

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
PÓS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS  
CÂMPUS DE BAURU

Ricardo de Almeida Simon

Simulação computacional de materiais com elétrons fortemente  
interagentes: DMRG aplicado a super-redes Hubbard com  
modulação de condução entre camadas

Bauru  
2008

Ricardo de Almeida Simon

Simulação computacional de materiais com elétrons fortemente interagentes: DMRG aplicado a super-redes Hubbard com modulação de condução entre camadas

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia de Materiais do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - UNESP.

Orientador: Prof. Dr. André Luiz Malvezzi

Bauru  
2008

Ricardo de Almeida Simon

Simulação computacional de materiais com elétrons fortemente interagentes: DMRG aplicado a super-redes Hubbard com modulação de condução entre camadas

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia de Materiais do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - UNESP.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. André Luiz Malvezzi- Orientador  
Faculdade de Ciências - UNESP

---

Prof. Dr. Marcio José Martins  
Departamento de Física - UFSCAR

---

Prof. Dr. Alexys Bruno Alfonso  
Faculdade de Ciências - UNESP

Bauru, 11 de abril de 2008

# *Agradecimentos*

Agradeço primeiramente a Deus e a meus pais pelo maravilhoso dom da vida.

Agradeço a toda minha família, por todo o apoio que sempre recebi, desde minha infância, até os dias de hoje, todos sempre estiveram presentes ajudando nesta jornada.

Agradeço a Cintia pelo companheirismo e amor dedicados a mim.

Em especial agradeço ao Professor André Luiz Malvezzi, grande companheiro nessa jornada, por acreditar e dar todo apoio para a realização deste projeto.

Agradeço aos Professores Klaus Werner Capelle, Alexys Bruno Alfonso e Marcio José Martins pelas correções, sugestões e discussões, que muito contribuíram para o enriquecimento deste documento.

Agradeço a todos amigos, colegas e professores - impossível citar o nome de cada um - que de certa forma contribuíram para este trabalho.

Por fim, agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, FAPESP, por tornar possível a realização deste projeto.

# *Resumo*

Na área de pesquisa em sistemas de elétrons fortemente correlacionados, o modelo das super-redes Hubbard tem sido utilizado para explicar e prever comportamentos de heteroestruturas, como multicamadas magnéticas, que apresentam propriedades diferentes e incomuns, comparadas com as dos sistemas homogêneos análogos, *e.g.*, ordenamentos magnéticos e de carga. Neste contexto, foram estudados nesta dissertação os efeitos da introdução de um novo valor,  $t_c$ , para o parâmetro de *hopping* de elétron nas interfaces de camadas diferentes da super-rede, ou seja, introduziu-se uma modulação na condução entre as camadas. Variou-se  $t_c$  entre  $0.1t$  e  $t$ , onde  $t$  é o parâmetro de *hopping* entre sítios da mesma camada. Para a lacuna de carga encontramos um comportamento dependente da densidade eletrônica na rede. Em geral, momentos magnéticos locais e a ocupação eletrônica nos sítios, apresentam uma distribuição mais uniforme para  $t_c = 0.1t$ . No entanto, nas densidades onde ocorre um aumento abrupto na lacuna de carga com a diminuição de  $t_c$ , essa uniformidade é mais pronunciada, possivelmente devido a uma comensurabilidade entre a distribuição dos elétrons na cadeia e a estrutura da super-rede. Para as funções de correlação de carga, que foram estudadas através do fator de estrutura, encontramos em alguns casos uma dependência em  $t_c$  do período do ordenamento correspondente.

# *Abstract*

In the research field of strongly correlated electron systems, the Hubbard superlattice model has been used for explain and predict the behavior of heterostructures, such as magnetic multilayers, whose unusual properties differ from the properties of their analogous homogeneous counterpart. In this context, we have studied here the effects of introducing a new value for the hopping parameter,  $t_c$ , for electrons between different layers, *i.e.*, we introduced a modulation in the electronic conduction between layers. We consider  $t_c$  in the range  $0.1t$  to  $t$ , where  $t$  is the hopping parameter for sites inside the layers. For the charge gap, we found a behavior that depends on the electronic density in the lattice. Local magnetic moments and electronic occupation on sites, generally, show a greater uniformity with decreasing  $t_c$ . However, for electronic densities where there is an abrupt increase in the charge gap for decreasing  $t_c$ , this uniformity is enhanced, probably due to a commensurability between the electronic distribution in the chain and the underlying superlattice structure. For the charge correlation functions, that were studied through their structure factor, we found in some cases a dependency in  $t_c$  of the correlations oscillation period.

# *Lista de Figuras*

1.1	Ilustração da aproximação tight-binding (ver texto). Figura retirada de [4]. . .	p. 4
1.2	Super-rede com $L_U = 4$ e $L_0 = 3$ sítios. . . . .	p. 13
1.3	Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para $L_U = L_0 = 2$ , $L_U = 2$ , $L_0 = 3$ e $L_U = 3$ , $L_0 = 2$ . Cálculos realizados com 12 células unitárias e $U = 6t$ . . . . .	p. 14
1.4	Transições $2k_F^* - 4k_F^*$ para o vetor de onda dominante na onda de densidade de carga (vide texto). . . . .	p. 17
1.5	Ilustração de super-rede estudada neste trabalho (vide texto). . . . .	p. 18
2.1	Unidades básicas do DMRG. . . . .	p. 21
2.2	Superbloco . . . . .	p. 21
2.3	Crescimento do sistema. (a) Superbloco (b) Truncagem do bloco aumentado (c) O antigo bloco aumentado passa a ser o bloco atual (d) Nova truncagem. .	p. 23
2.4	Procedimento do algoritmo da cadeia finita. (a) Superbloco (b) Truncagem do bloco aumentado (c) O bloco à esquerda cresce um sítio, enquanto o da direita diminui um sítio (d) Nova truncagem. . . . .	p. 23
2.5	Crescimento e iteração do algoritmo da cadeia finita para um sistema com $L = 10$ sítios. . . . .	p. 24
3.1	Momentos magnéticos(a) e energia por sítio(b) do sistema $L_U = L_0 = 2$ , $U = 6t$ e $\rho = 1.1$ , para $N_c = 16$ e $N_c = 32$ . . . . .	p. 26
3.2	Comparação da extrapolação da lacuna de carga em função de $t_c$ para $L_U = 2$ , $L_0 = 3$ e $\rho = 1.2$ (a) e o caso equivalente com $N_c = 16$ (b). . . . .	p. 27
3.3	Lacuna de carga em função da densidade eletrônica para $L_U = L_0 = 2$ em (a) $t_c = 0.1t$ e (b) $t_c = t$ , $L_U = 2$ , $L_0 = 3$ em (c) $t_c = 0.1t$ e (d) $t_c = t$ e $L_U = 3$ , $L_0 = 2$ em (e) $t_c = 0.1t$ e (f) $t_c = t$ . . . . .	p. 28

- 3.4 Comparação de momentos magnéticos locais e ocupação eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  entre  $\rho = 1.2$  ( $N_e = 72$ ) e a densidade adjacente acima ( $N_e = 74$ ), para  $t_c = t$ . . . . . p. 29
- 3.5 Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  entre  $\rho = 0.2$  ( $N_e = 12$ ) e a densidade adjacente acima ( $N_e = 14$ ), para  $t_c = 0.1t$ . . . . . p. 29
- 3.6 Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  em  $\rho = 0.2$  ( $N_e = 12$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . . . . . p. 30
- 3.7 Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  em  $\rho = 1.2$  ( $N_e = 72$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . . . . . p. 31
- 3.8 (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 64$  e  $N_e = 88$ . . . . . p. 31
- 3.9 (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 64$  e  $N_e = 32$ . . . . . p. 32
- 3.10 (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 64$  e  $N_e = 48$ . . . . . p. 32
- 3.11 (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 48$ . . . . . p. 33
- 3.12 (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 48$ . . . . . p. 33
- 3.13 Energias da super-rede  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 80$  e  $N = 48$  em função de  $t_c$ . . . p. 34
- 3.14 Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para  $L_U = L_0 = 2$  em função da densidade para (a)  $t_c = 0.1t$  e (b)  $t_c = t$ . . . . p. 35
- 3.15 Fatores de estrutura magnético da rede  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ , para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . Em (a)  $\rho < \rho_0$  (b) e (c)  $\rho_0 < \rho < \rho_{\uparrow\downarrow}$  (d)  $\rho = \rho_{\uparrow\downarrow}$  e d  $\rho_{\uparrow\downarrow} < \rho < \rho_I$ . Vide texto para discussão. . . . . p. 36
- 3.16 Fatores de estrutura de carga da rede  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ , em diversas densidades para,  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . Vide texto para discussão. . . . . p. 38
- 3.17 Fatores de estrutura de carga da rede  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ , em diversas densidades para,  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . Vide texto para discussão. . . . . p. 39



3.18	Fatores de estrutura de carga da rede $L_U = 2, L_0 = 3, L = 80$ e $N_e = 104$ em (a) $t_c = 0.8t$ , (b) $t_c = 0.7t$ , (c) $t_c = 0.6t$ e (d) $t_c = 0.5t$ . Vê-se que um pico surge em $q = \pi/2 = 2k_F^*$ à medida que $t_c$ decresce. . . . .	p. 40
3.19	Fatores de estrutura de carga da rede $L_U = 3, L_0 = 2$ , em diversas densidades para, $t_c = 0.1t$ e $t_c = t$ . Vide texto para discussão. . . . .	p. 41
3.20	Fatores de estrutura de carga da rede $L_U = 3, L_0 = 2, L = 80$ e $N_e = 10$ em (a) $t_c = 0.5t$ , (b) $t_c = 0.4t$ , (c) $t_c = 0.3t$ e (d) $t_c = 0.2t$ . Vê-se que o pico move-se de $2k_F^*$ para $4k_F^*$ à medida que $t_c$ decresce. . . . .	p. 42
A.1	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 2, U = 6$ entre $\rho = 0.5$ ( $N_e = 24$ ) e a densidade adjacente acima, para $t_c = t$ . . . . .	p. 44
A.2	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 2, U = 6$ entre $\rho = 1$ ( $N_e = 48$ ) e a densidade adjacente acima, para $t_c = 0.1t$ . . . . .	p. 45
A.3	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 2, U = 6$ em $\rho = 0.5$ ( $N_e = 24$ ), para $t_c = 0.1t$ e $t_c = 1t$ . . . . .	p. 45
A.4	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 2, U = 6$ em $\rho = 1$ ( $N_e = 48$ ), para $t_c = 0.1t$ e $t_c = 1t$ . . . . .	p. 46
A.5	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 3, U = 6$ entre $\rho = 0.8$ ( $N_e = 48$ ) e a densidade adjacente acima, para $t_c = t$ . . . . .	p. 46
A.6	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 3, U = 6$ entre $\rho = 0.6$ ( $N_e = 36$ ) e a densidade adjacente acima, para $t_c = 0.1t$ . . . . .	p. 47
A.7	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 3, U = 6$ em $\rho = 0.5$ ( $N_e = 24$ ), para $t_c = 0.1t$ e $t_c = t$ . . . . .	p. 47
A.8	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 3, U = 6$ em $\rho = 0.6$ ( $N_e = 36$ ), para $t_c = 0.1t$ e $t_c = t$ . . . . .	p. 48
A.9	Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para $L_U = 2, L_0 = 3, U = 6$ em $\rho = 0.8$ ( $N_e = 48$ ), para $t_c = 0.1t$ e $t_c = t$ . . . . .	p. 48

A.10	(a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de $t_c$ para $L_U = 2$ , $L_0 = 3$ , $L = 80$ e $N_e = 64$ . . . . .	p. 49
A.11	(a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de $t_c$ para $L_U = 2$ , $L_0 = 3$ , $L = 80$ e $N_e = 76$ . . . . .	p. 49
A.12	(a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de $t_c$ para $L_U = 3$ , $L_0 = 2$ , $L = 80$ e $N_e = 32$ . . . . .	p. 49
A.13	(a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de $t_c$ para $L_U = 3$ , $L_0 = 2$ , $L = 80$ e $N_e = 104$ . . . . .	p. 50
A.14	Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para $L_U = 2$ , $L_0 = 3$ , em função da densidade eletrônica para (a) $t_c = 0.1t$ e (b) $t_c = t$ . . . . .	p. 50
A.15	Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para $L_U = 3$ , $L_0 = 2$ , em função da densidade eletrônica para (a) $t_c = 0.1t$ e (b) $t_c = t$ . . . . .	p. 50
A.16	Fatores de estrutura magnético da rede $L_U = 2$ , $L_0 = 2$ , em diversas densidades, para $t_c = 0.1t$ e $t_c = t$ . . . . .	p. 51
A.17	Fatores de estrutura magnético da rede $L_U = 3$ , $L_0 = 2$ , em diversas densidades para, $t_c = 0.1t$ e $t_c = t$ . . . . .	p. 52

# *Sumário*

<b>Introdução</b>	p. 1
<b>1 Super-redes Hubbard</b>	p. 3
1.1 O modelo de Hubbard . . . . .	p. 3
1.1.1 Álgebra de férmions . . . . .	p. 6
1.1.2 Simetrias do modelo . . . . .	p. 11
1.2 Super-redes Hubbard . . . . .	p. 12
1.2.1 Momentos magnéticos locais . . . . .	p. 13
1.2.2 Lacuna de carga . . . . .	p. 15
1.2.3 Correlação de spin . . . . .	p. 15
1.2.4 Correlação de carga . . . . .	p. 16
1.3 Objetivos . . . . .	p. 18
<b>2 O algoritmo do grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG)</b>	p. 19
2.1 Introdução . . . . .	p. 19
2.2 Aumento do bloco e redução do espaço no DMRG . . . . .	p. 20
2.3 O algoritmo da cadeia finita . . . . .	p. 22
<b>3 Resultados e discussões</b>	p. 25
3.1 Metodologia . . . . .	p. 25
3.2 Lacuna de Carga . . . . .	p. 27
3.3 Comportamento das energias . . . . .	p. 34
3.4 Momentos magnéticos locais . . . . .	p. 35

3.5	Correlações de spin . . . . .	p. 35
3.6	Correlações de carga . . . . .	p. 37
3.6.1	$L_U = L_0 = 2$ . . . . .	p. 37
3.6.2	$L_U = 2, L_0 = 3$ . . . . .	p. 37
3.6.3	$L_U = 3, L_0 = 2$ . . . . .	p. 37
<b>4</b>	<b>Conclusões</b>	p. 43
	<b>Apêndice A – Gráficos adicionais</b>	p. 44
A.1	Gráficos relativos à seção 3.2 . . . . .	p. 44
A.2	Momentos magnéticos locais . . . . .	p. 50
A.3	Correlações de spin . . . . .	p. 51
A.3.1	$L_U = 2, L_0 = 2$ . . . . .	p. 51
A.3.2	$L_U = 3, L_0 = 2$ . . . . .	p. 52
	<b>Referências Bibliográficas</b>	p. 53

# *Introdução*

Em certos materiais as interações entre os elétrons (devido à repulsão Coulombiana) são muito importantes, e tais interações podem produzir propriedades físicas impressionantes. Tais materiais são comumente classificados como sistemas de elétrons fortemente correlacionados ou fortemente interagentes. O cenário usual de um gás de elétrons fracamente interagentes, o qual descreve razoavelmente bem os metais simples, perde totalmente sua validade e as teorias usuais baseadas nessa aproximação (*e.g.* Hartree-Fock) não descrevem o comportamento desses materiais. Nos últimos 20 anos um grande número de materiais pertencentes a essa classe foi descoberto, sendo provavelmente os supercondutores de alta temperatura crítica (*High-Tc's*) os seus representantes mais famosos; mas fenômenos como a magnetoresistência colossal nas chamadas manganitas ou transições metal-isolante em gases de elétrons bidimensionais são também exemplos dessa classe de materiais [1].

