

SERGIO ALEJANDRO CANNAS

*Uma generalização do modelo de Hubbard:
estudo de propriedades críticas mediante grupo de
renormalização*

Tese de Doutorado

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro - 1992

Aos meus pais.

A Gabriela.

Agradecimentos

A Constantino Tsallis, pela orientação competente, pelo incentivo, pelo apoio ao longo destes anos e também pela amizade e compreensão .

A meu grande amigo e colega de tantos anos Francisco Tamarit, a quem eu e o presente trabalho devemos tanto que não é possível expressá-lo num simples agradecimento.

A meu amigo e colega Pablo Serra, pelo apoio e pelas muitas discussões e sugestões sobre o trabalho.

A Evaldo Curado e Aglaé de Magalhães, pelo apoio e pelas discussões e sugestões extremamente proveitosas.

Aos meus colegas do Grupo da Materia Condensada em Córdoba, Pedro Pury, Omar Osenda, Carlos Briozzo e Guido Raggio, pela amizade e pelo inestimável apoio nestes anos.

A Domingo Prato, pelo incentivo e apoio, e também por algumas discussões de grande proveito.

A L. M. Falicov, por uma sugestão que foi fundamental.

Aos meus amigos Marcelo Lobato, Helio V. de Resende, Edson P. da Silva, Daniel Stariolo e Celia Antencodo pelo apoio e ajuda, mas sobre tudo pelos bons momentos compartilhados.

A Anna Chame, Welles Morgado, Ladario da Silva e Fortunato Menezes pelo apoio e pelas discussões sobre o trabalho.

A Miriam, Vanda e Almerio, pela grande amizade, pela atenção e boa vontade.

A Karenin, que me fez companhia em tantas noites de trabalho.

À Facultad de Matemática, Astronomía y Física da Universidad Nacional de Córdoba
e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

Estudamos modelos de fermions na rede relacionados com o modelo de Hubbard, mediante uma técnica de grupo de renormalização no espaço real (GR) que substitui as redes de Bravais d -dimensionais hipercúbicas por redes hierárquicas da mesma dimensionalidade.

Partindo do Hamiltoniano de Hubbard obtivemos, utilizando argumentos de simetria, uma generalização de dito Hamiltoniano (HG) que fica invariante em forma sob a transformação de GR. O Hamiltoniano HG contém, além do modelo de Hubbard, diversos modelos quânticos de interesse como casos particulares; calculamos os diagramas de fases a temperatura finita, em varias dimensões, dos seguintes modelos:

- Modelo de Hubbard generalizado com banda semi-cheia (número de eletrons igual ao número de sítios da rede). Em particular analisamos o modelo de Hubbard usual para $d = 1, 2$ e 3 . Os resultados sugerem ausência de transição metal-isolante (Mott) para todo valor finito da interação coulombiana no sítio, em qualquer dimensão. A influência de interações entre primeiros vizinhos é analisada mediante a inclusão de um termo de interação magnética biquadrática no Hamiltoniano anterior. Neste caso, diferentes tipos de transição metal-isolante aparecem. Os resultados apresentam também evidências de supercondutividade, ainda na presença de interações repulsivas tanto no sítio como entre primeiros vizinhos.
- Modelo de Hubbard com ocupação arbitraria da banda em dimensões $d = 2$ e 3 .

Achamos para $d = 3$, além das fases antiferromagnética (AF) e paramagnéticas (P) esperadas, uma fase ferromagnética (F) a baixas temperaturas, separada da fase AF por uma região P com alta concentração de elétrons (momentos locais desordenados). Não se encontraram evidências de transições de primeira ordem, em $d = 2$ nem em $d = 3$.

- Modelo de Schlottmann (uma certa generalização do modelo tJ) para $d = 2$ e 3. Em $d = 2$ achamos transições de primeira ordem entre uma fase rica em elétrons e outra rica em buracos. Estas transições desaparecem para valores pequenos da interação de troca. Para $d = 3$ achamos um diagrama de fases altamente complexo, no qual podem-se encontrar diversos tipos de comportamentos críticos (incluindo pontos tricríticos e pontos críticos terminais). A comparação com resultados experimentais mostra que este modelo fornece, ao menos no que diz respeito às propriedades magnéticas, uma descrição completa (pelo menos qualitativamente) dos diagramas de fases de compostos cerâmicos supercondutores a altas temperaturas que contem planos de CuO (e.g., compostos das famílias do La e Y). Nossos resultados predizem também a possível presença de pontos tricríticos nos diagramas de fases desses compostos.

Abstract

We study fermion models on a lattice related to the Hubbard model, by using a real space renormalization group (RG) technique. Our approach consists in replacing d -dimensional hypercubic Bravais lattices by hierarchical lattices of the same dimensionality.

Starting our analysis from the Hubbard Hamiltonian we obtained, by means of symmetry arguments, a generalization of such a Hamiltonian (HG), which remains invariant under the RG transformation. This Hamiltonian contains, besides the standard Hubbard one, many interesting quantum models as particular cases; we calculate the finite temperature phase diagrams, for different values of d , of the following models:

- Generalized half-filled band model (number of electrons equals the number of lattice sites). As a particular case we analyze the phase diagram of the standard half-filled band Hubbard model for $d = 1, 2$ and 3 . Our results suggest that no metal-insulator transition (Mott) exists for finite values of the intra-site Coulomb interaction, for any value of d . The influence of first nearest-neighbors interaction is analyzed by including a biquadratic exchange interaction term in the Hubbard Hamiltonian. In this case, different kinds of metal-insulator transitions appear. Evidence of superconductivity, even for both intra-site and first-neighbors repulsive interactions, is presented.
- Hubbard model with arbitrary occupation of the band. Besides the expected an-

tiferromagnetic (AF) and paramagnetic (P) phases, we found a ferromagnetic (F) one at low temperatures. The AF and F phases are separated by a P region with high density of electrons (disordered local moments). No evidences of first order phase transitions are found, neither for $d = 2$ nor for $d = 3$.

- Schlottmann's model (a certain generalization of the tJ model) for $d = 2$ and $d = 3$. For $d = 2$ first order phase transitions are found between a hole-rich and an electron rich phases. These phase transitions disappear for low values of the exchange parameter. For $d = 3$ a very complex phase diagram is encountered. Different kinds of critical behaviours (including tricritical points as well as critical-end points) are present. A comparison with experimental results shows that this model gives, at least as far as the magnetic properties are concerned, a complete description (at least qualitatively) of the phase diagram associated with high temperature superconducting compounds containing *CuO* planes (*e.g.*, *La* and *Y* based compounds). Moreover, our results predict the possible presence of tricritical points in these phase diagrams.

Sumário

Agradecimentos	ii
Resumo	iv
Abstract	vi
Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xv
1 Introdução	1
2 O modelo de Hubbard	9
2.1 O Hamiltoniano de Hubbard	9
2.2 Propriedades de simetria	14
2.2.1 Operadores de spin e de carga	14
2.2.2 Transformação partícula-buraco: a banda semi-cheia	16
2.2.3 Simetrias do Hamiltoniano	19
2.3 Propriedades gerais	22

3	Grupo de renormalização em sistemas quânticos: o Hamiltoniano de Hubbard generalizado	26
3.1	O GR em redes hierárquicas	27
3.1.1	As redes hierárquicas	28
3.1.2	O GR em sistemas clássicos	29
3.1.3	O GR em sistemas quânticos	31
3.2	O Hamiltoniano generalizado	36
3.2.1	O caso da banda semi-cheia	38
3.2.2	O caso geral	45
3.3	Generalidades do método de cálculo	48
4	Diagrama de fases do Hamiltoniano generalizado de Hubbard: banda semi-cheia	53
4.1	O modelo JKU	54
4.1.1	Diagrama de fases no caso $J = 0$	56
4.1.2	O modelo de Heisenberg	63
4.1.3	Diagrama de fases para $J \neq 0$	68
4.2	O modelo IKU	74
4.3	O modelo de Hubbard	77
4.4	O modelo de Hubbard com interações biquadráticas	83
5	O modelo tJ. Conexão com supercondutividade de alta T_c	91
5.1	O modelo tJ	91

5.2	Supercondutividade de altas temperaturas	93
5.3	O modelo tJ generalizado	98
6	Diagrama de fases do modelo tJ generalizado	103
6.1	Equações de recorrência para $t = 0$	104
6.2	Diagrama de fases para $d = 2$	108
6.3	Diagrama de fases para $d = 3$	118
6.3.1	Diagrama de fases para $t = 0$ (modelo $JK\mu$)	119
6.3.2	Diagrama de fases para $t \neq 0$	126
7	Diagrama de fases do modelo de Hubbard com ocupação arbitrária da	
	banda	135
7.1	Diagrama de fases para $d = 2$	137
7.2	Diagrama de fases para $d = 3$	138
8	Conclusões	142
A	A transformação \mathcal{U}_ρ	149
A.1	Caso $\vec{q} = \mathbf{z}$	149
A.2	Caso $\vec{q} = q_x \mathbf{x} + q_y \mathbf{y}$	150
A.3	Construção de invariantes	151
B	Cálculo de elementos de matriz	154
C	Parâmetro de ordem e supercondutividade no modelo IKU	157

Lista de Figuras

3.1	Clusters associados com a transformação de GR	30
3.2	Representação esquemática do efeito do traço parcial nas simetrias, para diferentes tamanhos de clusters	40
3.3	Diagrama hierárquico de Hamiltonianos invariantes sob GR	49
4.1	Diagrama de fluxo no plano (U, K) para $d = 2$	57
4.2	Expoentes críticos para $\lambda = 0$ em função da dimensionalidade d	62
4.3	Equação de recorrência do modelo de Heisenberg isotrópico de spin 1/2	65
4.4	Acoplamentos críticos J_c^A e J_c^F em função da dimensionalidade d	69
4.5	Expoentes críticos ν_A e ν_F em função da dimensionalidade d	69
4.6	Diagrama de fases do modelo JKU ($J > 0$) em $d = 3$ para $K = 0$	73
4.7	Expoentes tricríticos ν_t e ϕ_t do modelo JKU em função de $1/d$	74
4.8	Diagrama de fases do modelo de Hubbard com banda semi-cheia para $d = 3$	80
4.9	$1/t_c$ em função da dimensionalidade d	83
4.10	Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 2$, para $K = U/2$	85

4.11	Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 2$, para $U = \text{constante} = 8$	86
4.12	Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 3$, para $K = U/2$	87
4.13	Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 3$, para valores típicos de $U = \text{constante}$	90
5.1	Planos de CuO_2 nas cerâmicas supercondutoras de alta T_c	95
6.1	Diagrama de fluxo no subespaço invariante (μ, K) do modelo $JK\mu$ para $d = 2$	110
6.2	Diagrama de fases do modelo $JK\mu$ para $K < 0$ em $d = 2$	113
6.3	Superfície de transição de 2 ^{ta} ordem entre Pb e ODC no modelo $JK\mu$ para $J > 0$ em $d = 2$	114
6.4	Diagrama de fases do modelo tJ ($K = 0$) em $d = 2$	115
6.5	Corté representativo do diagrama de fases do modelo tJ generalizado para valores típicos de K e t em $d = 2$	116
6.6	Linhas de coexistência do modelo tJ em $d = 2$ ($K = 0$) para valores típicos de J/t	118
6.7	Temperatura crítica adimensional $(1/t)_c$ em função de J/t , para $K = 0$	119
6.8	Diagrama de fases do modelo $JK\mu$ em $d = 3$, para $K < 0$	123
6.9	Diagrama esquemático da ligação global do conjunto de pontos fixos que determinam o diagrama da Fig. 6.8.	124

6.10	Cortes típicos do diagrama de fases do modelo $JK\mu$ em $d = 3$, para $J > 0$ e $K = \text{constante}$	127
6.11	Cortes típicos do diagrama de fases do modelo tJ ($K = 0$) em $d = 3$, para $t = \text{constante}$	130
6.12	Diagrama de fases do modelo tJ ($K = 0$) em $d = 3$, para $J/t = \text{constante}$.	131
6.13	Diagrama de fases do modelo tJ ($K = 0$) em $d = 3$, para $J < 0$ e $t = \text{constante}$	134
7.1	Diagrama de fases do modelo de Hubbard em $d = 3$ para $1/t = \text{constante}$.	139
7.2	Diagrama de fases do modelo de Hubbard em $d = 3$ para $U/t = \text{constante}$.	140

Lista de Tabelas

4.1	Localização dos pontos fixos relevantes e dos expoentes críticos do modelo JKU para $J = 0$	61
4.2	Acoplamento e expoente críticos do modelo de Heisenberg antiferromagnético	67
4.3	Acoplamento e expoente críticos do modelo de Heisenberg ferromagnético	68
4.4	Classificação, localização e autovalores relevantes do modelo JKU para $J > 0$	72
4.5	Ciclos limite para $U/t = 0$ e $1/t < 1/t_c$	82
6.1	Classificação, localização e autovalores (relevantes) dos pontos fixos relevantes para o modelo $JK\mu$ em $d = 2$	112
6.2	Classificação, localização e autovalores (relevantes) dos pontos fixos relevantes para o modelo $JK\mu$, para $J = 0$, em $d = 3$	120
6.3	Classificação, localização e autovalores relevantes dos pontos fixos para o modelo $JK\mu$ para $J > 0$, em $d = 3$	122
6.4	Classificação, localização e autovalores relevantes dos pontos fixos para o modelo $JK\mu$ para $J < 0$, em $d = 3$	128

Capítulo 1

Introdução

Uma das áreas de maior importância na física do estado sólido é o estudo dos estados eletrônicos em cristais, já que constitui a base para a compreensão de uma grande variedade de fenômenos, tais como magnetismo, propriedades de transporte, propriedades óticas, supercondutividade, etc. Muitos destes problemas podem ser estudados na base de uma aproximação de partículas independentes, ora desprezando a interação elétron-elétron, no caso em que esta seja suficientemente fraca, ora utilizando uma representação de quasipartículas independentes que obedecem a estatística de Fermi, ainda no caso em que a interação é forte. Este último esquema é conhecido como a teoria dos líquidos de Fermi. Existe porém, uma série de fenômenos nos quais a correlação entre elétrons joga um papel determinante e onde a aproximação de partículas independentes resulta inviável. Conseqüentemente, estes fenômenos devem ser considerados como problemas propriamente de muitos corpos, aumentando assim enormemente a complexidade do tratamento teórico. Alguns exemplos típicos são a transição de Mott [1,2,3], fenômenos magnéticos (*e.g.*, magnetismo itinerante, ferromagnetismo e antiferromag-

netismo em isolantes, etc) [4,5], supercondutividade a baixas [6] e altas [7] temperaturas, etc. Em particular, os exemplos citados encontram-se profundamente relacionados. Qualitativamente, a transição de Mott é um fenômeno cooperativo que surge da competição entre a tendência dos elétrons a ficar delocalizados no cristal (isto é, pela energia cinética e a interação com o potencial da rede que favorecem a existência de autofunções estendidas) e a repulsão coulombiana entre eles que tende a mantê-los afastados uns dos outros, favorecendo assim a localização. Quando a repulsão coulombiana é suficientemente forte comparada com o ganho de energia pela delocalização, os elétrons podem ficar completamente localizados. Assim, sistemas que segundo o esquema de partículas independentes espera-se que sejam condutores (*e.g.*, sistemas com um elétron por átomo na capa mais exterior) podem resultar isolantes. Materiais que possuem estas características são conhecidos como *isolantes de Mott* (N. F. Mott foi quem primeiro explicou este fenômeno [2]), e foram muito estudados nas décadas de 1960 e 1970; alguns exemplos típicos são certos óxidos de metais de transição, tais como NiO , CoO , Va_2O_3 , etc. [1].

O mesmo mecanismo que gera os isolantes de Mott produz interações de troca entre os spins dos elétrons (ainda no caso em que o material não vire isolante) [4,5,8]. Assim, a maioria dos isolantes de Mott são materiais magnéticos, tipicamente antiferromagnetos.

O descobrimento recente de materiais supercondutores a altas temperaturas [7] renovou o interesse nos isolantes de Mott nos últimos anos. Tipicamente estes materiais são compostos cerâmicos, cujos átomos encontram-se ordenados em forma de camadas, com células unitárias muito complexas do tipo das perovskitas [9,10]; quando dopados

(isto é, quando se intruduzem impurezas), por exemplo, com terras raras, estes compostos podem virar supercondutores. Muitos desses materiais possuem planos (camadas) de CuO , sendo estes em geral isolantes de Mott no seu estado normal (isto é, sem a presença de dopantes). Um paradigma é o composto $La_{2-x}(X)_xCuO_4$, onde $X = Ba$ ou Sr . O composto não dopado La_2CuO_4 possui um eletrón (em média) por sítio e é um dos casos mais claros de isolante de Mott. Este material exhibe correlações antiferromagnéticas, principalmente nos planos de CuO . Um dos problemas teóricos de maior relevância na atualidade é determinar a relação entre antiferromagnetismo e supercondutividade nestes compostos, já que se acredita seja esta a base do mecanismo microscópico subjacente na supercondutividade a altas temperaturas, sendo que até o momento não existe nenhuma teoria que de conta em forma completa deste fenômeno.

O modelo mais simples que contém a física dos isolantes de Mott (e de outros fenômenos relacionados) é conhecido como *modelo de Hubbard* e foi introduzido mais o menos simultaneamente por diversos autores [8,11,12], devendo seu nome aos trabalhos pioneiros de J. Hubbard [11,13]. Este modelo tem sido aplicado no estudo de uma grande variedade de sistemas, entre os quais podemos citar os isolantes de Mott (um resumo bastante completo pode-se achar na Ref.[14]); o magnetismo itinerante (entre os inumeráveis trabalhos neste tópico, alguns dos mais representativos podem-se encontrar em [15,16,17] e nas referências ali citadas); as propriedades estáticas do 3He [18]; os sais orgânicos [19,20]; os modelos de cristalização em sólidos [21] e a supercondutividade a altas temperaturas (um muito bom resumo com uma lista completa dos trabalhos mais relevantes no tópico encontra-se na Ref.[22]). Em relação ao último tópico existe um

outro modelo de grande relevância, conhecido como *modelo tJ* [23], o qual pode ser mapeado no modelo de Hubbard em certo limite. Porém, fora desse limite os dois modelos apresentam comportamentos diferentes, e existem argumentos que indicariam o primeiro como sendo um melhor candidato em relação à supercondutividade do que o segundo (este ponto se analisará com maior detalhe no capítulo 5).

Apesar da relativa simplicidade destes modelos, poucos resultados rigorosos existem até o presente, os quais aliás, se reduzem quase exclusivamente a sistemas unidimensionais a temperatura zero (entre os mais importantes podemos citar a solução exata de Lieb e Wu [24] do estado fundamental do modelo de Hubbard e resultados recentes no modelo tJ [25]). Alguns resultados de caráter geral também existem para dimensões maiores [26,27,28]. Os mais variados métodos tem sido aplicados afim de obter informação, pelo menos qualitativa, acêrca do comportamento destes modelos (assim como de outros relacionados, *e.g.*, o modelo de Hubbard estendido [29,30]), especialmente a temperatura zero. Porém, a despeito de todo esse esforço, ainda não se conhecem as respostas a muitas questões (algumas delas fundamentais) acêrca destes modelos, já que em muitos casos não existe acordo (nem sequer qualitativo) entre os resultados fornecidos pelas diferentes aproximações. Assim, por exemplo, não se conhece em geral o estado fundamental destes modelos em dimensões $d > 1$. Portanto, a alta complexidade destes problemas, assim como a falta de uma quantidade mínima de teoremas gerais que possam servir como teste dos métodos aproximados, fazem com que a única maneira de avançar na compreensão destes modelos seja, por enquanto, a confrontação entre a maior quantidade possível de soluções aproximadas.

Neste trabalho estudamos as propriedades críticas a temperatura finita de um modelo que generaliza os anteriores. A análise é realizada mediante uma técnica de *grupo de renormalização no espaço real* (GR).

O GR é uma das técnicas mais poderosas que existe para o estudo de fenômenos críticos, e tem sido aplicada intensivamente em sistemas clássicos [31,32,33]. Contudo, a aplicação em sistemas quânticos tem sido mais limitada devido, entre outros motivos, às complicações derivadas da não comutação entre os operadores envolvidos, especialmente a temperatura finita. Em particular, pouco tem sido feito no caso dos modelos de fermions na rede (no caso do modelo de Hubbard para $d = 1$ [34,35,36,38] e para $d = 2$ [37]).

A aproximação utilizada neste trabalho consiste em substituir as redes de Bravais d -dimensionais por redes hierárquicas (fractais) de dimensionalidade d . Esta técnica tem-se mostrado uma ferramenta poderosa no estudo de fenômenos críticos em sistemas de spins quânticos [39,40,41]. É importante destacar que os resultados obtidos não são exatos (a diferença do caso clássico) para a rede hierárquica, devido ao problema da não comutação entre operadores. Porém, estes resultados são assintoticamente exatos a altas temperaturas [39,41], e se acredita sejam uma boa aproximação ainda para (relativamente) baixas temperaturas. O procedimento é baseado num cálculo de traço parcial realizado num "cluster" (isto é, célula) de tamanho finito (cujas iterações geram a rede hierárquica) preservando no cálculo certas correlações quânticas. A aplicação do método requer que a forma do Hamiltoniano se preserve exatamente na operação mencionada (isto é, que não se realizem aproximações de truncamento).

Partindo do Hamiltoniano de Hubbard construímos, utilizando argumentos de sine-

tria, um Hamiltoniano muito mais geral que chamaremos o *Hamiltoniano de Hubbard generalizado* (HG) [42], o qual se mantém invariante em forma sob a transformação de GR. Este Hamiltoniano contém como casos particulares os modelos de Hubbard e tJ, assim como muitos outros modelos de interesse, como por exemplo, o modelo de Heisenberg anisotrópico. Utilizando as equações de recorrência do GR correspondentes ao HG estudamos, dentre os diversos casos particulares possíveis, aqueles que são considerados mais relevantes no que diz respeito de propriedades magnéticas, transições metal-isolante (Mott) e supercondutividade.

No capítulo 2 o modelo de Hubbard é introduzido. Um breve resumo das propriedades gerais mais importantes é apresentado; certas propriedades particulares de interesse para o resto do trabalho são analisadas com maior detalhe, pondo ênfase em certas simetrias do Hamiltoniano.

O capítulo 3 é dedicado à construção de um GR adequado ao presente problema [43]. Diversos detalhes do método (tais como a escolha correta do cluster, as diversas aproximações envolvidas, etc) são discutidos. O Hamiltoniano HG é derivado, e uma classificação, em base às simetrias, dos diferentes modelos particulares contidos nele, assim como dos subespaços (do espaço de parâmetros) invariantes sob GR associados, é apresentada.

No capítulo 4 apresentamos os resultados correspondentes ao caso geral de *banda semicheia* [43] (número de elétrons em media igual ao número de sítios da rede). Este caso têm associado un subespacio invariante de 6 parâmetros que inclui, é claro, o modelo de Hubbard usual com banda semicheia (2 parâ metros) como caso particular. Este

último modelo é estudado em dimensões $d = 1, 2$ e 3 . Os resultados são comparados com outros obtidos por diferentes métodos. O efeito de introduzir interações entre elétrons localizados em sítios primeiros vizinhos é analisado em dimensões $d = 2$ e 3 , mediante a inclusão no Hamiltoniano de Hubbard de um termo de interação magnética biquadrática. A estrutura do diagrama de fases no espaço de 6 parâmetros assim como alguns efeitos das aproximações utilizadas são analisadas em geral.

No capítulo 5 o modelo tJ é introduzido. Um resumo geral de suas propriedades mais importantes, assim como da sua conexão com o modelo de Hubbard e com a supercondutividade de altas temperaturas são apresentados. Um Hamiltoniano tJ generalizado (modelo de Schlottmann [44]) é derivado a partir do HG num limite de correlações coulombianas infinitas. Este Hamiltoniano, que possui um parâmetro a mais do que o Hamiltoniano tJ standard (3 parâmetros), resulta também invariante sob GR.

No capítulo 6 calculamos o diagrama de fases completo no espaço de 4 parâmetros correspondente ao Hamiltoniano tJ generalizado [108]. Alguns resultados são comparados, quando possível, com as predições feitas por outros métodos aproximados, já que até onde nos sabemos, este é o primeiro cálculo que existe do diagrama de fases deste modelo a temperatura finita até o momento. As implicações destes resultados respeito das propriedades magnéticas dos materiais supercondutores a altas temperaturas são discutidas.

No capítulo 7 estudamos o modelo de Hubbard com ocupação arbitraria da banda (número arbitrario de elétrons) utilizando as equações de recorrência do Hamiltoniano HG [117]. Sob renormalização, o Hamiltoniano de Hubbard é mapeado num modelo tJ

generalizado efetivo. Assim, utilizando os resultados do capítulo 6, calculamos o diagrama de fases em dimensões $d = 2$ e 3 . Os resultados comparam-se com os correspondentes obtidos por outros métodos aproximados.

Finalmente no capítulo 8 um resumo das conclusões, assim como uma discussão das possíveis extensões do trabalho, são apresentadas:

Capítulo 2

O modelo de Hubbard

Neste capítulo introduzimos o Hamiltoniano de Hubbard e descrevemos brevemente algumas das suas propriedades básicas. Em particular, certas propriedades de simetria necessárias para a aplicação posterior do grupo de renormalização são discutidas.

2.1 O Hamiltoniano de Hubbard

Consideremos uma rede em d dimensões. Por simplicidade vamos podemos pensar, por enquanto, numa rede de Bravais hipercúbica com parâmetro cristalino unitário. Em termos gerais, o Hamiltoniano de um sistema de elétrons interagentes na rede pode-se escrever, numa versão de primeira quantização, como

$$H = \sum_i h(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2.1)$$

onde a soma é sobre todas as partículas (elétrons): \vec{r}_i denota a posição da partícula i ; h contém as energias cinética e a de interação com potenciais externos, tais como o potencial cristalino; V representa a interação elétron-elétron.

Uma base ortonormal conveniente de estados de uma partícula para este problema, são os estados (também chamados de orbitais) de Wannier [45]:

$$\varphi_{ni}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\vec{k}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

onde o índice n indica a banda; $\psi_{n\vec{k}}$ são as funções de Bloch correspondentes ao problema sem interação (isto é, autofunções de h); os vetores \vec{k} pertencem à primeira zona de Brillouin; \mathcal{N} é o número de sítios da rede e o índice i denota o sítio da rede ligado com o origem 0 pelo vetor da rede \vec{R}_i . Da Eq. (2.2) e da propriedade das funções de Bloch

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_i) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_i) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

vemos que

$$\varphi_{ni}(\vec{r}) = \varphi_{n0}(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (2.3)$$

isto é, para cada banda (não degenerada) corresponde um único orbital de Wannier e o resto deles obtém-se por traslação. Dado que o modelo de Hubbard (na sua versão mais simples) considera uma única banda não degenerada (banda s), só precisamos de uma única função de Wannier $\varphi(\vec{r})$ centrada no origem, e o resto das funções estaram dadas por

$$\varphi_j(\vec{r}) \equiv \varphi(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (2.4)$$

Introduzindo agora os operadores de criação e aniquilação $c_{i,\sigma}^\dagger$, $c_{i,\sigma}$ de um elétron no estado φ_j com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, podemos reescrever o Hamiltoniano (2.1) numa versão de segunda quantização como segue:

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} \langle ij | V | kl \rangle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{k,\sigma'} c_{l,\sigma} \quad (2.5)$$

onde

$$t_{ij} \equiv - \int d\vec{r} \varphi_i^*(\vec{r}) h(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) = t_{ji}^* \quad (2.6)$$

$$\langle ij | V | kl \rangle = \int d\vec{r} d\vec{r}' \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_k(\vec{r}') \varphi_l(\vec{r}) \quad (2.7)$$

Assumimos que tanto h como V não dependem do spin; as energias são normalizadas de maneira que $t_{ii} = 0$.

O modelo de Hubbard define-se então mediante as seguintes aproximações:

i) Aproximação tipo “tight-binding”:

$$t_{ij} = \begin{cases} \tilde{t} & \text{quando } i, j \text{ são } 1^{\text{os}} \text{ vizinhos} \\ 0 & \text{em qualquer outro caso} \end{cases} \quad (2.8)$$

onde \tilde{t} é conhecido como *parâmetro de “hopping”*.

ii) Assume-se que a interação elétron-elétron somente é efetiva a distâncias curtas; assim, conservamos só o termo dominante na segunda soma da Eq. (2.5), que corresponde à situação em que os dois elétrons encontram-se no mesmo sítio $i = j = k = l$:

$$\langle ij | V | kl \rangle = \begin{cases} \tilde{U} & \text{se } i = j = k = l \\ 0 & \text{em qualquer outro caso} \end{cases} \quad (2.9)$$

Neste caso, o princípio de exclusão de Pauli impõe que os dois elétrons tenham spins opostos. Com estas aproximações o Hamiltoniano de Hubbard tem a forma:

$$H_H = -\tilde{t} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \tilde{U} \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (2.10)$$

onde $n_{i,\sigma} \equiv c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ é o operador número de ocupação e $\langle i, j \rangle$ denota soma sobre todos os pares de sítios primeiros vizinhos.

O modelo definido pelo Hamiltoniano (2.10) é exatamente solúvel nos seguintes limites:

i) $\tilde{U} \rightarrow 0$. Neste caso, o Hamiltoniano (2.10) pode-se diagonalizar mediante uma transformada de Fourier:

$$c_{i,\sigma} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i) c_{\vec{k},\sigma} \quad (2.11)$$

onde os operadores $c_{\vec{k},\sigma}^\dagger$ correspondem aos estados de Bloch definidos na Eq. (2.2).

O Hamiltoniano diagonalizado fica da forma

$$H_{\tilde{U}=0} = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \quad (2.12)$$

com

$$\varepsilon(\vec{k}) = -\tilde{t} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} \quad (2.13)$$

a energia da banda, e onde $\vec{\delta}$ são vetores da rede que apontam na direção dos sítios primeiros vizinhos de um sítio arbitrário. Para uma rede hipercúbica em d dimensões temos

$$\varepsilon(\vec{k}) = -2\tilde{t} \sum_{i=1}^d \cos k_i \quad (2.14)$$

donde vemos que a largura da banda é $W = 4d|\tilde{t}|$, e em geral para uma rede de Bravais arbitraria teremos $W \propto |\tilde{t}|$.

ii) $\tilde{t} = 0$. Neste caso obtemos

$$H_{\tilde{t}=0} = \tilde{U} \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (2.15)$$

Para $\tilde{U} > 0$, isto é, interações repulsivas, os elétrons tendem, no estado fundamental, a preencher todos os sítios da rede sem produzir dupla ocupação, enquanto seja possível. Os estados excitados obtêm-se então de produzir um ou mais sítios com dupla ocupação a partir do estado fundamental. No caso em que o número de elétrons $N = \mathcal{N}$, conhecido como *banda semi-cheia* (este nome se deriva do fato de que para $\tilde{U} = 0$ este número de elétrons preenche exatamente a metade da banda (2.13)), o estado fundamental vai possuir exatamente um elétron localizado em cada sítio, tendo uma degenerescência 2^N pelo spin (em ausência de campo magnético externo). É assim de se esperar que ao “ligar” o termo de hopping no Hamiltoniano (2.10) os elétrons continuem localizados no caso em que $|\tilde{t}| \ll \tilde{U}$, já que uma transição de um sítio a outro (“hopping”) vai criar dupla ocupação, produzindo assim um aumento de energia $\sim \tilde{U}$. Neste caso o sistema será um isolante e recuperamos assim a descrição básica de um isolante de Mott feita no Cap.1.

Para $\tilde{U} < 0$, pelo contrario, os elétrons vão tender no estado fundamental a se agrupar em pares num mesmo sítio. O estado fundamental será também múltiplemente degenerado neste caso, devido às diferentes configurações possíveis de $N/2$ sítios com dupla ocupação. Para $|\tilde{t}| \ll |\tilde{U}|$ é de se esperar que os elétrons pulem apareados, já que “quebrar” um par produz um aumento de energia $\sim |\tilde{U}|$.

A temperatura finita a termodinâmica do modelo vem dada pela função de grã-partição

$$\mathcal{Z}_H(\mu, U, t) \equiv \mathcal{Z}_H \equiv \text{Tr} \exp(\mathcal{H}_H) \quad (2.16)$$

onde o Hamiltoniano de Hubbard adimensional é definido como

$$\mathcal{H}_H \equiv -\beta H_H + \mu \mathbf{N} = t \sum_{(i,j),\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \quad (2.17)$$

onde $\beta \equiv 1/k_B T$, $t \equiv \beta \tilde{t}$, $U \equiv \beta \tilde{U}$ e μ são respetivamente os parâmetros de hopping, interação e potencial químico adimensionais; $\mathbf{N} \equiv \sum_i (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow})$ é o operador número total de partículas.

2.2 Propriedades de simetria

A análise do grupo de renormalização simplifica-se em muitos aspetos mediante o uso de simetrias dos Hamiltonianos envolvidos. Introduzimos nesta seção as transformações unitárias que definem ditas simetrias.

2.2.1 Operadores de spin e de carga

Introduzimos agora os operadores de spin local associados com o sítio i ¹:

$$\begin{aligned} S_i^z &\equiv n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow} \\ S_i^x &\equiv S_i^+ + S_i^- \\ S_i^y &\equiv -i(S_i^+ - S_i^-) \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde

$$\begin{aligned} S_i^+ &\equiv c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow} \\ S_i^- &\equiv c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\uparrow} \end{aligned} \quad (2.19)$$

¹A definição usual dos operadores de spin inclui um fator $\frac{1}{2}$ que no presente trabalho é eliminado por simplicidade

Os operadores (2.18) possuem autovalores $0, \pm 1$ (com o 0 duplamente degenerado); porém não devem confundir-se com operadores de spin 1. É simples de verificar que estes satisfazem as relações de comutação correspondentes à algebra de Lie SU(2). Se consideramos o espaço de Hilbert relativo ao sítio i (4 estados: vacuo, duplamente ocupado e os dois estados de spin para ocupação simples) vemos que ditos operadores se reduzem às matrizes de Pauli no subespaço de ocupação simples, enquanto que no subespaço de estados com ocupação dupla e nula eles agem como operadores de spin zero, isto é, destruindo eles (e por tanto satisfazem de maneira trivial as relações de comutação). O operador de spin total do sistema é dado por

$$\vec{S} \equiv \sum_i \vec{S}_i \quad (2.20)$$

Em forma semelhante introduzimos os operadores de carga

$$\begin{aligned} \rho_i^z &\equiv n_{i,1} + n_{i,-1} - 1 \\ \rho_i^x &\equiv \rho_i^+ + \rho_i^- \\ \rho_i^y &\equiv -i(\rho_i^+ - \rho_i^-) \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde

$$\begin{aligned} \rho_i^+ &\equiv c_{i,1}^\dagger c_{i,-1}^\dagger \\ \rho_i^- &\equiv c_{i,-1} c_{i,1} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Estes operadores tem as mesmas propriedades do que os operadores de spin (2.18), só que neste caso eles agem como operadores de spin 1/2 no subespaço de ocupação dupla e nula, e como operadores de spin zero no subespaço de ocupação simples.

O caráter fermiônico dos operadores c impõe as seguintes relações entre os operadores de carga e spin:

$$\begin{aligned} (S_i^\nu)^2 + (\rho_i^{\nu'})^2 &= 1 \\ S_i^\nu \rho_i^{\nu'} &= S_i^{\nu'} \rho_i^\nu = 0 \quad (\nu, \nu' = x, y, z) \end{aligned} \quad (2.23)$$

2.2.2 Transformação partícula-buraco: a banda semi-cheia

Consideremos o caso em que a rede pode-se decompôr em duas subredes A e B, de maneira tal que cada sítio de uma das subredes tem como primeiros vizinhos somente sítios da outra (rede *bipartita*). Isto é verdade para as redes hipercúbicas, mas também para muitas outras redes, não necessariamente de Bravais [26]. Introduzimos então a seguinte transformação unitária:

$$c_{i,\sigma}^\dagger \rightarrow \begin{cases} -c_{i,\sigma}^\dagger & \text{se o sítio } i \in A \\ c_{i,\sigma}^\dagger & \text{se o sítio } i \in B \end{cases} \quad (2.24)$$

É simples de se verificar que sob a transformação (2.24) o Hamiltoniano (2.17) transforma-se como

$$\mathcal{H}_H(\mu, U, t) \rightarrow \mathcal{H}_H(\mu, U, -t) \quad (2.25)$$

Dado que uma transformação unitária não muda o espectro de um operador, da Eq. (2.16) achamos que

$$\mathcal{Z}_H(\mu, U, t) = \mathcal{Z}_H(\mu, U, -t) \quad (2.26)$$

isto é, a termodinâmica do modelo é invariante sob uma mudança de sinal do parâmetro t . Assim, por definição, no resto do trabalho escolheremos $t > 0$.

Introduzimos agora a transformação (unitária) partícula-buraco:

$$c_{i,\sigma}^\dagger \rightarrow c_{i,-\sigma} \quad (2.27)$$

As seguintes propriedades se verificam simplesmente:

$$n_{i,\sigma} \rightarrow 1 - n_{i,-\sigma} \quad (2.28)$$

$$\sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \rightarrow - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \quad (2.29)$$

Compondo as duas transformações (2.24) e (2.27) vemos que o Hamiltoniano (2.17) transforma-se como

$$\mathcal{H}_H(\mu, U, t) \rightarrow \mathcal{H}_H(U - \mu, U, t) + (2\mu - U) \mathcal{N} \quad (2.30)$$

Das Eqs. (2.16)-(2.17) e utilizando a Eq. (2.30) vemos que a densidade media de eletrons

$$\rho \equiv \frac{\langle \mathcal{N} \rangle}{\mathcal{N}} = \frac{\partial}{\partial \mu} \mathcal{Z}_H(\mu, U, t) \quad (2.31)$$

possui a seguinte propriedade

$$\rho(\mu, U, t) = 2 - \rho(U - \mu, U, t) \quad (2.32)$$

Para $\mu = U/2$ vemos que $\rho = 1$, o que corresponde ao caso da *banda semi-cheia* a temperatura finita, isto é, o número de eletrons *em media* é igual ao número de sítios da rede, independentemente do valor dos outros parâmetros (em particular da temperatura). Para $\mu = U/2$ o Hamiltoniano (2.17) pode-se reescrever utilizando a Eq. (2.18) como

$$\mathcal{H}_H|_{\mu=U/2} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \frac{1}{2} U \sum_i (S_i^z)^2 \quad (2.33)$$

Voltando à Eq. (2.32) podemos deduzir algumas propriedades de simetria do diagrama de fases para o caso de ocupação arbitraria da banda (isto é, para valores arbitrarios de μ). É conveniente introduzir as variaveis relativas

$$\tilde{\mu} = \mu - U/2 \quad (2.34)$$

$$\rho_e = \rho - 1 \quad \text{para } 0 \leq \tilde{\mu} < \infty \quad (2.35)$$

$$\rho_h = 1 - \rho \quad \text{para } -\infty < \tilde{\mu} \leq 0 \quad (2.36)$$

$$(2.37)$$

onde $\tilde{\mu} = 0$ corresponde à banda semi-cheia, ρ_h é a densidade de buracos e ρ_e é a densidade de eletrons relativa ao "background" da banda semi-cheia ($\rho = 1$). As seguintes propriedades se deduzem da Eq. (2.32):

$$0 \leq \rho_e < 1 \quad (2.38)$$

$$0 \leq \rho_h < 1$$

$$\rho_e(\tilde{\mu}, U, t) = \rho_h(-\tilde{\mu}, U, t) \quad \text{para } \tilde{\mu} > 0 \quad (2.39)$$

Mais ainda, introduzindo campos externos adequados, pode-se verificar que grandezas termodinâmicas tais como a magnetização espontanea, a magnetização de subrede, etc, ficam invariantes sob a transformação $\tilde{\mu} \rightarrow -\tilde{\mu}$. Vemos assim que o diagrama de fases do modelo será simetrico respeito de uma reflexão no plano $\tilde{\mu} = 0$, onde as densidades de portadores de carga em cada caso devem ser escolhidas segundo as Eqs. (2.35) - (2.36).

2.2.3 Simetrias do Hamiltoniano

As seguintes propriedades importantes verificam-se de maneira direta:

$$[\mathcal{H}_H, \vec{S}] = 0 \quad (2.40)$$

$$[\mathcal{H}_H, \mathbf{N}] = 0 \quad (2.41)$$

Introduzimos agora uma nova transformação unitária [46] (válida para redes bipartitas) definida por:

$$\begin{aligned} c_{i,\downarrow}^\dagger &= \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) b_{i,\downarrow} & c_{i,\uparrow}^\dagger &= b_{i,\uparrow}^\dagger \\ c_{i,\downarrow} &= \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) b_{i,\downarrow}^\dagger & c_{i,\uparrow} &= b_{i,\uparrow} \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde \vec{Q} é um vetor da rede recíproca que aponta às esquinas da primeira zona de Brillouin (e.g., $\vec{Q} = (\pi, \pi, \dots, \pi)$), de maneira que

$$\exp(i\vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)) = \begin{cases} +1 & \text{se } i \text{ e } j \text{ pertencem à mesma subrede} \\ -1 & \text{se } i \text{ e } j \text{ pertencem a diferentes subredes} \end{cases}$$

Verificam-se as seguintes propriedades de transformação:

$$\begin{aligned} S_i^\dagger &= \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \bar{\rho}_i^\dagger \\ S_i^z &= \bar{\rho}_i^z \end{aligned} \quad (2.43)$$

onde

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_i^\dagger &\equiv b_{i,\uparrow}^\dagger b_{i,\downarrow}^\dagger \\ \bar{\rho}_i^z &\equiv \bar{n}_{i,\uparrow} + \bar{n}_{i,\downarrow} - 1 \\ \bar{n}_{i,\sigma} &\equiv b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} \quad (\sigma = \uparrow, \downarrow) \end{aligned} \quad (2.44)$$

e

$$\begin{aligned}\rho_i^+ &= \exp(i\vec{Q}\cdot\vec{R}_i) \bar{S}_i^+ \\ \rho_i^- &= \bar{S}_i^- \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde

$$\begin{aligned}\bar{S}_i^+ &\equiv b_{i,\uparrow}^\dagger b_{i,\downarrow} \\ \bar{S}_i^- &\equiv \bar{n}_{i,\uparrow} - \bar{n}_{i,\downarrow}\end{aligned} \quad (2.46)$$

Aplicando a transformação (2.42) ao Hamiltoniano (2.33) (banda semi-cheia) vemos que $\mathcal{H}_H(t, U) = \bar{\mathcal{H}}_H(t, -U)$, onde $\bar{\mathcal{H}}_H$ obtém-se da Eq. (2.33) substituindo os operadores c pelos operadores b . Esta relação permite um mapeamento simples da região $U > 0$ do diagrama de fases na região $U < 0$ no caso da banda semi-cheia. De fato, das Eqs. (2.43) e (2.45) vemos que a transformação (2.42) fornece uma correspondência entre ordem magnética e ordem de carga. Assim por exemplo, se conhecermos a existencia de uma fase com ordem magnética numa dessas regiões, automaticamente sabermos da existencia de uma fase com ordem de carga na outra. Da mesma maneira se existir uma linea de transição numa região existe também uma linea simetrica na outra.

Introduzimos agora uma transformação unitária definida pelo seguinte operador [34]:

$$\mathcal{U}_\rho \equiv \prod_i \exp(i\gamma_i \vec{q}_i \cdot \vec{\rho}_i) \quad (2.47)$$

onde $\{\vec{q}_i\}$ são vetores unitários escolhidos arbitrariamente. Os vetores $\{\vec{q}_i\}$ e os coeficientes $\{\gamma_i\}$ são os parâmetros da transformação. Para $\vec{q}_i = \vec{q}$, com \vec{q} na

direção \mathbf{z} , \mathcal{U}_ρ corresponde a uma mudança de fase trivial nos estados de Wannier $\varphi(x) \rightarrow e^{\gamma} \varphi(x)$. Neste caso para $\gamma_i - \gamma_j = \pi$, onde i, j pertencem a diferentes sub-redes, recuperamos a transformação (2.24). Para $\vec{q}_i = \vec{q}$ no plano x-y, \mathcal{U}_ρ generaliza a transformação partícula-buraco (2.27) (exeto por un fator de fase dependente do spin; ver apêndice A).

Vamos salientar as seguintes simetrias do Hamiltoniano (2.17) que serão de aplicação específica do grupo de renormalização:

- (a) invariância sob \mathcal{U}_ρ para $\vec{q}_i = \vec{q}$, com \vec{q} na direção \mathbf{z} e $\gamma_i = \gamma$ para todo sítio i ;
- (b) invariância sob rotações alrededor de um eixo arbitrario associada com a Eq. (2.40).

No caso da banda semi-cheia o Hamiltoniano (2.33) possui mais uma simetria que não é satisfeita no caso geral (2.17):

- (c) invariância sob \mathcal{U}_ρ para $\vec{q}_i = \vec{q}$, com \vec{q} no plano x-y e $\gamma_i = -\gamma_j$, para todo par de sítios i, j primeiros vizinhos: notemos que esta simetria depende não somente da estrutura do Hamiltoniano, senão também da rede no qual ele esta definido. Assim ela só é satisfeita para redes bipartitas e não para redes frustradas, como por exemplo a rede triangular. O mesmo acontece com as transformações (2.24) e (2.42).

Finalmente vamos mencionar uma outra simetria que não é satisfeita pelo Hamil-

toniano (2.17) para nenhum valor de μ , mas que será de utilidade depois:

- (d) invariância sob \mathcal{U}_ρ para $\vec{q}_i = \vec{q}$, com \vec{q} no plano x-y e $\gamma_i = \gamma$ para todo sítio i .

2.3 Propriedades gerais

Existem algumas propriedades assintóticas do modelo bem conhecidas. Tal vez a mais importante de todas elas é o limite de correlações fortes ou $|U|/t \gg 1$. Assumimos no que segue $U > 0$ (o caso $U < 0$ pode-se obter usando a transformação (2.42) e será analisado em detalhe para o caso da banda semi-cheia no Cap.4) e $\rho \leq 1$ (o caso $\rho \geq 1$ é simétrico como já vimos na subseção.2.2.2). Vimos na seção.2.1 que para $t = 0$ o estado fundamental é múltiplemente degenerado e consiste em todos aqueles estados que não tem dupla ocupação sítio nenhum. No caso em que $t \neq 0$ com $U/t \gg 1$ o termo de hopping pode ser considerado como uma perturbação, que em princípio vai eliminar a degenerescência, mas sem produzir dupla ocupação. Assim, a parte baixa do espectro vai corresponder a estados que pertencem ao subespaço sem dupla ocupação, isto é, estados para os quais $n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} = 0$ para todo sítio i . Mediante o uso direto da teoria de perturbações [47], ou mediante o uso de transformações canônicas [48], obtém-se que a parte baixa

do espectro esta descrita pelo seguinte Hamiltoniano efetivo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ef} = & t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) (1 - n_{j,-\sigma}) \\ & - J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - n_i n_j) + U \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde

$$n_i \equiv n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} \quad (2.49)$$

O Hamiltoniano (2.48) age no subespaço sem dupla ocupação e $J = t^2/2U$ ². No caso da banda semi-cheia o primeiro termo na Eq. (2.48) anula-se, já que não podemos ter hopping sem produzir dupla ocupação, e o termo $n_i n_j$ se reduz a uma constante, já que no subespaço considerado $n_i = 1$ para todo sítio i . Dado que neste subespaço os operadores de spin são equivalentes às matrizes de Pauli, o Hamiltoniano (2.48) se reduz neste caso ao do modelo de Heisenberg isotrópico de spin 1/2. Temos então que no limite $U \rightarrow \infty$ o modelo de Hubbard com banda semi-cheia descreve um isolante antiferromagnético (já que $J > 0$), enquanto que no limite $U = 0$ o modelo descreve um condutor (paramagnético). Cabe então formular-se as seguintes perguntas: será que existe um valor de $U \neq 0$, para o qual o sistema muda sua natureza de metálica a isolante (transição de Mott)? Qual é a influência da dimensão e da temperatura? Somente para $d = 1$ existe uma resposta definitiva á primeira destas perguntas. Lieb e Wu [24] calcularam exatamente o estado fundamental do modelo unidimensional, para a banda semi-cheia, usando

²Na literatura é comum encontrar o valor $J = 2t^2/U$. A diferença é devida ao fator $\frac{1}{2}$ na definição dos operadores de spin (ver nota de rodapé na pag.14)

o “Bethe Ansatz”. Eles acharam que o sistema é isolante e antiferromagnético para todo valor de $U \neq 0$. Para $d \geq 2$ não existe nenhum resultado rigoroso que indique qual pode ser a resposta correta a este problema, e as diferentes aproximações utilizadas até o momento dão resultados diferentes. So para dar alguns dos exemplos mais conhecidos, entanto o método variacional de Gutzwiller [12,49] prediz uma transição de Mott a temperatura zero para um valor de $U/t \neq 0$ (independentemente da dimensão), métodos autoconsistentes do tipo de Hartree-Fock [50,51] e outros [52] predizem ausência de dita transição a temperatura zero para $U \neq 0$ em redes hipercúbicas ($d = 2$ e 3), mas não para uma rede fcc ($d = 3$) [53]. Pelo contrario, eles predizem uma transição metal-isolante a temperatura finita. Por outra parte o método de Monte Carlo, tanto a temperatura zero como finita, não mostra evidência nenhuma de dita transição, nem para a rede quadrada [50], nem para a rede cúbica [54]. Resultados de grupo de renormalização a temperatura finita [37] (com uma técnica diferente da utilizada neste trabalho) em $d = 2$ concordam com os de Monte Carlo.

Uma situação semelhante apresenta-se no problema fora da banda semi-cheia, cujo diagrama de fases tem em principio uma estrutura bem mais complexa. Um dos pontos principais sobre o qual não existe acordo entre os diferentes métodos aproximados é a existencia o não de uma fase ferromagnética e a natureza das possíveis transições presentes no diagrama de fases.

Existe um teorema de Nagaoka [27], posteriormente extendido por Tasaki [28], que

mostra que o estado fundamental do sistema finito com exatamente um buraco (isto é, $N = \mathcal{N} - 1$), no limite $U \rightarrow \infty$ é ferromagnético para uma grande variedade de redes em dimensões $d \geq 2$ (incluindo as redes hipercúbicas). A dúvida, porém, persiste sobre o que acontece para uma concentração *finita* de buracos no limite termodinâmico $\mathcal{N} \rightarrow \infty$. Diversos métodos autoconsistentes [15,16,17,55] (entre os quais não existe, porém, uma descrição qualitativa unificada da estrutura do diagrama de fases) indicam a existência da fase ferromagnética tanto a temperatura zero como finita, em tanto que expansões em série de altas temperaturas, no limite de dimensão infinita [56], indicam o contrário.

Finalmente, uma outra propriedade do modelo de Hubbard fora da banda semi-cheia, de grande interesse atual, refere-se à possível presença de supercondutividade para $U/t \gg 1$. Este ponto será discutido no capítulo 5 em relação com o modelo tJ .

Capítulo 3

Grupo de renormalização em sistemas quânticos: o Hamiltoniano de Hubbard generalizado

Neste capítulo descrevemos o formalismo do grupo de renormalização no espaço real (GR) utilizado neste trabalho. Afin de colocar o problema com maior clareza, os conceitos fundamentais do método são descritos inicialmente na sua versão em sistemas clássicos, e posteriormente estendidos aos sistemas quânticos. Um Hamiltoniano generalizado, apropriado para o estudo de GR de modelos relacionados com o modelo de Hubbard, é construído e suas propriedades gerais são analisadas [42,43].

3.1 O GR em redes hierárquicas

Um dos métodos de GR mais conhecidos é o da decimação. A ideia básica do método é bem simples e pode resumir-se como segue: vamos supôr, sem perda de generalidade, que a rede é decomposta em duas subredes A e B. Assim, vamos definir um Hamiltoniano renormalizado \mathcal{H}' na subrede A que satisfaz

$$\exp(\mathcal{H}' + \mathcal{C}) = \text{Tr}_B \exp(\mathcal{H}) \quad (3.1)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema total, \mathcal{C} é uma constante relacionada com a energia livre da subrede B e Tr_B representa um traço parcial sobre todos os graus de liberdade associados com os sítios da subrede B. O traço parcial define-se de maneira de preservar a função de partição (ou de grã-partição no nosso problema) do sistema total. A Eq. (3.1) fornece então as equações de recorrência para a análise do GR.

Como é bem sabido, não é possível em geral realizar em forma exata a decimação (3.1) em redes de Bravais para dimensões $d > 1$ ¹ [32]. Isto deve-se à proliferação *infinita* das constantes de acoplamento nos Hamiltonianos renormalizados ao longo das sucessivas decimações. Em outras palavras, o Hamiltoniano \mathcal{H}' vai conter novos termos de interação que não estavam presentes em \mathcal{H} (e.g., se \mathcal{H} contem somente acoplamentos entre primeiros vizinhos \mathcal{H}' vai conter também

¹Para Hamiltonianos com simetria discreta (e.g., modelo de Ising) a decimação em geral é exata em $d = 1$; porém isto pode não ser verdade para Hamiltonianos com simetria continua (e.g., modelo XY clássico).

acoplamentos entre segundos vizinhos, interações entre varios sítios, etc). Temos então que (como é usual nos métodos de GR) não existe uma receita única de decimação e uma grande variedade de métodos é possível, segundo a aproximação a utilizar no cálculo da Eq. (3.1).

3.1.1 As redes hierárquicas

Um método de GR que, para muitos casos, evita a proliferação do tipo mencionado consiste em reemplazar as redes de Bravais por redes hierárquicas, das quais umas das mais simples são as do tipo diamante. Este método tem sido utilizado intensivamente em sistemas clássicos (ver por exemplo Ref. [77,57,58]). As redes hierárquicas são geradas mediante um procedimento iterativo. Cada rede tem associado uma célula ou cluster básico, o qual possui um conjunto especial de sítios chamados de *terminais* (usualmente dois). A regra é que os clusters podem-se ligar entre eles somente a traves dos sítios terminais. Partindo do cluster original, em cada iteração as ligações são reemplazadas pela sua vez pelo cluster original. Isto gera uma hierarquia de redes finitas, onde o limite de infinitas iterações constitui a rede hierárquica. Os clusters básicos associados com as redes diamante se mostram na Fig.3.1. Cada cluster conforma-se de l^{d-1} cadeias em paralelo, tendo cada cadeia l ligações em série, onde l é um parâmetro ($l = 3$ na Fig.3.1) e d é a dimensão da rede de Bravais a ser reemplazada pela rede diamante. Por construção estas redes tem uma estrutura fractal (isto é, invariância de escala). A dimensão fractal

(também chamada de dimensionalidade) de uma rede hierárquica define-se como

$$d_f = \frac{\ln N_t}{\ln N_l} \quad (3.2)$$

onde N_l é o número de ligações que constituem o mínimo caminho entre os dois terminais do cluster (também conhecido como distância química) e N_t é o número total de ligações do cluster. É simples de verificar que para as redes diamante $d_f = d$. Desta maneira, estamos reemplazando uma rede de Bravais de dimensão d por uma rede fractal da mesma dimensionalidade. Por outra parte, a solução de GR nestas redes é equivalente para sistemas clássicos à aproximação de Migdal-Kadanoff para redes hipercúbicas de dimensão d [32].

3.1.2 O GR em sistemas clássicos

Consideremos inicialmente o caso em que \mathcal{H} corresponde a um sistema clássico, isto é, um sistema no qual todas as variáveis dinâmicas comutam entre elas. A cada cluster da rede infinita pode-se associar um Hamiltoniano \mathcal{H}_k . Conseqüentemente o Hamiltoniano total pode expressar-se como

$$\mathcal{H} = \sum_k \mathcal{H}_k \quad (3.3)$$

Para sistemas clássicos é claro que

$$\exp(\mathcal{H}) = \prod_k \exp(\mathcal{H}_k) \quad (3.4)$$

Assim, se \mathcal{H}_k admite ser tratado em forma exata, o método de GR permite resolver exatamente o modelo na rede hierárquica.

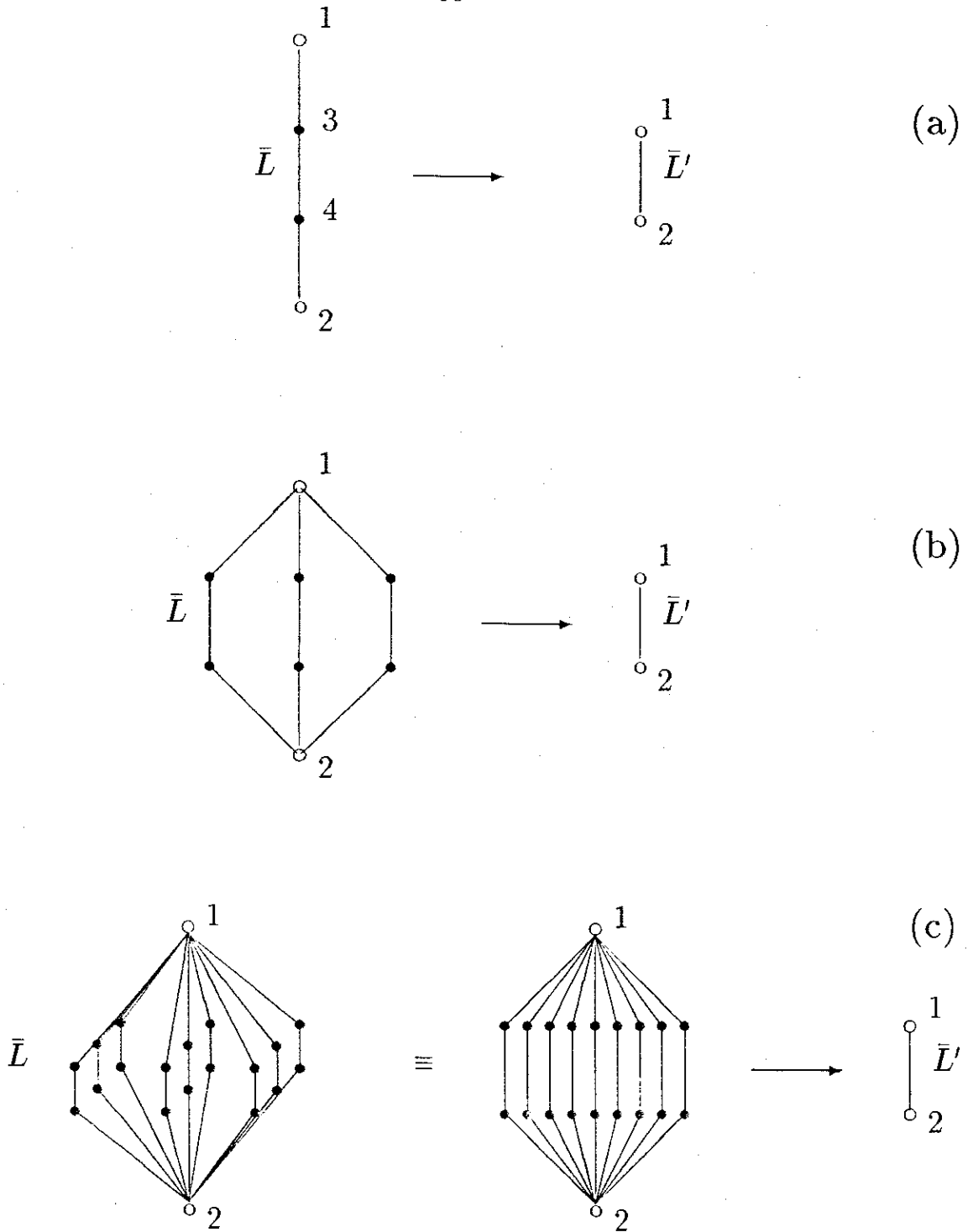


FIGURA 3.1: Clusters do GR. \bar{L} denota o conjunto de parâmetros do Hamiltoniano associado ao cluster (e.g., (U, t, μ) para \mathcal{H}_H). Cada cluster gera mediante infinitas iterações uma rede hierárquica de dimensionalidade d ; \circ e \bullet denotam sítios terminais e internos respectivamente. (a) $d = 1$; (b) $d = 2$; (c) $d = 3$.

O procedimento encontra-se esquematizado na Fig.3.1. O primeiro passo consiste em identificar os Hamiltonianos \mathcal{H}_k na Eq. (3.4) com os associados aos clusters básicos, cada \mathcal{H}_k contendo um conjunto de parâmetros de acoplamento denotado por \bar{L} . Seguidamente aplicamos em cada um dos clusters a seguinte equação

$$\exp(\mathcal{H}'_k + C') = \text{Tr}_{\text{sítios internos}} \exp(\mathcal{H}_k) \quad (3.5)$$

onde \mathcal{H}'_k é um Hamiltoniano *da mesma forma* que \mathcal{H}_k (isto, como veremos depois, não sempre é possível) mas com parâmetros renormalizados \bar{L}' , associado com um cluster de dois sítios, como se mostra na Fig.3.1. Desta maneira, o traço da Eq. (3.1) é decomposto num produto de traços parciais sobre os clusters, onde agora a subrede decimada (B) consiste no conjunto de sítios internos de todos os clusters. Finalmente (utilizando novamente a Eq. (3.4)) identificamos $\mathcal{H}' = \sum_k \mathcal{H}'_k$ com o Hamiltoniano (com parâmetros \bar{L}') da rede decimada que, devido a sua estrutura fractal, é idêntica à original. Assim o problema se reduz ao cálculo de decimação num cluster finito (relativamente pequeno). A Eq. (3.5) fornece as equações de recorrência entre os conjuntos de parâmetros \bar{L} e \bar{L}' . Por construção este método elimina a proliferação de interações entre sítios que não sejam primeiros vizinhos.

3.1.3 O GR em sistemas quânticos

No caso de sistemas quânticos a Eq. (3.4) perde validade, já que os operadores \mathcal{H}_k em geral não comutam entre eles. Assim, o GR no caso quântico não pode aplicar-se em forma exata na rede hierárquica. Nos vamos trabalhar na seguinte

aproximação [59]:

$$\exp\left(\sum_k \mathcal{H}_k\right) \approx \prod_k \exp(\mathcal{H}_k) \quad (3.6)$$

isto é, vamos considerar os efeitos quânticos dentro dos clusters, e no que diz respeito aos efeitos entre os clusters vamos tratar o problema como se fosse clássico (comparar com Eq. (3.4)).

Afim de clarificar o significado da aproximação (3.6) consideremos as fórmulas:

$$e^{\lambda(A_1+\dots+A_n)} = e^{\lambda A_1} \dots e^{\lambda A_n} e^B \quad (3.7)$$

e

$$e^{\lambda A_1} \dots e^{\lambda A_n} e^C = e^{\lambda(A_1+\dots+A_n)+D} \quad (3.8)$$

onde

$$\begin{aligned} B &= \sum_{m=2}^{\infty} \lambda^m B_m \\ C &= \sum_{m=2}^{\infty} \lambda^m C_m \\ D &= \sum_{m=2}^{\infty} \lambda^m D_m \end{aligned} \quad (3.9)$$

Os operadores B e D podem calcular-se para qualquer ordem m [60,61] nas expansões (3.9). Por exemplo, para $m=2$ temos

$$\begin{aligned} B_2 &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} [A_i, A_{i+1} + \dots + A_n] \\ B_2 &= C_2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} [A_i, A_{i+1} + \dots + A_n] \end{aligned} \quad (3.10)$$

Assim a Eq. (3.6) constitui uma aproximação de primeira ordem em λ nas expansões (3.7)-(3.9). Vemos das Eqs. (3.10) que na presente aproximação despreza-se a não comutação entre operadores associados com diferentes clusters. Os co-

mutadores desprezados são pelo menos quadráticos nos parâmetros do Hamiltoniano. Dado que todos os parâmetros são inversamente proporcionais à temperatura, vemos que os resultados obtidos no presente método são assintoticamente exatos (para a rede hierárquica) no limite $T \rightarrow \infty$, e em geral em qualquer situação na qual todos os comutadores sejam pequenos (obviamente os resultados serão exatos se para algum caso particular os comutadores são identicamente nulos). Por outro lado, certas aplicações deste método a sistemas de spins quânticos [41] mostraram bons resultados ainda para baixas temperaturas. Notemos que a aproximação é utilizada duas vezes em cada iteração. Na primeira vez ela é utilizada na Eq. (3.7) ao decompôr a exponencial do Hamiltoniano original num produto de exponenciais, no passo previo à aplicação do traço parcial (3.5). Na segunda vez, a aproximação utiliza-se na Eq. (3.8) ao fazer $\exp(\mathcal{H}') \approx \prod_k \exp(\mathcal{H}'_k)$. Notemos também que os termos de segunda ordem (3.10) desprezados nas duas aproximações tem sinais opostos. Conseqüentemente, podemos esperar que a dupla aproximação cancele, pelo menos parcialmente, o efeito da não comutação. De fato o cálculo das correções de segunda ordem nas equações de recorrência para o modelo de Heisenberg bidimensional [39], mostram que as mesmas são de ordem quártica nos parâmetros do Hamiltoniano.

Das Eqs. (3.7)-(3.9) vemos que em principio é possível fazer melhoras sistemáticas ao método, conservando sucessivos termos nas expansões (3.9). Porém, esse não é o objetivo do presente trabalho, no qual utilizaremos somente a aproximação (3.6).

Em sistemas clássicos tem-se provado [62] que a presente aproximação preserva, não somente a função de partição senão também a função de correlação de dois corpos. Acreditamos que o mesmo deveria acontecer no caso quântico, pelo menos dentro dos limites de validade da aproximação.

Como já mencionamos, em sistemas clássicos a solução exata de GR nas redes diamante é equivalente à aproximação de Migdal-Kadanoff (MK) em redes de Bravais hipercúbicas. Esta aproximação compõe-se de dois procedimentos sucessivos: deslocamento de ligações e decimação unidimensional. Como é sabido [63] a aproximação de deslocamento de ligações (e portanto o procedimento de MK) fornece uma cota inferior para a energia livre. A demonstração desta propriedade se baseia na convexidade da função exponencial. É simples de verificar que dita demonstração pode estender-se a sistemas quânticos utilizando a versão correspondente da desigualdade de Bogoliubov (a qual, na sua versão clássica, é uma consequência da convexidade da função exponencial) [64]. Acreditamos, portanto, que o presente método pode ser em princípio uma boa aproximação de altas temperaturas também para as redes de Bravais hipercúbicas.

Finalmente vamos discutir o conceito de traço parcial nos sistemas fermiônicos do tipo que estamos interessados neste trabalho. Em sistemas clássicos o conceito de “traço sobre graus internos de liberdade” do cluster surge de maneira direta, já que as variáveis dinâmicas (isto é, as que aparecem no Hamiltoniano) encontram-se em geral associadas aos sítios da rede (*e.g.*, variáveis de spin discretas ou contin-

uas, variáveis de ocupação num gás de rede, etc). Assim o traço parcial surge naturalmente como uma soma (traço) sobre os valores das variáveis associadas aos sítios internos do cluster. A extensão deste conceito aos sistemas quânticos impõe a utilização de uma representação em termos de operadores associados com os sítios da rede. No caso dos fermions, a representação adequada é a dos operadores $c_{i,\sigma}^\dagger$ associados com os orbitais de Wannier, e a base de estados correspondente é o espaço de Fock $|\{n_{i,\sigma}\}\rangle$ dos autovetores dos operadores número de ocupação $n_{i,\sigma}$. Nesta base o Hamiltoniano, em geral, é não diagonal, e por tanto \mathcal{H}_k e \mathcal{H}'_k estarão representados por matrizes finitas da dimensão dos subespaços de estados associados com os clusters correspondentes. Assim, o traço parcial implica o cálculo de todos os elementos de matriz de \mathcal{H}'_k , diagonais e não diagonais, em função dos elementos de matriz de \mathcal{H}_k . O cálculo do traço total só leva em conta os elementos diagonais. A preservação do traço (isto é, da função de grã-partição) somente impõe condições, por tanto, no cálculo dos elementos de matriz diagonais de \mathcal{H}'_k , sem impôr condição nenhuma sobre os elementos de matriz não diagonais. Assim existe uma certa liberdade na definição do traço parcial. No presente trabalho adotaremos a seguinte definição: sejam $|n_{1,1}, n_{1,1}, \{n_{i,\sigma}\}, n_{2,1}, n_{2,1}\rangle$ e $|n_{1,1}, n_{1,1}, n_{2,1}, n_{2,1}\rangle$ os estados dos subespaços do espaço de Fock associados respectivamente com os clusters inicial e renormalizado (ver Fig.3.1), onde $n_{1,\sigma}, n_{2,\sigma} = 0, 1$ são os autovalores dos correspondentes operadores número de ocupação dos sítios terminais e $\{n_{i,\sigma}\}$ representa o conjunto de autovalores dos operadores $n_{i,\sigma}$ associados com todos os sítios internos do cluster inicial. O traço parcial (3.5) define-se então pela seguinte

equação:

$$\langle n_{1,\uparrow}n_{1,\downarrow}n_{2,\uparrow}n_{2,\downarrow} | e^{\mathcal{H}'_k+C'} | n'_{1,\uparrow}n'_{1,\downarrow}n'_{2,\uparrow}n'_{2,\downarrow} \rangle = \sum_{\{n_{i,\sigma}\}} \langle n_{1,\uparrow}n_{1,\downarrow}\{n_{i,\sigma}\}n_{2,\uparrow}n_{2,\downarrow} | e^{\mathcal{H}_k} | n'_{1,\uparrow}n'_{1,\downarrow}\{n_{i,\sigma}\}n'_{2,\uparrow}n'_{2,\downarrow} \rangle \quad (3.11)$$

para todos os valores de $n_{1,\sigma}, n_{2,\sigma}, n'_{1,\sigma}, n'_{2,\sigma} = 0, 1$, com $\sigma = \uparrow, \downarrow$. O uso desta definição tem mostrado bons resultados em cálculos anteriores no modelo de Hubbard para $d = 1$ [35].

3.2 O Hamiltoniano generalizado

Como já mencionamos, a aplicação do procedimento de GR exige que o Hamiltoniano \mathcal{H}'_k na Eq. (3.5) tenha a mesma forma do que \mathcal{H}_k . Isto não sempre é possível, já que, ainda que na rede hierárquica não temos proliferação infinita de interações entre vizinhos afastados, podemos ter proliferação de termos de interação (operadores) de um e dois sítios. De fato, este é o caso para o Hamiltoniano (2.17). Efetivamente, se \mathcal{H}_k é o Hamiltoniano de Hubbard usual, \mathcal{H}'_k vai conter novos termos que não estão presentes em \mathcal{H}_k . Não obstante, devido ao caráter fermiônico do Hamiltoniano (isto é, a propriedade $(c_{i,\sigma}^\dagger)^2 = 0$ dos operadores $c_{i,\sigma}^\dagger$) a proliferação não pode continuar indefinidamente, já que num cluster finito o número de estados é finito. Assim, existe um Hamiltoniano mais geral do que o Hamiltoniano (2.17) que contém um número *finito* de termos e que satisfaz *exatamente* a Eq. (3.5). O nosso próximo passo então é achar esse Hamiltoniano.

Como veremos, a escolha do cluster neste problema é crucial, já que dela depende a forma do novo Hamiltoniano. Certas escolhas vão gerar um Hamiltoniano que não reproduz todas as simetrias do Hamiltoniano de Hubbard, e por tanto não vai conter este último como caso particular. Em consequência, o passo previo a construção do Hamiltoniano generalizado é achar o tipo de cluster adequado para a renormalização.

Como já dissemos, a estrutura do cluster vai determinar as simetrias do novo Hamiltoniano. Vamos analisar este ponto. As simetrias de interêsse neste problema são as que denotamos por (a), (b), (c) e (d) na subsecção 2.2.3. Todas elas tem a caraterística comum de que podem-se descrever por um operador unitário da forma

$$\mathcal{U} = \prod_i \mathcal{U}_i \quad (3.12)$$

onde o produto é sobre todos os sítios do cluster; \mathcal{U}_i contem somente operadores associados ao sítio i , e

$$[\mathcal{U}_i, \mathcal{U}_j] = 0 \quad (3.13)$$

para todo par de sítios i, j . No caso das rotações (b) obviamente $\mathcal{U}_i = \exp(i\theta \vec{n} \cdot \vec{S}_i)$.

Se \mathcal{U} representa uma simetria do Hamiltoniano original \mathcal{H}_k então

$$\mathcal{U} e^{\mathcal{H}_k} \mathcal{U}^\dagger = e^{\mathcal{H}_k} \quad (3.14)$$

Da definição (3.11) do traço parcial, pode-se verificar que ele fica invariante se sobre o operador $\exp(\mathcal{H}_k)$ se aplica uma transformação unitária da forma

$$\prod_{\text{sítios internos}} \mathcal{U}_i$$

onde os \mathcal{U}_i satisfazem a Eq. (3.13). Assim, reemplazando na Eq. (3.5) e utilizando esta última propriedade vemos que a Eq. (3.14) implica que

$$\mathcal{U}' e^{\mathcal{H}'_k} \mathcal{U}'^\dagger = e^{\mathcal{H}'_k} \quad (3.15)$$

onde $\mathcal{U}' \equiv \mathcal{U}_1 \mathcal{U}_2$ e 1, 2 denotam os sitios terminais. Da Eq. (2.47) vemos que no caso em que $\mathcal{U} = \mathcal{U}_p$ os operadores \mathcal{U}_i em principio admitem parâmetros independentes $\{\gamma_i\}$, $\{\bar{q}_i\}$ para cada sitio i (como é o caso da simetria (c)). Assim, se os parâmetros que definem \mathcal{U} possuem uma certa ordem pode acontecer que, dependendo da estrutura do cluster, os parâmetros de \mathcal{U}' tenham uma ordem *diferente*, e por tanto \mathcal{U} e \mathcal{U}' vão representar simetrias diferentes.

No caso em que \mathcal{U} e \mathcal{U}' tem a mesma estrutura a simetria representada por eles é preservada pelo traço parcial (3.5). Assim, se \mathcal{U} representa uma simetria do Hamiltoniano de interesse, então o novo Hamiltoniano vai ser em principio o mais geral possível que possui êssa simetria, contendo por tanto o original como caso particular.

3.2.1 O caso da banda semi-cheia

Vejamos primeiro o Hamiltoniano de Hubbard correspondente ao caso da banda semi-cheia (2.33). Por simplicidade vamos considerar inicialmente o problema unidimensional. Neste caso o cluster é simplesmente uma cadeia linear de m sitios e $m - 1$ ligações. Como já vimos na subseção 2.2.3, este Hamiltoniano possui as simetrias (a), (b) e (c). No caso das simetrias (a) e (b), todos os parâmetros dos

operadores \mathcal{U}_i são iguais, e portanto qualquer que seja o cluster \mathcal{U}' e \mathcal{U} vão ter a mesma estrutura. Por outro lado, no caso da simetria (c), operadores $\mathcal{U}_i, \mathcal{U}_j$ correspondentes a sítios primeiros vizinhos tem parâmetros γ_i, γ_j com sinais opostos. Por exemplo, podemos atribuir a cada sítio parâmetros γ e $-\gamma$ alternadamente, com $\gamma = \gamma_1$ arbitrário. Se escolhermos uma cadeia com um número de sítios m *ímpar* (e.g., $m = 3$, ver Fig.3.2a) teremos $\gamma_2 = \gamma$, e portanto em \mathcal{U}' teremos $\gamma_1 = \gamma_2$, onde os sítios 1 e 2 neste caso são primeiros vizinhos. Assim, \mathcal{H}'_k vai possuir a simetria (d) no lugar da (c). Sendo que as duas simetrias são em geral incompatíveis (exceto numos poucos casos particulares como veremos depois) \mathcal{H}'_k neste caso não vai conter o Hamiltoniano (2.33) como caso particular. O cluster utilizado por Castellani *et al* [34] é precisamente o de três sítios mostrado na Fig.3.2a e portanto o Hamiltoniano por eles achado apresenta este inconveniente. Pelo contrario, se escolhermos uma cadeia com m *par* (e.g., $m = 4$, ver Fig.3.2b) teremos $\gamma_2 = -\gamma_1 = -\gamma$, e a simetria (c) vai preservar-se.

O argumento anterior aplica-se não somente a cadeias lineares, senão também a qualquer cluster de dois terminais cuja topologia permite ao Hamiltoniano correspondente satisfazer a propriedade de invariância (c) com $\gamma_2 = -\gamma_1$. Os clusters associados às redes diamante da Fig.3.1 satisfazem esta propriedade.

Nosso proximo passo é achar uma generalização do Hamiltoniano (2.33) que satisfaça exatamente a Eq. (3.5). Vamos denotar este Hamiltoniano por \mathcal{H}_G [42]. Seguindo as ideias introduzidas na Ref.[34] podemos obter a estrutura de \mathcal{H}_G

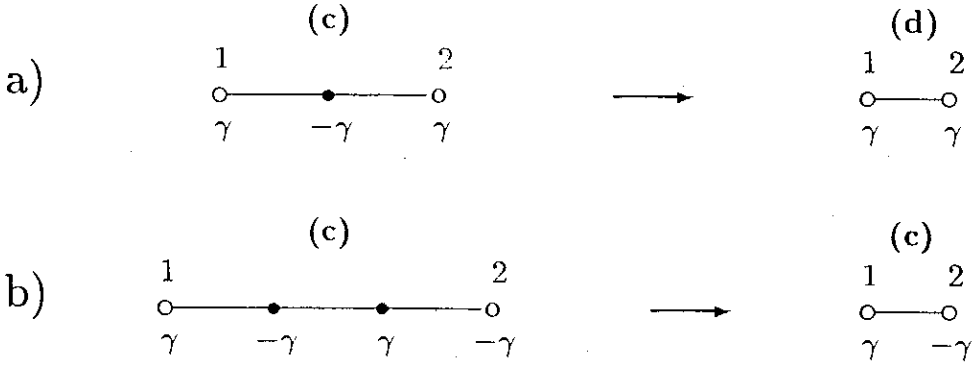


FIGURA 3.2: Representação esquemática do efeito do traço parcial na simetria (c) do Hamiltoniano (2.33) para diferentes clusters. a) Cadeias com m ímpar: a simetria (c) se transforma na (d); b) cadeia com n par: a simetria (c) preserva-se.

sem realizar explicitamente os cálculos envolvidos na Eq. (3.5). O procedimento consiste em achar *todos* os operadores *independentes* de um e dois sítios que satisfazem as simetrias (a), (b) e (c). O Hamiltoniano \mathcal{H}_G será então uma combinação linear desses operadores. O procedimento pode realizar-se em passos sucessivos. Primeiro procuramos a combinação linear mais geral de invariantes independentes que podem-se expressar somente em termos dos operadores de spin. Das Eqs. (2.23) vemos que estes operadores possuem trivialmente as simetrias (a) e (c). Dado que os operadores de spin satisfazem a álgebra do grupo $SU(2)$, a combinação linear mais geral, que possui a simetria (b), que podemos construir com estes operadores é

$$-J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \frac{1}{2} U \sum_i (S_i^z)^2 \quad (3.16)$$

Notemos que o terceiro destes termos está contido no Hamiltoniano (2.33). O passo seguinte é procurar os invariantes conformados somente de operadores de

carga. Novamente das Eqs. (2.23) vemos que estes serão trivialmente invariantes sob rotações **(b)**. Do apêndice A vemos que o operador bilinear de dois sítios mais geral que satisfaz **(a)** e **(c)** é (Eq. (A.16)):

$$-I \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\rho_i^z \rho_j^z - (\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y) \right]$$

Estes são todos os operadores de um e dois sítios que é possível construir em termos somente dos operadores \vec{S}_i e $\vec{\rho}_i$, já que pelo vínculo (2.23) eles não são independentes. Finalmente devemos considerar os operadores que não podem ser expressados exclusivamente em termos de \vec{S}_i e $\vec{\rho}_i$, os quais contêm necessariamente um número ímpar de operadores c e c^\dagger por sítio (termos de hopping). Um destes termos o obtemos diretamente do Hamiltoniano (2.33), e do apêndice A vemos que somente existe mais um termo deste tipo (Eq. (A.25)). Assim o Hamiltoniano \mathcal{H}_G tem a forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_G = & t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \frac{1}{2} U \sum_i (S_i^z)^2 - J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \\ & - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 - I \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\rho_i^z \rho_j^z - (\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y) \right] \\ & + D \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) (n_{i,-\sigma} - n_{j,-\sigma})^2 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Este é o *mínimo* Hamiltoniano (no sentido de que Hamiltonianos maiores existem, mais alguns de seus termos vão ser dependentes) que satisfaz a Eq. (3.5) e contém o Hamiltoniano (2.33) como caso particular. Este fato é verificado explicitamente pelos nossos cálculos numéricos. É importante recalcar que, não obstante termos seguido o método introduzido por Castellani *et al.* o Hamiltoniano por eles obtido

é diferente do Hamiltoniano (3.17) (ver apêndice A). Como já mencionamos, a diferença é devida aos diferentes clusters utilizados.