Assim, os sistemas de elétrons fortemente correlacionados estão na fronteira do estudo de novos materiais sendo um dos temas mais intensivamente estudados atualmente. A complexidade do problema o tornou uma área interdisciplinar, exigindo um esforço conjunto das ciências de materiais com a moderna física teórica do estado sólido.

Nas últimas décadas o desenvolvimento de técnicas de deposição bastante precisas tem gerado uma nova classe de materiais, chamados genericamente de heteroestruturas. São crescidos sistemas constituídos de camadas muito finas (em alguns casos com apenas alguns átomos de espessura) de materiais com diferentes propriedades físicas. Se a estrutura de camadas é periódica, tal sistema é chamado de super-rede. No estudo dessas heteroestruturas novos fenômenos têm sido observados, motivando igualmente um avanço teórico para o entendimento dos resultados observados. Nesse sentido, um modelo que tem sido estudado é a *super-rede Hubbard unidimensional* [5]-[13], formada por um arranjo periódico de  $L_U$  sítios (“camada”) nos quais a interação entre os elétrons é repulsiva, seguida de  $L_0$  sítios sem interação intereletônica.

Nesta dissertação, estudou-se os efeitos de introduzir-se inhomogeneidades na condução eletrônica entre as camadas da super-rede. Exploramos então os efeitos dessa inhomogeneidade nas propriedades eletrônicas (magnéticas e de carga) do sistema, como função dos parâmetros que definem o modelo.

No estudo de modelos de elétrons fortemente correlacionados, um enfoque amplamente utilizado é a diagonalização numérica do Hamiltoniano correspondente em cadeias de tamanho finito [24]. Diversas técnicas numéricas permitem extrair as propriedades físicas de um Hamiltoniano microscópico onde todas as interações quânticas são tratadas sem o uso de aproximações ou métodos perturbativos tradicionais, os quais sabidamente produzem resultados pobres devido às fortes correlações. Dentre as técnicas mais recentes destacam-se os algoritmos do grupo de renormalização da matriz densidade [22, 23] ou, do inglês, DMRG. O DMRG tem sido aplicado [9]-[11] com sucesso no estudo das super-redes Hubbard e também foi utilizado nesta dissertação .

No capítulo 1 apresentamos o modelo de Hubbard, sua extensão às super-redes e as modificações neste modelo estudadas nesta dissertação. No capítulo 2 apresentamos o DMRG, que utilizamos para o cálculo de propriedades das cadeias aqui estudadas. No capítulo 3 os principais resultados são exibidos, no capítulo 4 são apresentadas as conclusões do trabalho e, por fim, exibimos no ApêndiceA uma grande variedade de gráficos para alguns resultados obtidos.

# 1 *Super-redes Hubbard*

Neste capítulo, primeiramente é apresentado o modelo de Hubbard [2, 3], base do modelo estudado nesta dissertação. Em sequência, apresentamos as super-redes Hubbard e suas propriedades conhecidas [5] - [10], e por fim o modelo estudado nesta dissertação.

## 1.1 O modelo de Hubbard [3]

Este modelo apareceu pela primeira vez na literatura, no contexto aqui estudado, em 1963 [2], como uma tentativa de descrever simplificada a correlação eletrônica em bandas de energia estreitas, como as bandas-d nos metais de transição, onde os tradicionais métodos baseados em aproximações de elétrons não interagentes apresentam resultados pobres. O modelo é composto de duas partes, uma cinética, que descreve o movimento dos elétrons, e uma potencial, representando a repulsão coulombiana entre eles.

O Hamiltoniano de Hubbard pode ser obtido, após algumas aproximações, do Hamiltoniano de uma cadeia linear de átomos, que na linguagem de segunda quantização das teorias de campos com a utilização da aproximação de Born-Oppenheimer<sup>1</sup> é dado por

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}) V_{ee}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.1)$$

onde  $U_{\text{ion}}(\mathbf{r})$  é o potencial dos íons na rede,  $V_{ee}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  que é proporcional a  $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  é a repulsão coulombiana entre os elétrons e  $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$  é o operador de campo dos elétrons, onde  $\sigma$  representa o spin, e pode assumir os valores  $1/2(\uparrow)$  ou  $-1/2(\downarrow)$ .

Para esse problema utiliza-se a aproximação *tight-binding*, ilustrada na Fig. 1.1. Naquela Figura tem-se

---

<sup>1</sup>Aproximação que considera os núcleos atômicos fixos em suas posições (sem energia cinética).

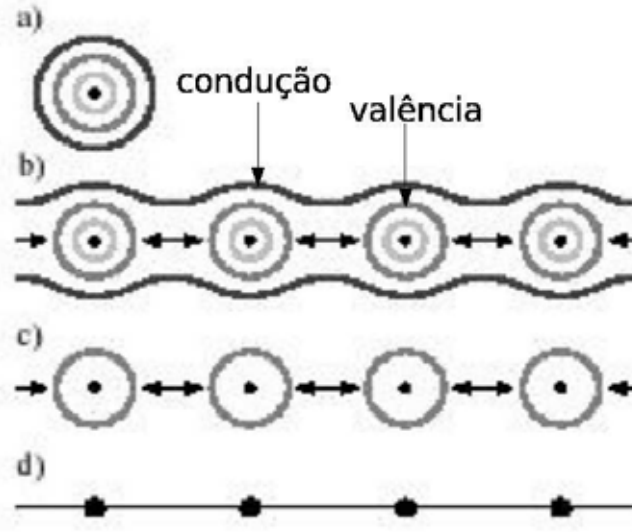


Figura 1.1: Ilustração da aproximação tight-binding (ver texto). Figura retirada de [4].

- a. Um átomo isolado com três orbitais.
- b. Sobreposição de 4 átomos idênticos, gerando um sólido com bandas. Na banda em cor preta, banda de condução, temos elétrons itinerantes, enquanto nos orbitais cinza-claro temos elétrons localizados em torno do núcleo. Já nos orbitais cinza-escuro os elétrons embora localizados em torno do núcleo podem tunelar para os orbitais cinza-escuro adjacentes com uma probabilidade diferente de zero (banda de valência).
- c. Aproximação do problema, considerando apenas a banda de valência.
- d. Redução do problema a um problema na rede, onde os elétrons ocupam sítios na rede e podem se mover de um sítio a outro.

Uma base para representar este tipo de comportamento é dada pelas funções de Wannier,  $\phi_i(\mathbf{r})^2$ , que são funções localizadas em torno do núcleo atômico. O Hamiltoniano (1.1) torna-se então

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \sum_{ijmn} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ijmn} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{n,\sigma'} c_{m,\sigma}, \quad (1.2)$$

onde

$$\begin{aligned} t_{ij} &= \langle i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) | j \rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \right) \phi_j(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.3)$$

<sup>2</sup>Usualmente indexa-se as funções de Wannier quanto ao tipo de orbital, mas por simplicidade assumimos que uma banda-s é capaz de representar a física do problema, então omitimos esse índice.



$$\begin{aligned}
v_{ijmn} &= \langle ij | V_{ee}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | mn \rangle \\
&= \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) V_{ee}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_m(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}')
\end{aligned} \tag{1.4}$$

e  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) cria (destrói) um férmion no sítio  $i$  com estado de spin  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ .

Como espera-se que os elementos de matriz decresçam rapidamente com a distância, e também considerando que  $t_{ij}$  independe da direção, (1.2) torna-se

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j \\
&+ J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + X \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) (n_{i,-\sigma} n_{j,-\sigma}) \\
&+ Y \sum_{\langle ij \rangle} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow} c_{j,\uparrow},
\end{aligned} \tag{1.5}$$

conhecido como o modelo de Hubbard generalizado, onde usamos a seguinte notação

$$\begin{aligned}
t &\equiv -t_{ij}, & U &\equiv v_{iii}, & X &\equiv v_{iii}, \\
V &\equiv v_{ijij}, & J &\equiv -2v_{ijji}, & Y &\equiv v_{üjj}
\end{aligned} \tag{1.6}$$

e  $\langle ij \rangle$  representando soma em primeiros vizinhos. O operador número de partículas é dado por  $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ , onde  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ , e o operador de spin é

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} c_{i,\alpha}^\dagger \vec{\tau}_{\alpha\beta} c_{i,\beta},$$

com  $\vec{\tau}_{\alpha\beta}$  sendo um vetor composto das matrizes de Pauli usuais.

Hubbard estimou os valores das energias (1.6) para metais de transição [2], obtendo

$$U \approx 20 \text{ eV} > V \approx 3 \text{ eV} > t \approx 1.5 \text{ eV} > X \approx 1 \text{ eV} > J, Y \approx 0.025 \text{ eV}. \tag{1.7}$$

De tal maneira que desconsiderou todas as energias relativas ao termo de repulsão intereletrônica, Eq. (1.4), menores que  $U$ . Quanto ao termo relativo a energia cinética e ao potencial da rede, Eq. (1.3), para o qual temos agora apenas  $t$ , foi mantido no modelo pois representa uma parte importante da física do problema, o *hopping*<sup>3</sup> de elétrons entre sítios primeiros vizinhos, criando o modelo de Hubbard [2]

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{Hub} &= \hat{H}_t + \hat{H}_U \\
&= -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + U \sum_{\langle ij \rangle} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}.
\end{aligned} \tag{1.8}$$

<sup>3</sup>Cuja tradução ao português é pulo, e está relacionado ao fato de elétrons desocuparem um dado orbital e ocupar outro.

O termo  $\hat{H}_t$  é chamado função energia cinética, o sinal negativo que acompanha  $t$  na Eq. (1.8) favorece a itinerância dos elétrons, privilegiando a propriedade de condução eletrônica na cadeia, característica de um metal. Enquanto o termo  $\hat{H}_U$ , chamado função energia potencial, favorece a localização dos elétrons na cadeia, pois faz que, para um elétron sair de um sítio em que está sozinho, e ir para outro adjacente, ocupado com um elétron de spin oposto, tenha um custo energético, privilegiando a propriedade de isolante de uma cadeia.

É a competição entre os dois termos do Hamiltoniano que produz propriedades físicas interessantes, como as transições metal-isolante. No caso de  $U/t$  grande, limite de forte acoplamento, o número de sítios duplamente ocupados é pequeno, pode-se então descrever o sistema através de um Hamiltoniano efetivo, o Hamiltoniano  $t - J$ , dado por

$$H_{tJ} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \left( \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{j,\sigma} + \tilde{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{i,\sigma} \right) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right), \quad (1.9)$$

onde  $\tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger} = c_{i,\sigma}^{\dagger} (1 - n_{i,-\sigma})$  e  $\tilde{c}_{i,\sigma} = (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i,\sigma}$ , o que impede a criação de um elétron em um sítio que já esteja ocupado e  $J = 4t^2/U$ . Esse Hamiltoniano então descarta os estados duplamente ocupados da representação do sistema.

No caso em que a densidade eletrônica é igual a um elétron por sítio, onde sabe-se que o Modelo de Hubbard se torna isolante, o Hamiltoniano (1.9) não permite *hopping* de elétrons, levando a outro Hamiltoniano efetivo, o Hamiltoniano de Heisenberg

$$H_{Heis} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (1.10)$$

### 1.1.1 Álgebra de férmions<sup>4</sup>

Nesta subseção são apresentadas algumas propriedades elementares dos operadores fermiônicos de criação e destruição que aparecem no Hamiltoniano (1.8) e do espaço de Hilbert onde atuam.

Inicialmente imagine um sítio separadamente, ele pode não possuir nenhum elétron, um elétron com spin  $+\frac{1}{2}$ , um elétron com spin  $-\frac{1}{2}$  ou dois elétrons com spin opostos. Representa-se cada uma das possibilidades respectivamente por  $|00\rangle, |\uparrow 0\rangle, |0 \downarrow\rangle, |\uparrow \downarrow\rangle$ .

No caso de mais de um sítio, basta repetir a notação ordenadamente, por exemplo no caso de 4 sítios, todos ocupados integralmente teríamos  $|\uparrow \downarrow, \uparrow \downarrow, \uparrow \downarrow, \uparrow \downarrow\rangle$ . Quando todos os sítios estão desocupados definimos o vácuo,  $|0\rangle$ , por  $|0\rangle = |00, 00, \dots, 00\rangle$

<sup>4</sup>Veja, e. g., seção 1.5 de [19]

O objetivo é descrever matematicamente o processo de inserir (retirar) uma partícula de spin  $\sigma$  no (do) sítio  $i$ . Para tal, definimos de maneira não rigorosa, os operadores de criação e destruição:

1. O operador de destruição é escrito como  $c_{i,\sigma}$ . Onde,  $i$  indica o sítio onde será retirado o elétron, e  $\sigma$  indica o spin do elétron a ser retirado. Por exemplo,  $c_{2,\uparrow}$  destrói um elétron com spin  $|\uparrow\rangle$  no sítio 2.
2. O operador de criação é escrito como  $c_{i,\sigma}^\dagger$ . Onde  $\dagger$  significa hermitiano conjugado,  $i$  indica o sítio onde será criado elétron, e  $\sigma$  indica o spin do elétron criado. Por exemplo,  $c_{2,\uparrow}^\dagger$  cria um elétron com spin  $|\uparrow\rangle$  no sítio 2.
3. Esses operadores obedecem às seguintes relações de comutação,

$$\begin{aligned} \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\}_+ &= \delta_{ij}\delta_{\sigma,\sigma'} \\ \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\}_+ &= 0 \\ \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\}_+ &= 0. \end{aligned} \quad (1.11)$$

onde o simbolo  $\{\}_+$  representa o anticomutador, ou seja,  $\{A, B\}_+ = AB + BA$ , onde  $A$  e  $B$  são operadores.

4. Note que  $0 = \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}^\dagger\}_+ = 2(c_{i\sigma}^\dagger)^2 \implies (c_{i\sigma}^\dagger)^2 = 0$ , ou seja, não é possível criar no mesmo sítio 2 elétrons com mesmo spin, respeitando-se assim o princípio da exclusão de Pauli.

Como exemplo considere quatro sítios e um único elétron com spin  $\uparrow$  para ser distribuído. As possíveis configurações são

$$\begin{aligned} |a\rangle &\equiv c_{1,\uparrow}^\dagger|0\rangle = |\uparrow 0, 00, 00, 00\rangle & |b\rangle &\equiv c_{2,\uparrow}^\dagger|0\rangle = |00, \uparrow 0, 00, 00\rangle \\ |c\rangle &\equiv c_{3,\uparrow}^\dagger|0\rangle = |00, 00, \uparrow 0, 00\rangle & |d\rangle &\equiv c_{4,\uparrow}^\dagger|0\rangle = |00, 00, 00, \uparrow 0\rangle. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Pode-se calcular a dimensão do espaço de Hilbert como uma combinação [17], neste caso, de 4 sítios tomados 1 a 1,  $C_4^1 = \frac{4!}{(4-1)!1!} = 4$ . De maneira genérica (para cadeias com todos elétrons com mesmo spin)

$$D = \frac{L!}{(L - n_\sigma)!n_\sigma!}, \quad (1.13)$$

onde  $L$  é o tamanho da cadeia, e  $n_\sigma$  o número de elétrons com spin  $\sigma$ .

As equações (1.12) mostram a ação dos operadores de criação. A seguir tem-se a ação dos operadores de destruição, por exemplo no estado  $|a\rangle$

$$c_{1,\uparrow}|a\rangle = |0\rangle, \quad c_{2,\uparrow}|a\rangle = 0, \quad c_{3,\uparrow}|a\rangle = 0, \quad c_{4,\uparrow}|a\rangle = 0. \quad (1.14)$$

Note a diferença entre o vácuo  $|0\rangle$  e o número 0, enquanto o primeiro representa uma cadeia vazia, o outro é o resultado do número 0 multiplicando um vetor. Aplicando a título de exemplo os operadores de criação em  $|a\rangle$  tem-se

$$\begin{aligned} c_{1,\uparrow}^\dagger |a\rangle &= 0 & c_{2,\uparrow}^\dagger |a\rangle &= |\uparrow 0, \uparrow 0, 00, 00\rangle \\ c_{3,\uparrow}^\dagger |a\rangle &= |\uparrow 0, 00, \uparrow 0, 00\rangle & c_{4,\uparrow}^\dagger |a\rangle &= |\uparrow 0, 00, 00, \uparrow 0\rangle . \end{aligned} \quad (1.15)$$

Os três últimos estados acima são estados com dois elétrons.

Define-se também um operador composto chamado de operador número de partículas, dado por  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ , ele destrói um elétron com spin  $\sigma$  no sítio  $i$  e o recria, assim, se o estado possui um elétron com spin  $\sigma$  no sítio  $i$ , o resultado da aplicação de  $n_{i,\sigma}$  é o próprio estado. Caso contrário, o resultado é 0, de tal maneira que o operador tem dois autovalores, 0 e 1. O número de elétrons no sítio  $i$  com estado de estado  $\sigma$ , é dado pelo autovalor correspondente ao estado. A seguir ilustra-se a atuação dos operadores número em estados da equação (1.12)

$$\begin{aligned} n_{1,\uparrow} |a\rangle &= c_{1,\uparrow}^\dagger c_{1,\uparrow} c_{1,\uparrow}^\dagger |0\rangle = 1 |a\rangle \\ n_{1,\downarrow} |a\rangle &= c_{1,\downarrow}^\dagger c_{1,\downarrow} c_{1,\uparrow}^\dagger |0\rangle = 0 \\ n_{1,\uparrow} |b\rangle &= c_{1,\uparrow}^\dagger c_{1,\uparrow} c_{2,\uparrow}^\dagger |0\rangle = 0 \\ n_{2,\uparrow} |b\rangle &= c_{2,\uparrow}^\dagger c_{2,\uparrow} c_{2,\uparrow}^\dagger |0\rangle = 1 |b\rangle \\ &\dots \end{aligned} \quad (1.16)$$

Para representar estados com mais de um elétron, considere como exemplo novamente quatro sítios, mas agora 2 elétrons, com estados de spin diferentes. Primeiro separadamente

$$\begin{aligned} &|\uparrow\rangle \quad |\downarrow\rangle \\ |\uparrow 0, 00, 00, 00\rangle & \quad |0 \downarrow, 00, 00, 00\rangle \\ |00, \uparrow 0, 00, 00\rangle & \quad |00, 0 \downarrow, 00, 00\rangle \\ |00, 00, \uparrow 0, 00\rangle & \quad |00, 00, 0 \downarrow, 00\rangle \\ |00, 00, 00, \uparrow 0\rangle & \quad |00, 00, 00, 0 \downarrow\rangle . \end{aligned} \quad (1.17)$$

Para construir os estados com os dois elétrons vamos tomar o produto tensorial  $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$  [16]

$$\begin{aligned}
|01\rangle &= |\uparrow\downarrow, 00, 00, 00\rangle & |02\rangle &= |\uparrow 0, 0 \downarrow, 00, 00\rangle \\
|03\rangle &= |\uparrow 0, 00, 0 \downarrow, 00\rangle & |04\rangle &= |\uparrow 0, 00, 00, 0 \downarrow\rangle \\
|05\rangle &= |0 \downarrow, \uparrow 0, 00, 00\rangle & |06\rangle &= |00, \uparrow\downarrow, 00, 00\rangle \\
|07\rangle &= |00, \uparrow 0, 0 \downarrow, 00\rangle & |08\rangle &= |00, \uparrow 0, 00, 0 \downarrow\rangle \\
|09\rangle &= |0 \downarrow, 00, \uparrow 0, 00\rangle & |10\rangle &= |00, 0 \downarrow, \uparrow 0, 00\rangle \\
|11\rangle &= |00, 00, \uparrow\downarrow, 00\rangle & |12\rangle &= |00, 00, \uparrow 0, 0 \downarrow\rangle \\
|13\rangle &= |0 \downarrow, 00, 00, \uparrow 0\rangle & |14\rangle &= |00, 0 \downarrow, 00, \uparrow 0\rangle \\
|15\rangle &= |00, 00, 0 \downarrow, \uparrow 0\rangle & |16\rangle &= |00, 00, 00, \uparrow\downarrow\rangle.
\end{aligned} \tag{1.18}$$

Com o auxílio de (1.13), concluí-se que a dimensão do espaço de estado para cadeias com elétrons de spins mistos é

$$D = \frac{L!}{(L-n_{\uparrow})!n_{\uparrow}!} \frac{L!}{(L-n_{\downarrow})!n_{\downarrow}!} \tag{1.19}$$

Como há uma certa arbitrariedade na construção de estados de múltiplos elétrons, as relações de anticomutação (1.11) fazem necessário o estabelecimento de uma convenção. Por exemplo, o estado  $|2\rangle$  pode ser escrito como

$$|2\rangle = c_{2,\downarrow}^{\dagger} c_{1,\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, \tag{1.20}$$

que consiste em colocar um elétron com spin  $|\uparrow\rangle$  no sítio 1, e depois colocar um elétron com spin  $|\downarrow\rangle$  no sítio 2. Mas também pode ser escrito como

$$|2\rangle = c_{1,\uparrow}^{\dagger} c_{2,\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \tag{1.21}$$

o que consiste na mesma operação anterior mas em ordem contrária. O resultado final pode parecer o mesmo mas se analisarmos as equações (1.11) veremos

$$\begin{aligned}
\left\{ c_{1,\uparrow}^{\dagger}, c_{2,\downarrow}^{\dagger} \right\}_+ &= 0, \\
c_{1,\uparrow}^{\dagger} c_{2,\downarrow}^{\dagger} + c_{2,\downarrow}^{\dagger} c_{1,\uparrow}^{\dagger} &= 0 \text{ e} \\
c_{1,\uparrow}^{\dagger} c_{2,\downarrow}^{\dagger} &= - c_{2,\downarrow}^{\dagger} c_{1,\uparrow}^{\dagger}.
\end{aligned}$$

Ou seja, trocar a ordem dos operadores de criação nos dá uma troca de sinal, o que significa que se escolhermos a configuração (1.20) para ter o sinal positivo, então a configuração (1.21) deverá ter o sinal negativo.

Dado o problema anterior toma-se a seguinte convenção de ordem:

1. Os operadores de criação são ordenados da esquerda para a direita em ordem crescente.
2. Se dois elétrons vão ser criados no mesmo sítio, então  $|\uparrow\rangle$  precede  $|\downarrow\rangle$

Por exemplo

$$\begin{aligned} |\uparrow 0, 00, \uparrow 0, \uparrow 0\rangle &= c_{1,\uparrow}^\dagger c_{3,\uparrow}^\dagger c_{4,\uparrow}^\dagger |0\rangle \text{ e} \\ |\uparrow 0, 0 \downarrow, \uparrow \downarrow, \uparrow 0\rangle &= c_{1,\uparrow}^\dagger c_{2,\downarrow}^\dagger c_{3,\uparrow}^\dagger c_{3,\downarrow}^\dagger c_{4,\uparrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Também como exemplo, é exibido o Hamiltoniano de Hubbard para uma cadeia de 2 sítios com um elétron de spin  $\uparrow$  e outro  $\downarrow$ . Uma base do espaço de estados é

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |00, \uparrow \downarrow\rangle \\ |2\rangle &= |0 \downarrow, \uparrow 0\rangle \\ |3\rangle &= |\uparrow 0, 0 \downarrow\rangle \\ |4\rangle &= |\uparrow \downarrow, 00\rangle, \end{aligned}$$

e o Hamiltoniano de Hubbard do sistema é dado por

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} U & t & -t & 0 \\ t & 0 & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & t \\ 0 & -t & t & U \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

Note alguns sinais positivos para  $t$ , originados da convenção normal de ordem, necessária devido a anticomutação dos operadores de criação e destruição .

No caso de  $U = 6t$  a diagonalização da matriz (1.23) leva ao seguinte resultado

Energias	$-0.60555t$	$0$	$6.0t$	$6.06055t$	
Autovetores	$-0.20495$	$0$	$\sqrt{2}/2$	$0.67677$	
normalizados	$0.67677$	$\sqrt{2}/2$	$0$	$0.20495$	. (1.24)
	$-0.67677$	$\sqrt{2}/2$	$0$	$-0.20495$	
	$0.20495$	$0$	$\sqrt{2}/2$	$-0.67677$	

Já para  $U = t$ , tem-se

$$\begin{array}{rccccc}
 \text{Energias} & -1.56155t & 0 & 1.0t & 2.56155t \\
 \text{Autovetores} & -0.43516 & 0 & \sqrt{2}/2 & 0.55735 \\
 \text{normalizados} & 0.55735 & \sqrt{2}/2 & 0 & 0.43516 \\
 & -0.55735 & \sqrt{2}/2 & 0 & -0.43516 \\
 & 0.43516 & 0 & \sqrt{2}/2 & -0.55735
 \end{array} . \quad (1.25)$$

Comparando os estados fundamentais dos dois casos apresentados, observa-se que para  $U$  menor, os estados duplamente ocupados tornam-se mais prováveis em comparação ao caso de  $U$  maior, porém em ambos os casos, os estados sem dupla ocupação são mais prováveis que os estados com dupla ocupação.

### 1.1.2 Simetrias do modelo

O modelo de Hubbard apresenta algumas simetrias que levam à conservação de algumas quantidades físicas com relação a aplicação do Hamiltoniano. Por exemplo, com relação a carga elétrica, já que o Hamiltoniano de Hubbard comuta com o operador número total,  $N = \sum_{i=1}^L n_i$ , onde  $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ . Resultados conhecidos de Algebra Linear[16] implicam que  $\hat{H}$  é bloco diagonal nos autoespaços do operador número, de tal maneira que aplicando o Hamiltoniano a um estado, somente teremos como resultado um estado com mesma carga. Pode-se concluir também, pela eq. (1.19), e pelo fato de  $\hat{H}$  ser bloco diagonal nos subspaços vetoriais de estados de mesma carga (ou setores de carga), que setores do Hamiltoniano relativos aos subspaços vetoriais com números de elétrons com spin  $\uparrow$  e  $\downarrow$  invertidos têm a mesma dimensão .

Outra simetria do modelo vem da comutação de  $\hat{H}$  com operador magnetização total  $S^z = \sum_{i=1}^L s_i^z$ , onde  $s_i^z = \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$ , o que implica em  $\hat{H}$  também ser bloco diagonal nos conjuntos de estados com mesma componente  $z$  de spin. Portanto ao aplicar  $\hat{H}$  em um dado estado, ele só poderá ir a um estado de mesma componente  $z$  do spin, conservando-a assim como a carga.

Também podemos citar como propriedades do modelo de Hubbard, a simetria partícula-buraco, o que significa que para uma rede com  $L$  sítios, os setores com  $n$  e  $2L - n$  partículas possuem o mesmo espectro de energias e auto-funções.

## 1.2 Super-redes Hubbard

Como já citado, o desenvolvimento de técnicas de deposição bastante precisas tem gerado uma nova classe de materiais, como as super-redes, que são arranjos periódicos de camadas de mesma espessura de um material, intercaladas por uma camada de outro material com diferentes propriedades físicas.