Notamos as seguintes propriedades:

- Utilizando a transformação (2.24) pode-se verificar que \mathcal{H}_G transforma-se como

$$\mathcal{H}_G(t, D) \rightarrow \mathcal{H}_G(-t, -D) \quad (3.18)$$

Assim, a função grã-partição associada

$$\mathcal{Z}_G = \text{Tr exp}(\mathcal{H}_G)$$

satisfaz

$$\mathcal{Z}_G(t, D) = \mathcal{Z}_G(-t, -D) \quad (3.19)$$

Esta propriedade generaliza a Eq. (2.26).

- Repetindo o mesmo procedimento utilizado na subseção 2.2.2 pode-se demonstrar usando a transformação (2.27) que $\rho = 1$ para o Hamiltoniano (3.17); isto é, ele preserva a propriedade de banda semi-cheia do Hamiltoniano (2.33)

Assim como o Hamiltoniano (3.17) é o mais geral que possui um certo conjunto de simetrias preservadas pelo traço parcial (3.5), podem existir Hamiltonianos menores que possuam um grupo de simetrias maior (sendo por tanto casos particulares de (3.17)). Se as novas simetrias fossem também preservadas pela Eq. (3.5) a forma dos correspondentes Hamiltonianos também se preservará. Em termos das equações de

recorrência do GR no espaço de parâmetros do Hamiltoniano (3.17) isto é equivalente a ter subespaços invariantes sob GR, associados com esses Hamiltonianos. Subespaços invariantes sob GR são de grande utilidade na análise do fluxo das equações de recorrência.

Nós achamos os seguintes subespaços invariantes:

- Aplicando a transformação (2.42) vemos que o Hamiltoniano (3.17) transforma-se como

$$\mathcal{H}_G(U, K, J, I, t, D) \rightarrow \bar{\mathcal{H}}_G\left(2\left(zK - \frac{1}{2}U\right), K, I, J, t, D\right) \quad (3.20)$$

onde z é o número de coordenação no caso de uma rede de Bravais e $z = 2$ para as redes hierárquicas utilizadas neste trabalho; $\bar{\mathcal{H}}_G$ obtem-se de \mathcal{H}_G substituindo os operadores c pelos operadores b (ver Eqs. (2.43)-(2.46)). Vemos que para $K = U/2z$ e $J = I$ o Hamiltoniano (3.17) é invariante sob a transformação (2.42). Pode-se verificar que esta simetria é preservada pela Eq. (3.5); conseqüentemente, o subespaço $(K, J) = (U/2, I)$ é invariante sob a transformação de GR no espaço de parâmetros (U, K, J, I, t, D) .

- Da Eq. (3.18) vemos que $t = D = 0$ corresponde também a um subespaço invariante.
- Para $t = D = I = 0$ obtemos o modelo JKU , caracterizado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{JKU} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \bar{S}_i \cdot \bar{S}_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \frac{1}{2} U \sum_i (S_i^z)^2 \quad (3.21)$$

O Hamiltoniano (3.21) tem a aparência de um análogo quântico do Hamiltoniano BEG (Blume-Emery-Griffiths) [65,66]; de fato a situação é mais complexa do que isso. Isto é devido ao fato de que os operadores \vec{S}_i não são uma simples extensão quântica das variáveis clássicas de spin 1 (isto é, operadores de spin 1). Ainda no caso dos operadores diagonais S_i^z , estes diferem das variáveis de spin-1 do modelo BEG no fato de que nos primeiros os estados $S_i^z = 0$ são duplamente degenerados, enquanto que nas últimas não. É simples verificar que este é o Hamiltoniano mais geral contido no Hamiltoniano (3.17) que possui as 4 simetrias (a), (b), (c) e (d), e por tanto o subespaço de parâmetros associado é invariante sob GR.

- O caso $J = 0$ de \mathcal{H}_{JKU} é isomórfico ao modelo de Ising spin 1/2 na presença de um campo magnético externo. Introduzindo as novas variáveis [67]

$$t_i \equiv 2(S_i^z)^2 - 1, \quad t_i = \pm 1 \quad (3.22)$$

\mathcal{H}_{JKU} pode-se escrever para $J = 0$ como

$$\mathcal{H}_{Ising} = K/4 \sum_{\langle i,j \rangle} t_i t_j + H_t \sum_i t_i \quad (3.23)$$

onde, levando em conta a dupla degenerescência do estado $S_i^z = 0$, temos que

$$H_t = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} U - K \right) \quad (3.24)$$

$J = 0$ constitui um subespaço invariante sob GR, que pela sua vez contém um outro subespaço menor invariante sob GR: $K = U/2$, isto é, $H_t = 0$. Esta simetria é um caso particular da expressada na Eq. (3.20).

- Finalmente para $t = D = J = 0$ temos um subespaço invariante associado com o modelo IKU , descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{IKU} = -I \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\rho_i^z \rho_j^z - (\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y) \right] - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \frac{1}{2} U \sum_i (S_i^z)^2 \quad (3.25)$$

Como veremos na seção 4.2 o modelo IKU pode mapear-se no modelo JKU utilizando a transformação (2.42). Assim, as simetrias associadas com este subespaço obtem-se das simetrias de \mathcal{H}_{JKU} ((a), (b), (c) e (d)) mediante a transformação (2.42).

3.2.2 O caso geral

Vamos considerar agora o caso de ocupação arbitraria da banda. Isto é, procuramos uma generalização do Hamiltoniano (2.17) que satisfaça a Eq. (3.5), a qual vamos chamar o *Hamiltoniano de Hubbard generalizado* (HG), e vamos denotarlo por \mathcal{H}_G^H . Como vimos na subseção 2.2.3 o Hamiltoniano (2.17) possui somente as simetrias (a) e (b), as quais são preservadas pela Eq. (3.5). Repetindo exatamente o mesmo procedimento que nos levou do Hamiltoniano (2.33) ao Hamiltoniano (3.17), isto é, construindo o Hamiltoniano mais geral que possui as simetrias (a) e (b),

achamos para \mathcal{H}_G^μ a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_G^\mu = & \quad t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + \frac{1}{2} U \sum_i (S_i^z)^2 + \tilde{\mu} \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \\
& - J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + Y \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\rho}_i \cdot \vec{\rho}_j \\
& - I \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\rho_i^z \rho_j^z - (\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y) \right] + R \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(\rho_i^z)^2 \rho_j^z + (\rho_j^z)^2 \rho_i^z \right] \quad (3.26) \\
& + D \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) (n_{i,-\sigma} - n_{j,-\sigma})^2 \\
& + E \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) n_{i,-\sigma} n_{j,-\sigma}
\end{aligned}$$

onde $\tilde{\mu}$ é dado pela Eq. (2.34). O Hamiltoniano (3.26) contém os seguintes modelos como casos particulares

- Para $J = K = I = Y = R = D = E = 0$ recuperamos o modelo de Hubbard usual (2.17).
- Para $\tilde{\mu} = R = E = Y = 0$ recuperamos o Hamiltoniano (3.17).
- Para $\tilde{\mu} = R = I = 0$; $D = -t$ e $E = 2D$ recuperamos precisamente o Hamiltoniano (aqui denotado por \mathcal{H}_{CD}) obtido por Castellani *et al* [34] mediante o uso do cluster de três sítios no caso da banda semi-cheia. O Hamiltoniano \mathcal{H}_{CD} (ver apêndice A) satisfaz as simetrias (a), (b) e (d), enquanto que o Hamiltoniano \mathcal{H}_G satisfaz (a), (b) e (c).
- Para $K = R = I = Y = 0$; $D = E = -t$ e tomando o limite $U \rightarrow \infty$ mantendo μ finito, obtemos o modelo t-J [23,68]. Uma versão generalizada deste modelo será discutida nos capítulos 5 e 6.

- Para $K = I = Y = R = D = E = 0$ obtemos o modelo de Hubbard-Heisenberg [69]

Vamos supôr agora que desejamos estudar o modelo de Hubbard (2.17), ou algum outro dos modelos contidos no Hamiltoniano (3.26), na presença de um campo magnético externo B utilizando o GR. O mesmo método utilizado na derivação dos Hamiltonianos (3.17) e (3.26) aplica-se neste caso. Por simplicidade vamos supôr que o campo esteja orientado na direção \mathbf{z} . Assim a simetria $(\mathbf{b};$ deve ser reemplazada pela invariância sob rotações alrededor do eixo \mathbf{z} : $[\mathcal{H}_H, \mathbf{S}^z] = 0$. Repetindo o mesmo procedimento anterior obtemos que o Hamiltoniano que fica invariante sob GR neste caso é o seguinte:

$$\mathcal{H}_G^{\mu B} = \mathcal{H}_G^{\mu} + \mathcal{H}_B \quad (3.27)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_B = & B \sum_i S_i^z - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^z S_j^z - (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)] \\ & + R_2 \sum_{\langle i,j \rangle} [(S_i^z)^2 S_j^z + (S_j^z)^2 S_i^z] \end{aligned} \quad (3.28)$$

Se consideramos o caso $B = R = R_2 = \tilde{\mu} = t = D = E = I = Y = 0$, e $U \rightarrow \infty$, $\mathcal{H}_G^{\mu B}$ reproduz o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico de spin 1/2, o qual pela sua vez contem, para $J_2 = 0$, o modelo de Heisenberg isotrópico como caso particular.

O procedimento aqui descrito é de carater geral e pode continuar-se no caso em que novos campos externos que quebrem algumas das simetrias anteriores sejam

incluídos. A aplicação sucessiva deste procedimento levaria eventualmente a um Hamiltoniano \mathcal{H}_g , sendo este o Hamiltoniano fermiônico mais geral contendo interações de um e dois sítios para uma banda s . A forma geral de \mathcal{H}_g obtem-se a partir de $\mathcal{H}_G^{\mu B}$ eliminando sucessivas simetrias. Assim, por exemplo, o termo $Y \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\rho}_i \cdot \vec{\rho}_j - I \sum_{\langle i,j \rangle} [\rho_i^z \rho_j^z - (\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y)]$ no Hamiltoniano (3.28) vai ser substituído por um termo mais geral da forma $\sum_{\langle i,j \rangle} [I_z \rho_i^z \rho_j^z + I_x \rho_i^x \rho_j^x + I_y \rho_i^y \rho_j^y]$. A seqüência completa de Hamiltonianos analisados nesta seção é resumida em forma esquemática na Fig.3.3.

3.3 Generalidades do método de cálculo

Nesta seção descrevemos brevemente as características mais importantes do método numérico utilizado no cálculo e análise de diagramas de fases nos capítulos 4, 6 e 7.

As equações de recorrência do GR obtem-se do cálculo explícito do traço parcial

$$\exp(\mathcal{H}' + \mathcal{C}') = \underset{\text{sítios internos}}{\text{Tr}} \exp(\mathcal{H}) \quad (3.29)$$

onde \mathcal{H} representa um Hamiltoniano invariante sob GR (que será algum dos Hamiltonianos analisados na seção anterior, dependendo do problema de interesse) associado com o cluster sob consideração e \mathcal{H}' representa o Hamiltoniano associado com o cluster de dois sítios (Fig.3.1). O cálculo explícito do traço parcial (3.29) realiza-se mediante a Eq. (3.11). Assim, o primeiro passo consiste em calcular explicitamente os elementos de matriz de $\exp(\mathcal{H})$ na base de autovetores dos operadores $\{n_{i,\sigma}\}$ corres-

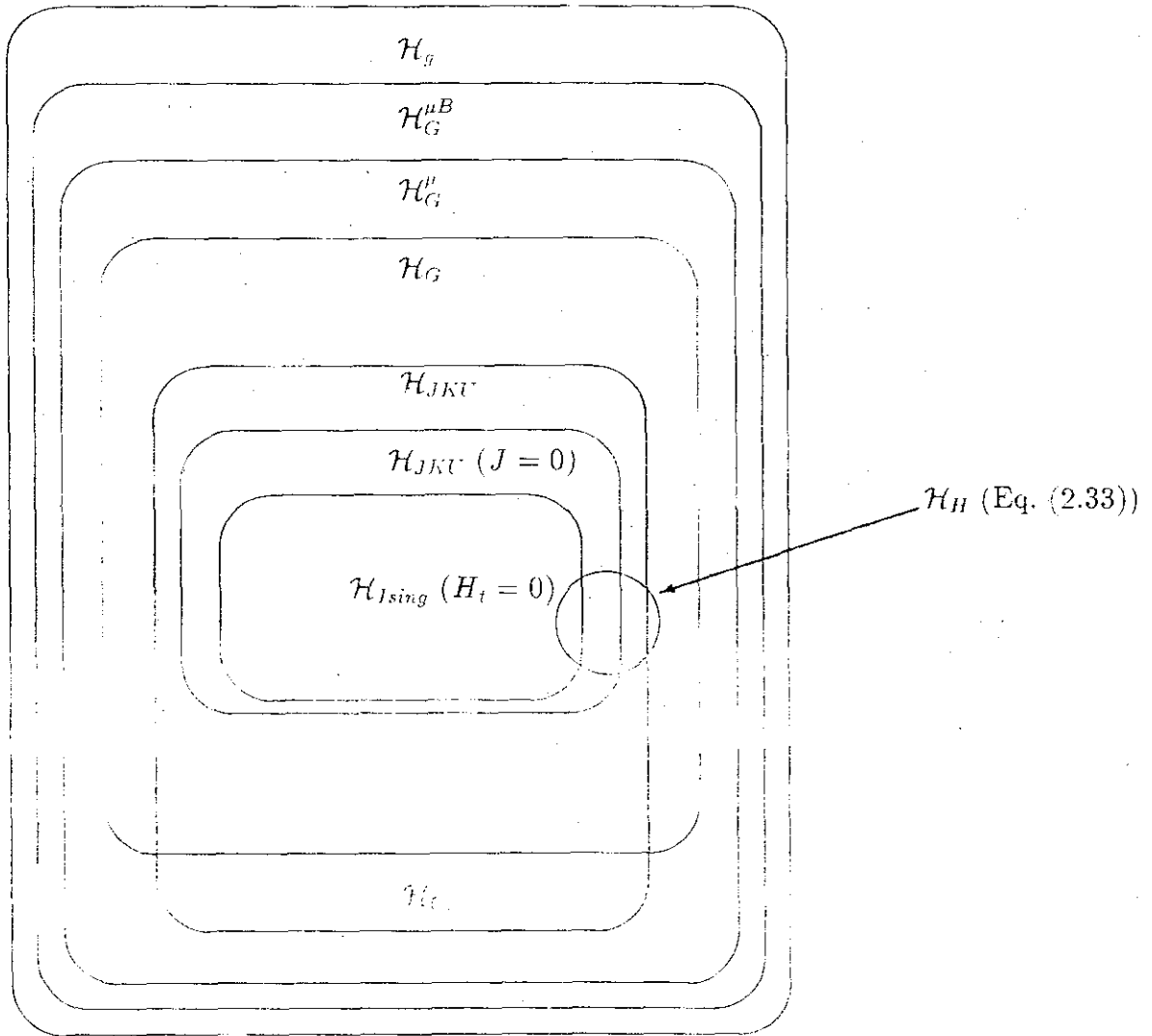


FIGURA 3.3: Diagrama hierárquico de Hamiltonianos invariantes sob CR. Os blocos retangulares representam seqüências de Hamiltonianos segundo o seu grau de *simetria* (o que não sempre coincide com seqüências de valores particulares de \mathcal{H}_g). O Hamiltoniano de Hubbard com banda semi-cheia (2.33) é indicado explicitamente por um círculo; a estrutura do diagrama mostra como \mathcal{H}_H esta contido em \mathcal{H}_G , mas não em \mathcal{H}_{CD} .

pondente ao cluster considerado. A representação de \mathcal{H} em dita base foi obtida para o caso geral de \mathcal{H}_G^μ utilizando uma linguagem simbólica de computação (ver apêndice B). Os elementos de matriz de $\exp(\mathcal{H})$ obtêm-se usando a expressão

$$\exp(\mathcal{H}) = U^\dagger \exp(\mathcal{H}^D) U \quad (3.30)$$

onde \mathcal{H}^D é a matriz \mathcal{H} diagonalizada e U é a matriz que diagonaliza \mathcal{H} . Precisamos então diagonalizar as matrizes \mathcal{H} e \mathcal{H}' . Assim utilizando as Eqs. (3.11) e (3.30) obtemos um conjunto de 16^2 equações ($16 = 2^4$ é a dimensão de \mathcal{H}'), das quais somente um número de equações igual ao número de parâmetros em \mathcal{H} , mais uma equação pela constante \mathcal{C}' , são independentes (este é mais um teste para verificar se \mathcal{H} é efetivamente invariante sob GR). Eliminando destas equações os parâmetros \bar{L}' de \mathcal{H}' como função dos parâmetros \bar{L} de \mathcal{H} obtemos finalmente as equações de recorrência do GR.

A matriz \mathcal{H} tem dimensão 4^M , onde M é o número total de sítios do cluster considerado. Isto em geral para $d \geq 2$ corresponde a matrizes de dimensão por acima da capacidade de cálculo de qualquer computador disponível (para $d = 2$ somente, \mathcal{H} é uma matriz 65536×65536), além do fato de que o tempo de computação cresce exponencialmente com M . Assim, novas aproximações devem ser introduzidas no cálculo para $d \geq 2$.

Inicialmente consideramos o cluster de 4 sítios correspondente ao problema em $d = 1$ (Fig.3.1a), para o qual as equações de recorrência foram obtidas em forma exata. Neste caso \mathcal{H} é representado por uma matriz 256×256 . Porém, o problema

pode-se simplificar aproveitando as simetrias de \mathcal{H} . Sabemos que \mathcal{H}_G^μ comuta com os operadores \mathbf{N} e \mathbf{S}^z . Assim, usando o fato de que os vetores da base $\{|n_{i,\sigma}\rangle\}$ são simultaneamente autovetores de \mathbf{N} e \mathbf{S}^z , podemos levar \mathcal{H}_G^μ a uma estrutura diagonal em blocos simplesmente escolhendo a ordem destes vetores de acordo com os autovalores de \mathbf{N} e \mathbf{S}^z . O maior bloco então é uma matriz 36×36 (correspondente aos autovalores $N = 4$ e $S^z = 0$, ver apêndice B). É possível diminuir ainda mais o tamanho dos blocos aproveitando outras simetrias, tal como a simetria de inversão dos sítios do cluster ($1 \longleftrightarrow 2, 3 \longleftrightarrow 4$). Porém, a maioria dos blocos obtidos desta maneira não ficam o suficientemente pequenos para ser diagonalizados analiticamente, e dado que o esforço computacional que implica este tipo de operação é comparavel ao da diagonalização numérica dos blocos originais, escolhemos este último caminho para a maioria dos casos. Exeto para alguns casos particulares, nos quais a simetria do problema permite a diagonalização analítica das matrices, em geral as mesmas foram diagonalizadas utilizando rotinas numéricas standard [70] para matrices reais e simétricas (hermíticas). Desta maneira obtivemos as equações de recorrência

$$\bar{L}' = \bar{L}'_1(\bar{L}) \quad (3.31)$$

onde o subíndice 1 denota $d = 1$. Afim de levar apropriadamente em conta o peso dos termos de um sítio (correspondentes aos parâmetros U e $\tilde{\mu}$) nestas equações, associamos com cada sítio interno do cluster unidimensional parâmetros U e $\tilde{\mu}$ e com cada sítio terminal parâmetros $U/2$ e $\tilde{\mu}/2$. Desta maneira, os termos locais

ficam proporcionais ao número de coordenação do sítio correspondente [71,72].

Consideremos agora os clusters correspondentes a dimensões $d \geq 2$, tais como os mostrados nas figuras 3.1b e 3.1c. Como vimos na subseção 3.1.1 cada um destes clusters conforma-se de 3^{d-1} cadeias de 4 sítios em paralelo. Assim, o Hamiltoniano correspondente pode ser expressado como uma soma de Hamiltonianos de cadeias, e por tanto dentro da mesma aproximação (3.6) obtemos as equações de recorrência

$$\bar{L}' = \bar{L}'_d(\bar{L}) = l^{d-1} \bar{L}'_1(\bar{L}) \quad (3.32)$$

onde $l = 3$ corresponde então ao fator de escala da transformação de GR. As Eqs. (3.32) corresponderiam também a uma versão quântica da aproximação de Migdal-Kadanoff para uma rede hipercúbica de dimensão d .

Capítulo 4

Diagrama de fases do Hamiltoniano generalizado de Hubbard: banda semi-cheia

Neste capítulo calculamos o diagrama de fases associado com o Hamiltoniano \mathcal{H}_G , Eq. (3.17), correspondente ao caso da banda semi-cheia do Hamiltoniano (3.26), mediante uma análise do fluxo das equações de recorrência (3.32) no espaço de parâmetros (U, K, J, I, t, D) [43]. Apresentamos aqui os cortes mais relevantes deste complexo diagrama de fases.

A maioria dos atratores (pontos fixos completamente estáveis das equações de recorrência) e muitos dos pontos fixos relevantes (semi-instáveis ou completamente instáveis) localizam-se no subespaço invariante $t = D = 0$, o qual é analisado nas seções 4.1 e 4.2. A região $t \neq 0$ do diagrama de fases é estudada nas seções 4.3 (modelo de Hubbard (2.33)) e 4.4 (modelo de Hubbard com in-

teração biquadrática entre primeiros vizinhos). Observamos que a maioria dos pontos pertencentes à região $D \neq 0$ do espaço de parâmetros são levados pelo fluxo do GR na região $D = 0$. Conseqüentemente, não se espera em geral que apareçam, em relação as propriedades críticas, efeitos na região $D \neq 0$ que não estejam também presentes na região $D = 0$ do diagrama de fases. A única exceção que se observou é discutida nas seções 4.3 e 4.4.

4.1 O modelo JKU

Vamos considerar nesta seção o corte do diagrama de fases com o subespaço invariante $t = D = I = 0$; isto é, analisamos o diagrama de fases associado com o Hamiltoniano (3.21). Nos estamos interessados principalmente no caso antiferromagnético ($J > 0$), devido a que a estrutura de pontos fixos associada determina em grande parte o diagrama de fases do modelo de Hubbard usual (ver seção 4.3), assim como de outros cortes importantes do diagrama de fases total. O caso ferromagnético ($J < 0$) apresenta resultados que são análogos aos correspondentes do caso $J > 0$. Mais precisamente, cada ponto fixo localizado na região $J > 0$ tem associado um ponto fixo semelhante na região $J < 0$ com a mesma estabilidade (embora com valores numéricos diferentes); de fato, esta analogia existe para a topologia inteira do fluxo do GR. É claro que as fases com orden magnética serão diferentes em cada caso, mas a estrutura dos diagramas de fases (isto é, a localização das fases e das superfícies de transição entre elas) será análoga nos dois

casos. Assim, é suficiente considerar o caso $J \geq 0$, embora que alguns resultados de interesse ao efeito de comparação são discutidos na subseção 4.1.2. Fisicamente, a analogia entre os casos $J > 0$ e $J < 0$ é de se esperar, e ela é reproduzida corretamente pelo presente método de GR, devido a que todos os caminhos mínimos entre os dois terminais dos clusters que estamos utilizando é *impar*.

No caso do modelo JKU as equações de recorrência (3.31) podem ser obtidas analiticamente. Utilizando a simetria de inversão do cluster (pag. 51) podemos decompôr a matriz que representa \mathcal{H}_{JKU} nos seus blocos irreducíveis, onde os blocos maiores são neste caso matrizes 3×3 , permitindo assim a sua diagonalização analítica. Temos então as seguintes equações de recorrência

$$\begin{aligned}
 U' &= 4l^{d-1} \ln \left(\frac{G_2}{G_1} \right) \\
 K' &= -J' + l^{d-1} \ln \left(\frac{G_2^2}{G_1 G_3} \right) \\
 J' &= \frac{l^{d-1}}{2} \operatorname{arctanh} \left(-\frac{G_5}{G_4} \right)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde

$$\begin{aligned}
 G_1 &\equiv 4 + \varepsilon \exp(U/2) + 2 \exp(U - K) g_5(J) \\
 G_2 &\equiv 4 \exp(U/4) + 4 \exp(3U/4) + \exp(5U/4 - K) g_4(J) \\
 &\quad + 2 \exp(3U/4 - K) g_5(J) \\
 G_3 &\equiv 4 \exp(U/2) + 4 \exp(U - K) g_5(J) + \exp(3(U/2 - K)) g_1(J) \\
 G_4 &\equiv 4 \exp(U/2) + 4 \exp(U - K) g_5(J) + \exp(3(U/2 - K)) g_2(J) \\
 G_5 &\equiv \exp(3(U/2 - K)) g_3(J)
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

com

$$\begin{aligned}
g_1(x) &\equiv \exp(x) + \frac{5}{3} \exp(-3x) + \frac{1}{3} \exp(3x) \cosh(2\sqrt{3} x) \\
&\quad + \exp(x) \left(\cosh(2\sqrt{2} x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sinh(2\sqrt{2} x) \right) \\
g_2(x) &\equiv \frac{1}{2} \exp(x) + \frac{5}{6} \exp(-3x) + \frac{2}{3} \exp(3x) \cosh(2\sqrt{3} x) \\
&\quad + \exp(x) \left(2 \cosh(2\sqrt{2} x) - \frac{1}{\sqrt{2}} \sinh(2\sqrt{2} x) \right) \\
g_3(x) &\equiv g_1(x) - g_2(x) \\
g_4(x) &\equiv 1 + 2 \exp(-2x) + \exp(4x) \\
g_5(x) &\equiv \exp(-x) + \exp(x) \cosh(2x)
\end{aligned} \tag{4.3}$$

4.1.1 Diagrama de fases no caso $J = 0$

Como vimos na seção 3.2.1 o subespaço $J = 0$ é invariante sob GR, como pode-se verificar das Eqs. (4.1). Notemos que para $J = 0$ o Hamiltoniano \mathcal{H}_{JKU} é diagonal (ver Eq. (3.23)). Conseqüentemente o GR é exato na rede hierárquica. Da Eq. (3.21) vemos que se trocarmos o sinal de qualquer spin ($S_i^z \rightarrow -S_i^z$) a energia de uma configuração arbitrária $\{n_{i,\sigma}\}$ não muda. Assim, a magnetização espontânea é sempre zero para $J = 0$.

O diagrama de fluxo no plano (U, K) é mostrado na Fig. 4.1 para $d = 2$ (o diagrama correspondente para $d = 3$ é completamente análogo).

A linha $K = U/2$, que corresponde a $H_t = 0$ (ver Eq. (3.24)) constitui um subespaço invariante do plano (U, K) . Em certo sentido, esta é uma linha

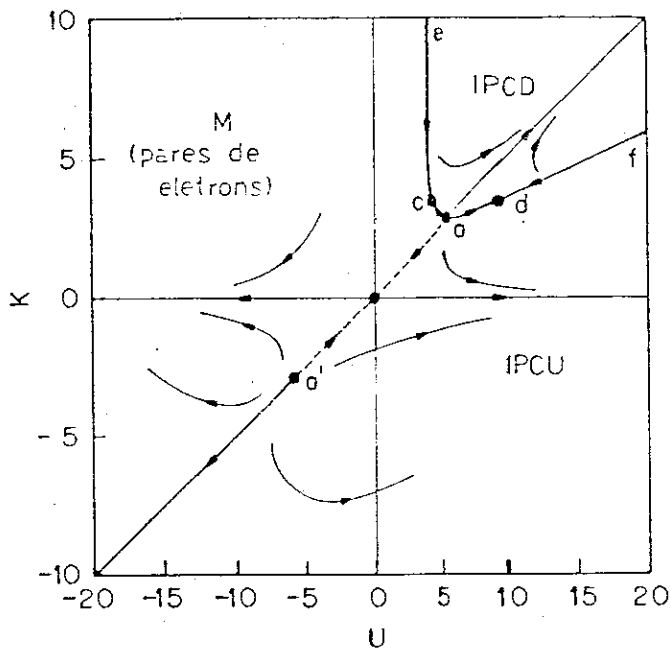


FIGURA 4.1: Diagrama de fluxo no plano (U, K) para $d = 2$. Os pontos fixos relevantes se denotam por a ; a' ; c e d . As três fases presentes são : isolante paramagnética com carga dimerizada (IPCD); isolante paramagnética com carga uniforme (IPCU) e metálica (M) (composta de pares de elétrons não correlacionados). A linha caf é de segunda ordem, entanto que a linha $K = U/2$ com $K < K_{a'}$ é de primeira ordem. A linha de traços entre a e a' corresponde a um passo contínuo entre as fases IPCU e P.

de simetria do diagrama de fases, já que o fluxo do GR é topologicamente equivalente nos dois lados da linha. Ao longo desta linha achamos dois pontos fixos completamente instáveis, denotados a e a' na Fig. 4.1. Achamos também um atrator: $(U, K) = (+\infty, +\infty)|_{K=U/2}$, e dois pontos fixos semi-instáveis: $(U, K) = (-\infty, -\infty)|_{K=U/2}$ e $(0, 0)$.

Fora da linha $K = U/2$ achamos mais dois atratores: $(U, K) = (\pm\infty, 0)$.

Distinguimos três fases no plano (U, K) , governadas cada uma delas por um dos três atratores mencionados. Diremos que uma região é *governada* por um ponto fixo quando a mesma constitui a bacia de atração de dito ponto. Podemos caracterizar as diferentes fases do diagrama utilizando o análogo magnético expressado nas Eqs. (3.22) e (3.23).

A região do plano (U, K) encerrada pela linha caf é governada pelo ponto fixo $(U, K) = (+\infty, +\infty)|_{K=U/2}$. Este ponto fixo caracteriza uma fase com ordem tipo “antiferromagnética”, isto é $\langle t_i \rangle > 0$ para todos os sítios pertencentes a uma subrede e $\langle t_i \rangle < 0$ para todos os sítios da outra. Em outras palavras, os sítios de uma subrede encontram-se predominantemente no estado $S_i^z = 0$, enquanto que os sítios da outra se encontrarão nos estados $S_i^z = \pm 1$; equivalentemente, uma subrede possui ocupação eletrônica simples, enquanto que na outra cada sítio pode estar duplamente ocupado ou desocupado indistintamente. Nenhuma destas subredes possui ordem magnética. Assim, esta é uma fase *isolante paramagnética* com uma distribuição de carga *dimerizada* (IPCD).

A região do plano $K < U/2$, excluindo a porção encerrada pela linha af , é governada pelo ponto fixo $(+\infty, 0)$. Este ponto fixo está associado com uma fase na qual $\langle t_i \rangle > 0$ em todos os sítios. Em outras palavras, a maioria dos sítios encontram-se num dos estados $S_i^z = \pm 1$ indistintamente, quer dizer, os elétrons estão na sua maioria localizados. Temos assim uma fase *isolante paramagnética* com uma distribuição de *carga uniforme* (IPCU).

A região do plano $K > U/2$, excluindo a porção encerrada pela linha ae , é governada pelo ponto fixo $(-\infty, 0)$. Este ponto fixo está associado com uma fase na qual $\langle t_i \rangle < 0$ em todos os sítios, ou equivalentemente (ver Eq. (3.22)) a maioria dos sítios encontram-se no estado $S_i^z = 0$. Nesta situação os elétrons se ligam em pares e a metade dos sítios vão a estar duplamente ocupados enquanto que a outra metade estarão desocupados. Dado que os pares podem se deslocar livremente pelos sítios desocupados, esta situação descreve uma fase *metálica* (M), na qual os portadores de carga são pares de elétrons não correlacionados.

Na linha $εaf$ temos dois pontos fixos semi-estáveis denotados por c e d na Fig. 4.1. A linha af é governada pelo ponto fixo d e corresponde a uma transição de segunda ordem entre as fases IPCD e IPCU. A linha ae é governada pelo ponto fixo c e corresponde a uma transição de segunda ordem entre as fases IPCD e M. Os dois pontos fixos estão conectados pela transformação unitária $(K, H_t) \rightarrow (K, -H_t)$, e portanto os autovalores das equações de recorrência linearizadas são iguais nos dois pontos. Conseqüentemente o expoente crítico térmico (isto é, o expoente do

comprimento de correlação [73,74]) $\nu_c = \ln l / \ln \lambda_c$ é o mesmo para as duas linhas de transição; $\lambda_c = \lambda_d > 1$ é o autovalor relevante no ponto fixo c (d).

Ao longo da linha $K = U/2$ o estado fundamental do sistema é degenerado, já que $H_i = 0$. A porção desta linha para $K < K_{a'}$ é governada pelo ponto fixo $(-\infty, -\infty)|_{K=U/2}$. O autovalor relevante das equações de recorrência linearizadas neste ponto tem o valor $\lambda = l^d$ ($l = 3$) e corresponde ao autovetor $(U, K) = (1, 0)$. Vemos assim que este ponto satisfaz a condição de Nienhuis e Nauenberg [75] para pontos fixos associados com transições de fases de primeira ordem. Em outras palavras, a linha $K = U/2$ com $K < K_{a'}$ descreve uma transição de primeira ordem (linha de coexistência de fases) entre as fases IPCU e M. Esta linha termina no ponto crítico a' .

Ao longo da linha aa' (linha de traços na Fig. 4.1) temos que $\langle t_i \rangle = 0$, isto é, $\langle S_i^z \rangle = 1/2$ para todos os sítios. Esta porção da linha é governada pelo ponto fixo $(0, 0)$. Se atravessarmos esta linha em qualquer direção o parâmetro de ordem $\langle t_i \rangle$ muda em forma suave em qualquer ponto da linha e pelo tanto não existe transição de fases nesta região. Ao deslocar o sistema ao longo da linha $K = U/2$ indo da fase IPCD em direção à origem, ele sofre uma transição de segunda ordem no ponto a . O expoente térmico $\nu_a = \nu_{a'}$ é dado neste caso por $\nu_a = \ln l / \ln \lambda_a^{(1)}$, onde $\lambda_a^{(1)}$ é o autovalor das equações de recorrência no ponto a correspondente ao autovetor na direção $K = U/2$. O expoente de cruzamento (isto é, "crossover" do comportamento crítico associado com o ponto a ao comportamento associado aos

d	U_a	U_c	K_c	U_d	K_d	ν_a	ν_c	ϕ_a	$\eta_{a'}$
2	5.77	4.38	3.48	9.54	K_c	1.35	1.22	0.17	0.25
3	2.83	2.61	8.68	32.10	K_c	1.08	0.55	1.54	-0.15

TABELA 4.1: Localização dos pontos fixos relevantes e dos correspondentes expoentes críticos do modelo JKU para $J = 0$. A localização do ponto fixo a' é $U_{a'} = -U_a$, $K_{a'} = -K_a$, onde $K_a = U_a/2$, e o expoente crítico é $\nu_{a'} = \nu_a$

pontos c ou d) é dado por $\phi_a = \ln \lambda_a^{(2)} / \ln \lambda_a^{(1)}$, onde $\lambda_a^{(2)}$ é o autovalor correspondente ao autovetor na direção tangencial à linha ef no ponto a ; o expoente da função de correlação $\eta_{a'}$ no ponto a' é dado por $\eta_{a'} = d + 2(1 - \ln \lambda_{a'}^{(2)} / \ln l)$, onde $\lambda_{a'}^{(2)}$ é o autovalor correspondente ao autovetor na direção transversal à linha de primeira ordem. Os valores numéricos dos expoentes críticos para $d = 2$ e $d = 3$, assim como a localização dos pontos fixos relevantes, são mostrados na tabela 4.1.

Uma das vantagens do método de GR utilizado neste trabalho é que temos a dimensionalidade d como parâmetro explícito, o que permite analisar a influência da dimensão nos diferentes tipos de fenômenos críticos presentes. Nas redes de Bravais a dimensão é um dos parâmetros principais que determina a universalidade em relação aos expoentes críticos. No caso das redes hierárquicas sabe-se que em geral estas não satisfazem as mesmas características de universalidade que as redes de Bravais. Assim, é ainda uma questão em aberto quais são os parâmetros relevan-

tes em relação à universalidade nas redes hierárquicas[76,77]. Em particular, um comportamento bem conhecido nas redes de Bravais é que para dimensões grandes os expoentes críticos de diferentes modelos (clássicos e quânticos) tendem todos a um mesmo conjunto de valores, isto é, os valores dos expoentes clássicos (expoentes da teoria de campo medio). Na Fig. 4.2 mostramos os expoentes ν_a e ν_c como função da dimensionalidade d . Vemos que $\nu_a \rightarrow 1$ para $d \rightarrow \infty$ (o expoente de campo medio é $\nu = 1/2$). Este comportamento é conhecido para o modelo de Potts de q estados com q arbitrário [58], onde o nosso caso corresponde a $q = 2$ (modelo de Ising). Porém, vemos que $\nu_c \rightarrow 0$ para $d \rightarrow \infty$, mostrando um comportamento não universal. Nos voltaremos discutir este ponto na subseção 4.1.2.

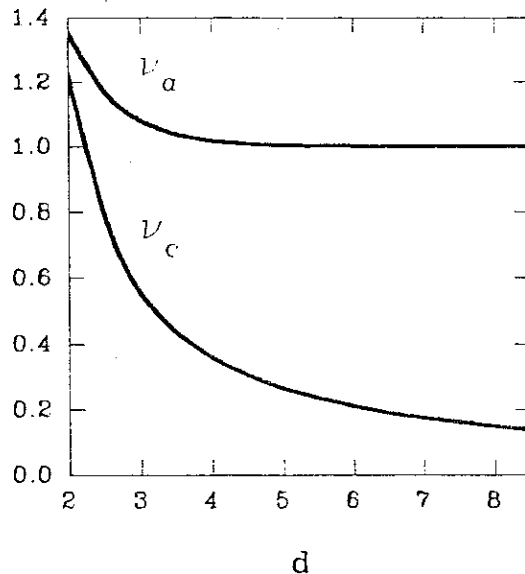


FIGURA 4.2: Expoentes críticos para $J = 0$ em função da dimensionalidade d .