Como exemplo, pode-se citar as multicamadas magnéticas, que são constituídas por camadas de metais de transição magnéticos, como Fe, Ni ou Co, separadas por camadas de metais não-magnéticos, tais como Cu, Ag, Au, Mg ou Mn. Observou-se [14] que o acoplamento entre as camadas magnéticas oscila conforme se altera a espessura tanto da camada magnética, quanto da camada não magnética. Também foi observado uma mudança de valor, de uma escala nunca vista antes, na resistência elétrica com a aplicação de um campo magnético (magnetoresistência gigante) nessas multicamadas.

Esses novos fenômenos, motivaram um avanço teórico para o entendimento dos resultados observados. Nesse sentido, um modelo que tem sido estudado é a *super-rede Hubbard unidimensional*, formada por um arranjo periódico de  $L_U$  sítios (“camada”) nos quais a interação entre os elétrons é repulsiva, que chamaremos de sítios repulsivos, seguida de  $L_0$  sítios sem interação intereletrônica, que chamaremos de sítios livres.

Tal sistema é representado pelo seguinte Hamiltoniano :

$$H = -t \sum_{i\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \sum_i U_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (1.26)$$

onde a notação é padrão, ou seja,  $i$  corre sobre os sítios de uma cadeia unidimensional,  $c_{i,\sigma}^\dagger$  ( $c_{i,\sigma}$ ) cria (destrói) um férmion no sítio  $i$  com estado de spin  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$  e  $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ , com  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ . A diferença para o modelo de Hubbard, Eq. (1.8), está na dependência de  $U$  com o sítio, agora temos  $U_i = U > 0$  para sítios repulsivos e  $U_i = 0$  para sítios livres. Considera-se o Hamiltoniano (1.26) em cadeias com  $N_s$  sítios e  $N_e$  elétrons. Um parâmetro relevante é o número de células unitárias  $N_c = N_s/N_b$  com uma base contendo  $N_b = L_U + L_0$  sítios. Na Fig. 1.2, é representada uma super-rede Hubbard com  $L_U = 4$  e  $L_0 = 3$ .

Com o estudo desse modelo, concluiu-se que o comportamento de certas propriedades pode mudar conforme a região de densidade eletrônica ( $\rho$ ) em que a cadeia se encontra, note que em se tratando de cadeias finitas, restringe-se os possíveis valores que  $\rho$  pode assumir a um conjunto discreto entre 0 e 2. Destacam-se alguns valores de densidade, que são fronteiras na mudança de comportamento:



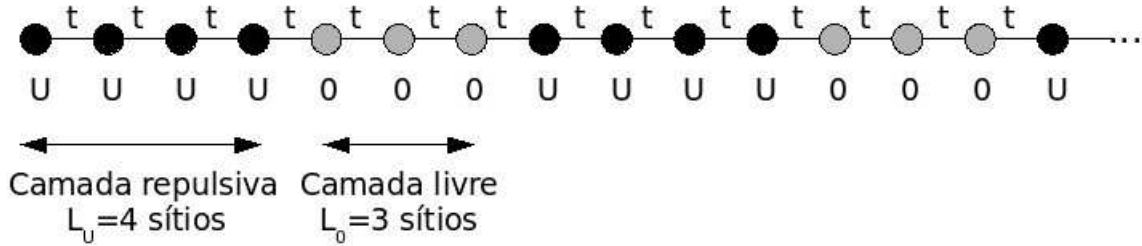


Figura 1.2: Super-rede com  $L_U = 4$  e  $L_0 = 3$  sítios.

- $\rho_0 = \frac{1}{L_U + L_0}$ , em que o número de elétrons é igual ao número de células unitárias.
- $\rho_u = 2 - \rho_0$ , em que número de buracos é igual ao número de células unitárias.
- $\rho_{\uparrow\downarrow} = \frac{2L_0}{L_U + L_0}$ , que no limite de forte acoplamento representa os sítios livres duplamente ocupados e os repulsivos vazios.
- $\rho_I = \frac{L_U + 2L_0}{L_U + L_0}$ , que no limite de forte acoplamento representa os sítios livres duplamente ocupados e os repulsivos cada um com um elétron. Nesta densidade o sistema torna-se isolante.

Definimos também a densidade efetiva por célula unitária ( $\rho_{cel}$ ) como

$$\begin{aligned} \rho_{cel} &= \frac{N_e}{N_c} && \text{se } \rho < \rho_{\uparrow\downarrow}, \text{ e} \\ \rho_{cel} &= \frac{N_e}{N_c} - 2L_0 && \text{se } \rho > \rho_{\uparrow\downarrow}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

No caso em que  $\rho > \rho_{\uparrow\downarrow}$ , subtraímos  $2L_0$  elétrons por célula unitária, pois os sítios duplamente ocupados tornam-se inertes magneticamente.

### 1.2.1 Momentos magnéticos locais

Uma quantidade física conveniente de ser estudada é o momento magnético local, dado por

$$\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle = \langle \mathbf{S}_i^{x2} \rangle + \langle \mathbf{S}_i^{y2} \rangle + \langle \mathbf{S}_i^{z2} \rangle = 3 \langle \mathbf{S}_i^{z2} \rangle = \frac{3}{4} \langle (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})^2 \rangle, \quad (1.28)$$

onde assumimos que o estado fundamental tem spin total nulo, sendo portanto, invariante por rotação de spin.

Além de caracterizar o comportamento magnético da rede, ele serve como uma medida de itinerância dos elétrons. Para uma rede homogênea totalmente localizada ( $U \rightarrow \infty$ ) tem-se [5]

$$\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle = \frac{3}{4}. \quad (1.29)$$

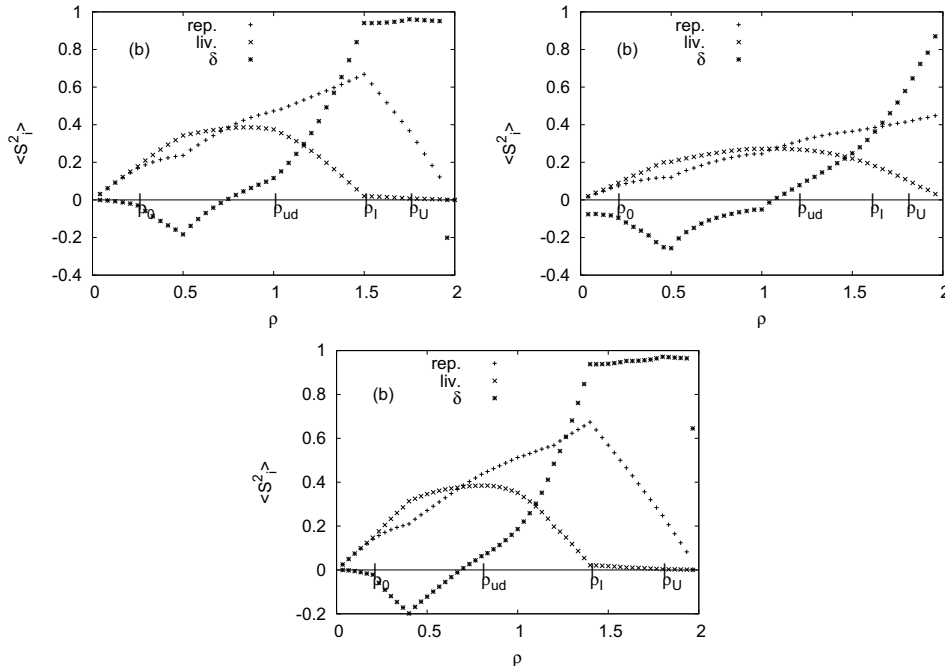


Figura 1.3: Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para  $L_U = L_0 = 2$ ,  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$  e  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ . Cálculos realizados com 12 células unitárias e  $U = 6t$ .

Já para o limite oposto, de total itinerância ( $U \rightarrow 0$ ), tem-se

$$\langle S_i^2 \rangle = \frac{3}{8}. \quad (1.30)$$

Estudando o comportamento do momento magnético local nas super-redes Hubbard, conclui-se que ele está relacionado com a densidade eletrônica na rede. Resumidamente

- $\rho < \rho_0$ , os momentos magnéticos estão igualmente distribuídos entre os sítios repulsivos e livres.
- $\rho_0 < \rho < \rho_{\uparrow\downarrow}$ , o momento magnético nos sítios livres começa a crescer mais rápido que nos sítios repulsivos.
- $\rho_{\uparrow\downarrow} < \rho < \rho_I$ , o momento magnético começa a diminuir nos sítios livres, devido à dupla ocupação, e a aumentar nos sítios repulsivos.
- $\rho > \rho_I$ , o momento magnético nos sítios repulsivos também começa a diminuir devido à dupla ocupação.

Na Fig. 1.3, apresentamos para três super-redes o comportamento das médias dos momentos magnéticos locais nos sítios repulsivos  $\langle S_U^2 \rangle$ , e livres  $\langle S_0^2 \rangle$ . Também apresentamos o *bias*

definido por

$$\delta = \frac{\langle S_U^2 \rangle - \langle S_0^2 \rangle}{\langle S_U^2 \rangle + \langle S_0^2 \rangle}, \quad (1.31)$$

que nos indica de maneira concisa onde os momentos magnéticos estão privilegiados ( $\delta < 0$ , nas camadas livres e  $\delta > 0$ , nas camadas repulsivas). As mudanças abruptas de comportamento naquela Figura são devidas provavelmente ao fato da densidade variar discretamente em uma cadeia finita.

### 1.2.2 Lacuna de carga

A condução dos elétrons em uma cadeia, além de ser analisada pelo momento magnético local, pode ser estudada pelo comportamento do lacuna de carga, dado por

$$\Delta_c = E(N_c, N_e + 1) + E(N_c, N_e - 1) - 2E(N_c, N_e), \quad (1.32)$$

onde  $E(N_c, N_e)$  é a energia do estado fundamental de uma cadeia com  $N_c$  células unitárias, e  $N_e$  elétrons.  $\Delta_c$  indica a energia necessária para adicionar (ou retirar) um elétron de uma cadeia.

Um valor nulo de lacuna de carga para  $N_c \rightarrow \infty$  indica uma cadeia condutora, enquanto um valor diferente de zero indica uma cadeia isolante. Para uma cadeia Hubbard homogênea, tem-se uma transição metal-isolante para banda semi-cheia ( $\rho = 1$ ). No limite de forte acoplamento podemos pensar que esta cadeia possui um elétron “parado” em cada sítio.

Para super-redes esta transição é deslocada para  $\rho_I$ , analogamente, em forte acoplamento temos dois elétrons em cada sítio livre, e um elétron em cada sítio repulsivo. Nessa densidade, os sítios livres tornam-se inertes magneticamente, e os sítios repulsivos interagem segundo um Hamiltoniano de Heisenberg efetivo,

$$H_{ef} = J_2 \sum_{[k,l]} \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l, \quad (1.33)$$

onde  $[k, l]$  representa soma sobre sítios repulsivos primeiros vizinhos, e  $J_2 = \frac{8t^4}{|U|^3}$ .

### 1.2.3 Correlação de spin

A correlação de spin entre dois sítios  $i, j$ , como anteriormente considerando que o estado fundamental tem spin total nulo, é dada por

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle = \langle \mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_j^x \rangle + \langle \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_j^y \rangle + \langle \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_j^z \rangle = 3 \langle \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_j^z \rangle = \frac{3}{4} \langle (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})(n_{j,\uparrow} - n_{j,\downarrow}) \rangle. \quad (1.34)$$

Pode-se analisar a periodicidade das correlações através do fator de estrutura magnético,

$$S(q) = \frac{1}{N_c} \sum_{ij} e^{i q (r_i - r_j)} \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle, \quad (1.35)$$

Em uma cadeia Hubbard homogênea, o fator de estrutura magnético apresenta um único pico, em  $q_{\text{máx}} = 2k_F$ , onde  $k_F$  é o vetor de Fermi, dado por

$$\begin{aligned} k_F &= \frac{\pi \rho}{2} && \text{se } \rho \leq 1, \text{ e} \\ k_F &= \frac{\pi(2 - \rho)}{2} && \text{se } \rho > 1. \end{aligned} \quad (1.36)$$

No entanto, para super-redes, o comportamento do fator de estrutura magnético não é tão simples. Sua estrutura produz uma maior variedade de comportamento do ordenamento magnético, sendo este dependente da região de densidade que a cadeia se encontra, podendo até apresentar dois picos no fator de estrutura magnético. O que significa uma tendência do sistema quasi-ordenar em um arranjo dominado por dois períodos.

O comportamento, por região de densidade é o seguinte:

- $\rho < \rho_0$ , o sistema comporta-se praticamente como o homogêneo,  $q_{\text{máx}} = \pi \rho_{\text{cel}}$ .
- $\rho_0 < \rho < \rho_{\uparrow\downarrow}$ , tem-se um único pico em  $q_{\text{máx}} = \pi$ .
- $\rho_{\uparrow\downarrow} < \rho < \rho_u$  tem-se dois picos, um em  $q_{\text{máx}} = \pi$  e outro em  $q'_{\text{máx}} = \pi \rho_{\text{cel}}$ .
- $\rho > \rho_u$ , novamente tem-se um único pico, em  $q_{\text{máx}} = \pi(2 - \rho_{\text{cel}})$ .

Nos casos em que há dois picos, a posição do segundo pico oscila com a camada livre. Pode-se chegar ao seguinte resultado para o período dessa oscilação [9]

$$\begin{aligned} \Delta L_0 &= \left(1 - \frac{k_F}{\pi}\right)^{-1} && \text{se } \rho_{\uparrow\downarrow} < \rho < 1, \text{ e} \\ \Delta L_0 &= \frac{\pi}{k_F} && \text{se } 1 < \rho < \rho_u. \end{aligned} \quad (1.37)$$

## 1.2.4 Correlação de carga

Diferentemente de metais normais, nos quais há uma distribuição uniforme de carga, em condutores com uma estrutura de cadeia, os elétrons condensam em um estado fundamental com uma distribuição modulada de carga. Estas ondas de densidade de carga, como são chamadas,

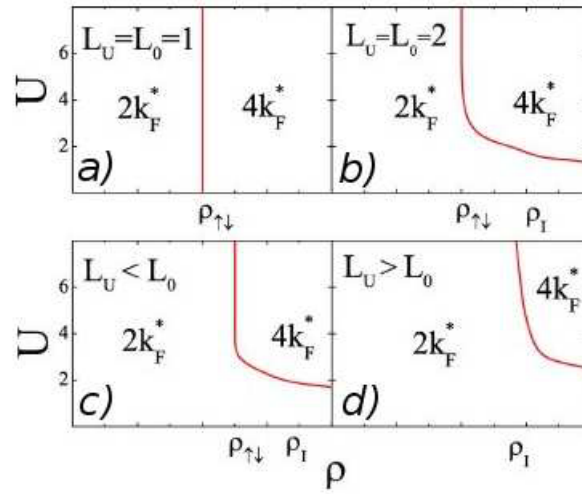


Figura 1.4: Transições  $2k_F^* - 4k_F^*$  para o vetor de onda dominante na onda de densidade de carga (vide texto).

determinam propriedades interessantes como comportamento não-ohmico e correntes oscilantes na presença de uma diferença de potencial constante [15].

Estuda-se o ordenamento de carga em super-redes Hubbard, através do fator de estrutura de carga, dado por

$$C(q) = \frac{1}{N_c} \sum_{i,j} e^{iq(r_i - r_j)} \langle Q_i Q_j \rangle, \quad (1.38)$$

onde  $\langle Q_i Q_j \rangle = \langle \Psi_0 | n_i n_j | \Psi_0 \rangle$ . Um pico no fator de estrutura de carga indica qual vetor de onda domina a onda de carga.

Desse estudo, pode-se concluir que, para as super-redes Hubbard, o vetor de onda que domina a onda de carga depende, além da densidade eletrônica ( $\rho$ ) e da estrutura da cadeia ( $L_U$  e  $L_0$ ), da repulsão coulombiana  $U$ . Dado (1.27) definimos o vetor de Fermi efetivo ( $k_F^*$ ) por,

$$\begin{aligned} 2k_F^* &= \pi \rho_{cel} & \text{se } \rho_{cel} < 1, \text{ e} \\ 2k_F^* &= \pi(2 - \rho_{cel}) & \text{se } \rho_{cel} > 1. \end{aligned} \quad (1.39)$$

No caso de  $L_U = L_0 = 1$ , há um comportamento muito bem definido, para  $\rho < \rho_{\uparrow\downarrow} = 1$ , o pico encontra-se em  $q^* = 2k_F^*$ , enquanto para  $\rho > \rho_{\uparrow\downarrow} = 1$  o pico encontra-se em  $q^* = 4k_F^*$ , independente de  $U$ . Ainda no caso de  $l = 1$ , mas com  $L_U = L_0 > 1$ , a fronteira da transição  $2k_F^* - 4k_F^*$  torna-se mais complexa passando a ter dependência de  $U$ . A Fig 1.4 [10] mostra essa transição, nos casos citados (em a e b, respectivamente), e também para  $L_U < L_0$ , em c, e  $L_U > L_0$ , em d.

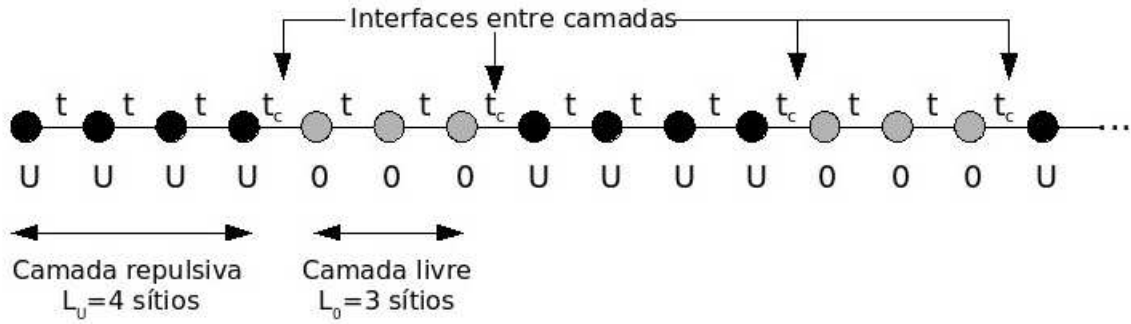


Figura 1.5: Ilustração de super-rede estudada neste trabalho (vide texto).

### 1.3 Objetivos

Nesta dissertação, é introduzida uma modulação no valor do termo de *hopping* de elétrons entre camadas diferentes das super-redes, temos assim o seguinte Hamiltoniano

$$H = - \sum_{i\sigma} t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.40)$$

Estudamos cadeias tomando  $t_i = t$  para o *hopping* de elétrons entre sítios pertencentes à mesma camada, e  $t_i = t_c$ , com  $0 < t_c \leq t$ , para o *hopping* de elétrons entre sítios de camadas diferentes, o valor de  $t_c$  estudado é menor que  $t$  pois isso dificulta a movimentação de elétrons, e pode trazer mudanças interessantes no comportamento da cadeia. Ilustramos na Fig 1.5 uma super-rede com essa modulação, nesta Figura temos  $L_U = 4$  e  $L_0 = 3$ , note que entre sítios de camadas diferentes o parâmetro de *hopping* é  $t_c$ , ao invés de  $t$ .

O objetivo é ver se essa modulação pode mudar, e como pode, as propriedades das super-redes, como transições metal-isolante, ou ordenamentos magnéticos e de carga. É válido ressaltar que essa modificação no modelo é inédita na literatura, de maneira que todos os resultados por nós obtidos são originais e somente comparáveis com a literatura no caso limite  $t_c = t$ .

## 2 *O algoritmo do grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG)*

Neste capítulo, é apresentado de maneira breve o algoritmo do grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG, do inglês), para um estudo mais detalhado recomenda-se a leitura da Referência [24], e das referências lá citadas.

### 2.1 Introdução

Quando se trabalha com problemas quânticos interagentes na rede, um dos principais obstáculos para a solução do problema está relacionado com o tamanho do espaço de Hilbert que representa o sistema estudado [24]. Por exemplo, para o modelo de Hubbard, em um problema com  $L$  sítios,  $n_{\uparrow}$  elétrons com spin  $\uparrow$  e  $n_{\downarrow}$  elétrons com spin  $\downarrow$ , a dimensão do espaço de Hilbert é dada pela equação (1.19), o que significa que, para uma cadeia com apenas 12 sítios, 6 elétrons com spin  $\uparrow$  e outros 6 com spin  $\downarrow$ , a dimensão do espaço de Hilbert associado é 853776.

Como tentativa para contornar esse problema, nasceu uma versão do algoritmo do grupo de renormalização de Wilson [20], cuja idéia é começar com um sistema para o qual pode-se encontrar a solução exata, o tamanho do sistema é então aumentado, porém sem aumentar o tamanho do espaço de Hilbert, até que se chegue ao sistema de dimensão desejada.

Aumentar o tamanho do sistema sem aumentar o espaço de Hilbert é feito em dois passos:

- O tamanho do sistema é aumentado, e conseqüentemente o espaço de Hilbert também cresce.
- O espaço de Hilbert é truncado para seu tamanho original, mantendo seu tamanho constante.

Para poder-se utilizar um método com essas características dois pontos devem ser definidos:

- Como o aumento do sistema é feito.
- Qual critério será utilizado no segundo passo para decidir os estados que serão mantidos.

Na versão do algoritmo de Wilson começa-se com um sistema pequeno. Esse sistema é então unido a um sistema igual, dobrando seu tamanho. O primeiro ponto está definido. O Hamiltoniano desse novo bloco é obtido e diagonalizado exatamente, seus autovetores serão utilizados como base. O espaço será truncado para o espaço gerado pelos  $m$  autovetores correspondentes aos menores autovalores (energias), onde  $m$  é a dimensão do espaço de Hilbert que se quer trabalhar. O segundo ponto está definido.

Esse procedimento mostrou-se satisfatoriamente eficiente para o modelo de Kondo [20]. Porém para outros modelos fortemente correlacionados, como o de Hubbard, Heisenberg e t-J, ele não produz bons resultados. O maior motivo para esta falha está na escolha dos autoestados como estados para serem mantidos na base. Como o bloco não está previamente conectado com o resto do sistema, nesse caso outro bloco idêntico, esses autoestados não têm as características apropriadas na borda do bloco em que será conectado o outro. White e Noack [21] indicaram esse problema e tentaram resolvê-lo combinando autoestados de diferentes blocos e sob varias condições de contorno.

## 2.2 Aumento do bloco e redução do espaço no DMRG

O objetivo desta seção é descrever como o DMRG realiza os dois passos da renormalização, o aumento do sistema, e a redução do espaço de Hilbert a seu tamanho original.

Como unidade elementar para o DMRG tem-se o sítio, que é descrito pelos estados  $|d_i\rangle$  ( $i=1,..D$ ), nos quais o sítio pode ser encontrado. Um bloco  $B(l, m)$  é composto de  $l$  sítios, seu Hamiltoniano  $H_B$  representa a interação apenas entre esses  $l$  sítios do bloco. Representando  $B(l, m)$  e  $H_B$  tem-se uma base  $m$ -dimensional, com  $m$  normalmente menor que a dimensão do espaço de Hilbert associado ao bloco. O bloco é aumentado adicionando-se a ele um sítio, formando, assim, um *bloco aumentado*  $B^e$ <sup>1</sup> (as três unidades básicas do DMRG são ilustradas na figura 2.1). Dada uma base  $|b_1\rangle...|b_m\rangle$  de  $B(l, m)$  e  $|d_1\rangle...|d_D\rangle$  dos estados do sítio, podemos construir uma base de  $B^e$  pelo produto tensorial

$$|b_k^e\rangle = |b_i\rangle \otimes |d_j\rangle, \quad (2.1)$$

de modo que a dimensão do espaço de Hilbert de  $B^e$  é dada por  $m \times D$  (produto das dimensões

<sup>1</sup>do inglês *enlarged block*, utilizam-se as siglas em inglês por estarem estabelecidas na literatura.



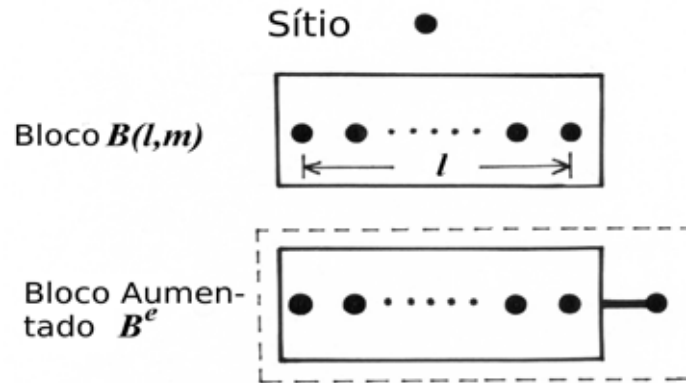


Figura 2.1: Unidades básicas do DMRG.

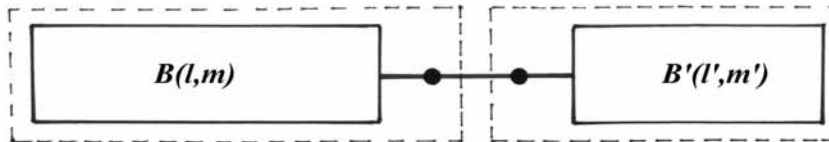


Figura 2.2: Superbloco

de  $B(l,m)$  e do sítio). Uma possível relação dos valores de  $i$  e  $j$  para  $k$  pode ser dada por  $k = (i-1)D + j$ , onde  $k$  é o índice da base de  $B^e$ , e  $i$  e  $j$  são, respectivamente, os índices das bases de  $B(l,m)$  e dos estados do sítio. O Hamiltoniano do bloco aumentado é

$$H_e = H_B \otimes H_d. \quad (2.2)$$

O primeiro passo, aumento do sistema, é feito da seguinte maneira, dado o bloco aumentado  $B^e$  constrói-se o *superbloco* (Figura 2.2), o que é feito conectando ao bloco aumentado inicial, um outro bloco aumentado (não necessariamente de mesmo tamanho). Uma base do espaço de Hilbert é dada pelo produto tensorial das bases dos blocos aumentados. Constrói-se também o Hamiltoniano do superbloco e calcula-se seu estado fundamental usando, por exemplo, Lanczos<sup>2</sup>. O estado fundamental será o estado *alvo* do DMRG.

Antes de descrever como o DMRG executa o segundo passo, é interessante citar o conceito de matriz densidade<sup>3</sup>. Esta foi desenvolvida pela Mecânica Estatística considerando um sistema em contato com um reservatório térmico. Dado o estado do conjunto formado pelo sis-

<sup>2</sup>Para estudo deste método recomenda-se a seção 4 da Referência [24]

<sup>3</sup>Ver, e.g., a Referências [18]

tema em contato com um reservatório, que em linguagem de Mecânica Estatística denomina-se *universo*, a matriz densidade indica quais estados do sistema mais contribuem para esse estado do universo. Expressando o estado do universo na base dos produtos tensoriais citada acima, tem-se

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{m \times D} \sum_{j=1}^{m' \times D} a_{ij} |b_i^e\rangle \otimes |b_j^{e'}\rangle, \quad (2.3)$$

a matriz densidade é dada por

$$\rho_{ii'} = \sum_{j=1}^{m' \times D} a_{ij} a_{i'j}^*. \quad (2.4)$$

Dados os autovetores  $|u_\alpha\rangle$  ( $\alpha = 1, \dots, m \times D$ ) de  $\rho$ , associados aos autovalores  $w_\alpha$ , tem-se  $\sum_\alpha w_\alpha = 1$ , com  $w_\alpha$  sendo a probabilidade do sistema estar no estado  $|u_\alpha\rangle$ , dado que o universo está em  $|\Psi_0\rangle$ .

Para realizar a redução do espaço, o DMRG utiliza essa informação da seguinte maneira: os  $m$  autoestados de  $\rho$  mais prováveis (associados aos  $m$  maiores autovalores) serão utilizados como base de  $B^e$ , e assim, teremos como novo bloco  $B(l+1, m)$ . White provou que essa escolha minimiza  $|\langle \psi | \psi \rangle - \langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle|$ , onde  $|\bar{\psi}\rangle$  é uma aproximação de  $|\psi\rangle$ , a função de onda do bloco aumentado [22]. Para representar o Hamiltoniano deste novo bloco, constrói-se a matriz  $O$ , com os  $m$  vetores da base em suas linhas e calcula-se  $H_{B(l+1, m)}$  da seguinte maneira,

$$H_{B(l+1, m)} = O H_e O^\dagger. \quad (2.5)$$

Essa transformação também é utilizada para representar outros operadores na nova base.