4.1.2 O modelo de Heisenberg

No limite $U \rightarrow \infty$ as equações de recorrência 4.1 resultam desacopladas, achando-se os seguintes comportamentos assintóticos:

$$\begin{aligned} U' &\sim l^{d-1} U \\ K' &\sim f_2(d, J) \\ J' &\sim f_1(d, J) \end{aligned} \tag{4.4}$$

onde

$$f_1(d, J) \equiv \frac{l^{d-1}}{2} \operatorname{arctanh} \left(-\frac{g_3(J)}{g_2(J)} \right) \tag{4.5}$$

$$f_2(d, J) \equiv l^{d-1} \ln \left(\frac{g_4^2(J)}{2g_1(J)g_5(J)} \right) - f_1(d, J) \tag{4.6}$$

Vemos que neste caso a única equação de recorrência não trivial é a correspondente ao parâmetro de troca (“exchange”) J , a qual alias, resulta fechada. Este fato é simples de compreender se notamos da Eq. (3.21) que no limite $U \rightarrow \infty$ os estados com $S_i^z = \pm 1$ para todos os sítios i predominam sobre todos os outros estados. Assim o Hamiltoniano \mathcal{H}_{JKU} age fundamentalmente no subespaço de ocupação simples, no qual os termos correspondentes aos parâmetros U e K tornam-se constantes aditivas irrelevantes. Nesta situação o Hamiltoniano (3.21) é equivalente ao seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} \sim -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \tag{4.7}$$

onde $\vec{\sigma}_i$ são as matrizes de Pauli no sítio i . O Hamiltoniano (4.7) corresponde ao modelo de *Heisenberg* isotrópico de spin 1/2. Assim, a equação de recorrência $J' =$

$f_1(d, J)$ é a correspondente ao modelo de Heisenberg na presente aproximação de GR. A função $f_1(d, J)$ se mostra na Fig. 4.3 para $d = 2$ e $d = 3$.

Para $d = 2$ as equações de recorrência possuem só pontos fixos triviais. Assim, o sistema não exhibe transições de fase, como era de se esperar da Eq. (4.7), já que ele possui um grupo de simetrias contínuo. Notemos que o ponto fixo trivial $J = 0$ corresponde ao atrator $(U, K, J) = (+\infty, 0, 0)$ já descrito na subseção 4.1.1.

Para $d = 3$, $f_1(3, J)$ exhibe dois pontos fixos não triviais: um ponto crítico antiferromagnético $J_c^A \approx 0.353$ e outro ferromagnético $J_c^F \approx -0.522$. Vemos que $f_1(3, J)$ possui também dois pontos fixos estáveis: um atrator antiferromagnético $J_2^A \approx 2.457$ e um atrator ferromagnético $J_2^F = -\infty$. Notemos que o atrator antiferromagnético toma um valor finito ao invés do valor usual $J = +\infty$ (temperatura zero). Dado que este ponto fixo está associado com o comportamento do sistema a temperatura zero (isto é, com a fase ordenada) o fato dele aparecer numa região finita de J é provavelmente um resultado da aproximação (3.6): à temperatura zero esta é provavelmente uma aproximação muito tôasca e pelo tanto resultados espúrios podem aparecer. Porém, isto não invalida os resultados obtidos na região crítica, a qual corresponde a temperaturas maiores. De fato este tipo de comportamento (deslocamento de pontos fixos estáveis a valores finitos) foi achado também por outros autores [39] na aplicação deste mesmo método com $l = 2$ ao modelo de Heisenberg anisotrópico ferromagnético.

Quando d diminui, os pontos fixos J_c^A e J_2^A juntam-se num ponto fixo marginal na di-

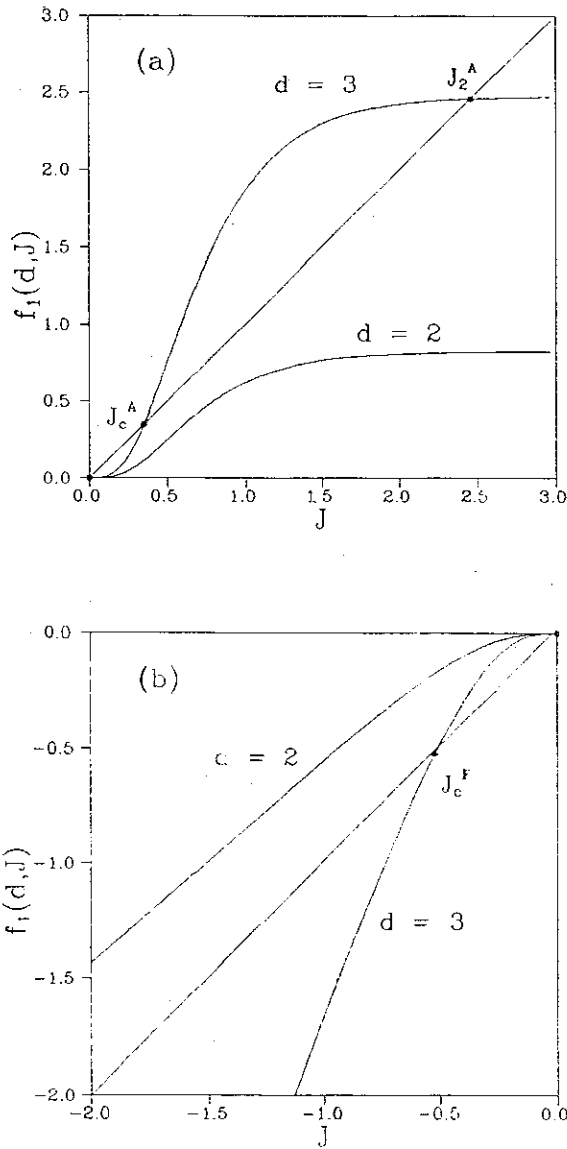


FIGURA 4.3: Equação de recorrência $J' = f_1(d, J)$ do modelo de Heisenberg isotrópico de spin 1/2, para dimensionalidades $d = 2$ e $d = 3$. (a) $J > 0$; (b) $J < 0$.

mensionalidade crítica inferior para a transição antiferromagnética $d_c^A \approx 2.41$ (para $d = d_c^A$, $f_1(d, J)$ é tangencial à linha $J' = J$). No caso da transição ferromagnética a dimensionalidade crítica inferior d_c^F obtem-se da seguinte equação:

$$\lim_{J \rightarrow \infty} \frac{\partial f_1(d, J)}{\partial J} = 1 \quad (4.8)$$

Temos que $d_c^F = 1 + \ln(2 + \sqrt{2})/\ln 3 \approx 2.12$. Os expoentes térmicos associados com estas transições estão dados por $\nu_{A,F} = \ln l / \ln \lambda_{A,F}$, onde

$$\lambda_{A,F} = \left. \frac{\partial f_1}{\partial J} \right|_{J_c^A, J_c^F} \quad (4.9)$$

Na tabela 4.2 comparamos os nossos resultados para J_c^A e ν_A em $d = 3$ com aqueles obtidos mediante expansões em series de altas temperaturas [78] para diversas redes de Bravais. Na tabela 4.3 comparamos os resultados para J_c^F e ν_F em $d = 3$ com os obtidos pelo mesmo método para $l = 2$ [79] e mediante expansões em serie de altas temperaturas [78] para diversas redes de Bravais.

Analisamos agora o comportamento para $d \rightarrow \infty$. *A priori* podemos esperar que os efeitos quânticos diminuam, isto é, que o comportamento do sistema se aproxime cada vez mais ao de um sistema clássico. De fato, como já mencionamos na subseção 4.1.1, isto acontece nas redes de Bravais. Efetivamente, um comportamento semelhante encontra-se no nosso caso. Notamos primeiro que para $d \rightarrow \infty$, $J_2^A \rightarrow \infty$, o que é consistente com o fato de que o valor finito seja um resultado de desprezar a não comutação entre operadores. Achamos também o seguinte comportamento assintótico perto de $J = 0$: $f_1(d, J) \sim -f_1(d, -J)$. Na

	ν_A	J_c^A
GR ($l = 3$)	1.241	0.353
series [78]	0.735	fcc : 0.232
		bcc : 0.357
		sc : 0.520

TABELA 4.2: Acoplamento crítico e expoente térmico do modelo de Heisenberg antiferromagnético na rede hierárquica ($l = 3$), comparados com os valores obtidos mediante expansões em série de altas temperaturas [78] para as redes de Bravais cúbica simples (sc), centrada no corpo (bcc) e centrada nas faces (fcc).

Fig. 4.4 mostramos J_c^A e J_c^F como função de d . Vemos que $J_c^A \rightarrow 0$ e $J_c^F \rightarrow 0$ para $d \rightarrow \infty$. Assim, temos que $J_c^F \sim -J_c^A$. Esta simetria entre os pontos críticos ferromagnético e antiferromagnético é característica dos sistemas clássicos. Na Fig. 4.5 mostramos ν_A e ν_F como função de d . Vemos que para $d \rightarrow \infty$, $\nu_A \rightarrow 1$ e $\nu_F \rightarrow 1$. Comparando com os resultados da subseção anterior (ver Fig. 4.2) vemos que se observa certo tipo de comportamento universal, no sentido de que expoentes de sistemas clássicos e quânticos em ausência de campos externos convergem a um mesmo valor $\nu = 1$ para $d \rightarrow \infty$; este porém, é diferente do valor de campo médio $\nu = 1/2$ que é obtido para sistemas em redes de Bravais.

	ν_F	$ J_c^F $
GR - $l = 3$	1.55	0.52
GR - $l = 2$ [79]	1.40	0.34
series [78]	0.735	fcc : 0.25 bcc : 0.39 sc : 0.3

TABELA 4.3: Acoplamento crítico e expoente térmico do modelo de Heisenberg ferromagnético na rede hierárquica para $l = 3$ (este trabalho) e $l = 2$ [79], comparados com os valores obtidos mediante expansões em série de altas temperaturas [78] para as redes de Bravais cúbica simples (sc), centrada no corpo (bcc) e centrada nas faces (fcc).

4.1.3 Diagrama de fases para $J \neq 0$

Em ausência de campos externos os diagramas de fases para $J > 0$ e $J < 0$ são inteiramente análogos, como já mencionamos no início do capítulo. Ainda mais, para $d = 3$ eles são muito semelhantes (qualitativamente) aos diagramas de fases do modelo BEG em $d = 2$, tanto ferromagnético [66] como antiferromagnético [80]. Dado que neste capítulo estamos interessados principalmente naquelas propriedades do diagrama de fases completo no espaço (U, K, J, I, t, D) relacionadas com o termo de hopping (t), e dado que os pontos fixos que determinam essas características localizam-se principalmente na região $U \gg 1$ (ver subseção 4.1.2), vamos dar aqui

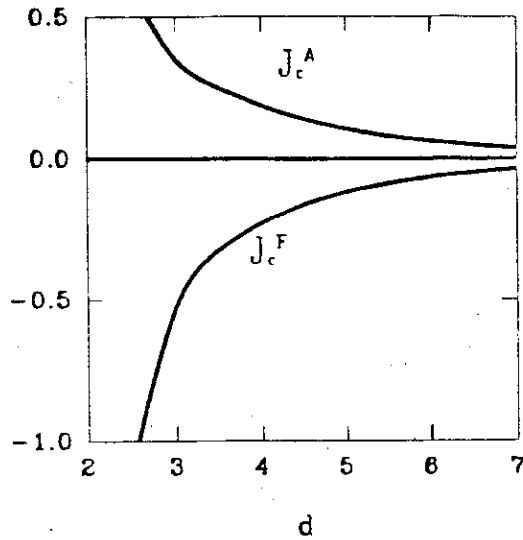


FIGURA 4.4: Acoplamentos críticos J_c^A e J_c^F em função da dimensionalidade d .

só uma descrição breve do diagrama de fases (U, K, J) para valores intermédios de U . Um diagrama de fases semelhante se analisará em detalhe no capítulo 6.

Para $d = 3$ existe uma fase *antiferromagnética isolante* (AFI), a valores relativa-

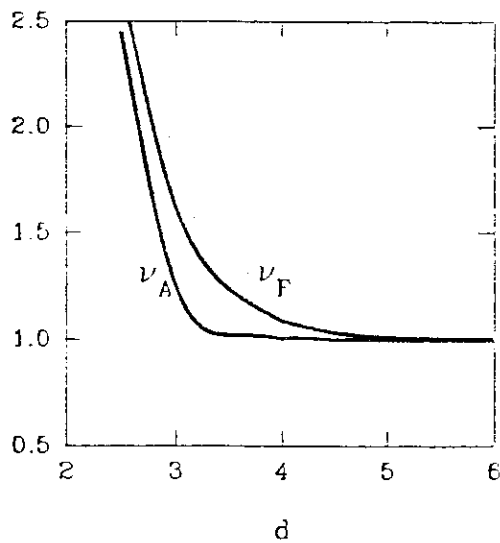


FIGURA 4.5: Expoentes críticos ν_A e ν_F em função da dimensionalidade d .

mente grandes de J , governada pelo ponto fixo estável $(U, K, J) = (+\infty, K_2^A, J_2^A)$, onde $K_2^A \equiv f_2(3, J_2^A) \approx -18.78$. Esta fase está separada da fase IPCU (ver subseção 4.1.1) por uma superfície de transição de segunda ordem, a qual é governada pelo ponto fixo $(+\infty, K_c^A, J_c^A)$, onde $K_c^A \equiv f_2(3, J_c^A) \approx -0.001$. Para $U \gg 1$ esta superfície é assintoticamente paralela ao plano $J = 0$, estando localizada a uma altura J_c^A deste plano. Para $U < 0$ a fase AFI encontra-se separada da fase M por uma superfície de transição de primeira ordem, a qual é governada pelo ponto fixo $(-\infty, -\infty, J_c^A)|_{K=U/2}$. O autovalor relevante das equações de recorrência linearizadas neste ponto satisfazem a condição de Nienhuis e Nauenberg [75]. As duas superfícies mencionadas (primeira e segunda ordem) juntam-se de maneira suave numa linha de pontos tricríticos governada pelo ponto fixo tricrítico [81] $(U_T, K_T, J_T) = (-2.27, -0.16, 0.79)$. Este ponto fixo possui dois autovalores relevantes $\lambda_T^{(1)} > \lambda_T^{(2)} > 1$, e um terceiro autovalor $\lambda_T^{(3)} < 1$. As direções dos autovetores associados com $\lambda_T^{(2)}$ e $\lambda_T^{(3)}$ são tangenciais à superfície de transição, enquanto que a correspondente a $\lambda_T^{(1)}$ é transversal à superfície; a direção do autovetor associado com $\lambda_T^{(3)}$ é aliás tangencial à linha tricrítica. Os expoentes tricríticos estão dados por [33,82] $\nu_t = \ln l / \ln \lambda_T^{(1)}$ e $\phi_t = \ln \lambda_T^{(2)} / \ln \lambda_T^{(1)}$. Os valores calculados são $\nu_t = 0.40$ e $\phi_t = 0.21$.

Alem das duas superfícies de transição já descritas, existe uma superfície de primeira ordem entre as fases IPCU e M, a qual encontra-se governada pelo ponto fixo $(U, K, J) = (-\infty, -\infty, 0)|_{K=U/2}$, constituindo uma extensão da linha de

primeira ordem para $J = 0$ mostrada na Fig. 4.1. Esta superfície termina numa linha crítica isolada, a qual é governada pelo ponto fixo a' (ver Fig. 4.1).

As três superfícies de transição juntam-se ao longo de uma linha de pontos críticos terminais, a qual é governada pelo ponto fixo $(U, K, J) = (-\infty, -\infty, J_c^A) \Big|_{K=U/2}$. Este ponto fixo possui dois autovalores relevantes: $\lambda_1 = l^A$ e $\lambda_2 = l^d$. Temos também que as duas superfícies de primeira ordem possuem a mesma pendente ao longo desta linha. Estes fatos respondem a caracterização de GR dos pontos críticos terminais [66].

As três linhas críticas (isto é, a linha crítica isolada, a linha de pontos críticos terminais e a linha tricrítica) juntam-se num ponto fixo multicrítico especial (isto é, completamente instável) $(U_E, K_E, J_E) = (-2.66, -0.75, 0.59)$. As possíveis interpretações deste tipo de ponto fixo serão discutidas com maior detalhe no capítulo 6. Os diferentes pontos fixos relevantes para $J > 0$, assim como as suas características mais importantes são listadas na tabela 4.4. Como exemplo mostramos na Fig. 4.6 o corte do diagrama de fases com o plano $K = 0$. A localização do ponto tricrítico T_0 para $K = 0$ é $(U, J) = (-2.22, 0.86)$.

Na Fig. 4.7 mostramos os expoentes tricríticos ν_t e ϕ_t em função da dimensionalidade d . Nas redes de Bravais a dimensão crítica superior (isto é, a dimensão por encima da qual os expoentes de campo medio são exatos) para pontos tricríticos é $d = 3$. Assim, nessas redes, se espera que os expoentes tricríticos convergam rapidamente aos valores de campo médio $\nu_t = \phi_t = 1/2$ quando a dimensão cresce.

Ponto fixo (U, K, J)	Estabilidade	Bacia de atração	Autovalores relevantes
$(+\infty, K_2^A, J_2^A)$	estável	fase AFI	—
$(+\infty, K_c^A, J_c^A)$	instável	superfície de 2 ^{da} ordem entre IPCU e AFI	$\lambda_A \approx 2,42$
$(-\infty, -\infty, J_2^A) _{K=U/2}$	instável	superfície de 1 ^{ra} ordem entre M e AFI	$\lambda = l^d = 27$
$(-\infty, -\infty, J_c^A) _{K=U/2}$	duplamente instável	linha de pontos críticos terminais	$\lambda_A, \lambda = l^d$
(U_T, K_T, J_T)	duplamente instável	linha tricrítica	$\lambda_T^{(1)} \approx 14,99$ $\lambda_T^{(2)} \approx 1,79$
(U_E, K_E, J_E)	triplemente instável	ponto multicrítico especial	$\lambda_E^{(1)} \approx 16,43$ $\lambda_E^{(2)} \approx 2,68$ $\lambda_E^{(3)} \approx 1,23$

TABELA 4.4: Classificação, localização e autovalores relevantes do modelo JKU para $J > 0$.

Pelo contrario, no nosso caso vemos que os expoentes convergem lentamente a zero para $d \rightarrow \infty$. Por outro lado, vemos que $\nu_t - \phi_t \rightarrow 0$ para $d \rightarrow \infty$, tal como acontece nas redes de Bravais. Vemos também que ϕ_t apresenta um máximo para $d \approx 4$.

Finalmente, um outro comportamento interessante acontece no diagrama de fases para $K > 0$ e $U > 0$, onde uma superfície de transição de segunda ordem de forma paraboidal aparece como extensão da linha crítica caf mostrada na Fig. 4.1. Esta superfície localiza-se por embaixo da superfície de segunda ordem entre as fases IPCU e AFI. A maior parte desta superfície esta governada, ora pelo ponto fixo c ora pelo ponto fixo d da Fig. 4.1; na fronteira entre estas duas porções da superfície existe uma linha crítica governada pelo ponto fixo a da Fig. 4.1.

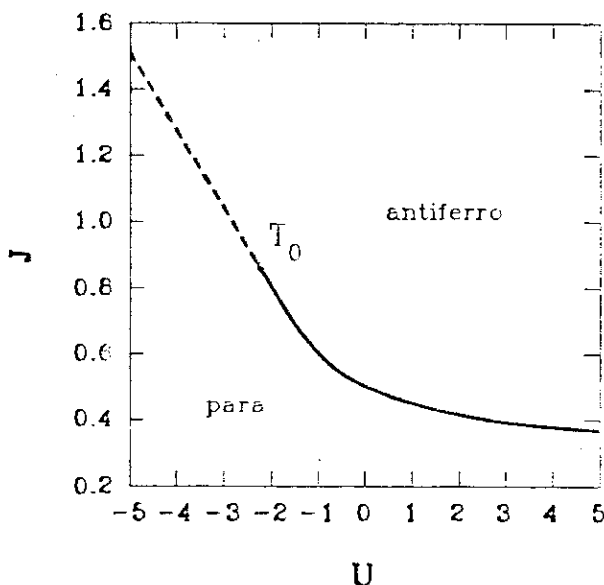


FIGURA 4.6: Diagrama de fases do modelo JKU ($J > 0$) em $d = 3$ para $K = 0$. As linhas de traços e continua correspondem a transições de primeira e segunda ordem respectivamente. As duas linhas juntam-se no ponto tricrítico T_0 .

4.2 O modelo IKU

Analizamos nesta seção o corte do diagrama de fases correspondente ao subespaço invariante $t = D = J = 0$, isto é, consideramos o diagrama de fases associado com o Hamiltoniano (3.25). Utilizando a transformação (2.42) o Hamiltoniano (3.25) pode-se mapear num Hamiltoniano da mesma forma que o correspondente ao modelo JKU (Eq. (3.21)), onde os parâmetros de acoplamento se substituem da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}U &\rightarrow 2K - \frac{1}{2}U \\ I &\rightarrow J \end{aligned} \quad (4.10)$$

Conseqüentemente, o diagrama de fases do modelo IKU pode-se obter do diagrama correspondente ao modelo JKU analisado na seção 4.1 mediante a transformação (4.10). Esta correspondência entre os dois diagramas de fases é recu-

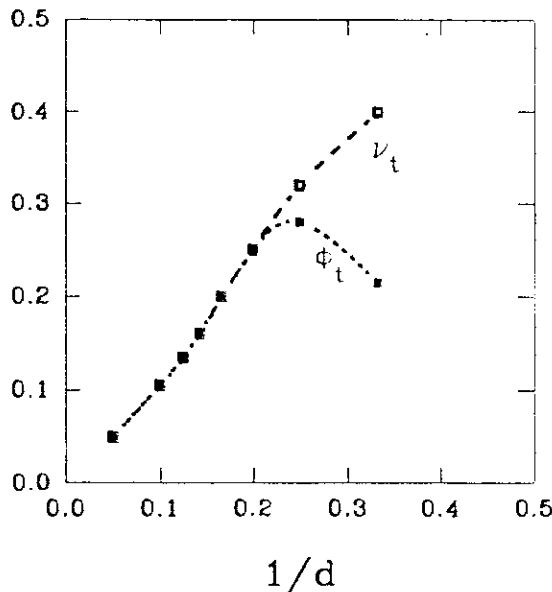


FIGURA 4.7: Expoentes tricríticos ν_t e ϕ_t do modelo JKU em função de $1/d$.

perada exatamente pelas nossas equações de recorrência (3.32). Da propriedade

$$(S_i^z)^2 = 1 - (\rho_i^z)^2 \quad (4.11)$$

vemos que o Hamiltoniano (3.25) pode expressar-se exclusivamente em termos de operadores de carga, podendo assim interpretar-se como um Hamiltoniano que descreve as interações entre os graus de liberdade das cargas. Em particular, para $U \rightarrow -\infty$ o Hamiltoniano favorece a formação de pares de eletrons ligados num mesmo sítio. Estes pares vão se comportar como bosons de "caroço duro". Assim, o Hamiltoniano (3.25) vai descrever nestas condições um gas de bosons interagentes. O limite $U \rightarrow -\infty$ do modelo *IKU* é mapeado a traves das Eqs. (4.10) no limite $U \rightarrow \infty$ do modelo *JKU*. Nestas condições o único termo que contribui no Hamiltoniano (3.25) é o associado com o parâmetro I . Este termo é obtido mediante as Eqs. (4.10) do Hamiltoniano efetivo (4.7), e pode pela sua vez obter-se do modelo de Hubbard com banda semi-cheia (em cujo caso resulta $I > 0$) mediante teoria de perturbações no limite $U \rightarrow -\infty$ [47].

No modelo *JKU* a fase antiferromagnética é caracterizada pelo seguinte parâmetro de ordem:

$$\mathcal{M}_s = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i \langle \vec{S}_i \rangle \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \quad (4.12)$$

o qual corresponde à magnetização espontanea de subrede, onde o limite de um campo magnético alternante indo a zero esta implícito na expressão (4.12). O parâmetro \mathcal{M}_s pode orientar-se numa direção arbitraria. No caso em que \mathcal{M}_s se orienta na direção \mathbf{z} , vemos da Eq. (2.43) que no modelo *IKU* temos o seguinte

parâmetro de ordem diferente de zero:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i \langle \rho_i^z \rangle \exp(i \vec{Q} \cdot \vec{R}_i) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}, \sigma} \langle c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k} + \vec{Q}, \sigma} \rangle \quad (4.13)$$

onde no segundo termo temos utilizado a Eq. (2.11). O estado associado corresponde a uma fase de *ondas de densidade de carga* (ODC).

No caso em que o parâmetro \mathcal{M}_s encontra-se no plano x-y o parâmetro de ordem diferente de zero no modelo *IKU* é o seguinte:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i \langle c_{i,1}^\dagger c_{i,1} \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \langle c_{\vec{k},1}^\dagger c_{-\vec{k},1} \rangle \quad (4.14)$$

o qual indica a existência de uma fase *supercondutora de singletes* (SS) (ver Apêndice B).

No caso em que os dois parâmetros (4.13) e (4.14) são identicamente nulos teremos que não existe correlação entre os pares para U suficientemente negativo (fase M), ou teremos ausência de pares (fase IPCU) para U suficientemente grande. No segundo caso temos que os estados com $\rho_i^z = 0$ para a maioria dos sítios vão predominar, em tanto que no primeiro os estados que predominaram serão aqueles nos quais $\rho_i^z = \pm 1$.

Utilizando as Eqs. (4.10) vemos que o modelo *IKU* apresenta para $U < 0$ uma superfície de transição de segunda ordem entre a fase M e a fase mista ODC/SS. Esta superfície está governada pelo ponto fixo $(U, K, I) = (-\infty, K_c^A, I_c)$, onde $I_c = J_c^A$, e o expoente térmico correspondente é $\nu_I = \nu_A$ (ver seção 4.1). A fase mista está governada pelo ponto fixo $(-\infty, K_2^A, I_2)$, onde $I_2 = J_2^A$, e as demais fases

possuem a mesma caracterização que no caso do modelo JKU . As demais partes do diagrama de fases podem obter-se em forma semelhante a partir dos resultados da seção 4.1.

4.3 O modelo de Hubbard

Consideramos nesta seção o corte do diagrama de fases com o plano (U, t) , isto é, $I = J = K = D = 0$, tanto para $U > 0$ como para $U < 0$. Este caso corresponde ao modelo de Hubbard com banda semi-cheia (2.33). O plano (U, t) não é invariante sob GR, e por tanto o fluxo estende-se a todo o espaço (U, K, J, I, t, D) .

Afin de testar o método de GR analisamos primeiro o caso unidimensional. Para $d = 1$ o GR não mostra evidências de transição de fases para $U \neq 0$, como é de se esperar (ver subseção 2.3). Todos os pontos no plano (U, t) são levados pelo fluxo de GR na linha $t = 0$, a qual é uma linha de pontos fixos para $d = 1$. Os pontos com $U > 0$ são levados na região $U \gg 1$ do eixo $t = 0$, a qual caracteriza uma fase isolante, já que neste caso os eletrons estarão completamente localizados. Os pontos com $U < 0$ são levados na região $|U| \gg 1$ do semi-eixo negativo $t = 0$. Nesta situação os eletrons se ligam de a pares, mas para $d = 1$ não existe correlação entre os pares. Assim, o sistema é um metal, onde os portadores de carga são pares de eletrons (fase M). O eixo t completo ($U = 0$) é governado pelo ponto fixo $(U, K, J, I, t, D) = (0, 0, 0, 0, 0, 0)$. Este comportamento interpreta-se como segue: para $U = 0$ o modelo descreve um sistema de fermions não interagentes (modelo

tight-binding) com uma banda de energias dada pela Eq. (2.14). O procedimento de decimação utilizado consiste basicamente numa eliminação dos graus de liberdade associados às escalas pequenas (comprimentos de onda pequenos) e um posterior reescalamiento das variáveis. Este procedimento vai produzir em cada iteração uma diminuição da largura da banda, a qual é proporcional ao parâmetro de hopping t (ver subseção 2.1). Conseqüentemente, sob renormalização teremos que $t \rightarrow 0$, e assim o ponto fixo $(0, 0, 0, 0, 0, 0)$ caracteriza uma fase metálica normal (isto é, onde os portadores de carga são eletrons não interagentes). Vemos que para $d = 1$ o método de GR reproduz o comportamento conhecido da solução exata (já que para $d = 1$ a rede hierárquica é equivalente à rede de Bravais).

Para $d > 1$ a região $U > 0$ do plano (U, t) é governada pela região $U \rightarrow \infty$ do subespaço $t = D = I = 0$, com $J > 0$. Como vimos na seção 4.1, no limite $U \rightarrow \infty$, com $t = D = I = 0$, as propriedades termodinâmicas do sistema estão inteiramente determinadas pelo Hamiltoniano de Heisenberg (4.7). Podemos concluir assim, que para $d > 1$ o estado fundamental do modelo de Hubbard com banda semi-cheia (pelo menos na rede hierárquica) é sempre isolante e antiferromagnético, isto é, não se observa transição de Mott para $U \neq 0$ em *nenhuma dimensão*.

A região $U < 0$ do plano (U, t) , para $d > 1$, é governada pela região $U \rightarrow -\infty$ do subespaço $t = D = J = 0$. Assim, para $U < 0$ o estado fundamental do sistema corresponde a um gas de bosons (pares de eletrons) interagentes (ver seção 4.2).

Em $d = 2$ encontramos para o diagrama de fases uma estrutura semelhante à do

diagrama em $d = 1$ (ainda que o fluxo não é igual). O eixo $U = 0$ completo é governado pelo ponto fixo $(0, 0, 0, 0, 0, 0)$. Assim, para $U = 0$ o sistema é um metal normal. A região $U > 0$ é governada inteiramente pelo atrator $(+\infty, 0, 0, 0, 0, 0)$, o qual encontra-se associado à fase IPCU já descrita na seção 4.1. Dado que para $U \rightarrow \infty$ os eletrons estão localizados, o sistema é um isolante paramagnético para $U > 0$ e temperatura finita. Estes resultados concordam com outros previos obtidos por uma outra técnica de GR [37] e com cálculos de Monte Carlo [50]. A região $U < 0$ é governada inteiramente pelo atrator $(-\infty, 0, 0, 0, 0, 0)$, o qual como já vimos na seção 4.2 encontra-se associado à fase M (pares de eletrons não correlacionados).

Na Fig. 4.8 mostramos o diagrama de fases calculado para $d = 3$, onde temos utilizado no lugar de (U, t) , as variaveis mais apropriadas para o análise: $1/t$ (temperatura adimensional) e U/t . Como já vimos, para $U/t > 0$ o sistema é sempre um isolante, mas para $d = 3$ temos uma linha de transição de segunda ordem entre uma fase AFI a baixas temperaturas, governada pelo ponto fixo $(U, K, J, I, t, D) = (+\infty, K_2^A, J_2^A, 0, 0, 0)$, e uma fase IPCU a altas temperaturas, governada pelo ponto fixo $(U, K, J, I, t, D) = (+\infty, 0, 0, 0, 0, 0)$. A linha crítica é governada pelo ponto fixo $(U, K, J, I, t, D) = (+\infty, K_c^A, J_c^A, 0, 0, 0)$ e o expoente térmico correspondente ν_A é dado na tabela 4.2. Para $U/t < 0$ temos uma linha de transição de segunda ordem (simetrica com a correspondente para $U/t > 0$) entre a fase M a altas temperaturas e a fase mista ODC/SS a baixas temperaturas. Esta

linha crítica esta governada pelo ponto fixo $(U, K, J, I, t, D) = (-\infty, K_c^A, 0, I_c, 0, 0)$ e o expoente térmico correspondente é $\nu_I = \nu_A$. A coexistência das fases ODC e SS no modelo de Hubbard com U negativo é uma degenerescência particular da banda semi-cheia. Esta degenerescência é removida no caso da banda não semi-cheia [47.83]. As duas linhas críticas (IPCU-AFI e M-ODC/SS) juntam-se no ponto $1/t_c \neq 0$ no eixo $U/t = 0$. A região $1/t > 1/t_c$ do eixo $U/t = 0$ é governada pelo ponto fixo $(0, 0, 0, 0, 0, t)$, correspondendo por tanto a uma fase metálica normal.

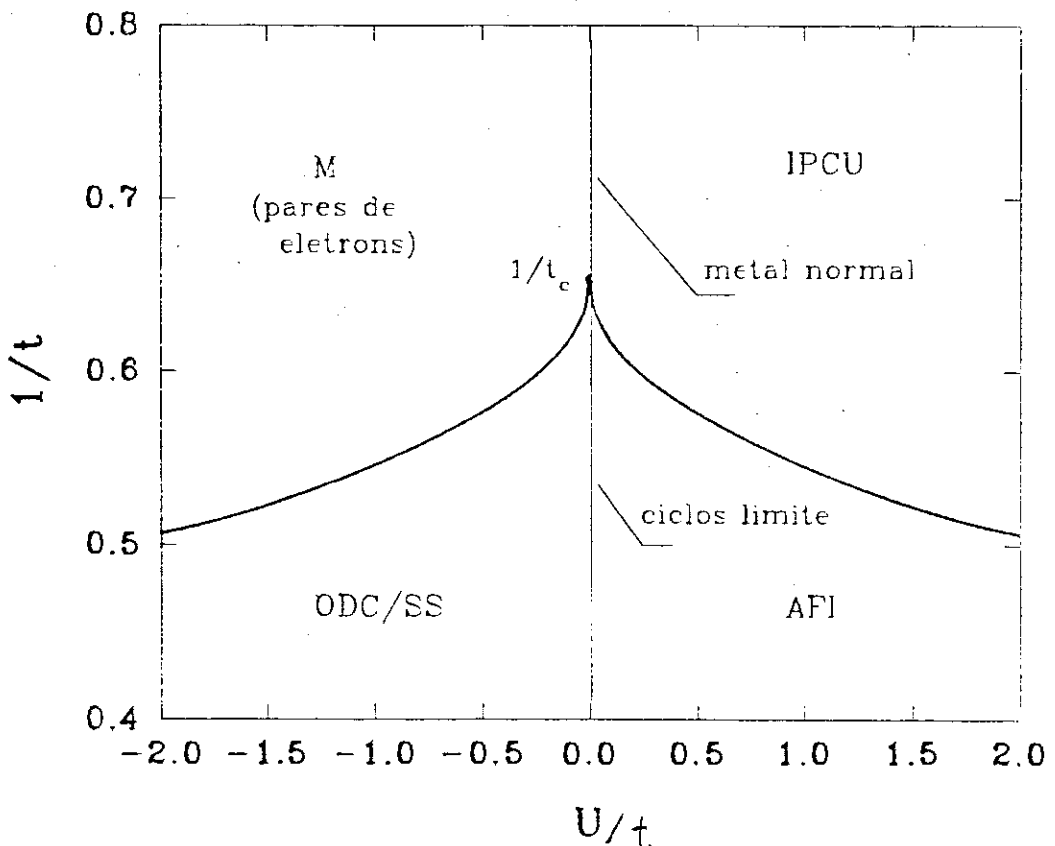


FIGURA 4.8: Diagrama de fases do modelo de Hubbard com banda semi-cheia para $d = 3$ ($1/t$: temperatura adimensional).

Na região $1/t < 1/t_c$ encontramos um comportamento anômalo no fluxo de GR. Esta região é governada por ciclos limite de ordem dois, em vez de ser governada por pontos fixos usuais. Mais precisamente, cada ponto nesta região é levado sob renormalização num dos dois ciclos limites denotados por C_1 e C_2 , cujos valores se mostram na tabela 4.5. As bacias de atração destes ciclos no eixo $U/t = 0$ aparecem para $0 < 1/t < 1/t_c$ na forma de intervalos aparentemente densos de diferentes comprimentos, distribuídos alternadamente de maneira complexa e sem uma estrutura clara. Porém, notemos da tabela 4.5 que C_1 e C_2 estão relacionados pela transformação $(t, D) \rightarrow (-t, -D)$, sendo assim evidente que os dois representam de fato o mesmo estado termodinâmico (ver Eq. (3.19)). O significado físico destes ciclos (se existir) não é claro até o momento. Em particular o fato de ter uma mudança no fluxo de GR (o qual interpreta-se usualmente como uma transição de fases) no modelo tight-binding puro ($U/t = 0$), claramente não é o que se espera numa rede de Bravais, onde a qualquer temperatura os elétrons vão preencher a banda de energias de acordo com a distribuição de Fermi, não existindo pelo tanto nenhum tipo de transição de fase. Porém, isto não é necessariamente assim numa rede fractal. É conhecido que modelos tight-binding (ou equivalentemente, modelos harmônicos) definidos em redes fractais apresentam propriedades muito peculiares a temperatura zero, tais como efeitos de localização, diferentes tipos de espectro fractal, autofunções com estrutura hierárquica [84] e outros tipos de anomalias (ver Fig.1 em Ref. [85]). Todas estas propriedades dependem da dimensionalidade da rede. Assim, é de se esperar que qualquer operação envolvendo reescalamiento

<i>ciclo</i>	U	K	J	I	t	$D^{(1)}$	$D^{(2)}$
C_1	1.406	0.703	0.07	0.07	7.513	0.607	-15.63
C_2	1.406	0.703	0.07	0.07	-7.513	-0.607	15.63

TABELA 4.5: Ciclos limite para $U/t = 0$ e $1/t < 1/t_c$. Os parâmetros (U, K, J, I, t) tem valores fixos, em tanto que o parâmetro D oscila entre os valores $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$.

(Eq. (3.29)) pode apresentar resultados muito diferentes dos que se obteriam numa rede de Bravais. Acreditamos, por tanto, que a presença dos ciclos limite seja um efeito devido à fractalidade das redes utilizadas, estando possivelmente relacionada a alguma degenerescência particular do estado fundamental destas redes. De fato, ciclos limite de ordem dois no fluxo do GR tem sido observados em modelos de Ising com interações competitivas, onde tal comportamento reflete certas degenerescências do estado fundamental do modelo [86]. Na seção 4.4 mostraremos como estes ciclos estendem-se a uma região maior, a qual esta relacionada com certas simetrias do modelo.

Respeito da forma da linha crítica, digamos para $U/t > 0$, se espera para redes de Bravais, que a mesma apresente um máximo ao diminuir U/t , indo depois a zero para $U/t \rightarrow 0$ [87,54]. No nosso caso vemos que a linha cresce monotonamente ao diminuir U/t , convergindo ao valor $1/t_c$. Esta diferença é devida provavelmente ao mesmo efeito que gera os ciclos limite.

Na figura 4.9 mostramos $1/t_c$ em função da dimensionalidade d . Vemos que $1/t_c \rightarrow 0$ para $d \rightarrow d_c$, isto é, os ciclos limite desaparecem para $d < d_c$, onde $d_c \approx 2.41$. Vemos que $d_c = d_c^A$, onde d_c^A é a dimensionalidade crítica para a transição para-antiferro achada na seção 4.1 para o modelo JKU . Este fato sugere que a linha crítica completa da Fig. 4.8 desaparece para $d < d_c$.