Uma medida da precisão do algoritmo pode ser dada pela soma dos autovalores relacionados com os autovetores utilizados,  $P(m) = \sum_{\alpha=1}^m w_\alpha$ . À medida que  $P(m)$  tende à unidade, mais representativo é o conjunto de estados retidos na truncagem e maior a exatidão na energia e na autofunção de estado alvo.

## 2.3 O algoritmo da cadeia finita

Esta é a versão do DMRG utilizada neste trabalho<sup>4</sup>. Seu objetivo é restringir o tamanho da cadeia a um determinado número  $L$  de sítios, e melhorar a precisão dos resultados obtidos realizando algumas iterações, que refinam a base utilizada para a representação dos blocos.

Antes de alcançar o tamanho desejado do sistema ( $L$  sítios), ele é crescido conectando-se ao bloco aumentado um bloco “espelho”, para formar o superbloco (o procedimento é ilustrado na

<sup>4</sup>Existe ainda outra versão, a da cadeia infinita, ver [24].

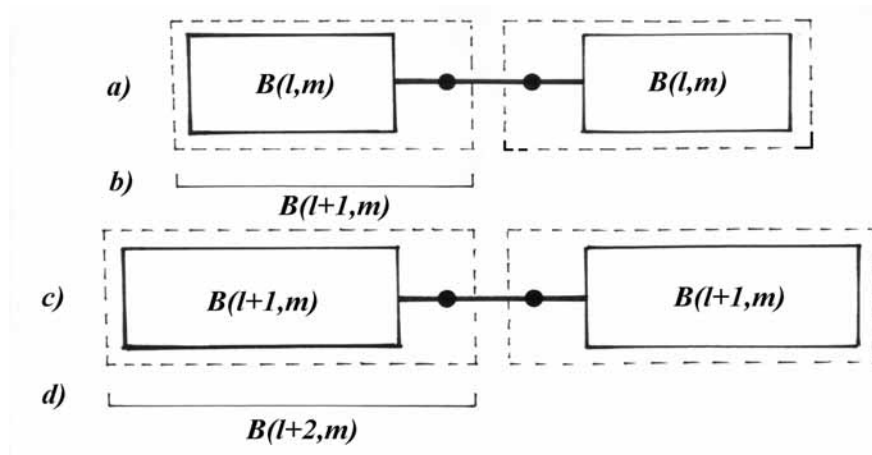


Figura 2.3: Crescimento do sistema. (a) Superbloco (b) Truncagem do bloco aumentado (c) O antigo bloco aumentado passa a ser o bloco atual (d) Nova truncagem.

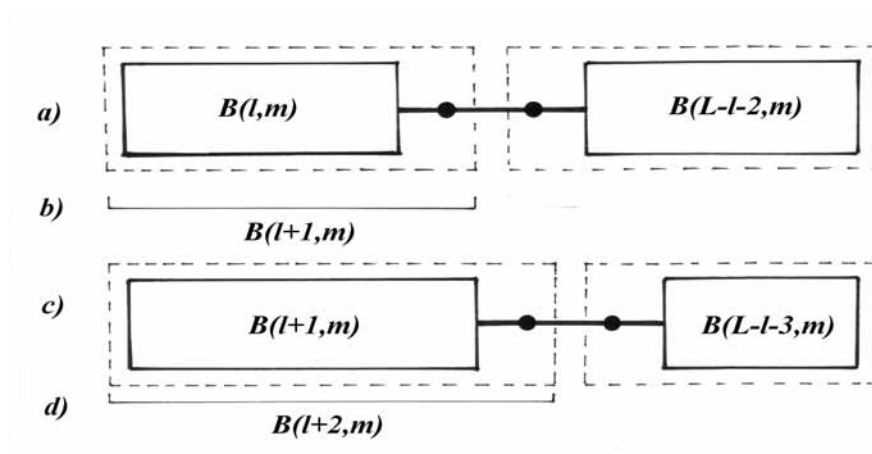


Figura 2.4: Procedimento do algoritmo da cadeia finita. (a) Superbloco (b) Truncagem do bloco aumentado (c) O bloco à esquerda cresce um sítio, enquanto o da direita diminui um sítio (d) Nova truncagem.

Fig. 2.3). Assim o sistema cresce 2 sítios a cada passo, e para cada número de sítios do bloco, salva-se seu Hamiltoniano e operadores relevantes para os cálculos a serem realizados.

Ao atingir o tamanho desejado, com  $l = (L - 2)/2$ , não mais conecta-se o bloco com um “espelho”, mas sim aumenta-se um sítio no bloco esquerdo e diminui-se um no bloco direito, e assim sucessivamente (a Fig 2.4 ilustra um passo do algoritmo), até que o bloco direito tenha apenas um sítio, então passa-se a crescer o bloco direito e a diminuir o bloco esquerdo, até que se chegue a configuração simétrica dos blocos novamente. No caso de um sistema espacialmente simétrico com relação ao centro da cadeia, essa oscilação nos tamanhos dos blocos representa uma iteração, já para o caso de um sistema não simétrico, para completar a iteração precisa-se chegar a ter apenas um sítio no bloco esquerdo e voltar a crescê-lo até chegar a configuração simétrica novamente. Essa variação no tamanho dos blocos, formando uma cadeia com tamanho

fixo, refina a representação dos operadores de cada bloco, levando a melhores resultados. Pode-se estimar a convergência da energia, por exemplo, calculando a diferença entre os valores de energia para uma configuração simétrica e a anterior. A Fig. 2.5 ilustra o crescimento de um sistema com  $L = 10$  sítios, e uma iteração - para um sistema não simétrico - do algoritmo da cadeia finita (no caso de um sistema simétrico a figura representa duas iterações).

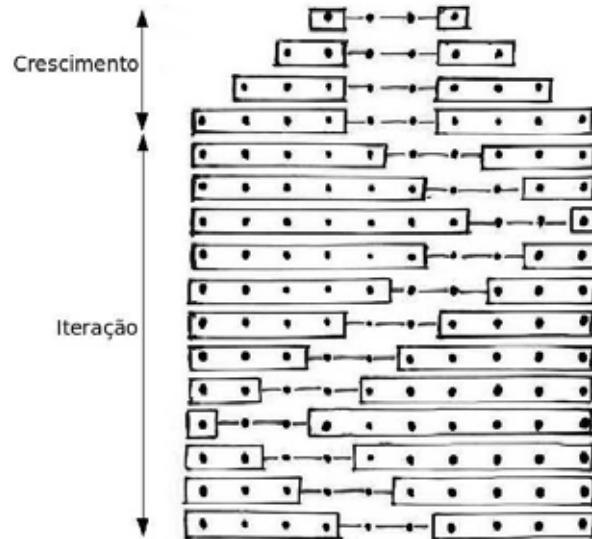


Figura 2.5: Crescimento e iteração do algoritmo da cadeia finita para um sistema com  $L = 10$  sítios.

O algoritmo DMRG, permite calcular o estado fundamental e sua energia - e assim outras propriedades que possam ser obtidas a partir destas - para cadeias quânticas com um número grande de sítios, porém com a dimensão do espaço de Hilbert reduzida a um limite, sendo essa representação feita de maneira otimizada.

Desse modo, ele permite trabalhar com cadeias muito grandes em comparação a métodos de diagonalização que trabalham com o espaço de Hilbert completo.

## 3 *Resultados e discussões*

Neste capítulo são comentadas as etapas da realização do projeto e apresentados os principais resultados obtidos para o modelo estudado. É importante lembrar que os resultados obtidos para  $t_c = t$  concordam com os da literatura, enquanto os resultados obtidos para  $t_c \neq t$  são inéditos.

### 3.1 Metodologia

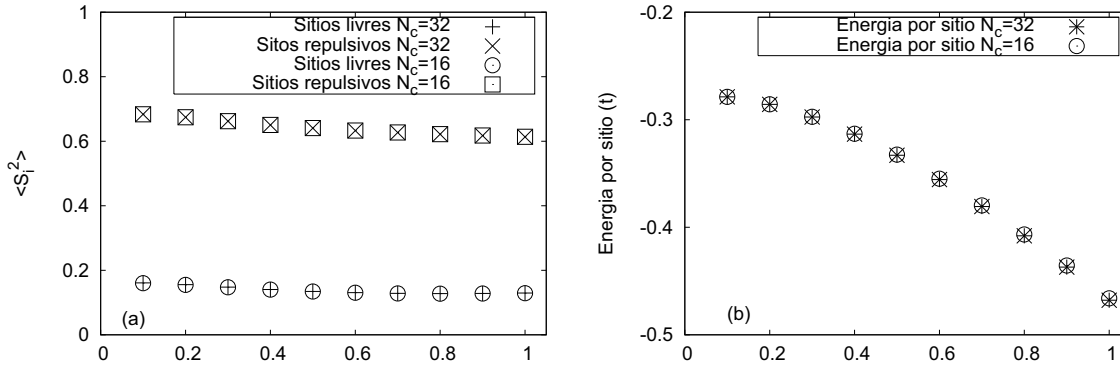
A ferramenta computacional utilizada neste estudo, foi desenvolvida tendo como base um programa já existente, em linguagem FORTRAN, desenvolvido pelo orientador deste trabalho, para super-redes Hubbard sem a modulação para condução entre camadas, sendo necessário o estudo do programa para sua adaptação ao problema proposto. Foram feitas duas adaptações independentes, uma pelo aluno e outra pelo orientador, como chegassem caso houvesse algum erro, ambas versões produziram os mesmos resultados nos testes.

O hardware tipicamente utilizado foi um computador com processador Intel Pentium D 915, rodando com sistema operacional Linux Fedora 6. Para os cálculos típicos, o tempo envolvido para o cálculo das propriedades de uma cadeia em um dado  $t_c$  foi de aproximadamente 24 horas.

Foram realizados cálculos para três estruturas de super-redes  $L_U = L_0 = 2$ ,  $L_U = 2$  e  $L_0 = 3$ , e  $L_U = 3$  e  $L_0 = 2$ . Sendo cada uma representativa de um caso de relação de tamanho entre camadas repulsivas e livres. Não foram estudadas mais estruturas devido à complexidade computacional envolvida, mas seria interessante a realização de cálculos com mais estruturas de super-redes. Em geral, os cálculos foram realizados em região de forte acoplamento, com  $U = 6t$ . Esse valor é menor do que o que pode ser considerado típico para metais de transição, usando a Eq. (1.7) teríamos  $U/t \approx 13$ , pois os valores estimados por Hubbard são para o núcleo atômico, e conforme a idéia apresentada na Fig. 1.1, consideramos o núcleo atômico e elétrons ocupando orbitais mais internos, causando assim, um efeito de blindagem que justifica o uso de um valor menor do que  $U$  do modelo.

$L_U = 2, L_0 = 2$ $\rho_0 = \frac{1}{4}, \rho_I = \frac{3}{2}$ $N_c = 16 N_e =$	$\rho = 0.15$ 10	$\rho = \frac{1}{2}$ 32	$\rho = \frac{3}{4}$ 48	$\rho = \rho_{\uparrow\downarrow} = 1$ 64	$\rho = \frac{5}{4}$ 80	$\rho = \frac{11}{8}$ 88
$L_U = 2, L_0 = 3$ $\rho_0 = 0.2 \rho_I = 1.6$ $N_c = 16 N_e =$	$\rho = \frac{1}{8}$ 10	$\rho = 0.6$ 48	$\rho = 0.8$ 64	$\rho = 0.95$ 76	$\rho = \rho_{\uparrow\downarrow} = 1.2$ 96	$\rho = 1.3$ 104
$L_U = 3, L_0 = 2$ $\rho_0 = 0.2 \rho_I = 1.4$ $N_c = 16 N_e =$	$\rho = \frac{1}{8}$ 10	$\rho = 0.4$ 32	$\rho = 0.6$ 48	$\rho = \rho_{\uparrow\downarrow} = 0.8$ 64	$\rho = 1.2$ 96	$\rho = 1.3$ 104

Tabela 3.1: Configurações de super-redes que estudamos.

Figura 3.1: Momentos magnéticos(a) e energia por sítio(b) do sistema  $L_U = L_0 = 2, U = 6t$  e  $\rho = 1.1$ , para  $N_c = 16$  e  $N_c = 32$ .

Primeiramente variou-se  $t_c$ , de  $0.1t$  a  $t$  em intervalos de  $0.1t$ , para valores em diversas regiões de densidade eletrônica (ver Tabela 3.1) e redes com 16 células unitárias. Com esse tamanho de rede estamos sem efeitos de tamanho finito significativos, pois como se vê na Fig. 3.1, uma comparação entre  $N_c = 16$  e  $N_c = 32$  de momentos magnéticos locais e energia por sítio para  $L_U = L_0 = 2, U = 6t$  e  $\rho = 1.1$ , praticamente não há diferenças entre os valores quando dobramos o tamanho do sistema. Exibe-se também, a comparação entre uma extrapolação de  $N_c \rightarrow \infty$ (a) e  $N_c = 16$ (b) para  $L_U = 3, L_0 = 2$  e  $N_e = 96$ , na Fig. 3.2

Para os resultados obtidos com os pontos da Tabela 3.1, não foi possível encontrar um padrão claro no comportamento da lacuna de carga. Foi feito então, um mapeamento dos valores da lacuna de carga, Eq. (1.32), em função da densidade eletrônica nos extremos do intervalo de  $t_c$  ( $0.1t$  e  $t$ ). Devido ao volume de cálculos a ser feito para esse mapeamento, utilizou-se 12 células unitárias. Como veremos a seguir, com esse mapeamento sistemático pode-se notar alguns comportamentos diferentes para determinadas densidades.