4.4 O modelo de Hubbard com interações biquadráticas

Consideramos nesta seção o corte $I = J = D = 0$ do diagrama de fases para $d = 2$ e $d = 3$ (o caso $d = 1$ não apresenta nada de novo respeito do caso $d = 1$ analisado na seção 4.3). Este corte corresponde a um modelo de Hubbard com banda semi-

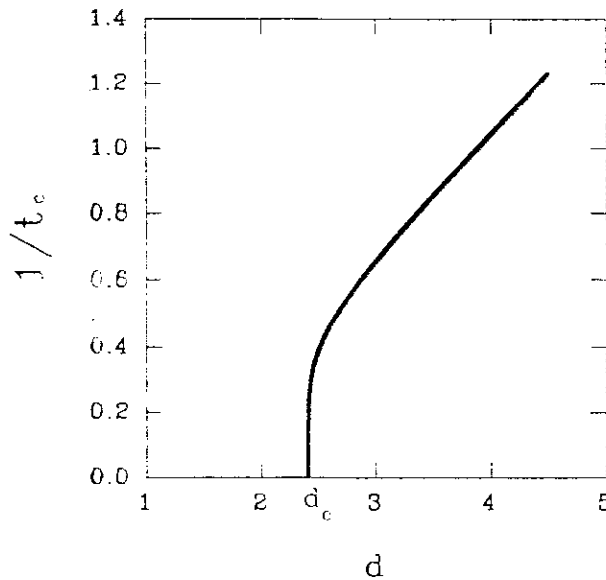


FIGURA 4.9: $1/t_c$ em função da dimensionalidade d

cheia e interações biquadráticas entre primeiros vizinhos, o qual é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \frac{1}{2} U \sum_i (n_{i,1} - n_{i,2})^2 - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 \quad (4.15)$$

Dado que os operadores de spin no termo correspondente ao parâmetro K estão elevados ao quadrado, da Eq. (4.12) vemos que este termo pode também interpretar-se como uma interação entre cargas. Neste sentido, o Hamiltoniano (4.15) é semelhante ao modelo de Hubbard estendido [29].

Consideramos primeiro o caso $d = 2$. O corte deste diagrama de fases com o plano $t = 0$ foi mostrado na Fig. 4.1, em tanto que o corte com o plano $K = 0$ foi discutido na seção 4.3. A continuação vamos discutir o corte deste diagrama com o plano $K = U/2$. Como vimos na subseção 3.2.1, o subespaço $(I, K) = (J, U/2)$ do espaço de parâmetros completo (U, K, J, I, t, D) é invariante sob GR. Assim, o fluxo no presente caso vai se manter neste subespaço, ainda que os pontos iniciais com $I = J = 0$ serão levados em pontos com $I = J \neq 0$. O diagrama de fases calculado se mostra na Fig. 4.10. Para $U < 0$ temos uma região de coexistência entre as fases IPCU e M, a qual é governada pelo ponto fixo $(U, K, J, I, t, D) = (-\infty, -\infty, 0, 0, 0, 0)|_{K=U/2}$, e que termina na linha crítica $a'b$; esta linha é governada pelo ponto fixo a' da Fig. 4.10 (ver subseção 4.1.1). Para $U > 0$ achamos uma fase IPCD, a qual é governada pelo ponto fixo $(+\infty, +\infty, 0, 0, 0, 0)|_{K=U/2}$. A linha ab corresponde a uma transição de segunda ordem metal-isolante; esta linha esta governada pelo ponto fixo a (a local-

ização dos pontos fixos mencionados encontra-se na tabela 4.1).

Consideramos agora o resto do diagrama de fases no espaço (U, K, t) , isto é, para $K \neq U/2$. Para $K > 0$ e $U > 0$ temos uma superfície crítica de forma paraboidal, cujos cortes com os planos $t = 0$ e $K = U/2$ foram mostrados nas figuras 4.1 e 4.10 respetivamente. A porção desta superfície para $K > U/2$ esta governada pelo ponto fixo d da Fig. 4.1; en tanto que a porção para $K < U/2$ esta governada pelo

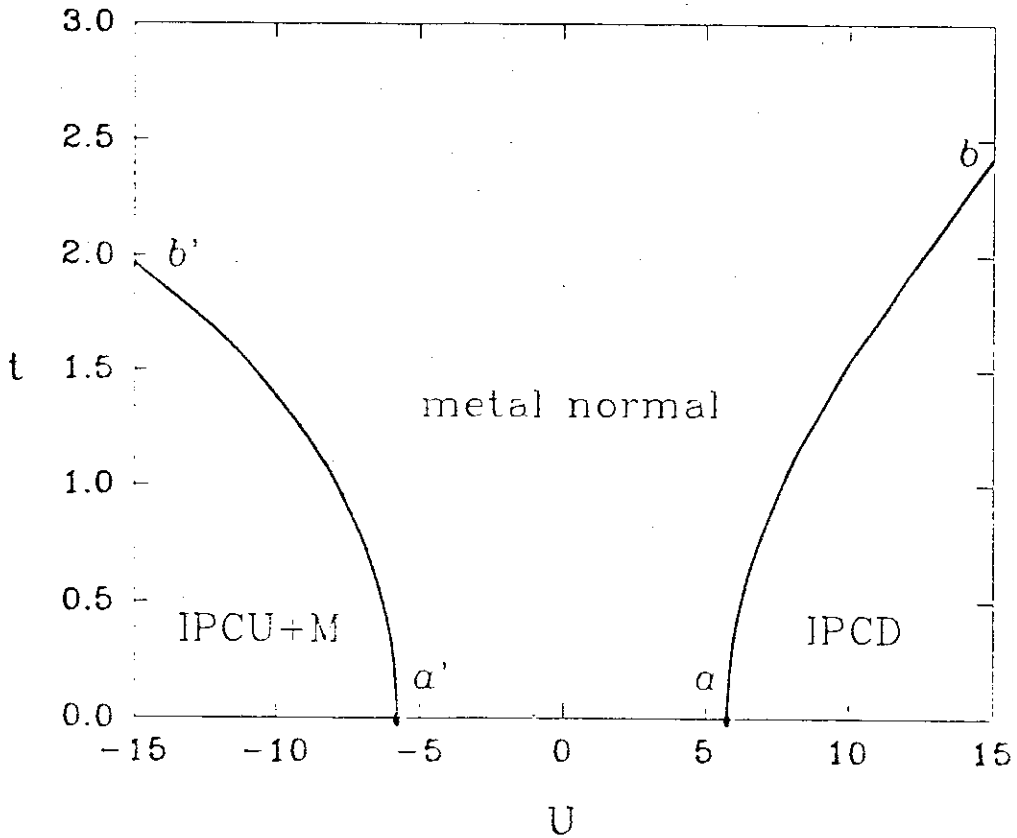


FIGURA 4.10: Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 2$, para $K = U/2$. Para $U < 0$ temos uma região de coexistência entre as fases IPCU e M

ponto fixo c . Para $K > U/2$ esta superfície descreve uma transição metal-isolante contínua entre as fases IPCD e M. A fase M estende-se sobre toda a região $K > U/2$, exceto aquela porção encerrada pela superfície de transição acima descrita. Para $K < U/2$ a superfície descreve uma transição de segunda ordem entre as fases IPCU e IPCD. Todos os pontos com $K < U/2$, fora da região encerrada pela superfície de transição, pertencem à fase IPCU. Na Fig. 4.11 mostramos um corte típico do diagrama de fases para $K > 0$ com um plano $U = \text{constante}$ ($U = 8$).

Para $K < 0$ e $U < 0$ as fases IPCU e M encontram-se separadas pela superfície plana ($K = U/2$) mostrada na Fig. 4.10, a qual descreve uma transição metal-isolante de primeira ordem. Esta superfície termina na linha crítica isolada $a'b'$.

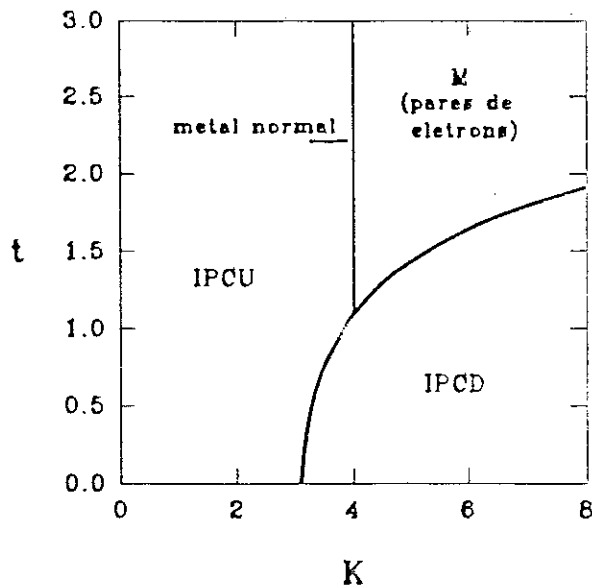


FIGURA 4.11: Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 2$, para $U = \text{constante} = 8$.

Fora desta superfície, para $K = U/2$, o sistema transforma-se de maneira contínua (isto é, sem transição de fases) da fase M ($K > U/2$) à IPCU ($K < U/2$), passando por uma fase metálica normal em $K = U/2$, onde os pares de eletrons se quebram.

Finalmente vamos considerar o diagrama de fases para $d = 3$, cujo corte com o plano $K = U/2$ se mostra na Fig. 4.12. Para valores pequenos do parâmetro t o diagrama mostra as mesmas características que o correspondente para $d = 2$. Para valores maiores de t novos efeitos aparecem. Notamos primeiro que os ci-

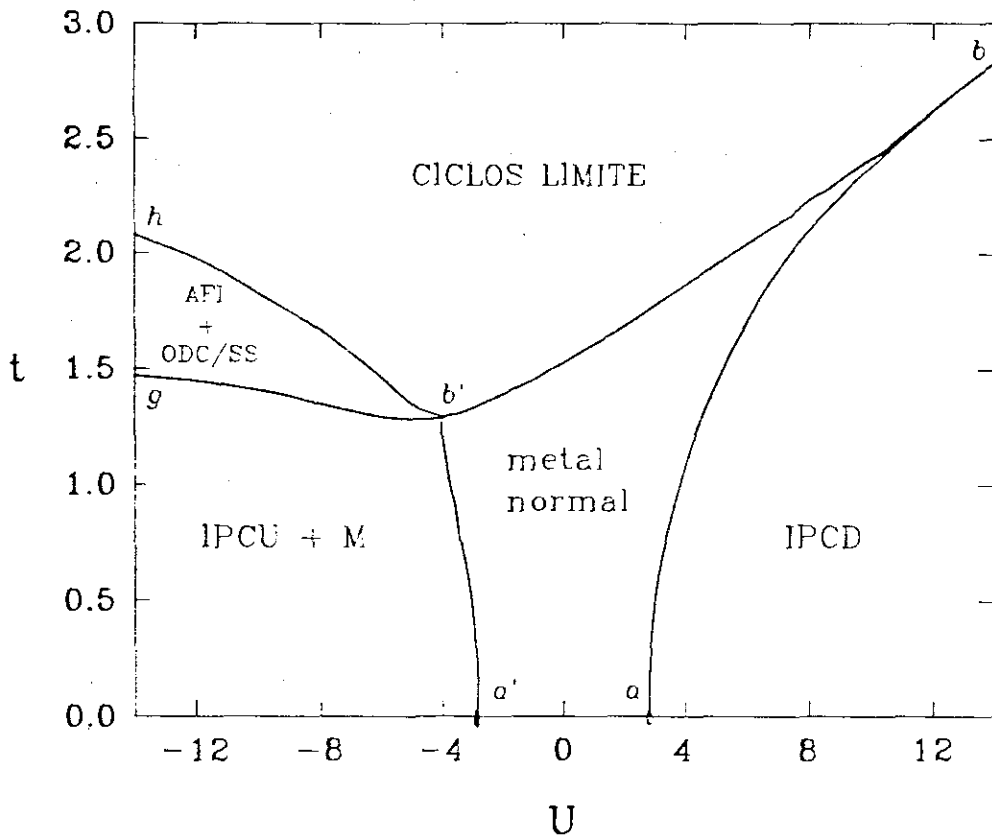


FIGURA 4.12: Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 3$, para $K = U/2$.

dos limite já encontrados para $K = U = 0$ (ver seção 4.3) estendem-se por tudo o plano $K = U/2$ por encima da linha $hb'b$ na Fig. 4.12. As bacias de atração dos dois ciclos C_1 e C_2 aparecem na forma de faixas alternadas de forma complexa. A aparição dos ciclos limite acontece somente para $K = U/2$. Ven.os também que entre a região de coexistência (IPCU+M) e a região dos ciclos limite aparece uma nova região, na qual coexistem as duas fases ordenadas descritas na seção 4.3 (isto é, AFI e ODC/SS). Esta região esta governada pelo ponto fixo $(U, K, J, I, t, D) = (-\infty, -\infty, J_2^A, J_2^A, 0, 0)|_{K=U/2}$. Este ponto fixo possui três autovalores relevantes: $\lambda_1 = l^d$, satisfazendo assim a condição de Nienhuis e Nauenberg, e dois autovalores degenerados $\lambda_2 = \lambda_3 = l^{\nu_A}$. Podemos entender a presença desta região de coexistência si notamos que para $K = U/2$ o segundo e o terceiro termo no Hamiltoniano (4.15) podem-se combinar dando como resultado (para a rede hierárquica)

$$\frac{1}{4} U \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(S_i^z)^2 - (S_j^z)^2 \right]^2$$

Para $U \ll -1$ as configurações no espaço de estados que vão predominar serão aquelas para as quais $S_i^z = 0$ para todos os sítios, ou aquelas para as quais $S_i^z = \pm 1$ (indistintamente) para todos os sítios. Os dois tipos de configurações (isto é, $S_i^z = 0$ ou $S_i^z = \pm 1$) tem a mesma energia e por tanto a mesma probabilidade de acontecer. Para valores pequenos de t esta degeneressência é a responsável da coexistência entre as fases desordenadas (M+IPCU), tanto para $d = 2$ como para $d = 3$. Em $d = 3$, quando t cresce cada uma destas fases sofre uma transição de se-

gunda ordem à correspondente fase ordenada (tendo associado cada transição um expoente crítico ν_A), na linha gb' da Fig. 4.12. É provável que esta degenerescência esteja também relacionada com a aparição dos ciclos limite, já que as duas coisas acontecem somente para $K = U/2$.

Para $K < U/2$ temos uma superfície de transição de segunda ordem, que separa a fase IPCU (valores pequenos de t) da fase AFI (valores grandes de t), a qual é governada pelo ponto fixo $(+\infty, K_c^A, J_c^A, 0, 0, 0)$. Para $K > U/2$ temos uma superfície de transição de segunda ordem, que separa a fase M (valores pequenos de t) da fase mista ODC/SS (valores grandes de t), a qual é governada pelo ponto fixo $(-\infty, K_c^A, 0, I_c, 0, 0)$ (ver seção 4.2). O corte destas superfícies pelo plano $K = 0$ corresponde às linhas críticas da Fig. 4.8. As duas superfícies críticas juntam-se ao longo da linha $gb'b$ no plano $K = U/2$ (Fig. 4.12). As fases AFI e ODC/SS estão separadas pela região de ciclos limite no plano $K = U/2$, exeito na pequena região do plano encerrada pela curva $gb'h$ da Fig. 4.12, na qual as duas fases coexistem (isto é, temos uma transição de primeira ordem, associada ao autovalor $\lambda_1 = l^d$, ao atravessar o plano $K = U/2$ nesta região. Na Fig. 4.13 mostramos alguns cortes do diagrama de fases com planos $U = \text{constante}$, para alguns valores típicos de U . Vemos que a presença de interações repulsivas entre primeiros vizinhos (K) permite a existência de uma fase supercondutora (SS) *ainda para interações no sítio repulsivas* $U > 0$. Notemos também (Fig. 4.13c) que a superfície crítica paraboidal achada para $d = 2$, se deforma perto de $K = U/2$ no caso $d = 3$.

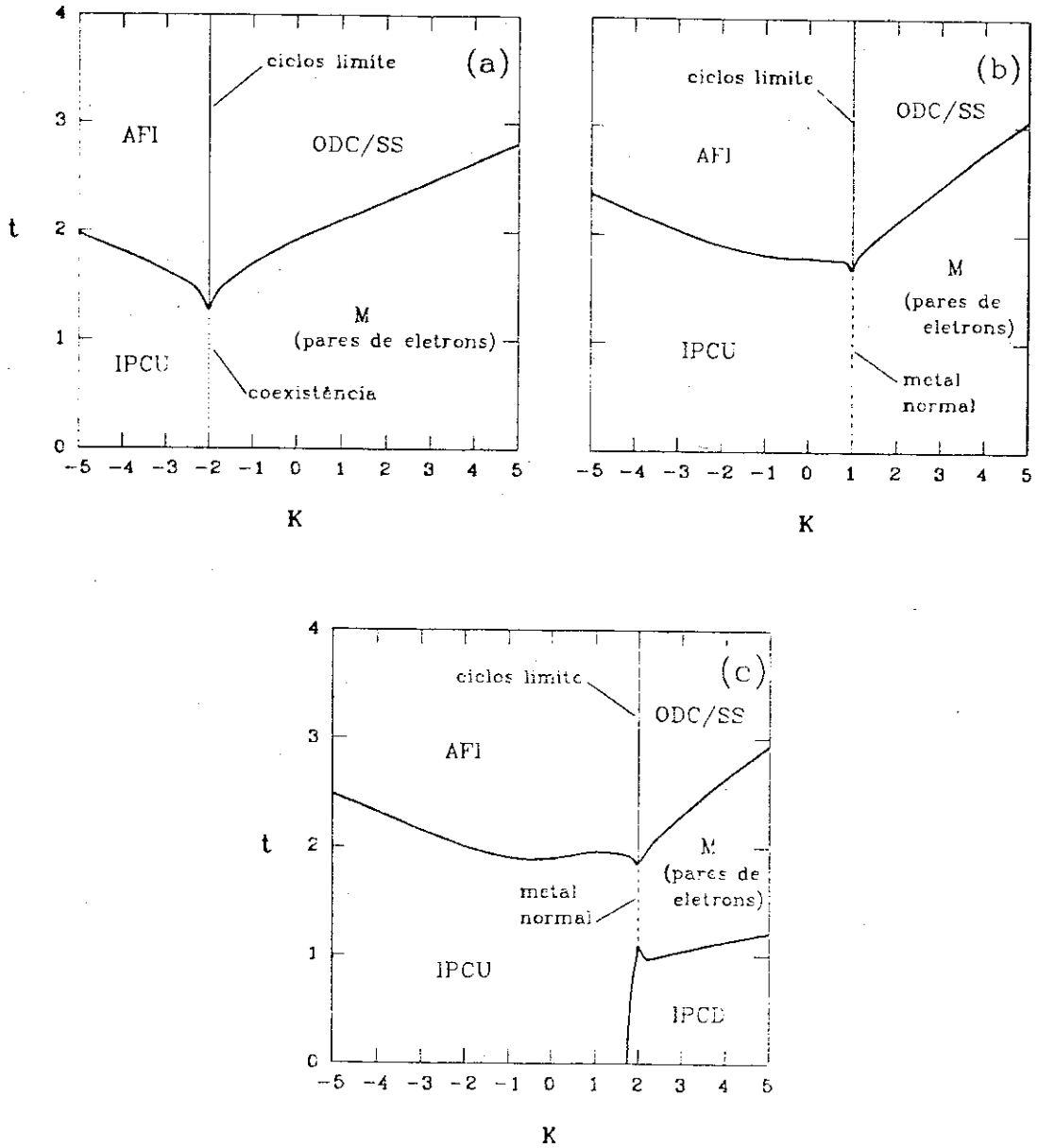


FIGURA 4.13: Diagrama de fases do modelo de Hubbard com interações biquadráticas em $d = 3$, para valores típicos de $U = \text{constante}$. (a) $U = -4$; (b) $U = 2$; (c) $U = 4$.

Capítulo 5

O modelo tJ. Conexão com supercondutividade de alta T_c

Neste capítulo introduzimos o modelo tJ e comentamos brevemente a sua conexão com o fenômeno de supercondutividade a altas temperaturas em compostos cerâmicos. Um modelo tJ generalizado é derivado do modelo de Hubbard generalizado, resultando assim o apropriado para o estudo de GR.

5.1 O modelo tJ

Consideremos, ao igual que para o modelo de Hubbard, uma rede arbitrária, onde a cada sítio temos associado um orbital de Wannier não degenerado $\varphi_i(\vec{r})$. Vamos a supor então, que temos definido na rede um sistema de fermions (eletrons) com interações de “caroço duro”, isto é, assumimos que cada sítio da rede pode estar ocupado *no máximo por um elctron*. O modelo tJ adimensional define-se então pelo

seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{tJ} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + a_{j,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}) - J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \quad (5.1)$$

onde $a_{i,\sigma}^\dagger \equiv (1 - n_{i,-\sigma})c_{i,\sigma}^\dagger$; t , J e μ são os parâmetros adimensionais de hopping, troca e o potencial químico respetivamente. Os operadores de spin \vec{S}_i estão definidos nas Eqs. (2.18). Os operadores $a_{i,\sigma}^\dagger$ se introduzem a fim de levar em conta apropriadamente o vínculo que proíbe a dupla ocupação em todo sítio. Existe uma outra versão do Hamiltoniano tJ que aparece freqüentemente na literatura, isto é:

$$\mathcal{H}_{tJ} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + a_{j,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}) - J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - n_i n_j) + \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \quad (5.2)$$

Como vimos na subsecção 2.3 (ver Eq. (2.48)) o Hamiltoniano (5.2) obtém-se em forma aproximada no limite $U/t \gg 1$ do modelo de Hubbard, onde nesse caso $J/t = t/2U$. Assim, no limite $U/t \gg 1$ o modelo de Hubbard é mapeado no limite $J/t \ll 1$ do modelo tJ . De fato, na expansão para $U/t \gg 1$ do modelo de Hubbard outros termos de hopping entre segundos vizinhos aparecem, os quais normalmente não se consideram já que eles correspondem a termos de hopping de segunda ordem. Por outra parte, estes termos são eliminados sistematicamente no procedimento de GR utilizado neste trabalho. Afim de evitar confusão, queremos salientar que o Hamiltoniano (5.2) é em geral *diferente* do Hamiltoniano (5.1) (eles só coincidem se o número de elétrons é igual ao número de sítios na rede). Desafortunadamente, na literatura os dois são chamados de Hamiltoniano tJ . O Hamiltoniano tJ generalizado que vamos a introduzir na seção 5.3 contém os dois Hamiltonianos (5.1) e (5.2) como casos particulares.

No limite $\mu \rightarrow \infty$, temos que $\rho = 1$, isto é, todos os sítios estão ocupados e o modelo tJ (em qualquer uma de suas versões) se reduz ao modelo de Heisenberg isotrópico. Assim, este modelo, para μ finito descreve um antiferromagneto (isolante de Mott) dopado (isto é, com buracos na ocupação eletrônica).

5.2 Supercondutividade de altas temperaturas

Desde a descoberta de materiais cerâmicos supercondutores com temperaturas críticas entre 30 K e 40 K por Bednorz e Müller [7] em 1986, uma enorme variedade de materiais com temperaturas críticas crescentes foram descobertos nos anos seguintes (chegando até o limite de 125 K até agora). Todos estes materiais tem uma estrutura de camadas, com celdas unitárias complexas, tendo como fato estrutural comum a presença de um ou mais planos de CuO_2 (por celda unitária) [10]. Dentre todos estes compostos tal vez os mais estudados (constituindo assim autênticos paradigmas) são os da família $La_{2-x}(X)_xCuO_{4-y}$, onde $X = Ba$ ou Sr , e os da família $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. No que segue, vamos nos referir em geral a estes dois tipos de materiais. A estrutura geral consiste em grupos de um (La) ou mais (dois no caso do Y) planos de CuO_2 , separados por várias camadas de átomos de disposição variada, contendo Cu , O e os restantes elementos constituintes. Estas camadas intermediárias, entre muitas outras propriedades, agem como reservatórios de carga para os planos de CuO_2 . Assim, a dopagem, isto é, tanto a variação na concentração de oxigênio como a introdução de impurezas (X na família do La),

localiza-se nestas regiões do material, dando como resultado final uma variação na concentração eletrônica nos planos de CuO_2 [88].

Duas características destes materiais, de importância fundamental para o fenômeno da supercondutividade (assim como para outras propriedades peculiares que eles apresentam), tem sido amplamente reconhecidas (baseadas numa enorme quantidade de evidência experimental): (i) o papel fundamental dos planos de CuO_2 ; a evidência indica que os portadores de carga tanto na fase supercondutora como na fase condutora normal se deslocam nestes planos, tendo uma interação muito pequena entre planos; isto dá ao fenômeno características quasebidimensionais; (ii) o quantum de carga supercondutora é $2e$, isto é, a supercondutividade envolve portadores de carga eletrônica na forma de *pares de Cooper*; a formação destes pares (quaisquer que seja a sua natureza, coisa que ainda hoje não se sabe com certeza) encontra-se relacionada em forma direta à presença de *buracos* na ocupação eletrônica dos planos de CuO_2 como resultado da dopagem [88,89].

Nos planos de CuO_2 , cada átomo de Cu está ligado fortemente a quatro átomos de O (ver Fig. 5.1). Em muitos casos a célula unitária é quadrada, podendo também ter a forma de retângulo ou de losango. A estrutura dos planos de CuO_2 é devida principalmente a ligações semicovalentes entre os orbitais $3d$ (de simetria $x^2 - y^2$) dos íons de Cu e orbitais $2p_\sigma$ dos íons de O . O nível que resulta da hibridização dos orbitais $3d$ e $2p$, gera uma banda eletrônica com características d (e portanto estreita), a qual possui somente um estado por íon de Cu . Na ausência de buracos o

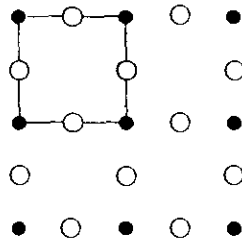


FIGURA 5.1: Planos de CuO_2 nas cerâmicas supercondutoras de alta T_c ; os círculos cheios e vazios correspondem aos átomos de Cu e O respetivamente.

nível de Fermi cai no meio desta banda, isto é, a banda resulta semi-cheia. Porém, a forte repulsão coulombiana no orbital $3d$ do Cu faz com que cada orbital híbrido esteja ocupado no máximo por um elétron. Estas características fazem destes planos a realização física mais simples de um isolante de Mott [3], o que ve-se confirmado pelo fato de que no estado sem dopagem (La_2CuO_4 ou $YBa_2Cu_3O_6$) estes materiais são isolantes antiferromagnéticos. Os momentos magnéticos, neste caso, localizam-se nos ions de Cu formando um sistema de spins que é bem descrito por um modelo de Heisenberg de $s_{\text{spin}}=1/2$ numa rede quadrada [88]. A interação dominante neste caso é uma forte interação de troca J_{\parallel} entre ions de Cu primeiros vizinhos no plano ($J \sim 10 - 130 \text{ meV}$). Porém, existe também um acoplamento de troca J_{\perp} entre planos, muito mais fraco ($J_{\perp}/J_{\parallel} \sim 10^{-3}$) [90], o qual gera ordem antiferromagnético de longo alcance tridimensional, com temperaturas de Néel $T_N \sim 300 \text{ K}$.

Ao introduzir buracos nos planos de CuO_2 (os quais localizam-se nos orbitais híbridos já mencionados) mediante a dopagem, estes materiais apresentam um diagrama

de fases muito rico [91]. Ao aumentar a concentração de buracos x desde zero, a temperatura T_N cai rapidamente a zero. No diagrama $x - T$ temos então uma linha crítica onde o sistema passa a uma fase paramagnética isolante. Ao continuar aumentando x o sistema passa a altas temperaturas de isolante a metal (a natureza desta transição não é bem conhecida), e a baixas temperaturas o sistema apresenta uma fase supercondutora, onde T_c aumenta até um máximo, para logo cair a zero ao continuar aumentando x . Na região de baixas temperaturas, entre a fase antiferromagnética e a fase supercondutora, podem acontecer uma variedade de fenômenos (tais como a presença de uma fase vidro de spin, transições de primeira ordem, etc), mas em geral os resultados experimentais ainda não são suficientes para determinar com certeza a natureza desta região.

Baseado nas características do estado não dopado (isolante de Mott) Anderson [23] propôs o modelo de Hubbard bidimensional como base para explicar o fenômeno da supercondutividade nestes materiais. Ainda sendo um modelo muito simplificado, Anderson sugeriu que nas interações entre buracos, geradas pelo entorno antiferromagnético do isolante de Mott, deveria se achar a essência da formação dos pares de Cooper. Sendo que a interação coulombiana no sítio U é bastante forte, a sua proposta na verdade leva ao modelo tJ , na sua versão (5.2).

Resultados de campo médio no limite de correlações fortes do modelo de Hubbard, em geral apoiam a proposta de Anderson [92,93]. Porém, resultados de Monte Carlo [94] e soluções exatas em clusters finitos [95] não mostram evidências de cor-

relações supercondutoras no modelo de Hubbard bidimensional, o que levanta algumas dúvidas sobre a aplicabilidade do modelo a este problema.

Por outra parte, Zhang e Rice [68] derivaram em forma direta o modelo tJ (Hamiltoniano (5.1)) a partir de um Hamiltoniano de duas bandas, que leva em conta a hibridização dos orbitais do *Cu* e do *O*. Esta derivação fornece um valor de J/t bastante mais alto do que $t/2U$, o que, além de se afastar do modelo de Hubbard, parece concordar com os valores altos de $J_{||}$ medidos. Assim, o modelo tJ aparece como sendo um modelo mais fundamental do que o modelo de Hubbard para a descrição deste fenômeno, e portanto um melhor candidato a explicá-lo. Em particular os resultados de Monte Carlo [96] e diagonalização exata de clusters finitos [97], entre outros (ver Ref. [98] e referências ali citadas), parecem confirmar esta hipótese.

Resumindo, ainda que o modelo tJ é um modelo muito simplificado para descrever em forma completa estes materiais altamente complexos, ele aparece como sendo uma base de partida promissória para explicar a parte essencial dos fenômenos associados. É importante mencionar que existem muitas outras teorias e modelos de natureza muito diferente (ver, por exemplo, as Ref.[89,99]) propostas para explicar a supercondutividade em materiais cerâmicos. Porém, dado que o objeto de estudo neste trabalho são os modelos de fermions relacionados com o modelo de Hubbard, nós vamos nos limitar a testar, mediante a técnica de GR, em que medido o modelo tJ reproduz algumas das propriedades dos materiais supercondutores, e não nos

ocuparemos desses outros modelos.

5.3 O modelo tJ generalizado

A evidência experimental parece indicar que as propriedades magnéticas e a supercondutividade nos óxidos cerâmicos descritos na seção 5.2 estão profundamente relacionadas [100]. Em particular, diversas teorias para a formação dos pares de Cooper contêm como parte essencial as interações magnéticas nestes materiais (ver por exemplo, as referências [101,102,103,104]). Assim, em relação ao modelo tJ, resulta interessante estudar as propriedades magnéticas a temperatura finita do modelo, a fim de testar se o modelo reproduz a fenomenologia geral do diagrama de fases. Uma ferramenta poderosa para este tipo de estudos é precisamente a técnica de GR. Em particular, uma questão interessante para analisar é a possível presença a baixas temperaturas de transições de primeira ordem (isto é. coexistência de fases) entre uma fase rica em elétrons, ordenada antiferromagneticamente, e uma fase rica em buracos (paramagnética). Experiências de difração de neutrons tem mostrado a existência deste tipo de transições em compostos de *La* dopados com oxigênio [105]. Ainda mais, experiências de RQN [106] e espectroscopia por ressonância de muons [107] indicam a possível existência destas transições em compostos de *La* dopados com *Sr* ou *Ba*. Porém, até onde nós sabemos, estas transições não tem sido encontradas nos compostos de *Y*. Assim, uma das questões importantes é se o modelo tJ pode fornecer uma descrição unificada destes

fenômenos.

Queremos salientar que nós não detectamos com o presente método de GR a fase supercondutora (isto é, não achamos nenhum tipo de atrator associado com esta fase). Em princípio, este resultado sugere que não existe supercondutividade no modelo tJ nas redes hierárquicas que nos utilizamos, ainda que isto não pode ser afirmado com certeza já que o GR neste caso é aproximado. Por tanto, este resultado indicaria que o GR não é um método adequado para estudar aproximar as redes de Bravais no estudo de supercondutividade no modelo tJ. Porém, como veremos depois, o GR nas redes hierárquicas fornece uma descrição muito completa da parte magnética do diagrama de fases dos materiais supercondutores a altas temperaturas. Assim, a informação obtida do GR vai nos permitir comparar somente a parte magnética do diagrama de fases dos materiais supercondutores com a correspondente no modelo tJ.

Ao igual que no caso do modelo de Hubbard, o Hamiltoniano \mathcal{H}_{tJ} não é invariante sob GR. O nosso seguinte passo é então a procura de uma generalização que seja invariante sob GR. O ponto de partida para isso é o Hamiltoniano de Hubbard generalizado \mathcal{H}_G'' (Eq. (3.26)). Afim de obter uma generalização dos Hamiltonianos (5.1) e (5.2) que seja invariante sob GR, devemos impor ao Hamiltoniano \mathcal{H}_G'' o vínculo que proíbe a dupla ocupação em todo sítio, o qual obtem-se tomando na Eq. (3.26) o limite $U \rightarrow \infty$, mantendo os demais parâmetros finitos. Neste limite os estados que contém sítios com dupla ocupação não vão contribuir à energia.

Assim, o Hamiltoniano efetivo resultante vai ter elementos de matriz não nulos somente entre estados pertencentes ao subespaço de estados com ocupação simples, isto é, aqueles estados que satisfazem: $n_{i,↑}n_{i,↓} = 0$ para todo sítio i . Neste caso os únicos processos de hopping que vão contribuir serão aqueles que ligam sítios com ocupação simples ou nula; esta condição pode colocar-se em forma explícita tomando $D = E = -t$ no Hamiltoniano (3.26). Dado que os operadores de carga não diagonais ρ_i^x, ρ_i^y possuem elementos de matriz não nulos somente entre estados com ocupação nula ou dupla no sítio i , os termos correspondentes no Hamiltoniano (3.26) não vão contribuir. Por outra parte, dado que $n_{i,↑}n_{i,↓} = 0$, temos que

$$(\rho_i^z)^2 = -\rho_i^z = 1 - (S_i^z)^2 \quad (5.3)$$

$$(S_i^z)^2 = n_i \quad (5.4)$$

Das Eqs. (5.3) e (5.4) vemos que os termos na Eq. (3.26) que contém operadores de carga diagonais ρ_i^z , podem ser absorvidos nos termos associados com os parâmetros K e μ . Finalmente, utilizando a Eq. (2.34), o Hamiltoniano resultante pode se escrever como segue:

$$\mathcal{H}_S = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + a_{j,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}) - J \sum_{\langle i,j \rangle} \bar{S}_i \cdot \bar{S}_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \quad (5.5)$$

O termo associado com o parâmetro K no Hamiltoniano (5.5) pode ser reescrito, usando a Eq. (5.4), como $\sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j$: assim, ele descreve uma interação de carga entre elétrons localizados em sítios primeiros vizinhos. Fazendo $K = 0$ na Eq. (5.5)

recuperamos o Hamiltoniano (5.1), entanto que para $K = -J$ recuperamos o Hamiltoniano (5.2). O subíndice S no Hamiltoniano (5.5) faz referência a Schlottmann, quem foi o primeiro que propos [44] este Hamiltoniano no contexto de sistemas de fermions pesados ($K \equiv V$ na notação de Schlottmann).

O Hamiltoniano \mathcal{H}_G^μ foi derivado construindo o mais geral possível que satisfaz um certo conjunto de simetrias preservadas pelo traço parcial (3.5) (ver subseção 3.2.2). É simples de verificar que essas propriedades de simetria são preservadas também no limite $U \rightarrow \infty$ utilizado para derivar o Hamiltoniano (5.5) a partir de \mathcal{H}_G^μ . Assim, \mathcal{H}_S é o Hamiltoniano mais simples que contém o modelo tJ (em qualquer uma de suas versões) como caso particular e fica invariante sob GR.

Usando a transformação (2.24) pode verificar-se que o espectro de \mathcal{H}_S é invariante sob uma mudança de sinal do parâmetro t . Assim, a função de grã-partição associada

$$\mathcal{Z}_S = \text{Tr} \exp(\mathcal{H}_S)$$

satisfaz $\mathcal{Z}_S(t) = \mathcal{Z}_S(-t)$, e portanto o diagrama de fases vai resultar simétrico sob a transformação $t \rightarrow -t$. Por definição, no que segue assumiremos $t > 0$.

O subespaço $t = 0$ do espaço de parâmetros (μ, K, J, t) é invariante sob GR. Neste caso temos um modelo $JK\mu$ descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{JK\mu} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \bar{S}_i \cdot \bar{S}_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \mu \sum_i (S_i^z)^2 \quad (5.6)$$

onde temos utilizado a Eq. (5.4). O Hamiltoniano (5.6) é semelhante ao do modelo JKU (Eq. (3.21)) analisado na seção 4.1. Porém, a diferença entre os dois modelos é que no caso do modelo JKU os estados com $S_i^z = 0$ são duplamente degenerados, em tanto que para o modelo $JK\mu$ isto não acontece. Esta diferença vai introduzir modificações no diagrama de fases. Por outra parte, como veremos, ainda que os dois diagramas de fases apresentam muitas semelhanças, a interpretação física é muito diferente nos dois casos.

Capítulo 6

Diagrama de fases do modelo tJ generalizado

Neste capítulo calculamos o diagrama de fases completo do modelo tJ generalizado [108] introduzido no capítulo 5. As equações de recorrência são obtidas pelo mesmo método utilizado no caso do modelo geral \mathcal{H}_G^μ (ver seção 3.3). Ainda que os blocos irreducíveis de \mathcal{H}_S são menores que no caso de \mathcal{H}_G^μ (já que o espaço de estados ve-se reduzido), eles continuam sendo o suficientemente grandes para não admitir o tratamento analítico no caso mais geral. Uma propriedade importante é que todos os pontos fixos relevantes das equações de recorrência localizam-se no subespaço invariante $t = 0$ do espaço (μ, K, J, t) . De fato, neste caso particular as equações de recorrência são obtidas analiticamente. Assim, resulta conveniente discutir primeiro algumas propriedades gerais destas equações para $d > 1$. As propriedades a temperatura zero do modelo tJ são em geral conhecidas [25]. Baseados nessas propriedades em geral não esperamos que o diagrama de fases do modelo tJ generalizado em $d = 1$ apresente nenhuma característica

de particular interesse.

6.1 Equações de recorrência para $t = 0$

Para $t = 0$ temos o modelo $JK\mu$ associado ao Hamiltoniano (5.6). As equações de recorrência neste caso tem a forma:

$$\begin{aligned}\mu' &= 2l^{d-1} \ln\left(\frac{F_2}{F_1}\right) \\ K' &= -J' + l^{d-1} \ln\left(\frac{F_2^2}{F_1 F_3}\right) \\ J' &= \frac{l^{d-1}}{2} \operatorname{arctanh}\left(-\frac{F_5}{F_4}\right)\end{aligned}\tag{6.1}$$

com

$$\begin{aligned}F_1 &\equiv 1 + 4 \exp(\mu) + 2 \exp(2\mu - K) g_5(J) \\ F_2 &\equiv \exp(\mu/2) [1 + 2 \exp(\mu) + \exp(2\mu - 2K) g_4(J) + \exp(\mu - K) g_5(J)] \\ F_3 &\equiv \exp(\mu) + 2 \exp(2\mu - K) g_5(J) + \exp(3\mu - 3K) g_1(J) \\ F_4 &\equiv \exp(\mu) + 2 \exp(2\mu - K) g_5(J) + \exp(3\mu - 3K) g_2(J) \\ F_5 &\equiv \exp(3\mu - 3K) g_3(J)\end{aligned}\tag{6.2}$$

onde as funções $g_i(x)$, $i = 1, \dots, 5$, estão definidas pelas Eqs. (4.3). Das Eqs. (6.1) verifica-se que $J = 0$ constitui pela sua vez um subespaço invariante (isto é, $J = 0$ implica $J' = 0$). Algumas propriedades gerais do diagrama de fases neste subespaço podem ser deduzidas facilmente notando que, para $J = 0$ o Hamiltoniano (5.6) (comparar com os

resultados da subseção 4.1.1), toma a forma:

$$\mathcal{H}_{JK\mu} = -K \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i \quad (6.3)$$

Introduzindo as variáveis t_i em cada sítio i (as quais são, pela Eq. (5.4), equivalentes às variáveis (3.22)):

$$t_i \equiv 2 \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \quad (t_i = \pm 1) \quad (6.4)$$

o Hamiltoniano (6.3) pode-se mapear num modelo de Ising de spin-1/2 na presença de um campo magnético externo *dependente da temperatura*:

$$\mathcal{H}_t = -\frac{1}{4} K \sum_{\langle i,j \rangle} t_i t_j + \sum_i B_i t_i \quad (6.5)$$

onde

$$B_i \equiv \frac{1}{2} \left(\mu - \frac{1}{2} z_i K + \ln 2 \right) \quad (6.6)$$

e z_i é o número de sítios primeiros vizinhos do sítio i . Numa rede de Bravais $z_i = z$ é constante e o campo B_i resulta homogêneo; numa rede hierárquica z_i depende do sítio e assim B_i é um campo local. Notemos que no caso do modelo JKU o campo externo efetivo H_t (Eq. (3.24)) é sempre homogêneo e independe da temperatura (a diferença encontra-se no termo $\ln 2$ na Eq. (6.6), que não está escalado pela temperatura).

A linha $K = 0$ no plano (U, K) é também um subespaço invariante sob GR (isto é, $K = 0 \Rightarrow K' = 0$). No análogo magnético (Eq. (6.5)) este subespaço corresponde a um sistema de spins não interagentes num campo magnético externo. Ao longo desta linha encontramos três pontos fixos: (i) o ponto fixo semi-estável $(\mu, K, J, t) = (0, 0, 0, 0)$, que denotamos por q ; (ii) o atrator $(+\infty, 0, 0, 0)$, que denotamos por p , e (iii) o atrator

$(-\infty, 0, 0, 0)$, que denotamos por h . Da Eq. (6.6) vemos que o ponto fixo p está associado a uma fase caracterizada por $\langle t_i \rangle > 0$, o que equivale (ver Eq. (6.4)) a $\langle n_i \rangle > 1/2$; conseqüentemente, esta é uma fase *rica em eletrons* (alta densidade de eletrons). O ponto fixo h está associado com uma fase caracterizada por $\langle t_i \rangle < 0$, o que equivale a $\langle n_i \rangle < 1/2$, sendo por tanto uma fase *rica em buracos* (baixa densidade de eletrons). As duas fases (rica em eletrons y rica em buracos) são paramagnéticas. Para $K < 0$ o Hamiltoniano (6.5) descreve um modelo ferromagnético. Assim, para $d > 1$, deveremos achar para $K < 0$ uma linha de transição de primeira ordem entre as duas fases associadas com os pontos fixos h e p .

Para $K > 0$ o Hamiltoniano (6.5) descreve um modelo de Ising antiferromagnético num campo externo, e em conseqüência esperamos, para $d > 1$, a presença de uma fase com ordem tipo antiferromagnética, nalguma região do semiplano $K > 0$ do espaço (μ, K) . Em outras palavras, supondo uma rede bipartita, teremos $\langle t_i \rangle > 0$ para todos os sítios pertencentes a uma das subredes, e $\langle t_i \rangle < 0$ para todos os sítios da outra. Da Eq. (6.4) vemos que numa das subredes vão predominar os sítios no estado $n_i = 0$, enquanto que na outra vão predominar os sítios no estado $n_i = 1$. Esta situação corresponde a uma fase de *ondas de densidade de carga* (ODC). A densidade total de eletrons neste caso é $\rho = 1/2$. Notemos que a fase ODC neste caso é diferente da fase achada no modelo JKU , onde a densidade eletrônica é $\rho = 1$ (a subrede com maior densidade eletrônica tem $n_i = 2$).

Vamos considerar agora alguns limites importantes do caso geral $J \neq 0$. Das Eqs. (6.1)

encontramos, no limite $\mu \rightarrow +\infty$, os seguintes comportamentos assintóticos:

$$\begin{aligned}\mu' &\sim l^{d-1} \mu \\ K' &\sim f_2(d, J) \\ J' &\sim f_1(d, J)\end{aligned}\tag{6.7}$$

onde as funções f_1 e f_2 estão definidas pelas Eqs. (4.5) e (4.6). Vemos que a única equação de recorrência não trivial neste limite é a correspondente ao parâmetro J , a qual, alias, resulta fechada. Isto resulta do fato de que no limite $\mu \rightarrow +\infty$ temos que $\rho \rightarrow 1$, isto é, todos os sítios estarão ocupados. Nesta situação, o termo associado ao parâmetro K no Hamiltoniano (5.6) vira uma constante aditiva irrelevante, e o Hamiltoniano se reduz ao do modelo de Heisenberg de spin-1/2 (Eq. (4.7)). Os diversos pontos fixos e os correspondentes expoentes críticos da equação de recorrência $J' = f_1(d, J)$ foram analisados na subseção 4.1.2. Assim, vemos que para $d = 2$, esta equação não apresenta nada de novo respeito do caso $J = 0$. Para $d = 3$ os pontos fixos de $f_1(3, J)$ fornecem o seguinte conjunto de pontos fixos para as Eqs. (6.7): $(\mu, K, J) = (+\infty, K_c^A, J_c^A); (+\infty, K_2^A, J_2^A); (+\infty, K_c^F, J_c^F); (+\infty, +\infty, -\infty)$.

Outro comportamento assintótico interessante acontece para $\mu \rightarrow -\infty$ e $K \rightarrow -\infty$.

Consideremos primeiro o caso $J = 0$. Vamos propor a seguinte relação:

$$K = \mu + \ln \alpha_0\tag{6.8}$$

Usando então as Eqs. (6.1) e impondo que, no limite $\mu \rightarrow -\infty$, $K' \sim \mu' + \ln \alpha_0$, achamos

que

$$\mu' \sim l^{d-1} \mu\tag{6.9}$$

e

$$\ln \alpha_0 = 2 \frac{l^{d-1}}{l^d - 1} \ln 2 \quad (6.10)$$

Em outras palavras, a linha determinada pela Eq. (6.8) é assintoticamente invariante sob GR. A existência desta linha é confirmada numericamente nas seções 6.2 e 6.3. Nesta linha encontramos o ponto fixo $(\mu, K, J) = (-\infty, -\infty, 0)|_{K=\mu+\ln \alpha_0}$.

Consideremos agora o caso $J \neq 0$. No limite $\mu \rightarrow -\infty$, com $K = \mu + \text{constante}$, encontramos das Eqs. (6.1) os seguintes comportamentos assintóticos:

$$\begin{aligned} \mu' &\sim l^{d-1} \mu \\ K' &\sim \mu' \\ J' &\sim f_1(d, J) \end{aligned} \quad (6.11)$$

onde $f_1(d, J)$ é dado pela Eq. (4.5). Das Eqs. (6.11) achamos, para $d = 3$, mais quatro pontos fixos : $(\mu, K, J) = (-\infty, -\infty, J_c^A)$; $(-\infty, -\infty, J_2^A)$; $(-\infty, -\infty, J_c^F)$ e $(-\infty, -\infty, -\infty)$. Neste limite ($\mu \rightarrow -\infty$) o Jacobiano das equações de recorrência (6.1), avaliado em qualquer um dos cinco pontos fixos acima mencionados exibe um autovalor $\lambda = l^d$, o qual encontra-se associado com o autovetor $(\mu, K, J) = (1, 0, 0)$. O significado físico destes pontos fixos vai ser analisado nas seções 6.2 e 6.3.

6.2 Diagrama de fases para $d = 2$

Em $d = 2$ não temos ordem magnética de longo alcance. Porém, afim de distingui-las das fases com ordem magnética que apareceram em $d = 3$, daqui em diante vamos denotar

as fases rica em buracos e rica em eletrons por Pb (*paramagnética rica em buracos*) e Pe (*paramagnética rica em eletrons*) respetivamente.

Analisamos primeiro o corte $J = t = 0$ do diagrama de fases no espaço (μ, K, J, t) , o qual é um subespaço invariante sob GR. O diagrama de fluxo que resulta das Eqs. (6.1) é mostrado na Fig. 6.1. Neste subespaço temos quatro pontos fixos não triviais: o ponto a , duplamente instável; o ponto b instável; o ponto $(\mu, K, J, t) = (0, 0, 0, 0)$ instável, denotado por q , e (das Eqs. (6.9)-(6.10)) o ponto fixo instável $(\mu, K, J, t) = (-\infty, -\infty, 0, 0)|_{K=\mu+3/4 \ln 2}$, denotado por F_0 , que já foi discutido na seção 6.1.

A linha ea é governada pelo ponto fixo F_0 . Como vimos na seção 6.1, o autovalor relevante neste ponto é $\lambda = l^d$, o qual tem associado o autovetor $(\mu, K) = (1, 0)$. Dado que o potencial químico μ é o campo termodinamicamente conjugado ao parâmetro de ordem ρ , o ponto fixo F_0 satisfaz a condição de Nienhuis e Nauenberg [75]. Assim, a linha ea , a qual tem a forma assintótica (6.8) para $\mu \rightarrow -\infty$, descreve uma transição de primeira ordem entre as fases Pb e Pe. Esta linha termina no ponto crítico a . A linha de traços na Fig. 6.1 é governada pelo ponto fixo q . Esta linha corresponde a uma transformação continua de uma fase na outra, isto é, a densidade de eletrons ρ muda em forma contínua ao atravessar esta linha, não correspondendo por tanto a transição de fases nenhuma. Os expoente térmico e da função de correlação no ponto crítico a estão dados respetivamente por $\nu_a = \ln l / \ln \lambda_a^{(1)}$ e por $\eta_a = d + 2(1 - \ln \lambda_a^{(2)} / \ln l)$, onde $\lambda_a^{(1)}$ and $\lambda_a^{(2)}$ são os autovalores das equações de recorrência linearizadas no ponto a ; os autovetores associados são respetivamente tangencial e transversal à linha ea .

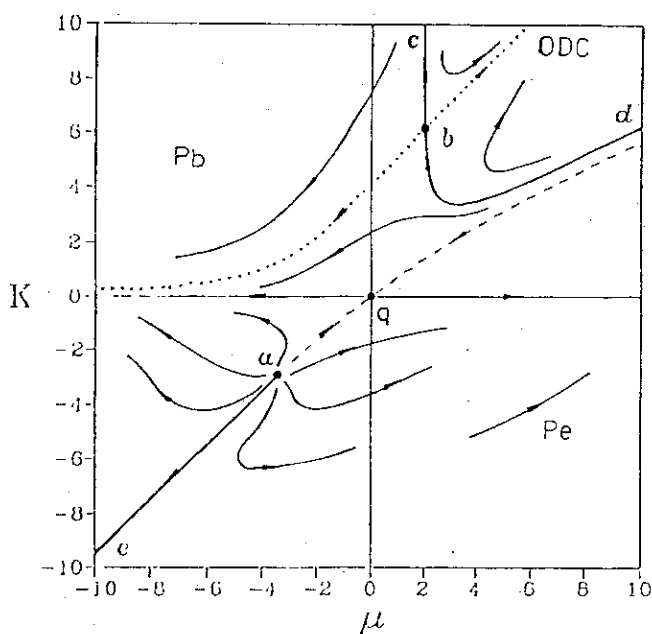


FIGURA 6.1: Diagrama de fluxo no subespaço invariante (μ, K) do modelo $JK\mu$ para $d = 2$. O fluxo de GR é indicado esquematicamente por setas. A linha cbd corresponde a uma transição de fases de 2^{da} ordem. A linha contínua ea corresponde a uma transição de 1^{ra} ordem entre as fases P_b e P_e , e termina no ponto crítico a ; a linha de traços corresponde a um passo contínuo entre as duas fases. A linha de pontos esta associada ao campo de escala relevante no ponto fixo b .

A região encerrada pela linha cbd na Fig. 6.1 é governada pelo atrator $(\mu, K, J, t) = (+\infty, +\infty, 0, 0)|_{K=\mu+\gamma}$, com $\gamma \approx 4$; este ponto fixo caracteriza a fase ODC descrita na seção 6.1 e vamos denota-lo por w . A linha cbd é governada pelo ponto fixo b e corresponde a uma transição de segunda ordem entre as fases Pb e ODC. O expoente térmico nesta linha é dado por $\nu_b = \ln l / \ln \lambda_b$, onde λ_b é o autovalor relevante no ponto b (o autovetor associado é tangencial à linha de pontos na Fig. 6.1). Na tabela 6.1 apresentamos um resumo das características gerais dos pontos fixos acima analisados.

A estrutura de pontos fixos mostrada no subespaço $J = t = 0$ determina completamente o fluxo de todos os pontos no espaço inteiro (μ, K, J, t) para $d = 2$, já que todo ponto localizado fora do dito subespaço é atraído por ele, isto é, o fluxo de todos os pontos é governado pelo conjunto de pontos fixos no subespaço $J = t = 0$. Assim, as diferentes hipersuperfícies de transição no espaço (μ, K, J, t) estão governadas pelos pontos fixos não triviais nesse subespaço. Vamos descrever agora alguns cortes representativos do diagrama de fases completo em $d = 2$.

Consideremos o corte $t = 0$ do diagrama de fases para $J > 0$ (o diagrama para $J < 0$ é completamente análogo ao do caso $J > 0$). Na Fig. 6.2 mostramos a região $K < 0$ (interação atrativa) e $\mu < 0$ do diagrama de fases no espaço (μ, K, J) . Temos uma superfície de transição de primeira ordem entre as fases Pb e Pe. Esta superfície, a qual constitui a extensão para $J > 0$ da linha ea mostrada na Fig. 6.1, esta governada pelo ponto fixo F_0 e termina numa linha crítica (denotada por af na Fig. 6.2) a qual é governada pelo ponto fixo a . A superfície de primeira ordem e a linha crítica estendem-se

Ponto fixo	Localização (μ, K)	Estabilidade	Bacia de atração no espaço (μ, K, J, t)	Autovalores relevantes
q	$(0, 0)$	instável	hypersuperfície entre Pb e Pe sem transição de fases	$\lambda = l^{d-1} = 3$
p	$(+\infty, 0)$	estável	fase Pe	—
h	$(-\infty, 0)$	estável	fase Pb	—
w	$(\infty, \infty) _{K=\mu+\gamma}$ $\gamma \approx 4$	estável	fase ODC	—
F_0	$(-\infty, -\infty) _{K=\mu+\alpha_0}$ $\alpha_0 = 3/4 \ln 2$	instável	hypersuperfície de 1 ^{ra} ordem entre Pb e Pe	$\lambda = l^d = 3$
a	$(-3.42, -2.93)$	duplamente instável	superfície crítica	$\lambda_a^{(1)} \approx 2.27$ $\lambda_a^{(2)} \approx 7.84$
b	$(2.03, 6.14)$	instável	hypersuperfície crítica entre Pb e ODC	$\lambda_b \approx 2.80$

TABELA 6.1: Classificação, localização e autovalores (relevantes) dos pontos fixos relevantes para o modelo $JK\mu$ em $d = 2$. Todos os pontos fixos nesta tabela localizam-se no subespaço $J = t = 0$.

à região $K > 0$ e $\mu < 0$.

Na Fig 6.3 mostramos a região $K > 0$ (interação repulsiva) e $\mu > 0$ do diagrama de fases no espaço (μ, K, J) . Temos uma superfície de transição de segunda ordem entre as fases Pb e ODC. Esta superfície (que constitui a extensão para $J > 0$ da linha cbd da Fig. 6.1) é governada pelo ponto fixo b .

A estrutura geral do diagrama de fases para $t \neq 0$ repete as características do caso $t = 0$. Na Fig. 6.4 mostramos o diagrama de fases para $K = 0$, o qual está associado com

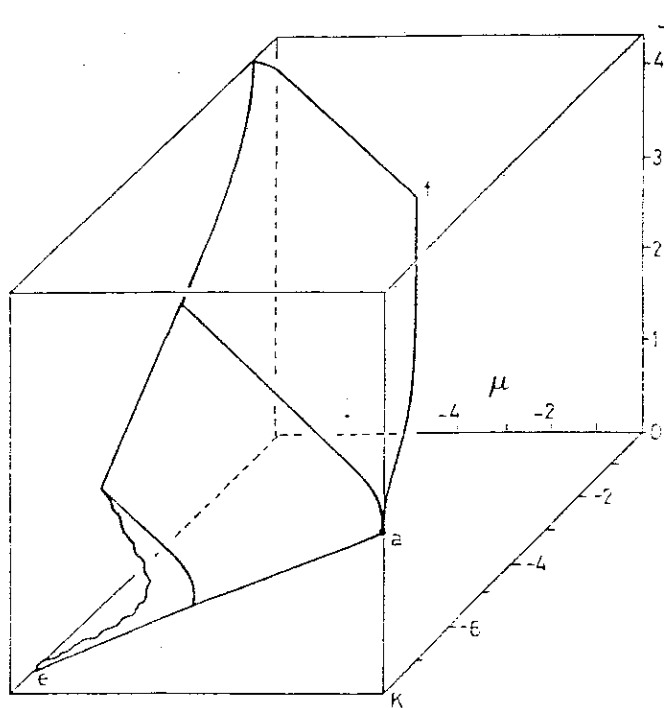


FIGURA 6.2: Diagrama de fases do modelo $JK\mu$ para $K < 0$ em $d = 2$. A superfície caf corresponde a uma transição de fases de 1ª ordem entre Pb e Pe, e termina na linha crítica af .

o Hamiltoniano (5.1). Para $\mu < 0$ achamos novamente uma superfície de transição de primeira ordem entre as fases Pb (embaixo da superfície) e Pe (acima da superfície), a qual é governada pelo ponto fixo F_0 . Esta superfície termina numa linha crítica (denotada por gh na Fig. 6.4) a qual é governada pelo ponto fixo a . O valor crítico de J nesta linha cresce com t . Para $K = 0$ não existe fase ODC.

A estrutura geral do diagrama de fases completo para $d = 2$ pode resumir-se como segue:

- Existem no total 3 fases: Pe, Pb e ODC.

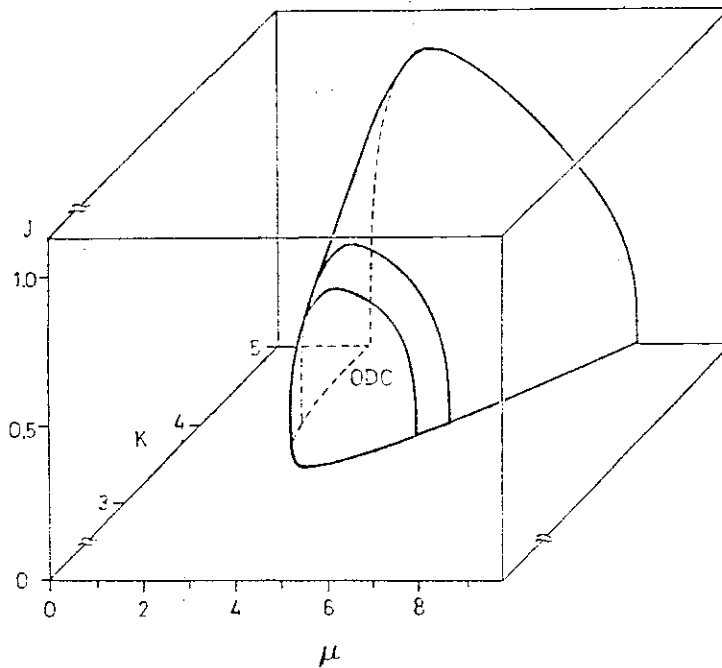


FIGURA 6.3: Superfície de transição de 2^{da} ordem entre Pb e ODC no modelo $JK\mu$ para $J > 0$ em $d = 2$

- Para $\mu < 0$ existe uma hipersuperfície de transição de primeira ordem entre as fases Pb e Pe, a qual termina numa superfície crítica.
- Para $\mu > 0$ e $K > 0$ existe uma hipersuperfície de transição de segunda ordem entre as fases Pb e ODC.
- Para $\mu > 0$ a transição entre Pb e Pe é suave (isto é, sem transição de fases), no sentido de que a densidade eletrónica muda de maneira suave ao passar de uma fase

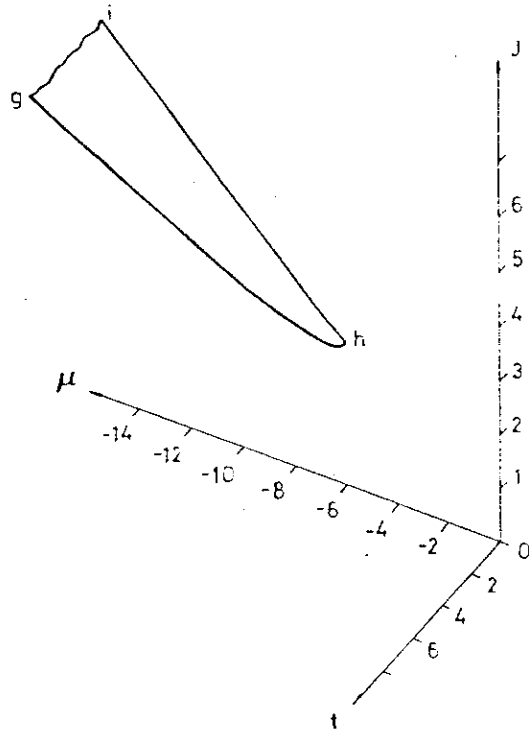


FIGURA 6.4: Diagrama de fases do modelo tJ ($K = 0$) em $d = 2$. A figura mostra uma superfície de transição de 1^{ra} ordem entre as fases Pb (J pequeno) e Pe (J grande), a qual termina na linha crítica gh ; a linha ih localiza-se no plano $t = 0$. Outra superfície semelhante existe para $J < 0$.

à outra.

Na Fig. 6.5 mostramos um corte representativo do diagrama de fases para valores típicos de $K > 0$ e t constantes. A lista completa dos pontos fixos que determinam a estrutura do diagrama de fases em $d = 2$ e as características gerais destes pontos se mostra na tabela 6.1.

O problema da separação de fases (isto é, transições de primeira ordem) no modelo tJ bidimensional tem sido tratado a temperatura zero por outros autores [109,110]. Em particular, os resultados de Emery *et al* sugerem que a separação de fase acontece *para todo valor de J/t* ; isto está em desacordo com os nossos resultados. Aos fins de comparação, analisamos então o diagrama de fases em termos da temperatura adimensional

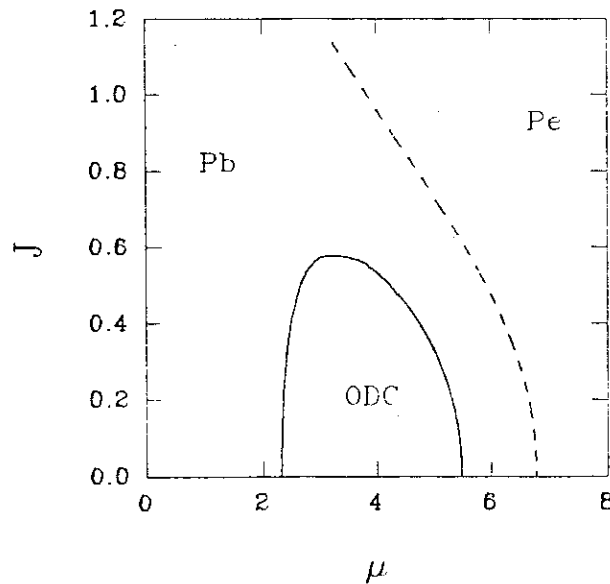


FIGURA 6.5: Corte representativo do diagrama de fases do modelo tJ generalizado para valores típicos de K e t em $d = 2$. A linha de traços corresponde a uma mudança suave entre as fases Pb e Pe.

$1/t$ e das variáveis independentes da temperatura J/t , μ/t . Na Fig. 6.6 mostramos as linhas de coexistência entre as fases Pb e Pe no plano $(\mu/t, 1/t)$ para $K = 0$ e J/t constante, para diversos valores de J/t . Cada linha termina num ponto crítico cuja temperatura crítica $(1/t)_c$ diminui ao diminuir J/t . Na Fig. 6.7 mostramos a temperatura crítica $(1/t)_c$ em função de J/t . Desafortunadamente, o erro numérico no cálculo cresce com t , fazendo extremamente difícil obter resultados precisos para temperaturas muito baixas ($1/t < 0.1$). Além disso, os valores correspondentes do parâmetro t encontram-se fora da região do espaço de parâmetros na qual se espera que a aproximação (3.6) forneça resultados confiáveis. Porém, nossos resultados sugerem a existência de um valor crítico $(J/t)_c$ por embaixo do qual a transição desaparece para toda temperatura, isto é, o modelo tJ bidimensional *não apresenta separação de fases para valores pequenos de J/t* . Da Fig. 6.7 extrapolamos o valor $(J/t)_c \approx 1.4$.

Resulta interessante repetir a análise anterior para o caso $K = -J$ (associado ao Hamiltoniano (5.2)). Os resultados obtidos são análogos aos do caso $K = 0$. Para $K = -J$ extrapolamos o valor $(J/t)_c \approx 0.67$. Este resultado sugere que o modelo de Hubbard também não apresenta separação de fases, ao menos para valores grandes de U/t , onde se esperam semelhanças com o modelo tJ. Esta conclusão concorda com resultados de Monte Carlo a temperatura finita no modelo de Hubbard [111], e é consistente com os resultados que apresentaremos no capítulo 7.

6.3 Diagrama de fases para $d = 3$

Ainda que muitas das características do diagrama de fases em $d = 2$ persistem em $d = 3$, o diagrama de fases neste último caso ve-se apreciavelmente modificado, devido a que as interações entre spins, associadas com grupos de simetrias contínuas, geram ordem magnética de longo alcance. Assim, um diagrama de fases muito rico e complexo aparece. Dado que todos os pontos fixos relevantes, isto é, todos aqueles que determinam completamente as propriedades críticas, localizam-se no subespaço invariante $t = 0$, iniciamos nossa discussão com este caso.

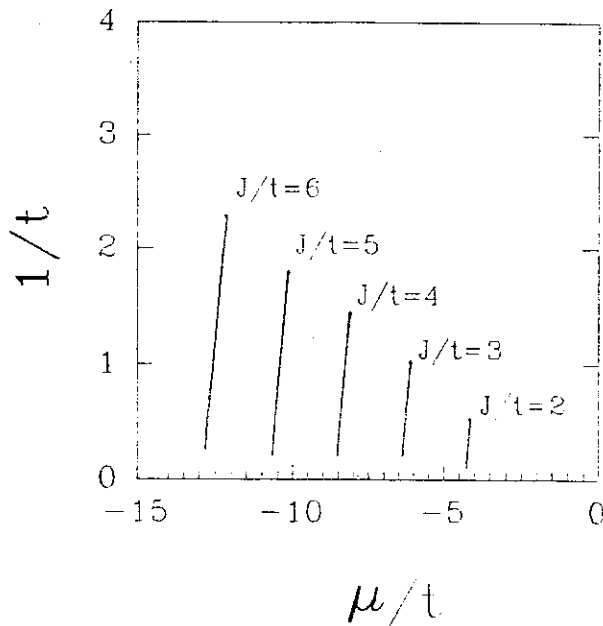


FIGURA 6.6: Linhas de coexistência do modelo tJ em $d = 2$ ($K = 0$) para valores típicos de J/t

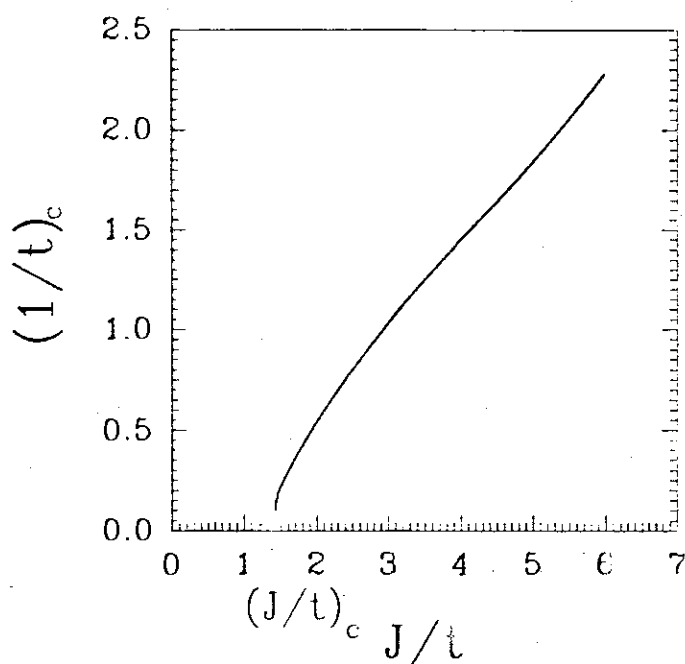


FIGURA 6.7: Temperatura crítica adimensional $(1/t)_c$ em função de J/t , para $K = 0$. A curva sugere que $(1/t)_c \rightarrow 0$ para $J/t \rightarrow (J/t)_c$. O valor extrapolado de $(J/t)_c$ é $(J/t)_c \approx 1.4$.

6.3.1 Diagrama de fases para $t = 0$ (modelo $JK\mu$)

Como já dissemos, todos os pontos fixos relevantes estão no subespaço $t = 0$; em outras palavras, todos os pontos do espaço de parâmetros (μ, K, J, t) são levados neste subespaço sob a transformação de GR.

Começamos nossa análise com o subespaço invariante $J = t = 0$. A estrutura geral de pontos fixos neste subespaço é qualitativamente análoga à estrutura do caso $d = 2$ (ver subseção 6.2 e a Fig. 6.1). Os valores numéricos destes pontos fixos, assim como as suas características gerais, se mostram na tabela 6.2. Todos os autovalores das equações de recorrência linearizadas, correspondentes aos campos de escala associados

Ponto fixo	Localização (μ, K)	Bacia de atração no espaço (μ, K, J, t)	Autovalores relevantes
q	$(0, 0)$	fronteira entre as fases Ph e Pe sem transição	$\lambda = l^{d-1} = 9$
p	$(+\infty, 0)$	fase Pe	—
h	$(-\infty, 0)$	fase Pb	—
w	$(\infty, \infty) _{K=\mu+\gamma}$ $\gamma \approx 12.48$	fase ODC	—
F_0	$(-\infty, -\infty) _{K=\mu+\alpha_0}$ $\alpha_0 = 9/13 \ln 2$	hypersuperfície de 1 ^{ra} ordem entre as fases Pb e Pe	$\lambda = l^d = 27$
a	$(-1.82, -1.47)$	superfície crítica	$\lambda_a^{(1)} \approx 8.27$ $\lambda_a^{(2)} \approx 11.33$
b	$(1.44, 14.43)$	hypersuperfície crítica entre Pb e ODC	$\lambda_b \approx 8.10$

TABELA 6.2: Classificação, localização e autovalores (relevantes) dos pontos fixos relevantes para o modelo $JK\mu$, para $J = 0$, em $d = 3$. Todos os pontos fixos nesta tabela localizam-se no subespaço $J = t = 0$.

com os parâmetros t e J , em todo ponto fixo são irrelevantes, isto é, todos os pontos fixos são atrativos nessas direções.

O diagrama de fases para o caso $J > 0$ e $K < 0$ é mostrado na Fig. 6.8, e o conjunto de

pontos fixos para $J > 0$, que junto com os pontos fixos para $J = 0$ determina a estrutura do diagrama, é listado na tabela 6.3. A ligação global de todos os pontos fixos para $J \geq 0$ é mostrada na Fig. 6.9. Como é de se esperar, este diagrama de fases mostra uma grande semelhança qualitativa com o do modelo BEG clássico em $d = 2$ (ver Ref. [66]).

Temos três fases para $J \geq 0$: (i) a fase Pb, por embaixo da superfície FMT; (ii) a fase Pe, por embaixo da superfície FTC e (iii) uma fase ordenada antiferromagneticamente (AF) localizada acima da superfície FMTC. Estas três fases estão governadas respectivamente pelos pontos fixos h , p e $(\mu, K, J) = (+\infty, K_2^A, J_2^A)$, sendo este último ponto denotado por A . A superfície FTC esta governada pelo ponto fixo $(\mu, K, J) = (+\infty, K_c^A, J_c^A)$, o qual denotamos C_A . Os pontos fixos A e C_A emergem das Eqs. (6.7). Em consequência a superfície FTC corresponde a uma transição de segunda ordem entre as fases AF e Pe, onde o expoente térmico associado é ν_A (ver subseção 4.1.2), isto é, esta transição pertence à classe de universalidade do modelo de Heisenberg isotrópico.

A superfície FMT esta governada pelo ponto fixo $(\mu, K, J) = (-\infty, -\infty, J_2^A)$, o qual denotamos por F_A . Este ponto fixo é atrativo em todas as direções, exeto aquela associada ao campo de escala μ , cujo autovalor associado é $\lambda = l^d$. Dado que a densidade eletrônica satisfaz $\rho \approx 1$ ($\mu = +\infty$ no ponto fixo A), FMT é uma superfície de transição de primeira ordem entre as fases Pb e AF.

A superfície FEac esta governada pelo ponto fixo F_0 . As características deste ponto fixo já foram discutidas nas seções 6.1 e 6.2. Mediante os mesmos argumentos utilizados para $d = 2$ concluímos que FEac é uma superfície de transição de primeira ordem entre as fases Pb e Pe. Esta superfície termina na linha crítica isolada aE , a qual é governada

Ponto fixo	Localização (μ, K, J)	Estabilidade	Bacia de atração no espaço (μ, K, J, t)	Autovalores relevantes
A	$(+\infty, K_2^A, J_2^A)$	estável	fase AF	—
C_A	$(+\infty, K_c^A, J_c^A)$	instável	hypersuperfície de 2 ^{da} ordem entre Pe e AF	$\lambda_A \approx 2.42$
F_A	$(-\infty, -\infty, J_2^A)$	instável	hypersuperfície de 1 ^{ra} ordem entre Pb e AF	$\lambda = l^d = 27$
G_A	$(-\infty, -\infty, J_c^A)$	duplamente instável	superfície crítica terminal	$\lambda_A, \lambda = l^d$
T	$(-1.02, -0.01, 0.70)$	duplamente instável	superfície tricrítica	$\lambda_T^{(1)} \approx 12.87$ $\lambda_T^{(2)} \approx 1.57$
E	$(-1.72, -0.97, 0.49)$	triplemente instável	linha multicrítica especial	$\lambda_E^{(1)} \approx 16.32$ $\lambda_E^{(2)} \approx 2.74$ $\lambda_E^{(3)} \approx 1.66$

TABELA 6.3: Classificação, localização e autovalores relevantes dos pontos fixos para o modelo $JK\mu$ para $J > 0$, em $d = 3$. Estes pontos fixos, junto com os mostrados na tabela 6.2 determinam completamente o diagrama de fases do modelo tJ generalizado em $d = 3$ para $J > 0$.

pelo ponto fixo a .

As superfícies FMT e FTC juntam-se de maneira suave na linha ET. Os pontos fixos E e T nesta linha são não triviais. O ponto fixo T é atrativo ao longo da linha

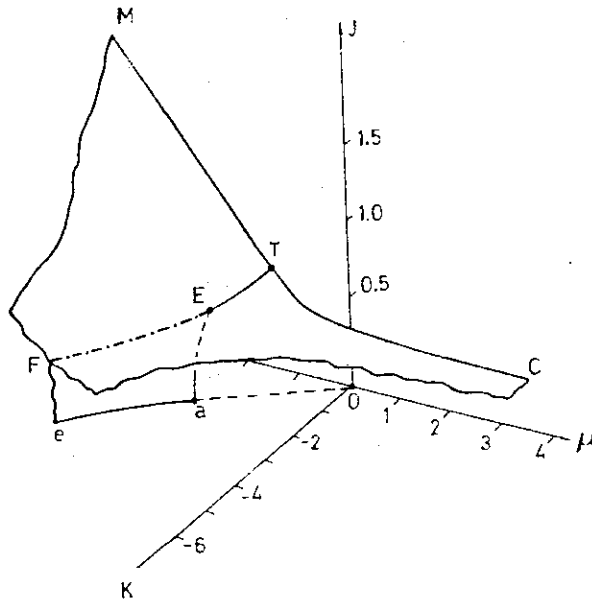


FIGURA 6.8: Diagrama de fases do modelo $JK\mu$ em $d = 3$, para $K < 0$. A região por encima da superfície FMTC corresponde à fase AF; a região por embaixo da superfície FTC corresponde à fase Pe, em tanto que a região por embaixo da superfície FMT corresponde à fase Pb. A superfície FTC é de 2^{da} ordem, em tanto que FMT é de 1^{ra} ordem; a superfície FEae é de 1^{ra} ordem e termina na linha crítica isolada aE. A linha continua ET é tricrítica, em tanto que a linha de traços e pontos FE é uma linha de pontos críticos terminais.

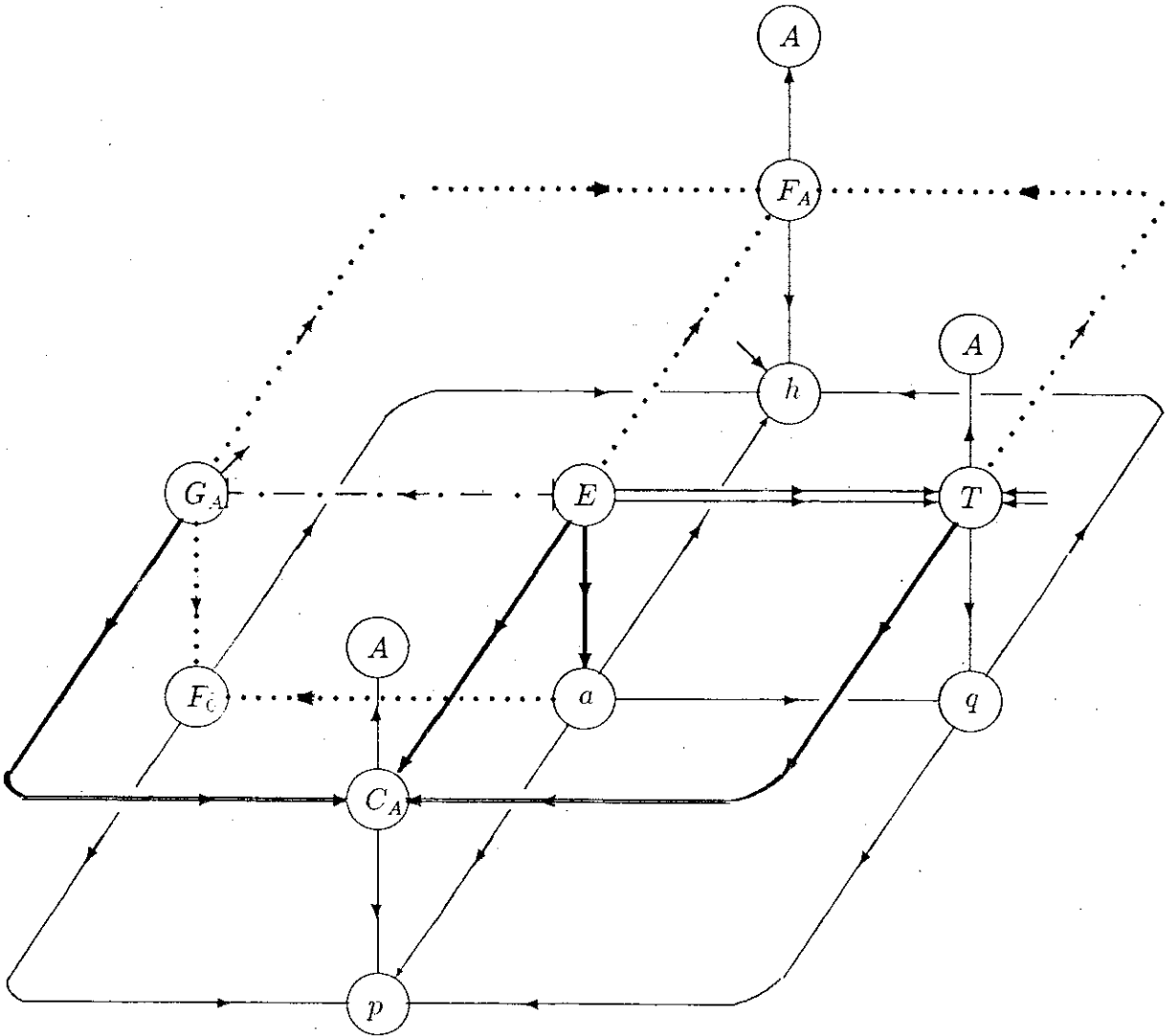


FIGURA 6.9: Diagrama esquemático da ligação global do conjunto de pontos fixos que determinam o diagrama da Fig. 6.8. As linhas contínuas grossas e as linhas de pontos correspondem a trajetórias de GR em superfícies de 2^{da} e 1^{ra} ordem respectivamente; a linha dupla contínua e a linha de traços e pontos correspondem as linhas tricrítica e de pontos críticos terminais respectivamente; as linhas contínuas finas não correspondem a transições de fases.