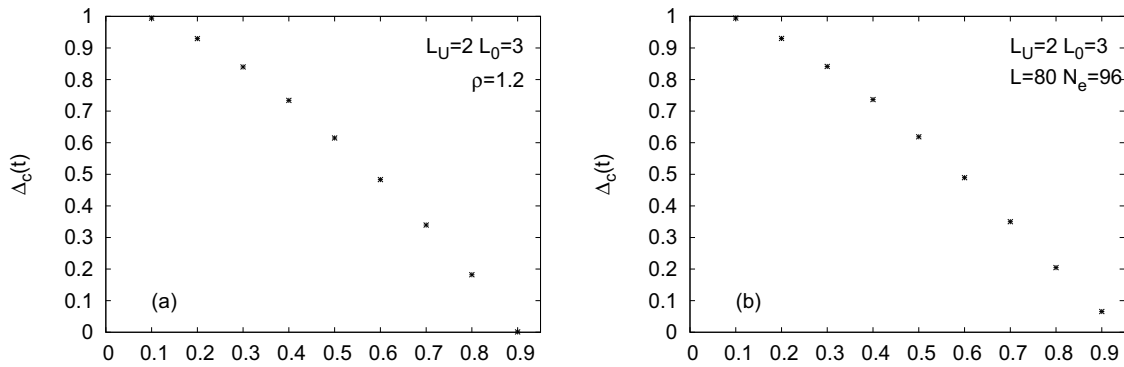


Figura 3.2: Comparação da extrapolação da lacuna de carga em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$  e  $\rho = 1.2$ (a) e o caso equivalente com  $N_c = 16$ (b).

## 3.2 Lacuna de Carga

Como mencionado, será apresentado um mapeamento da lacuna de carga,  $\Delta_c$ , em função da densidade eletrônica,  $\rho$ , para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . A Fig. 3.3 traz esses resultados para as super-redes estudadas. Nota-se naquela Figura, que para a maioria das densidades a lacuna de energia de carga tem um valor muito próximo de zero, se comparado com o valor da lacuna para  $\rho_I$ , onde o sistema é sabidamente isolante.

No entanto, para certos valores de  $\rho$  a lacuna apresenta valor comparável ao seu valor em  $\rho_I$ . No intuito de compreendermos esse comportamento da lacuna de carga apresentamos a seguir, para  $L_U = 3$  e  $L_0 = 2$  e algumas dessas densidades, a distribuição na rede do momento magnético e da densidade eletrônica. A título de comparação exibimos também as mesmas quantidades para densidades adjacentes àquelas onde a lacuna tem um valor significativo. (Figuras análogas são exibidas no Apêndice A.1 para as demais estruturas de super-redes).

A Fig. 3.4 exhibe as propriedades acima citadas para a rede  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  e  $t_c = t$  em  $\rho = 1.2$  e na densidade logo acima, exemplificando um caso em que temos uma lacuna de energia considerável para  $t_c = t$ . A distribuição de momentos magnéticos e ocupação eletrônica não apresenta grandes diferenças entre as densidades exibidas.

Já para o caso em que tem-se um valor grande de lacuna de carga para  $t_c = 0.1t$ , é exibida a Fig. 3.5, que traz aquelas propriedades para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  e  $t_c = 0.1t$  em  $\rho = 0.2$  e na densidade adjacente acima. Para este caso, existe uma grande diferença entre as distribuições. Enquanto para  $N_e = 12$  tem-se uma distribuição uniforme dos momentos magnéticos e ocupação eletrônica, para  $N_e = 14$  tem-se esses valores oscilando ao longo da cadeia, embora somente nos sítios livres.

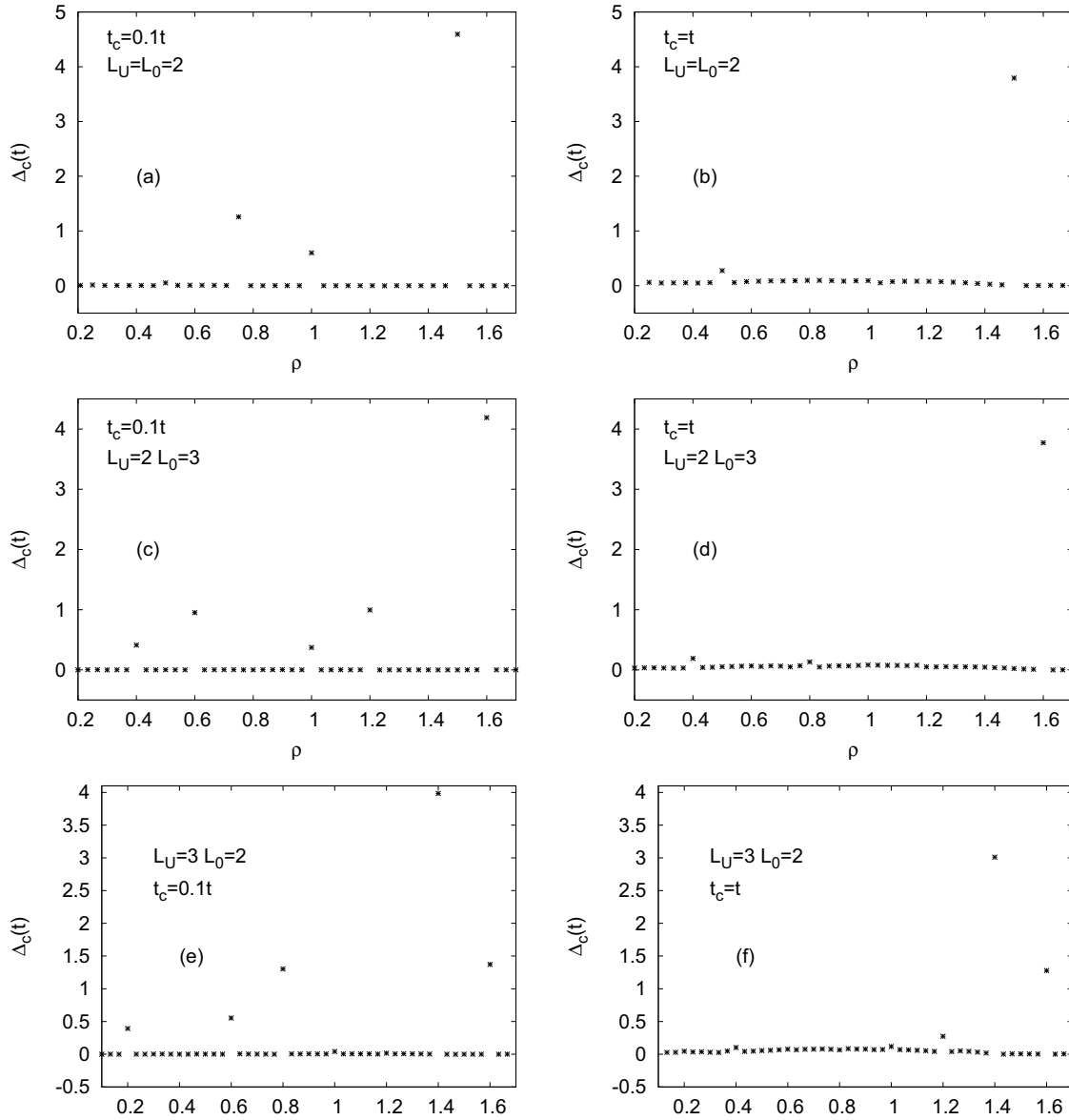


Figura 3.3: Lacuna de carga em função da densidade eletrônica para  $L_U = L_0 = 2$  em (a)  $t_c = 0.1t$  e (b)  $t_c = t$ ,  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$  em (c)  $t_c = 0.1t$  e (d)  $t_c = t$  e  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  em (e)  $t_c = 0.1t$  e (f)  $t_c = t$ .



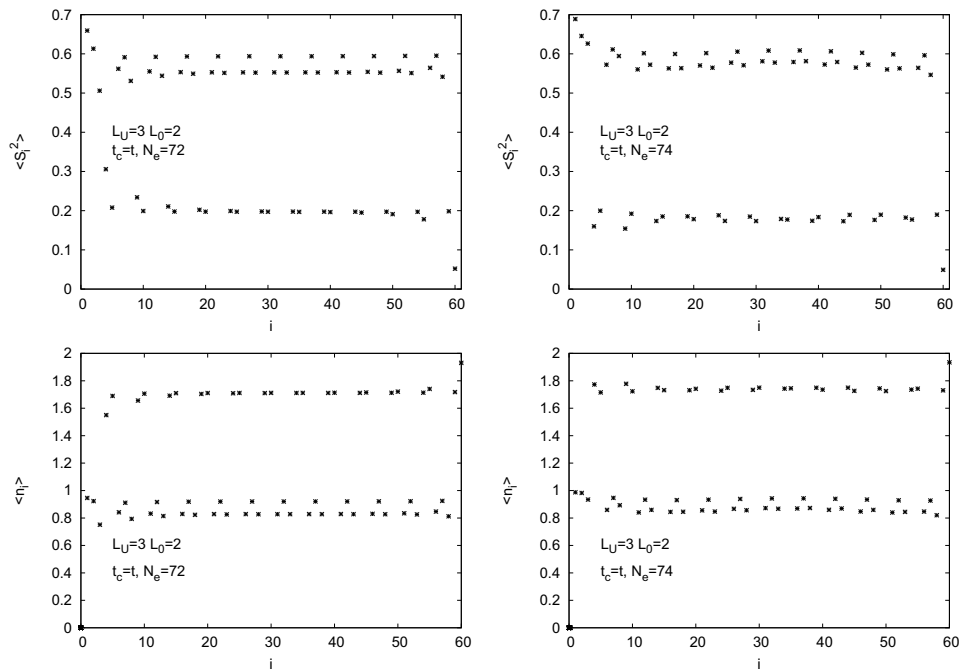


Figura 3.4: Comparação de momentos magnéticos locais e ocupação eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  entre  $\rho = 1.2$  ( $N_e = 72$ ) e a densidade adjacente acima ( $N_e = 74$ ), para  $t_c = t$ .

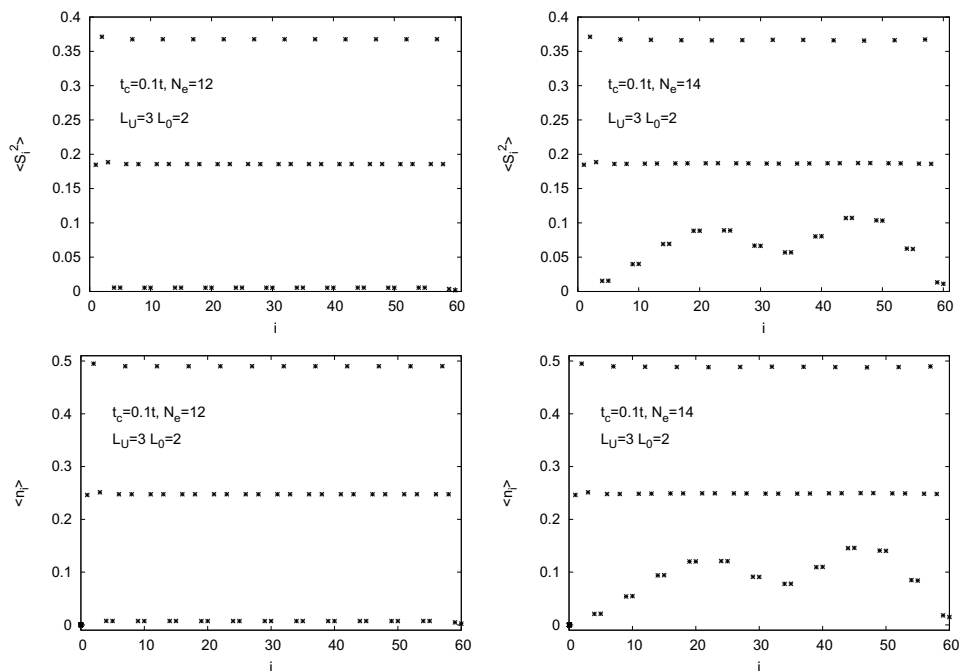


Figura 3.5: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  entre  $\rho = 0.2$  ( $N_e = 12$ ) e a densidade adjacente acima ( $N_e = 14$ ), para  $t_c = 0.1t$ .

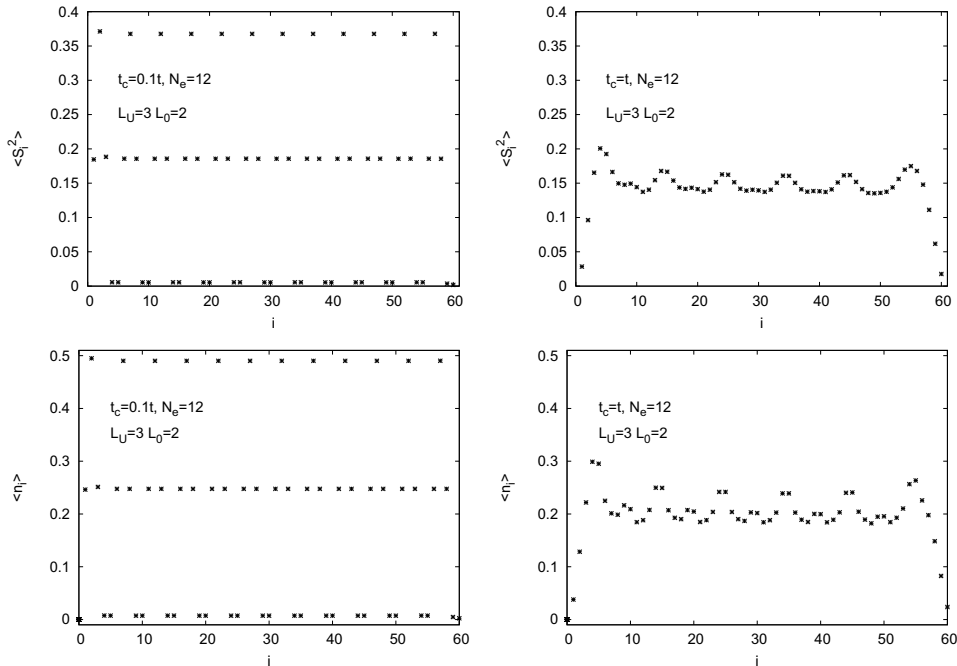


Figura 3.6: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  em  $\rho = 0.2$  ( $N_e = 12$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ .

Após essa comparação de comportamentos em um mesmo  $t_c$ , entre densidades próximas, é interessante compará-los na mesma densidade, entre  $t_c$ . Isto é feito nas Fig. 3.6 e 3.7.

A partir daquelas Figuras, pode-se notar que para o caso de lacuna grande em  $t_c = 0.1t$ , existe uma distribuição muito mais uniforme para  $t_c = 0.1t$ , indicando uma ocupação comensurável dos elétrons com a estrutura da super-rede. Fato que não ocorre para nenhum dos  $t_c$ 's no caso que se tem uma lacuna grande em  $t_c = t$ .