ET, isto é, o autovalor cujo autovetor é tangencial à linha ET satisfaz $\lambda < 1$. Este ponto possui também dois autovalores relevantes ($\lambda_T^{(1)} > \lambda_T^{(2)} > 1$), cujos autovetores associados são respetivamente transversal e tangencial à superfície de transição. Esta estrutura caracteriza a linha ET como uma linha tricrítica [33,82]. Os expoentes tricríticos estão dados por $\nu_t = \ln l / \ln \lambda_T^{(1)}$ e $\phi_t = \ln \lambda_T^{(2)} / \ln \lambda_T^{(1)}$. Os valores numéricos dos autovalores relevantes se mostram na tabela 6.3.

As duas superfícies de primeira ordem FMT e FE $\alpha\epsilon$, e a superfície de segunda ordem FTC juntam-se ao longo da linha FE, na qual as duas superfícies de primeira ordem tem a mesma derivada. A linha FE é governada pelo ponto fixo $(\mu, K, J) = (-\infty, -\infty, J_c^A)$, o qual denotamos por G_A . Este ponto fixo possui dois autovalores relevantes: um autovalor de primeira ordem $\lambda = l^d$, acoplado ao campo de escala μ e associado portanto a uma transição de primeira ordem, e um outro autovalor $\lambda = l^{\nu_A}$ o qual associa-se a uma transição de segunda ordem com as mesmas características que C_A . O ponto fixo G_A é instável na direção que o liga com C_A (ver Fig. 6.9) com $\lambda = l^d$, e instável na direção que o liga com F_0 e F_A , com $\lambda = l^{\nu_A}$. Esta estrutura caracteriza o comportamento de pontos críticos terminais, e assim FE resulta uma linha *crítica terminal* (feita de pontos críticos terminais). A linha tricrítica ET, a linha crítica αE e a linha crítica terminal FE juntam-se no ponto fixo E. Este ponto possui três autovalores relevantes ($\lambda_E^{(1)} > \lambda_E^{(2)} > \lambda_E^{(3)} > 1$), sendo assim um ponto multicrítico. No modelo BEG clássico existe um ponto fixo análogo [66], sendo neste caso um ponto tricrítico especial associado à transição do modelo de Potts de três estados [112]. No caso do ponto fixo E, ele está provavelmente relacionado a algum tipo de análogo quântico do modelo de três estados. A mesma

interpretação aplica-se ao ponto fixo análogo achado no modelo JKU na subseção 4.1.3.

A superfície de transição entre as fases paramagnéticas (Pb e Pe) e a fase antiferromagnética (incluindo tanto as superfícies de primeira e segunda ordem, assim como a linha tricrítica) estendem-se à região $K > 0$ do espaço de parâmetros. Embaixo desta superfície temos, para $\mu > 0$, uma superfície de transição de segunda ordem entre as fases Pb e ODC (esta última encerrada pela superfície de segunda ordem); esta superfície é análoga à encontrada na seção 6.2 (ver Fig. 6.3) e esta governada pelo ponto fixo b . Na Fig. 6.10 mostramos alguns cortes do diagrama de fases para $J > 0$ e $K = \text{constante}$, para valores típicos de K .

O diagrama de fases para $t = 0$ e $J < 0$ mostra qualitativamente a mesma estrutura do que o diagrama para $J > 0$ descrito acima, onde neste caso a fase AF é substituída por uma fase ferromagnética (F). Por cada ponto fixo para $J > 0$, existe um ponto análogo para $J < 0$; a localização e as características gerais destes pontos fixos são listadas na tabela 6.4. A ligação global entre os diferentes pontos fixos é a mesma que se mostra para o conjunto correspondente de pontos fixos para $J > 0$ na Fig. 6.9.

6.3.2 Diagrama de fases para $t \neq 0$

Como já mencionamos, os pontos fixos do caso $t = 0$ (modelo $JK\mu$) determinam o diagrama de fases completo do modelo tJ generalizado em $d = 3$. Assim, as superfícies de primeira e segunda ordem analisadas na subseção anterior viram, no espaço completo (μ, K, J, t) , hipersuperfícies tridimensionais, em tanto que as linhas tricríticas e as linhas

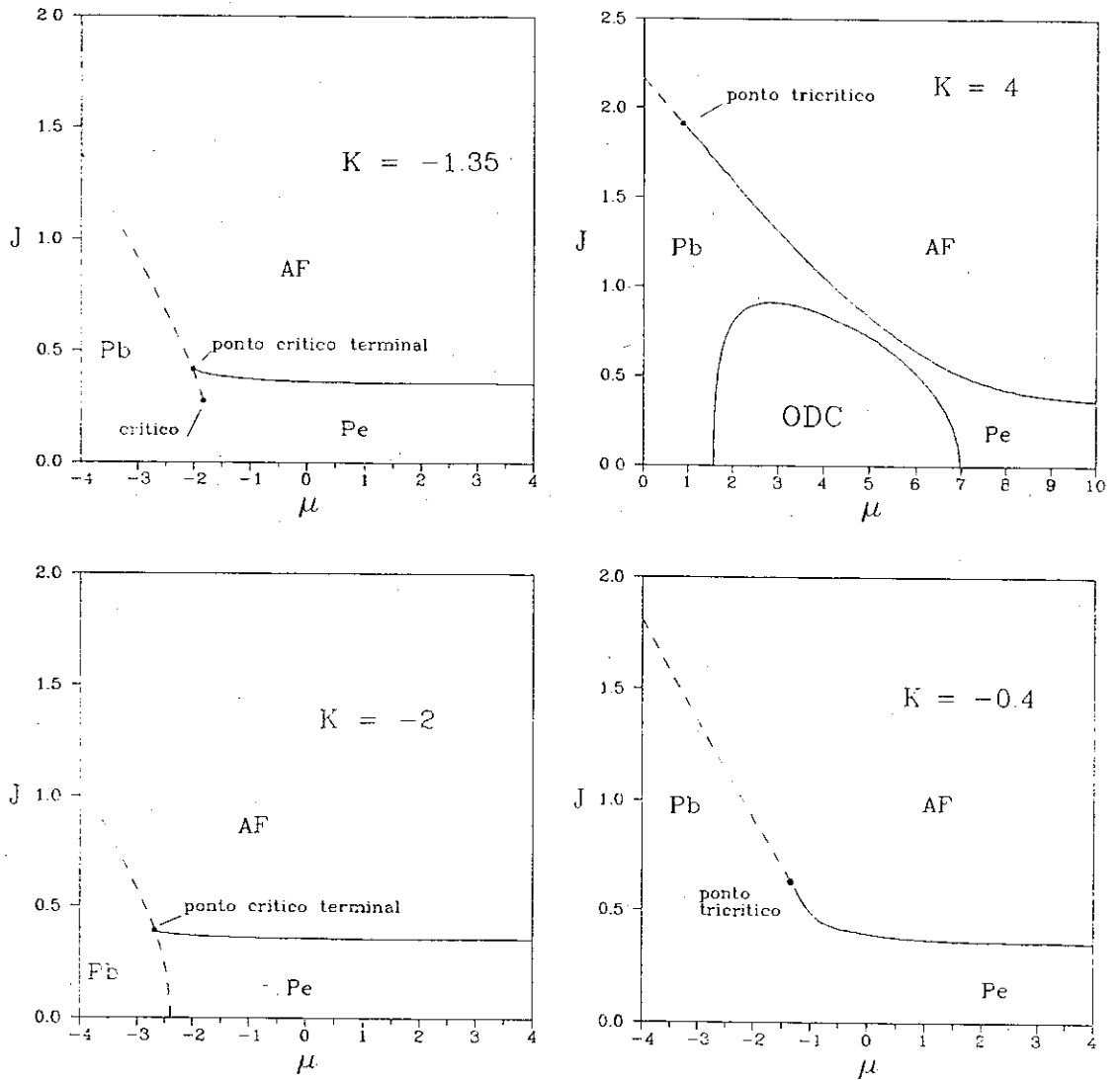


FIGURA 6.10: Cortes típicos do diagrama de fases do modelo $JK\mu$ em $d = 3$, para $J > 0$ e $K = \text{constante}$. As linhas de traços e contínuas correspondem a transições de 1^{ra} e 2^{da} ordem respetivamente.

Ponto fixo	Localização (μ, K, J)	Estabilidade	Bacia de atração no espaço (μ, K, J, t)	Autovalores relevantes
F	$(+\infty, +\infty, -\infty)$	estável	fase F	—
C_F	$(+\infty, K_c^F, J_c^F)$	instável	hypersuperfície de 2 ^{da} ordem entre Pe e F	$\lambda_F \approx 2.03$
F_F	$(-\infty, -\infty, -\infty)$	instável	hypersuperfície de 1 ^{ra} ordem entre Pb e F	$\lambda = l^d = 27$
G_F	$(-\infty, -\infty, J_c^F)$	duplamente instável	superfície crítica terminal	$\lambda_F, \lambda = l^d$
T	$(-1.54, -0.36, -1.15)$	duplamente instável	superfície tricrítica	$\lambda_T^{(1)} \approx 15.41$ $\lambda_T^{(2)} \approx 2.18$
E	$(-1.76, -1.10, -0.58)$	triplemente instável	linha multicrítica especial	$\lambda_E^{(1)} \approx 16.87$ $\lambda_E^{(2)} \approx 2.96$ $\lambda_E^{(3)} \approx 1.38$

TABELA 6.4: Classificação, localização e autovalores relevantes dos pontos fixos para o modelo $JK\mu$ para $J < 0$, em $d = 3$. Estes pontos fixos, junto com os mostrados na tabela 6.2 determinam completamente o diagrama de fases do modelo tJ generalizado em $d = 3$ para $J < 0$; F corresponde a ferromagnética.

críticas terminais viram hipersuperfícies bidimensionais. Os pontos multicríticos especiais achados para $t = 0$ geram linhas multicríticas isoladas, as quais localizam-se nas fronteiras entre as superfícies tricríticas e críticas terminais. Vamos a analisar agora alguns casos particulares. Na Fig. 6.11 mostramos alguns cortes típicos do diagrama de fases para $K = 0$, $J > 0$ e $t = \text{constante}$. Para $K = 0$ a transformação entre as fases Pb e Pe é suave (isto é, sem transição de fases) em quasi tudo o espaço de parâmetros, exeto numa superfície estreita de primeira ordem para $t \gtrsim 3$; esta superfície localiza-se muito perto da superfície de segunda ordem entre Pe e AF. Para valores grandes de t , e valores pequenos de $J > 0$ vemos a aparição de uma fase ferromagnética (F), isto é, uma região do espaço de parâmetros governada pelo atrator F (ver tabela 6.4). Esta região encontra-se encerrada por uma superfície de segunda ordem, que a separa da fase Pe. A presença da fase F para $J > 0$ pode interpretar-se melhor em termos das variáveis $(\mu/t, J/t, 1/t)$. Na Fig. 6.12 apresentamos alguns diagramas de fases típicos para diversos valores de $J/t = \text{constante}$ e $K = 0$. Da Fig. 6.12c vemos que a fase F aparece a baixas temperaturas, para valores pequenos de J/t , precisamente onde se espera que o modelo tJ apresente um comportamento semelhante ao do modelo de Hubbard (ainda para $K = 0$), para valores grandes de U/t . Como já mencionamos na subsecção 2.3 o teorema de Nagaoka [27,28] mostra que um buraco no modelo de Hubbard com banda semi-cheia e U/t grande, cria um entorno ferromagnético, as vezes chamado de *polaron ferromagnético*. Baseado nestas ideias e em diversos métodos aproximados, tal como Hartree-Fock [15], ascreta-se que o modelo de Hubbard possui um estado fundamental ferromagnético para concentrações finitas de buracos. Ainda mais, diversas aproximações indicam a presença

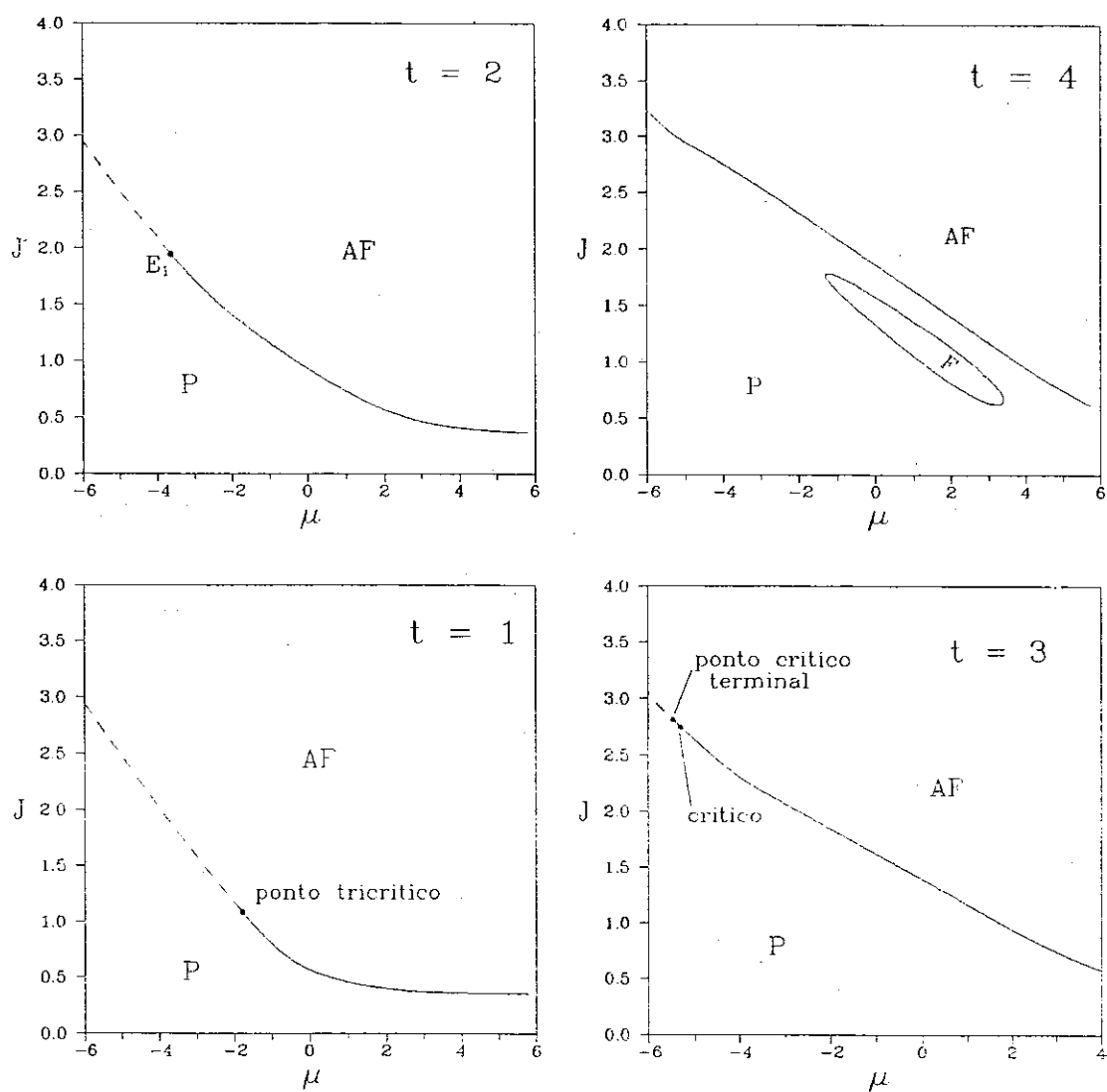


FIGURA 6.11: Cortes típicos do diagrama de fases do modelo tJ ($K = 0$) em $d = 3$, para $t = \text{constante}$. As linhas de traços e contínuas correspondem a transições de 1^{ra} e 2^{da} ordem respectivamente. E_1 é um ponto multicrítico especial. Para $t = 3$ a linha de 1^{ra} ordem entre P_b e P_e , e a linha de 2^{da} ordem localizam-se muito perto para ser resolvidas na escala utilizada; P corresponde a paramagnética (P_e ou P_b).

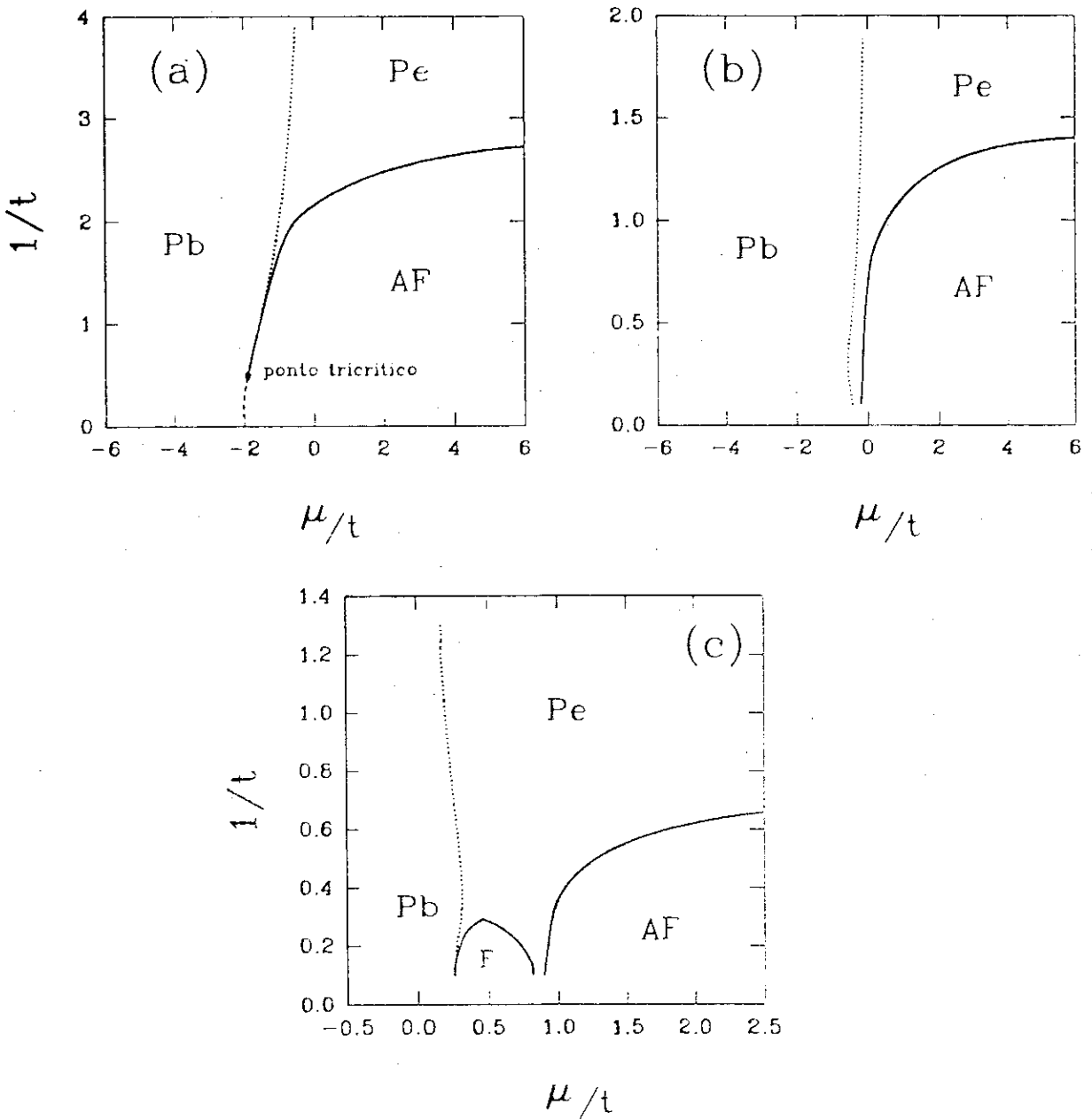


FIGURA 6.12: Diagrama de fases do modelo tJ ($K=0$) em $d=3$, para $J/t = \text{constante}$. As linhas de traços e contínuas correspondem a transições de 1^{ra} e 2^{da} ordem respectivamente; as linhas de pontos correspondem a mudanças rápidas, mas suaves, da densidade ρ , e não descrevem transições de fases. (a) $J/t = 1$; (b) $J/t = 0.5$; (c) $J/t = 0.25$.

de uma transição a uma fase F a temperatura finita [17,113,114]. Assim, a presença da fase F no modelo tJ pode interpretar-se em termos de polarons ferromagnéticos. A fase F desaparece ao aumentar J/t . Como veremos no capítulo 7, a fase F no modelo de Hubbard também desaparece para valores pequenos de U/t .

Da Fig. 6.12 podemos tirar algumas conclusões de interesse em relação aos supercondutores de alta T_c . Notamos primeiro que para todo valor de J/t o sistema encontra-se ordenado antiferromagneticamente a baixas temperaturas, para baixas concentrações de buracos (isto é, para valores grandes de μ). Ao aumentar a concentração de buracos (isto é, diminuindo μ) a ordem AF desaparece. De fato a dopagem com buracos destrói rapidamente o estado de Néel nos compostos de La e Y [90,106,107,115,116]. Em geral a transição da fase AF a uma fase paramagnética é de segunda ordem, exceto para valores grandes de J/t , onde a baixas temperaturas a transição passa a ser de primeira ordem. Assim, ao igual que no caso $d = 2$ (ver seção 6.2), o modelo tridimensional apresenta separação de fases, mas neste caso a fase rica em elétrons encontra-se ordenada antiferromagneticamente (ver discussão na pag. 98). Outro fato interessante é que o modelo apresenta comportamento tricrítico na região que separa as transições de primeira e segunda ordem. De fato, certas anomalias nos tempos de relaxação de NQR nos compostos de La [106] poderiam ser indicativas de comportamento tricrítico. Vemos também que, para valores de $J/t \sim 0.1 - 1$ (valores que são da ordem de grandeza dos valores medidos nos compostos cerâmicos), o passo da fase paramagnética isolante (Pe) à fase condutora (Pb) é sempre suave, isto é, sem uma real transição de fases a temperatura finita.

Finalmente consideramos brevemente algumas características do diagrama de fases

para $J < 0$. Na Fig. 6.13 mostramos dois cortes típicos do diagrama de fases para $K = 0$ e $t = \text{constante}$. Para valores pequenos de t a estrutura geral do diagrama de fases é muito semelhante à do caso $J > 0$, onde a fase AF é substituída pela fase F. Porém, ao aumentar t a semelhança desaparece. Vemos da Fig. 6.13 que, para valores pequenos de $|J|$, as interações magnéticas induzem uma fase ODC, separada da fase Pb por uma transição de segunda ordem (comparar a Fig. 6.13 com a Fig. 6.11).

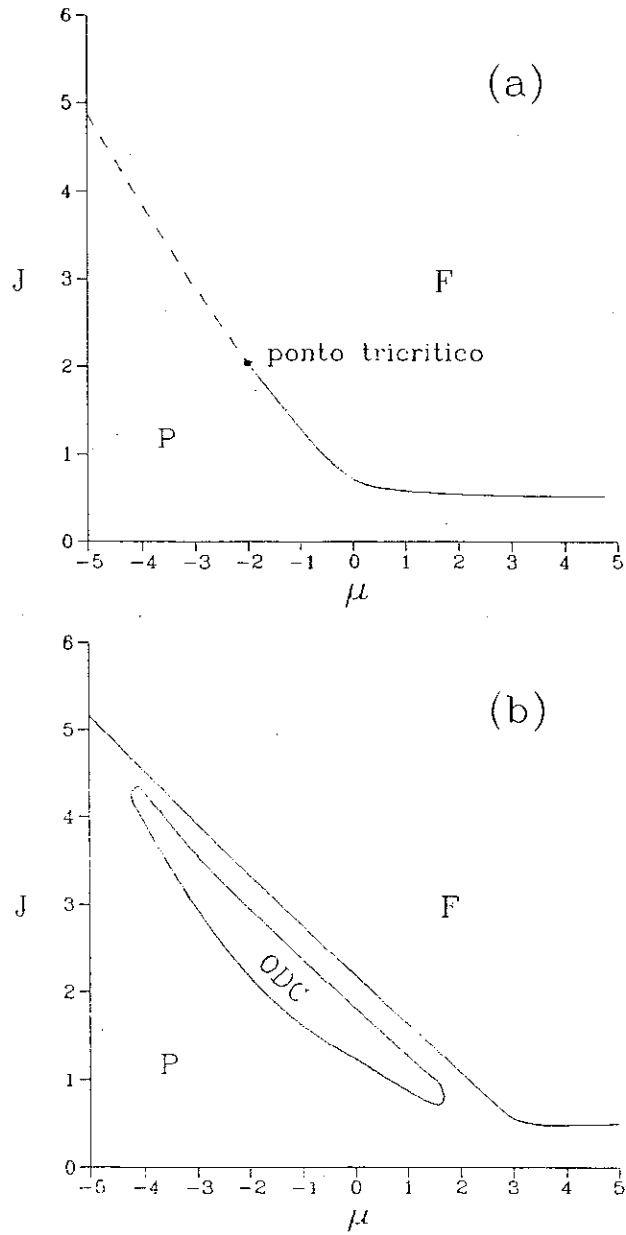


FIGURA 6.13: Diagrama de fases do modelo tJ ($K = 0$) em $d = 3$, para $J < 0$ e $t =$ constante; P corresponde a paramagnética (Pe ou Pb). (a) $t = 1$; (b) $t = 3$.

Capítulo 7

Diagrama de fases do modelo de Hubbard com ocupação arbitraria da banda

Neste capítulo calculamos o diagrama de fases do modelo de Hubbard com banda não semi-cheia (2.17) [117], para $U > 0$ e $0 < \rho \leq 1$, isto é, para $\tilde{\mu} \leq 0$, onde $\tilde{\mu}$ é dado pela Eq. (2.34) ($\tilde{\mu} = 0$ corresponde ao caso da banda semi-cheia analisado na seção 4.3). Como vimos na subseção 2.2.2 o caso $\rho > 1$ pode obter-se simplesmente da transformação partícula-buraco. O Hamiltoniano (2.17) não é invariante sob GR, e por tanto devemos analisar neste caso o fluxo do Hamiltoniano de Hubbard generalizado (3.26). Assim, vamos a apresentar aqui o corte $K = J = I = Y = R = D = E = 0$ do diagrama de fases no espaço $(\tilde{\mu}, K, J, U, I, Y, R, t, D, E)$ associado ao Hamiltoniano \mathcal{H}_G^μ (isto é, o diagrama no espaço $(\tilde{\mu}, U, t)$).

Ao analisar o fluxo dos pontos pertencentes ao espaço $(\tilde{\mu}, U, t)$, notamos que todos eles são levados, após umas poucas iterações do GR, na região $U \rightarrow \infty$, em tanto que $\mu = \tilde{\mu} + U/2$, assim como os parâmetros K, J, I, Y, R, t, D e E , mantem-se finitos. Como

vimos na seção 5.3, neste limite qualquer estado do espaço de configurações que possui pelo menos um sítio com dupla ocupação (isto é, que satisfaz $n_{i,↑}n_{i,↓} = 1$) não contribui à energia. Assim, no limite $U \rightarrow \infty$ obtemos que: (i) os únicos processos de hopping que contribuem são aqueles que ligam sítios com ocupação simples ou nula; (ii) os operadores de carga não diagonais ρ_i^x, ρ_i^y não contribuem. Pode verificar-se que estas duas condições dão como resultado, sob as iterações de GR,

$$D = E = -t \quad (7.1)$$

$$I = -Y \quad (7.2)$$

Assim, aplicando as condições (7.1) e (7.2), e utilizando as Eqs. (5.3) e (5.4) ao Hamiltoniano (3.26) no limite $U \rightarrow \infty$ (com μ finito) achamos que o fluxo de GR para o modelo de Hubbard é governado pelo seguinte Hamiltoniano efetivo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \approx & t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) (1 - n_{j,-\sigma}) \\ & - J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \bar{K} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \bar{\mu} \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \end{aligned} \quad (7.3)$$

onde, para as redes hierárquicas que estamos utilizando, temos que

$$\bar{K} \equiv K + 2R + I \quad (7.4)$$

$$\bar{\mu} \equiv 2I + 4R + \mu \quad (7.5)$$

O Hamiltoniano (7.3) é um Hamiltoniano tJ generalizado da forma (5.5). Conseqüentemente, todas as propriedades críticas do modelo de Hubbard estão determinadas pelo fluxo de GR no espaço de parâmetros $(\bar{\mu}, \bar{K}, J, t)$. O procedimento consiste então em

estudar a qual parte do espaço $(\bar{\mu}, \bar{K}, J, t)$ são levados os pontos localizados inicialmente no espaço $(\tilde{\mu}, U, t)$. Utilizando então os resultados do capítulo 6 obtivemos o diagrama de fases (no que segue assumimos a notação utilizada nesse capítulo para os pontos fixos, mas aplicada ao espaço $(\bar{\mu}, \bar{K}, J, t)$). Ao igual que no caso do modelo tJ (Cap. 6) não esperamos que o diagrama de fases do modelo de Hubbard em $d = 1$ apresente nenhuma característica de maior interesse e concentramos a nossa atenção nos casos $d = 2$ e $d = 3$, os quais são de grande interesse físico.

7.1 Diagrama de fases para $d = 2$

Em $d = 2$ não existe ordem magnética de longo alcance. A maior parte do espaço $(\tilde{\mu}, U, t)$ esta governado pelos pontos fixos p e h (ver seção 6.2). Porém, a fronteira entre as respectivas bacias de atração esta governada somente pelo ponto fixo q . Assim, ainda que temos a presença de dois regimes diferentes P_b e P_e , não podemos falar de uma autêntica transição de fases entre estes dois regimes; de fato os dois descrevem neste caso uma única fase paramagnética (P). Atravessar a fronteira acima mencionada equivale a uma mudança rápida, mas suave, na densidade eletrônica ρ . Nos conferimos um amplo intervalo de valores de U/t sem achar evidências de uma transição de fases. Este resultado já tinha sido achado na seção 6.2 para U/t grande, isto é, para o modelo tJ com J/t pequeno. Vemos que os nossos resultados sugerem que o modelo de Hubbard em $d = 2$ não apresenta separação de fases para nenhum valor de U/t . Calculos de Monte Carlo [111] apoiam esta suposição.

7.2 Diagrama de fases para $d = 3$

Em $d = 3$ achamos, além da fase paramagnética (Pb ou Pe) descrita na seção anterior, duas fases com ordem magnética: uma antiferromagnética (AF) e uma outra ferromagnética (F), governadas respetivamente pelos pontos fixos A e F (ver seção 6.3). Cada uma destas fases sofre uma transição de segunda ordem à fase paramagnética (de fato à região Pe) a temperatura finita. As superfícies críticas AF-P e F-P estão governadas pelos pontos fixos C_A e C_F respetivamente, pertencendo por tanto à classe de universalidade do modelo de Heisenberg isotrópico (ver subseção 4.1.2). A diferença do modelo tJ (ver seção 6.3), em que as transições AF-P e F-P podiam ser de primeira ordem (sendo neste caso à região Pb), não encontramos evidências da existência deste tipo de transições no modelo de Hubbard em toda a região do espaço dos parâmetros estudada. Ao igual que no caso $d = 2$, também não achamos evidências de transições de fases de nenhum tipo entre os regímenes Pb e Pe em $d = 3$.

Na Fig. 7.1 mostramos o diagrama de fases calculado no espaço $(\tilde{\mu}/t, U/t)$ para valores típicos da temperatura $1/t = \text{constante}$; na Fig. 7.2 mostramos o diagrama de fases no espaço $(\tilde{\mu}/t, 1/t)$ para valores típicos de $U/t = \text{constante}$. Apesar de que, falando rigorosamente, não existe transição AF-Pb (ou F-Pb), estas duas fases podem estar localizadas muito perto (ver figuras 7.1 e 7.2). Assim, vemos que as transições AF-P e F-P podem ser seguidas de um decrescimento muito rápido na densidade eletrónica ρ .

Vemos que a fase F somente existe para valores grandes de U/t (comparar a Fig. 7.2b com a Fig. 6.12c); assim, da Fig. 7.1a vemos que, a baixas temperaturas, a fase F desa-

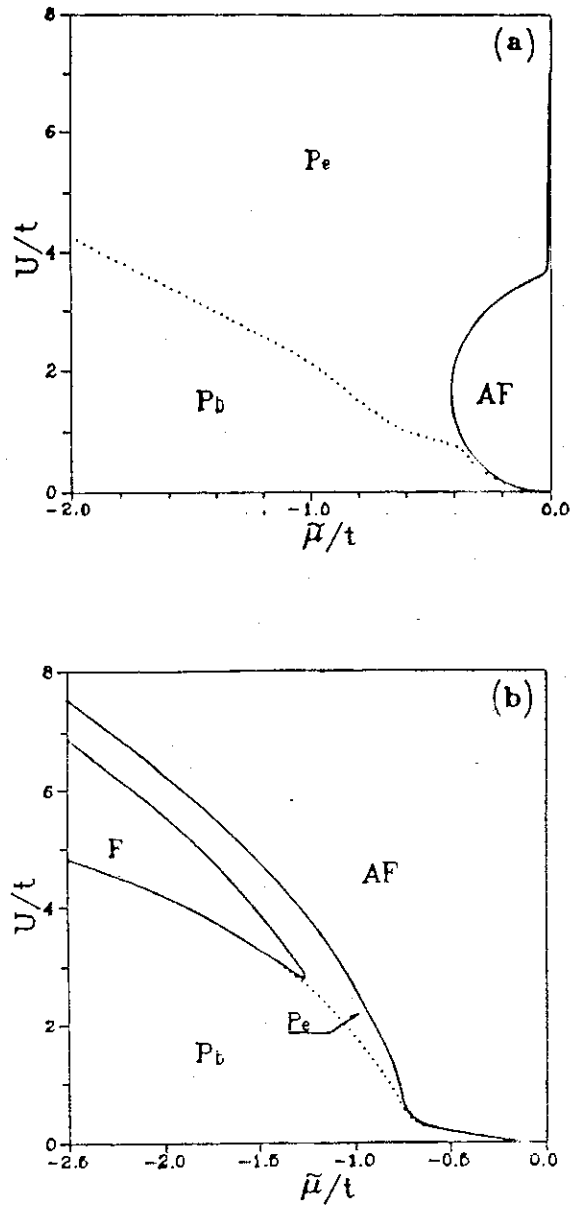


FIGURA 7.1: Diagrama de fases do modelo de Hubbard em $d = 3$ para $1/t = \text{constante}$. As linhas contínuas correspondem a transições de segunda ordem; as linhas de pontos correspondem a uma transformação suave entre as regiões P_b e P_e . (a) $1/t = 0.5$; (b) $1/t = 0.25$.

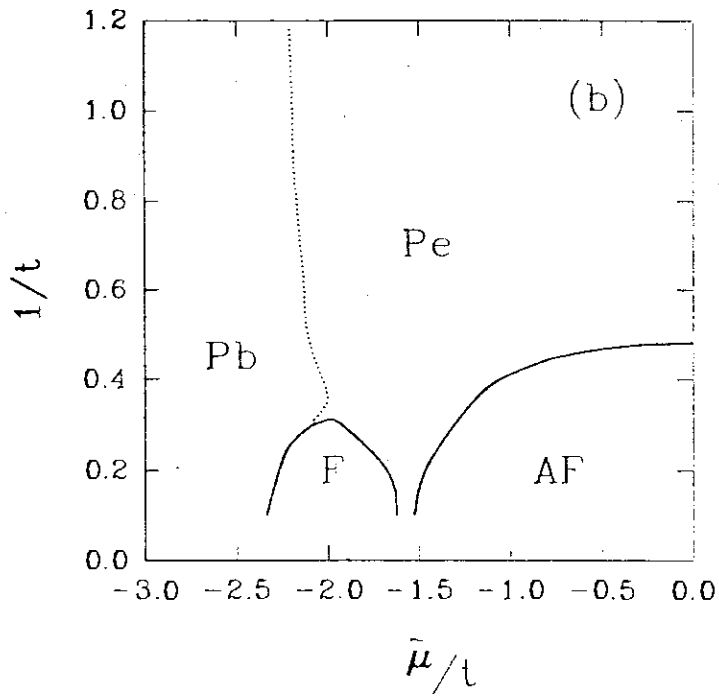
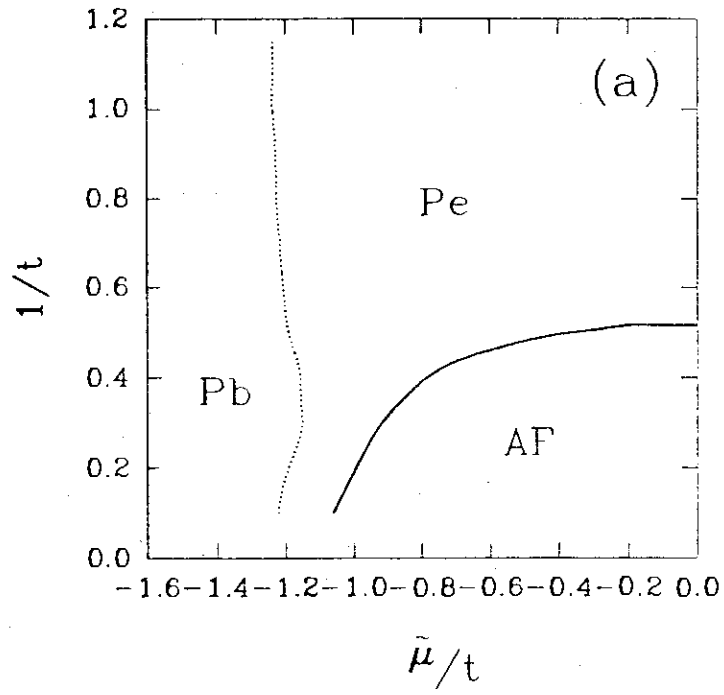


FIGURA 7.2: Diagrama de fases do modelo de Hubbard em $d = 3$ para $U/t = \text{constante}$.

(a) $U/t = 2.5$; (b) $U/t = 4.5$.

parece para valores relativamente baixos de U/t ($U/t \sim 2$). Este resultado concordaria com a interpretação do ferromagnetismo no modelo de Hubbard em termos de polarons ferrromagnéticos. Consistentemente, o diagrama de fases a temperatura zero que se obtém por métodos autoconsistentes, tais como SDA (“spectral density approach”) [17], apresenta um valor crítico de U/t por embaixo do qual não existe ferromagnetismo.

Outro fato interessante dos nossos resultados a baixas temperaturas (ver Fig. 7.1a), é a presença de uma região paramagnética (Pe) entre as fases F e AF. Temos, por uma parte, que o diagrama de fases a temperatura zero obtido por métodos autoconsistentes [15,17] não mostra evidência da existência desta região. Ainda que não podemos excluir a possibilidade de que esta região se encolha até sumir para $1/t \rightarrow 0$, achamos difícil seja este o caso. Como já mencionamos anteriormente, o erro numérico não nos permite analisar adequadamente o limite $1/t \rightarrow 0$. Por outra parte, as características do ponto fixo que governa a fase Pe ($U = +\infty, \bar{\mu} = +\infty$) indicam um alto grau de localização dos elétrons nesta região. Assim, a presença da região paramagnética poderia se dever a existência de momentos locais desordenados no estado fundamental. De fato, resultados obtidos por outros métodos aproximados [55] apoiam esta hipótese.

Capítulo 8

Conclusões

Apresentamos aqui um resumo dos resultados e das conclusões gerais mais importantes deste trabalho.

Em termos gerais, nós temos analisado as propriedades críticas a temperatura finita de um Hamiltoniano de Hubbard generalizado (HG). No capítulo 3 este Hamiltoniano foi construído no contexto do grupo de renormalização (GR) no espaço real que substitui as redes de Bravais por redes hierárquicas do tipo diamante, e ele resulta invariante sob GR. Mediante uma análise das simetrias preservadas pelo traço parcial que define o GR, mostramos uma classificação dos diversos Hamiltonianos invariantes sob GR contidos como casos particulares no HG. Além do interesse intrínseco destes Hamiltonianos menores, eles têm associados subespaços invariantes sob GR do espaço total de parâmetros associado ao HG, o que resulta de grande utilidade na análise do fluxo das equações de recorrência do GR. Dada a grande variedade de modelos particulares contidos no HG (não necessariamente invariantes sob GR), o uso da técnica de GR (a qual, para modelos de fermions associados ao modelo de Hubbard leva necessariamente ao HG) se apresenta

como uma ferramenta poderosa no estudo de propriedades críticas a temperatura finita neste tipo de modelos, tal como mostram os resultados obtidos nos casos particulares aqui analisados.

Dentre as vantagens do método podemos destacar principalmente dois:

- i) A não proliferação de interações, o que permite o uso de equações de recorrência fechadas.
- ii) O tratamento numérico acessível a partir da aproximação que resulta de desprezar a não commutação de operadores associados com diferentes clusters; isto permitiu o cálculo dos diagramas de fases a temperatura finita de modelos altamente complexos (tais como o modelo de Hubbard e o modelo tJ) os quais, em varios casos, não tinham sido calculados por nenhum método até o presente.

Das limitações achadas do método podemos mencionar dois:

- i) Manifestações do carater fractal da rede. A aparição de ciclos limites no fluxo de renormalização, associados (acreditamos) com degeneressências no estado fundamental, derivadas da estrutura fractal da rede, limitam a aplicabilidade dos resultados a sistemas em redes de Bravais, para certos casos particulares (ver seções 4.3 e 4.4). Isto porém, poderia ter um interesse intrínseco em relação tanto à compreensão da propria técnica de GR, como ao estudo das propriedades de modelos tight-binding definidos em redes fractais.
- ii) Limitações da aproximação de altas temperaturas. A baixas temperaturas podem aparecer efeitos espúrios, tal como o deslocamento de atratores a temperatu-

ras finitas (ver subseção 4.1.2), os quais porém, não parecem afetar (pelo menos qualitativamente) a estrutura geral do diagrama de fases. Isto, por outra parte, limita a análise do limite de temperatura zero, além de certos problemas de cálculo numéricos neste limite. Porém, os resultados (tanto os obtidos neste trabalho como os obtidos por outros autores) mostram que em muitos casos a técnica funciona muito bem ainda para temperaturas relativamente baixas, permitindo assim a extrapolação a temperatura zero.

No capítulo 4 calculamos o diagrama de fases a temperatura finita associado ao HG no caso mais geral de banda semi-cheia. Especial atenção foi dedicada aos casos particulares correspondentes aos modelos quânticos JKU (seção 4.1) e IKU (seção 4.2). Já que nós achamos que os Hamiltonianos associados governam o comportamento crítico de grande parte do espaço de parâmetros associado com o HG no caso de banda semi-cheia. Nós mostramos como o modelo IKU pode derivar-se do modelo JKU mediante uma transformação unitária. Assim, a análise numérica concentrou-se principalmente neste último modelo.

O diagrama de fases do modelo JKU (o qual não fôra calculado com anterioridade) foi calculado para $d = 2$ e $d = 3$. Diferentes tipos de comportamentos críticos de interesse foram achados, incluindo transições de primeira e segunda ordem, comportamentos tricríticos e pontos críticos terminais. A análise dos diferentes expoentes críticos do modelo JKU para dimensionalidades altas ($d \geq 3$) mostram certas diferenças de comportamento respeito dos sistemas em redes de Bravais, ainda que certas características de

universalidade nas redes hierárquicas foram achadas.

Na seção 4.3 calculamos o diagrama de fases do modelo de Hubbard usual com banda semi-cheia para diferentes dimensionalidades. A conclusão geral mais importante que podemos extrair dos nossos resultados é a *ausência de transição de Mott para todo valor de $U \neq 0$, para qualquer dimensionalidade d* . Em $d = 1$ este resultado é consistente com a solução exata já conhecida do modelo, em tanto que em $d = 2$ e $d = 3$ ele é consistente com resultados obtidos por outros métodos aproximados. Para $d > 1$ os nossos resultados mostram também que o fluxo de GR, para $U > 0$, é sempre governado pelo Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico antiferromagnético, o que indicaria um estado fundamental antiferromagnético. Este resultado, por outra parte, é consistente com a solução perturbativa do modelo para $U/t \rightarrow \infty$. Consistentemente, para $d = 3$ (e em geral para $d \geq d_c \approx 2.41$) achamos (para $U > 0$), uma linha de transição de segunda ordem para-antiferro a temperatura finita, na classe de universalidade do modelo de Heisenberg. Neste caso, para $U = 0$ temos a presença dos ciclos limite já mencionados no fluxo de GR. Este comportamento apresenta-se como anômalo respeito do que se espera nas redes de Bravais; nos conjecturamos que ele associa-se à estrutura fractal das redes utilizadas.

Na seção 4.4 calculamos o diagrama de fases do modelo de Hubbard com banda semi-cheia e interações biquadráticas entre primeiros vizinhos para $d = 2$ e $d = 3$, o qual não fôra calculado com anterioridade. Achamos que a competição entre a interação eletrônica no sítio e a interação entre primeiros vizinhos gera uma variedade de efeitos novos de interesse, tais como a presença de uma fase isolante com ordem de carga

dimerizada (IPCD) e transições metal-isolante contínuas e descontínuas, tanto em $d = 2$ como em $d = 3$. Em $d = 3$ tal vez a característica mais relevante é a presença de uma fase supercondutora (degenerada com uma fase de ondas de densidade de carga) para *interações repulsivas*.

No capítulo 5 derivamos um modelo tJ generalizado como limite do HG. Nos mostramos como este Hamiltoniano resulta invariante sob GR.

No capítulo 6 calculamos o diagrama de fases completo a temperatura finita do modelo tJ generalizado para $d = 2$ e $d = 3$, o qual não tinha sido calculado com anterioridade.

Em $d = 2$ (seção 6.2), além do interesse intrínseco do diagrama de fases em geral, o resultado mais importante é a existência de um valor crítico de J/t (dependente do parâmetro de interação de cargas K) por embaixo do qual o modelo tJ *não apresenta transições de primeira ordem* entre as fases rica em buracos (Pb) e rica em elétrons (Pe). Este resultado contradiz os resultados obtidos a temperatura zero por outros autores mediante diagonalização exata de clusters finitos, mas concorda com cálculos de Monte Carlo a temperatura finita. Outro resultado interessante é a presença de uma fase de ondas de densidade de carga para interações de cargas repulsivas $K > 0$ (isto tanto em $d = 2$ como em $d = 3$).

Em $d = 3$ (seção 6.3) o diagrama de fases do modelo tJ generalizado mostra uma estrutura muito rica e complexa, incluindo transições de primeira e segunda ordem, assim como diferentes tipos de comportamento multicrítico. Nossos resultados sugerem que, pelo menos no que às propriedades magnéticas se refere, o modelo tJ tridimensional pode fornecer uma descrição adequada dos diagramas de fases dos compostos cerâmicos su-

percondutores em geral. Vimos que este diagrama de fases (para valores de J/t da ordem dos valores medidos nos compostos supercondutores) apresenta muitas das características gerais conhecidas de ditos compostos, tais como transições de segunda ordem (na classe de universalidade do modelo de Heisenberg isotrópico) da fase isolante antiferro (AF) à fase paramagnética isolante (Pe), e transições de primeira ordem à fase paramagnética condutora (Pb), ao modificar a concentração de buracos. Vimos também que todas estas propriedades podem modificar-se com a presença de interações de carga entre primeiros vizinhos. É claro que este modelo resulta extremamente simplificado como para dar uma descrição numérica precisa desses materiais, mas muitas melhoras ao modelo poderiam implementar-se. Por exemplo, da Fig. 6.12 vemos que os nossos resultados predizem para o sistema não dopado (isto é, para $\mu \rightarrow \infty$) uma temperatura de transição $1/t \sim 1$, o que corresponde a uma temperatura de Néel $T_N \sim 10^5 K$ (assumindo uma largura de banda $\sim 1 eV$), a qual resulta extremamente alta ($T_N \sim 100 - 300 K$ nos compostos cerâmicos). Istos valores claramente resultam da aproximação de considerar um modelo isotrópico. Resulta razoável então esperar que um modelo tJ tridimensional com acoplamentos de troca altamente anisotrópicos, apresentaria a mesma fenomenologia que o modelo isotrópico, mas com temperaturas de Néel bem menores (podemos esperar que uma anisotropia da ordem de 10^{-3} , ver seção 5.2, reduza T_N até a ordem de $100 K$). Um resultado novo dos nossos cálculos (pelo menos até onde nos temos conhecimento) é a presença de *comportamento tricrítico* na região que separa as transições de primeira das de segunda ordem, o que poderia servir como possível teste experimental do modelo. Um outro resultado de interesse, é que a transição da região paramagnética isolante à região condutora

a altas temperaturas, ao variar a concentração de buracos, aparece como sendo suave, isto é, sem singularidades de nenhum tipo nas funções termodinâmicas.

No capítulo 7 apresentamos o diagrama de fases do modelo de Hubbard para ocupação arbitrária da banda (isto é, para valores arbitrários do potencial químico μ) em $d = 2$ e $d = 3$, para $U > 0$. Este é, até onde nos sabemos, o primeiro cálculo de GR deste diagrama de fases. Nos achamos que o comportamento crítico deste modelo é governado inteiramente por um modelo tJ generalizado efetivo. Os resultados obtidos para U/t grande (tanto em $d = 2$ como em $d = 3$) resultam consistentes com os obtidos para o modelo tJ com J/t pequeno, onde se espera que os dois modelos apresentem comportamentos semelhantes. A ausência de transições de fases para todo valor de U/t achada em $d = 2$ (seção 7.1) é consistente com resultados de Monte Carlo a temperatura finita obtidos por outros autores.

O diagrama de fases em $d = 3$ apresenta diversas características de interesse, dentre as quais podemos salientar, por exemplo, a presença de uma fase ferromagnética a baixas temperaturas para valores grandes de U/t . Vale a pena mencionar também que nossos resultados sugerem ausência de transições de primeira ordem para todo valor de U/t (isto é, todas as transições resultam de segunda ordem).

Finalmente, da comparação entre os resultados obtidos para o modelo de Hubbard e o modelo tJ, podemos concluir que este último modelo (com J/t grande) apresenta um diagrama de fases que, em termos gerais, fornece uma descrição muito mais completa e apropriada das propriedades magnéticas a temperatura finita dos materiais supercondutores de altas temperaturas.

Apêndice A

A transformação \mathcal{U}_ρ

Analisamos aqui algumas das propriedades da transformação \mathcal{U}_ρ introduzida na seção 2.2.3, no caso em que $\vec{q}_i = \vec{q}$ para todo sítio i , isto é

$$\mathcal{U}_\rho = \prod_i \exp(i\gamma_i \vec{q} \cdot \vec{\rho}_i) \quad (\text{A.1})$$

A.1 Caso $\vec{q} = \mathbf{z}$

Temos que $\vec{q} \cdot \vec{\rho}_i = \rho_i^z$. Para $\gamma_i = \gamma$ temos da definição (2.21) que

$$\mathcal{U}_\rho = e^{i\gamma \sum_i \rho_i^z} = e^{-i\gamma} e^{i\gamma N} \quad (\text{A.2})$$

Assim, a invariância sob \mathcal{U}_ρ neste caso é equivalente à conservação do número total de partículas.

No caso geral de parâmetros γ_i independentes, utilizando a expansão

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (\text{A.3})$$

achamos que os operadores $c_{i,\sigma}$ transformam-se como

$$\mathcal{U}_\rho c_{i,\sigma} \mathcal{U}_\rho^\dagger = e^{i\gamma_i} c_{i,\sigma} \quad (\text{A.4})$$

Assim, a transformação (A.1) neste caso é equivalente a uma mudança de fase nos estados de Wannier $\varphi_i(x) \rightarrow e^{i\gamma_i} \varphi_i(x)$.

A.2 Caso $\vec{q} = q_x \mathbf{x} + q_y \mathbf{y}$

Dado que \vec{q} é um vetor unitário temos que $q_x^2 + q_y^2 = 1$. Neste caso temos as seguintes propriedades de comutação

$$[\vec{q} \cdot \vec{\rho}_i, c_{i,\sigma}] = -s(q_x - i q_y) c_{i,-\sigma}^\dagger \quad (\text{A.5})$$

$$[\vec{q} \cdot \vec{\rho}_i, c_{i,\sigma}^\dagger] = s(q_x + i q_y) c_{i,-\sigma} \quad (\text{A.6})$$

onde $s = 1$ para $\sigma = \uparrow$ e $s = -1$ para $\sigma = \downarrow$. Das Eqs. (A.3), (A.5) e (A.6) obtemos as propriedades de transformação

$$\mathcal{U}_\rho c_{i,\sigma} \mathcal{U}_\rho^\dagger = c_{i,\sigma} \cos \gamma_i - i s (q_x - i q_y) c_{i,-\sigma}^\dagger \sin \gamma_i \quad (\text{A.7})$$

$$\mathcal{U}_\rho c_{i,\sigma}^\dagger \mathcal{U}_\rho^\dagger = c_{i,\sigma}^\dagger \cos \gamma_i + i s (q_x + i q_y) c_{i,-\sigma} \sin \gamma_i \quad (\text{A.8})$$

Para $q_x = 0$, $q_y = -1$ e $\gamma_i = \pi/2$ temos que

$$\mathcal{U}_\rho c_{i,\sigma} \mathcal{U}_\rho^\dagger = s c_{i,-\sigma} \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{U}_\rho c_{i,\sigma}^\dagger \mathcal{U}_\rho^\dagger = s c_{i,-\sigma}^\dagger$$

Exeto por um fator de fase dependente do spin, vemos que a transformação (A.9) é equivalente à transformação partícula-buraco (2.27).

A.3 Construção de invariantes

Analizamos agora a construção de operadores invariantes sob \mathcal{U}_ρ , nos casos correspondentes às simetrias (a), (c) e (d).

Consideramos primeiro o operador de dois sítios i, j mais geral bilinear nos operadores ρ_i^ν . A conservação do número total de partículas, isto é, a preservação da simetria (a), faz com que as únicas combinações possíveis sejam $\rho_i^z \rho_j^z$ e $(\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y)$. Definindo o operador

$$\mathcal{J} \equiv \vec{q} \cdot (\gamma_i \vec{\rho}_i + \gamma_j \vec{\rho}_j) \quad (\text{A.10})$$

com $\vec{q} = q_x \mathbf{x} + q_y \mathbf{y}$, das relações de comutação dos operadores $\vec{\rho}_i$

$$\vec{\rho}_i \times \vec{\rho}_i = 2i \vec{\rho}_i \quad (\text{A.11})$$

obtemos

$$[\rho_i^z \rho_j^z, \mathcal{J}] = 2i (q_x (\gamma_i \rho_i^y \rho_j^z + \gamma_j \rho_i^z \rho_j^y) - q_y (\gamma_i \rho_i^x \rho_j^z + \gamma_j \rho_i^z \rho_j^x)) \quad (\text{A.12})$$

$$[\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y, \mathcal{J}] = -2i (q_x (\gamma_i \rho_i^z \rho_j^y + \gamma_j \rho_i^y \rho_j^z) - q_y (\gamma_i \rho_i^z \rho_j^x + \gamma_j \rho_i^x \rho_j^z)) \quad (\text{A.13})$$

No caso da simetria (d), isto é, $\gamma_i = \gamma_j = \gamma$, vemos que

$$[\rho_i^z \rho_j^z, \mathcal{J}] = -[\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y, \mathcal{J}] \quad (\text{A.14})$$

Assim, a combinação de operadores que resulta invariante sob \mathcal{U}_ρ é $\vec{\rho}_i \cdot \vec{\rho}_j$, como era de se esperar, já que neste caso \mathcal{U}_ρ representa uma "rotação" no espaço de carga (espaço de estados com ocupação dupla e nula em todos os sítios).

No caso da simetria (**c**), isto é, $\gamma_i = -\gamma_j = \gamma$, vemos que

$$[\rho_i^z \rho_j^z, \mathcal{J}] = [\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y, \mathcal{J}] \quad (\text{A.15})$$

Assim, a combinação de operadores que resulta invariante sob \mathcal{U}_ρ neste caso é

$$\rho_i^z \rho_j^z - (\rho_i^x \rho_j^x + \rho_i^y \rho_j^y) \quad (\text{A.16})$$

Consideremos agora os operadores que não podem ser construídos somente em termos dos operadores \vec{S}_i e $\vec{\rho}_i$, aos quais chamaremos em geral termos de hopping. Temos somente três operadores de hopping possíveis (hermíticos) :

$$h_1 = \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}) \quad (\text{A.17})$$

$$h_2 = \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}) (n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}) \quad (\text{A.18})$$

$$h_3 = \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}) n_{i,-\sigma} n_{j,-\sigma} \quad (\text{A.19})$$

Verificam-se as seguintes propriedades de comutação:

$$[h_1, \mathcal{J}] = (\gamma_i + \gamma_j) \left((q_x - i q_y) (c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{j,\uparrow}^{\dagger} + c_{j,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow}^{\dagger}) + (q_x + i q_y) (c_{i,\downarrow} c_{j,\downarrow} + c_{j,\downarrow} c_{i,\downarrow}) \right) \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} [h_2, \mathcal{J}] = & [h_1, \mathcal{J}] + (\gamma_i - \gamma_j) \left\{ (q_x - i q_y) (c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{j,\downarrow}^{\dagger} (n_{j,\uparrow} - n_{i,\downarrow}) + c_{j,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}^{\dagger} (n_{j,\downarrow} - n_{i,\uparrow})) \right. \\ & \left. + (q_x + i q_y) (c_{i,\downarrow} c_{j,\uparrow} (n_{j,\downarrow} - n_{i,\uparrow}) + c_{j,\downarrow} c_{i,\uparrow} (n_{j,\uparrow} - n_{i,\downarrow})) \right\} \quad (\text{A.21}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [h_3, \mathcal{J}] = & (\gamma_i + \gamma_j) \left\{ (q_x + i q_y) (c_{i,\downarrow} c_{j,\uparrow} n_{i,\uparrow} n_{j,\downarrow} + c_{j,\downarrow} c_{i,\uparrow} n_{j,\uparrow} n_{i,\downarrow}) \right. \\ & \left. - (q_x - i q_y) (c_{j,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}^{\dagger} n_{i,\uparrow} n_{j,\downarrow} + c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{j,\downarrow}^{\dagger} n_{j,\uparrow} n_{i,\downarrow}) \right\} \\ & + (q_x + i q_y) (c_{j,\uparrow} c_{i,\downarrow} (\gamma_j n_{i,\uparrow} + \gamma_i n_{j,\downarrow}) + c_{i,\uparrow} c_{j,\downarrow} (\gamma_j n_{i,\downarrow} + \gamma_i n_{j,\uparrow})) \\ & + (q_x - i q_y) (c_{j,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow}^{\dagger} (\gamma_j n_{i,\uparrow} + \gamma_i n_{j,\downarrow}) + c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{j,\uparrow}^{\dagger} (\gamma_j n_{i,\downarrow} + \gamma_i n_{j,\uparrow})) \quad (\text{A.22}) \end{aligned}$$

No caso da simetria **(c)**, $\gamma_i = -\gamma_j = \gamma$, temos que

$$[h_1, \mathcal{J}] = 0 \quad (\text{A.23})$$

e

$$[h_2, \mathcal{J}] = 2 [h_3, \mathcal{J}] \quad (\text{A.24})$$

assim, os termos que resultam invariantes sob \mathcal{U}_ρ são h_1 e

$$h_2 - 2h_3 = \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) (n_{i,-\sigma} - n_{j,-\sigma})^2 \quad (\text{A.25})$$

No caso da simetria **(d)**, $\gamma_i = \gamma_j = \gamma$, temos que $[h_3, \mathcal{J}] \neq 0$ e

$$[h_1, \mathcal{J}] = [h_2, \mathcal{J}] \quad (\text{A.26})$$

assim, o único termo que resulta invariante sob \mathcal{U}_ρ neste caso é

$$h_1 - h_2 = \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) (1 - n_{i,-\sigma} - n_{j,-\sigma}) \quad (\text{A.27})$$

É simples verificar que os três operadores h_1 , h_2 e h_3 possuem a simetria **(a)**. É possível também verificar (ainda que os cálculos sejam bastante mais longos) que os três operadores são também invariantes sob rotações (simetria **(b)**).

Finalmente das Eqs. (3.16), (A.14) e (A.26) vemos que o Hamiltoniano mais geral que possui as simetrias **(a)**, **(b)** e **(d)** é

$$\mathcal{H}_{CD} = \mathcal{H}_{JKU} + \tilde{I} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\rho}_i \cdot \vec{\rho}_j + \hat{D} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) (1 - n_{i,-\sigma} - n_{j,-\sigma}) \quad (\text{A.28})$$

o qual foi obtido por Castellani *et al* [34] (comparar com \mathcal{H}_G).æ

Apêndice B

Cálculo de elementos de matriz

Como já mencionamos na seção 3.3 o Hamiltoniano \mathcal{H}_G'' associado com o cluster de 4 sítios esta representado por uma matriz de dimensão 256×256 . Arranjando os vetores de base $|\{n_{i,\sigma}\}\rangle$ de acordo com os autovalores de \mathbf{N} e \mathbf{S}^z , \mathcal{H}_G'' apresenta uma estrutura diagonal em blocos, onde os diferentes blocos possíveis são listados na seguinte tabela:

N	S^z	dimensão do bloco	N	S^z	dimensão do bloco
0	0	1×1	4	± 4	1×1
1	± 1	4×4	5	± 1	24×24
2	0	16×16	5	± 3	4×4
2	± 2	6×6	6	0	16×16
3	± 1	24×24	6	± 2	6×6
3	± 3	4×4	7	± 1	4×4
4	0	36×36	8	0	1×1
4	± 2	16×16			

onde obviamente os blocos com o mesmo N e spin $\pm S^z$ são idênticos. Levando em conta que os blocos são simétricos (\mathcal{H}_G^μ é um operador hermítico), temos que calcular então um número total de 1759 elementos de matriz.

Os elementos de matriz foram calculados utilizando a linguagem de programação REDUCE. Em termos gerais o algoritmo é simples. Aproveitando a estrutura de operadores da linguagem nós definimos operadores de criação, aniquilação e número de ocupação, assim como todos os operadores compostos presentes em \mathcal{H}_G^μ . A estrutura da linguagem permite, por outra parte, definir propriedades nos operadores. Aproveitando esta facilidade nós podemos intruzir a algebra de fermions nos operadores definidos. Todos estes operadores agem sobre vetores de 8 componentes, cujos valores podem ser 0 ou 1. Cada componente representa assim a ocupação de um sítio com spin \uparrow ou \downarrow . Intro-

duzindo então as bases de vetores correspondentes a cada bloco, nós calculamos então os elementos de matriz desejados.

No caso do modelo de Schlottmann os cálculos resultam mais simples, já que neste caso o vínculo que proíbe a dupla ocupação em todo sítio vai reduzir o número total de estados possíveis a 3^M . Assim, para o cluster de 4 sítios \mathcal{H}_S esta representado por uma matriz 81×81 . Neste caso, os blocos possíveis são os seguintes:

N	S^z	dimensão do bloco	N	S^z	dimensão do bloco
0	0	1×1	3	± 3	4×4
1	± 1	4×4	4	0	6×6
2	0	12×12	4	± 2	4×4
2	± 2	6×6	4	± 4	1×1
3	± 1	12×12			

o que dá um total de 230 elementos de matriz a calcular.

Apêndice C

Parâmetro de ordem e supercondutividade no modelo *IKU*

Consideremos o seguinte parâmetro de ordem, que descreve uma das fases ordenadas no modelo *IKU* (ver seção 4.2):

$$\Delta \equiv \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i \langle c_{i,1}^\dagger c_{i,1}^\dagger \rangle = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \langle c_{\vec{k},1}^\dagger c_{-\vec{k},1}^\dagger \rangle \quad (\text{C.1})$$

Introduzindo os operadores de campo $\Psi_\sigma(\vec{r})$ definidos por

$$c_{\vec{k},\sigma} = \int d\vec{r} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \Psi_\sigma(\vec{r}) \quad (\text{C.2})$$

onde a integral estende-se sobre todo o cristal, podemos reescrever Δ como segue:

$$\Delta = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \int d\vec{r} d\vec{r}' f(\vec{r}, \vec{r}') \Phi(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{C.3})$$

onde

$$f(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{-\vec{k}}(\vec{r}') \quad (\text{C.4})$$

e

$$\Phi(\vec{r} - \vec{r}') \equiv \langle \Psi_1(\vec{r}) \Psi_1(\vec{r}') \rangle \quad (\text{C.5})$$

Vemos assim que $\Delta \neq 0$ implica que $\Phi(\vec{r})$ não é identicamente nulo. Se por embaixo de alguma temperatura $\Phi(\vec{r}) \neq 0$ nalguma região do espaço, isto implica a existência de efeito Meissner e portanto de supercondutividade [118].

Bibliografia

- [1] B. H. Brandow, *Electronic Structure of Mott Insulators*, Adv. Phys. **26**, 651 (1977).
- [2] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transition*, Rev. Mod. Phys. **40**, 677 (1968).
- [3] P. W. Anderson, *50 years of the Mott phenomenon*, em *Frontiers and Borderlines in Many-Particle Physics*, Proc. of Varenna Summer School, North-Holland (1987).
- [4] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism*, Springer (1981).
- [5] T. Moriya Ed., *Electron Correlations and Magnetism in Narrow Band Systems*, Springer, New York (1981).
- [6] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, McGraw-Hill Book Co., New York (1975).
- [7] J. G. Beddnorz and K. A. Müller, Z. Phys. **B64**, 188 (1986).
- [8] P. W. Anderson, *Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors*, em *Solid State Physics* vol. 14, p. 99, eds. F. Seitz e D. Turnbull, Academic Press, NY (1963).

- [9] C. Y. Huang, *Some Aspects of High-Temperature Superconductors: a Review*, Int. J. Mod. Phys. **B2**, 355 (1988).
- [10] W. E. Pickett, *Electronic Structure of the High-temperature Oxide Superconductors*, Rev. Mod. Phys. **61**, 433 (1989).
- [11] J. Hubbard, Proc. R. Soc. A **276** 238 (1963).
- [12] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. **137**, A1726 (1965).
- [13] J. Hubbard, Proc. R. Soc. A **277**, 237 (1964); **A 281**, 401 (1964).
- [14] M. Cyrot, *The Hubbard Hamiltonian*, Physica **91B**, 141 (1977).
- [15] D. Penn, Phys. Rev. **142**, 350 (1966).
- [16] W. Schumacher, U. Linder and R. Jauch, Phys. Stat. Sol. (b) **86**, 621 (1978).
- [17] W. Nolting and W. Borgiel, Phys. Rev. **B 39**, 6962 (1989).
- [18] D. Vollhardt, *Normal ^3He : an almost localized Fermi liquid*, Rev. Mod. Phys. **56**, 99 (1984).
- [19] D. W. Hone and P. Pincus, Phys. Rev. **B7**, 4889 (1973).
- [20] S. Chen and Y. Cheng, Phys. Rev. **B18**, 3465 (1978).
- [21] E. H. Lieb, *Statistical Physics, Proceedings from STATPHYS 16*, ed. E. Stanley, Boston University, p. 240 (1986).

- [22] A. P. Balachandran *et al*, *Hubbard Model and Anyon Superconductivity: a Review*, Int. J. Mod. Phys. **B4**, 2057 (1990).
- [23] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [24] E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett **20**, 1445 (1968).
- [25] S. Sarkar, J. Phys. A **23**, L409 (1990); P. A. Bares and G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **64**, 2567 (1990).
- [26] E. H. Lieb. Phys. Rev. Lett. **62**,1201 (1989).
- [27] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
- [28] H. Takasaki, Phys. Rev. **B 40**, 9192 (1989).
- [29] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and K. A. Chao, Phys. Rev. **B24**, 1579 (1981).
- [30] P. G. J. van Dongen, Phys. Rev. Lett. **67**. 757 (1991).
- [31] C. Domb and M. S. Green (eds.), *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. **6**, Academic. New York (1976).
- [32] T. W. Burkhardt and J. M. J. van Leeuwen (eds.), *Real-Space Renormalization em Topics in Current Physics* vol. **30**, Springer (1980).
- [33] P. Pfeuty and G. Toulouse, *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena*, Wiley, New York (1977).

- [34] C. Castellani, C. DiCastro, D. Feinberg and J. Ranninger, *Phys. Rev. Lett* **43**, 1957 (1979).
- [35] H. Takano and M. Suzuki, *Physica* **109A**, 618 (1981).
- [36] C. Vanderzande and A. L. Stella, *J. Phys.C* **17**, 2075 (1984).
- [37] C. Vanderzande, *J. Phys. A* **18**, 889 (1985).
- [38] T. Matsubara, C. Totsuji and C. J. Thompson, *J. Phys.* **A24**, 4599 (1991).
- [39] H. Takano and M. Suzuki, *J. Stat. Phys.* **26**, 635 (1981).
- [40] A. O. Caride, C. Tsallis and S. I. Zanette, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 145 (1983); **51**, 616 (1983).
- [41] A. M. Mariz, C. Tsallis and A. O. Caride, *J. Phys. C* **18**, 4189 (1985).
- [42] S. A. Cannas, F. A. Tamarit and C. Tsallis, *Solid State Commun.* **78**, 685 (1991).
- [43] S. A. Cannas, F. A. Tamarit and C. Tsallis, *Phys. Rev. B* **45** (*Maio 1992*).
- [44] P. Schlottmann, *Phys. Rev B* **36**, 5177 (1987).
- [45] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976).
- [46] H. Shiba, *Prog. Theor. Phys.* **48**, 2171 (1972).
- [47] V.J. Emery, *Phys. Rev. B* **14**, 2989 (1976).

- [48] K. A. Chao, J. S. Spałek and A. M. Olés, *J. Phys.* **C 10**, L271 (1977).
- [49] W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Phys. Rev.* **B 2**, 4302 (1970).
- [50] J. Hirsch, *Phys. Rev.* **B 31**, 4403 (1985).
- [51] W. Langer, M. Plischke and D. Mattis, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1448 (1969).
- [52] E. N. Economou, C. T. White and R. R. DeMarco, *Phys. Rev.* **B18**, 3946 (1978).
- [53] M. Cyrot, *J. Physique* **33**, 125 (1972).
- [54] J. Hirsh, *Phys Rev.* **B 35**, 1851 (1987).
- [55] S. H. Liu, *Phys. Rev.* **B17**, 3629 (1978).
- [56] C. J. Thompson *et al*, *J. Phys.* **A 24**, 1261 (1991).
- [57] C. Tsallis, *J. Phys.* **C18**, 6581 (1985).
- [58] L. R. da Silva and C. Tsallis, *J. Phys.* **A20**, 6013 (1987).
- [59] M. Suzuki and H. Takano, *Phys. Lett.* **A69**, 426 (1979).
- [60] M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **51**, 183 (1976).
- [61] R. M. Wilcox, *J. Math. Phys.* **8**, 962 (1967).
- [62] J. W. Essam and C. Tsallis, *J. Phys.* **A19**, 409 (1986). A. C. N. de Magalhães and J. W. Essam, *J. Phys.* **A19**, 1955 (1986); *J. Phys.* **A22**, 2549 (1988);
- [63] L. P. Kadanoff, *Ann. Phys. (N.Y.)* **100**, 359 (1976).

- [64] H. Falk, Am. J. Phys. **38**, 858 (1970).
- [65] B. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, Phys. Rev. **A 4**, 1071 (1971).
- [66] A. N. Berker and M. Wortis, Phys. Rev. **B 14**, 4946 (1976).
- [67] R. B. Griffiths, Physica **33**, 689 (1967).
- [68] F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. **B 37**, 3759 (1988).
- [69] J. B. Marston and I. Affleck, Phys. Rev. **B 39**, 11538 (1989).
- [70] W. H. Press *Numerical Recipes*, Cambridge University Press (1986).
- [71] R. R. dos Santos, J. Phys. **C 18**, L1067 (1985).
- [72] E. P. da Silva and C. Tsallis, Physica A **167**, 347 (1990).
- [73] Th. Niemeijer and J.M.J van Leeuwen em Ref.[31]
- [74] S. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, W.A. Benjamin. New York (1976).
- [75] B. Nienhuis and M. Nauenberg, Phys. Rev. Lett **35**, 477 (1975).
- [76] B. Hu, Phys. Rev. Lett. **55**, 2316 (1985).
- [77] J. R Melrose, J. Phys. **A16**, 1041. 3077, L407 (1983).
- [78] G. S. Rushbrooke, G. A. Baker Jr. and P. J. Wood em *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. **3**, Eds. C. Domb and M. S. Green, Academic, New York (1974).

- [79] R. B. Stinchcombe, *J. Phys. C* **12**, 4533 (1979 b).
- [80] Y. Saito, *J. Chem. Phys.* **74**, 715 (1981).
- [81] B. Nienhuis and M. Nauenberg, *Phys Rev. B* **13**, 2021 (1976).
- [82] I. D. Lawrie and S. Sarbach, *Theory of Tricritical Behaviour*, em *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. **9**, Eds. C. Domb and J. L. Lebowitz, Academic, New York (1984).
- [83] R. Micnas *et al.*, *Phys. Rev. B* **37**, 9410 (1988).
- [84] R. Rammal, *J. Physique* **45**, 191 (1984).
- [85] C. Tsallis and R. Maynard, *Phys. Lett.* **A129**, 118 (1978).
- [86] P. M. C. Oliveira, *J. Physique* **47**, 1107 (1986).
- [87] R. R. DeMarco, E. N. Economou and C. T. White , *Phys. Rev.* **B18**, 3968 (1978).
- [88] B. Batlogg, *Physical Properties of High- T_c Superconductors*, *Phys. Today*, p. 44, June (1991).
- [89] J. Friedel, *The High- T_c Superconductors: a Conservative View*, *J. of Phys.: Condensed Matter* **1**, 7757 (1989).
- [90] T. Thio *et al.*, *Phys. Rev. B* **38**, 905 (1988).
- [91] A. Aharony *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1987).

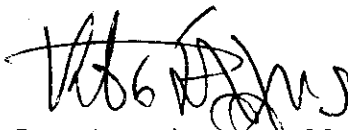
- [92] G. Baskaran, *Int. J. Mod. Phys.* **B1**, 697 (1987).
- [93] G. Baskaran, Z. Zou and P. W. Anderson, *Solid State Commun.* **63**, 4973 (1987).
- [94] J. E. Hirsch and H. Q. Lin, *Phys. Rev* **B37**, 5070 (1988).
- [95] H. Q. Lin and J. E. Hirsch, *Phys. Rev.* **B37**, 7359 (1988).
- [96] N. E. Bonesteel and J. W. Wilkins, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1232 (1991).
- [97] K. H. Luk and D. L. Cox, *Phys. Rev.* **B41**, 4456 (1990).
- [98] T. M. Rice, *Superconductivity and Magnetic Properties in High- T_c Materials*, preprint ETH-TH/89-7 (Zürich).
- [99] N. F. Mott, *Adv. in Phys.* **39**, 55 (1990).
- [100] I. Felner *et al*, *Physica* **A168**, 229 (1990).
- [101] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [102] P. W. Anderson, G. Baskaran, Z. Zou and T. Hsu, *Phys. Rev. Lett* **58**, 2790 (1987).
- [103] J. E. Hirsch, *Phys. Rev.* **B35**, 8726 (1987).
- [104] J. R. Schrieffer, X.G. Wen and S.C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 944 (1988).
- [105] J. D. Jorgensen *et al*, *Phys. Rev.* **B 38**, 11337 (1988).
- [106] K. Kumagai *et al*, *Physica* **B 148**, 480 (1987).
- [107] D. W. Harshman *et al*, *Phys. Rev.* **B 38**, 852 (1988).

- [108] S. A. Cannas and C. Tsallis, *submetido para publicação (Phys. Rev. B)*.
- [109] V. J. Emery, S. A. Kivelson and H. Q. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 4755 (1990).
- [110] M. Marder, N. Papanicolaou and G. C. Psaltakis, *Phys. Rev.* **B41**, 6920 (1990).
- [111] A. Moreo, D. Scalapino and E. Dagotto, *Santa Barbara preprint UCSBTH/90/49*.
- [112] M. Kaufman *et al*, *Phys. Rev.* **B23**, 3448 (1981).
- [113] K. Kubo, *Prog. Theor. Phys.* **11**, 159 (1974).
- [114] Bao-Hua Zhao *et al*, *Phys. Rev. B* **36**, 2321 (1987).
- [115] D. Vaknin *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2802 (1987).
- [116] Y. Tranquada *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 156 (1988).
- [117] S. A. Cannas and C. Tsallis, *submetido para publicação (Phys. Rev. B)*.
- [118] D. Foster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions*, *Frontiers in Physics*, W. A. Benjamin Inc. (1975), cap. 12.

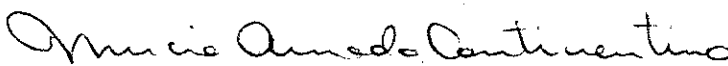
"UMA GENERALIZAÇÃO DO MODELO DE HUBBARD: ESTUDO DE PROPRIEDADES
CRÍTICAS MEDIANTE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO"

SÉRGIO ALEJANDRO CANNAS

Tese de Doutorado apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológica, fazendo parte da banca examinadora os seguintes professores:



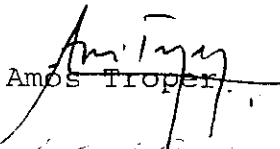
Constantino Tsallis - Presidente



Mucio Amado Continentino



Sérgio Šaul Makler



Amos Troper



Jorge Silvio Helman



Ximenes Alexandrino da Silva - Suplente