São exibidos ainda neste capítulo, resultados mais detalhados em  $t_c$  para  $L_U = L_0 = 2$  (e no Apêndice A para as demais redes). A Fig. 3.8 exhibe resultados para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 64$  e  $N_e = 88$ , exemplificando um caso em que não temos um valor grande de lacuna de carga em qualquer  $t_c$ . Nota-se naquela Figura que a lacuna de energia apresenta uma curva suave e monotônica em função de  $t_c$ , apresentando valores pequenos. A ocupação eletrônica se aproxima de 1 elétron por sítio repulsivo e 1.75 por sítio livre para  $t_c = 0.1t$ , como  $L_U = L_0 = 2$ , tem-se em média 2 elétrons por camada repulsiva e 3.5 elétrons por camada livre.

Como exemplo de um caso em que a lacuna de carga apresenta um valor significativo para  $t_c = t$  exhibe-se a Fig. 3.9 onde, como anteriormente, a curva da lacuna é suave e monotônica, mas cresce em torno de uma ordem de grandeza. Nesse caso a ocupação eletrônica se aproxima de 0.25 elétron por sítio repulsivo e 0.75 por sítio livre para  $t_c = 0.1t$ , como  $L_U = L_0 = 2$ , tem-se em média 0.5 elétrons por camada repulsiva e 1.5 elétrons por camada livre.

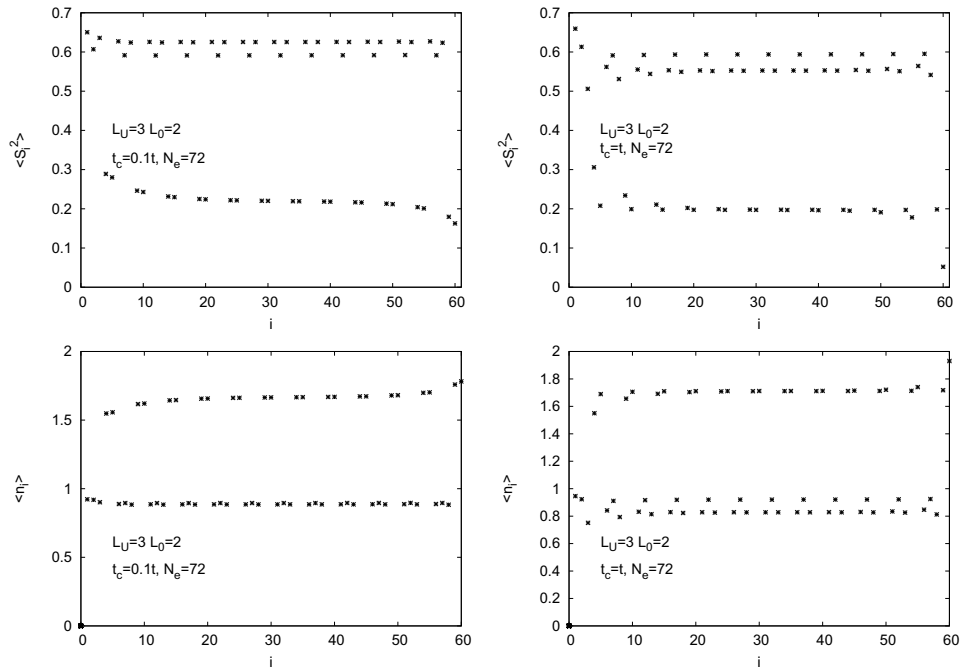


Figura 3.7: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$  em  $\rho = 1.2$  ( $N_e = 72$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ .

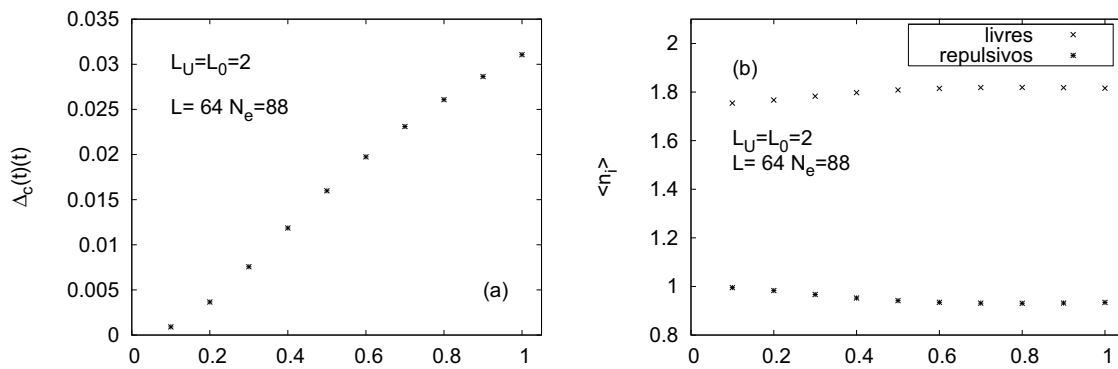


Figura 3.8: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 64$  e  $N_e = 88$ .

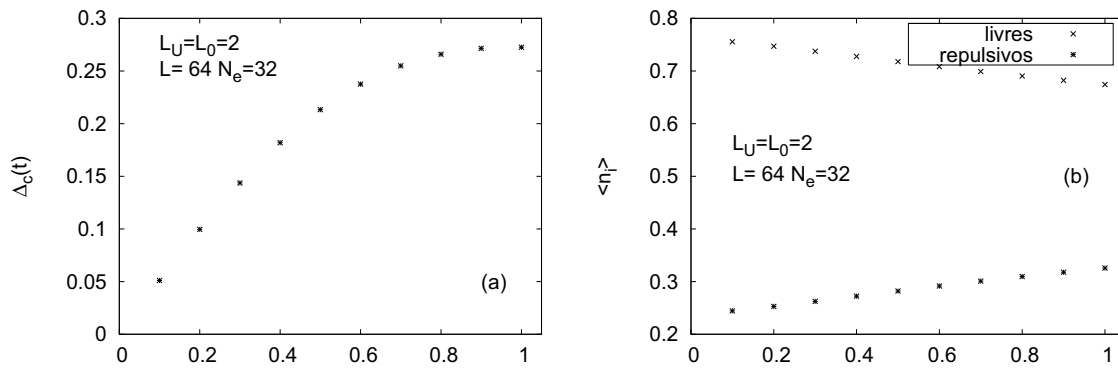


Figura 3.9: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 64$  e  $N_e = 32$ .

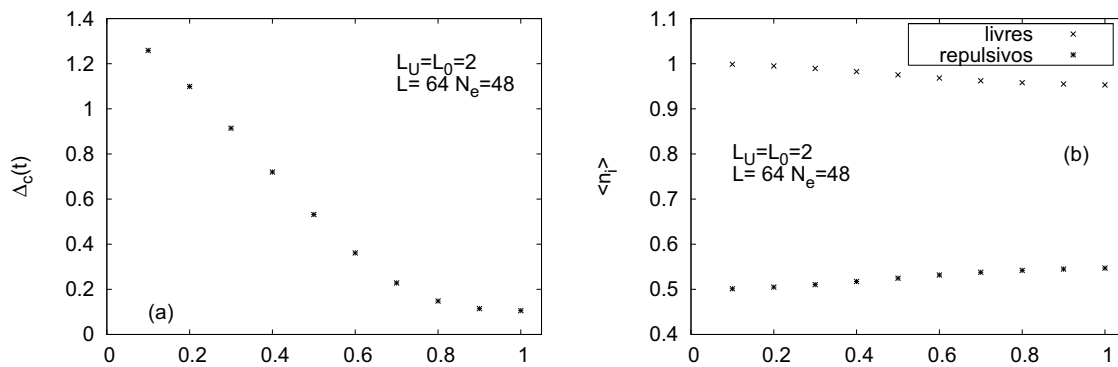


Figura 3.10: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 64$  e  $N_e = 48$ .

Finalmente, como exemplo de um caso em que a lacuna de carga apresenta um valor grande para  $t_c = 0.1t$ , é exibida a Fig. 3.10, onde nota-se a curva da lacuna de carga decrescendo monotonicamente em função de  $t_c$ , e a ocupação eletrônica média sendo de 0.5 elétrons por sítio repulsivo e 1 elétron por sítio livre, quando  $t_c = 0.1t$ , o que totaliza 1 elétron por camada repulsiva e 2 elétrons por camada livre. Esses valores inteiros de elétrons por camada, indicam que os elétrons estão ocupando de maneira comensurável a rede, o que sugere uma fase isolante, como ocorre com a banda semi-cheia no modelo de Hubbard.

É interessante exibir aqui esse mesmo resultado para as demais redes estudadas, onde tem-se o mesmo efeito, como pode ser visto nas Fig. 3.11 e 3.12.

Nota-se que, em ambos os casos, temos também em média 1 elétron por camada repulsiva e 2 elétrons por camada livre.

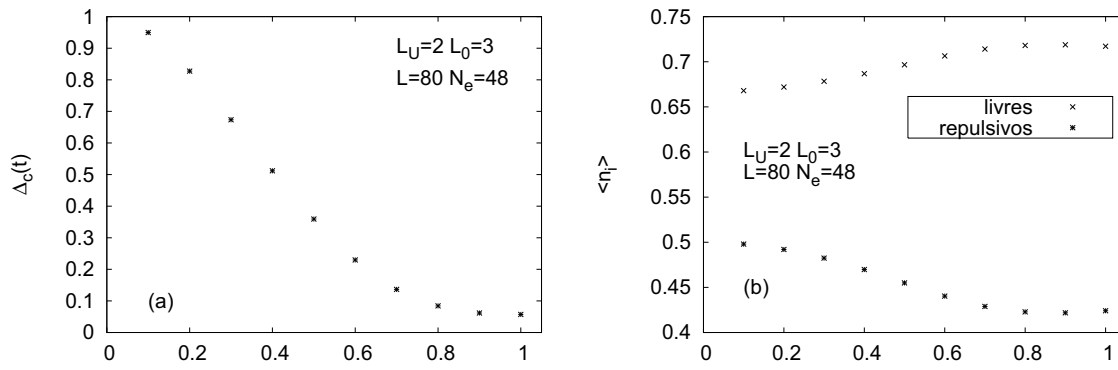


Figura 3.11: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 48$ .

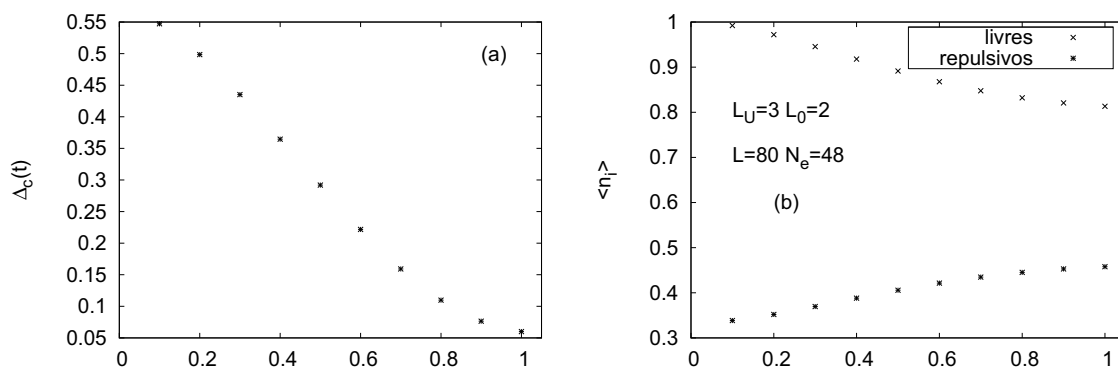


Figura 3.12: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 48$ .

### 3.3 Comportamento das energias

O objetivo desta seção é descrever o comportamento da energia em função de  $t_c$ . Para tal, além da energia total que é calculada pelo DMRG, calculamos a energia potencial nas super-redes, através do valor médio do operador  $n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow}$  nos sítios repulsivos. Esta energia é relativa ao segundo termo do Hamiltoniano (1.40). Como nosso Hamiltoniano possui dois termos, calculadas as energias total e potencial, obtemos a energia relativa ao primeiro termo apenas subtraindo a energia potencial da total.

Como o primeiro termo de (1.40) é chamado função energia cinética, denominamos essa diferença entre a energia total e potencial como energia cinética, mas é interessante notar que esse termo também envolve o potencial da rede, além do movimento dos elétrons, como pode ser notado em (1.3).

Nas super-redes estudadas a energia total decresce em função de  $t_c$ , se tornando mais negativa quando se aproxima de  $t$ . Já a energia potencial cresce em função de  $t_c$ , porém possui valores menores do que a energia total, de tal maneira que a energia cinética domina o comportamento da energia total.

Exemplificamos esse comportamento aqui discutido, com a Fig. 3.13.

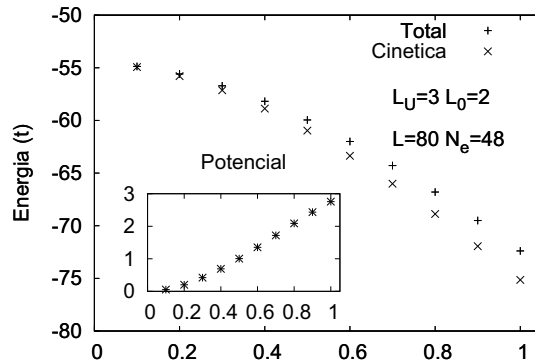


Figura 3.13: Energias da super-rede  $L_U^t = 3$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 80$  e  $N = 48$  em função de  $t_c$ .

### 3.4 Momentos magnéticos locais

Nesta seção, é exibida a influência de  $t_c$  na distribuição do momento magnético local nas camadas da super-rede. Na Fig. 3.14 temos os valores médios nos sítios repulsivos e livres do momento magnético local em função de  $\rho$  para (a)  $t_c = 0.1t$  e (b)  $t_c = t$  para a rede  $L_U = L_0 = 2$ . Juntamente é exibido também o comportamento do bias, Eq. (1.31).

Nesta Figura, nota se que para  $t_c = 0.1t$ , tem-se uma maior definição de patamares de valores. Resultado que também ocorre para as outras estruturas de super-rede, cujas Figuras podem ser vistas na seção A.2 do Apêndice A.

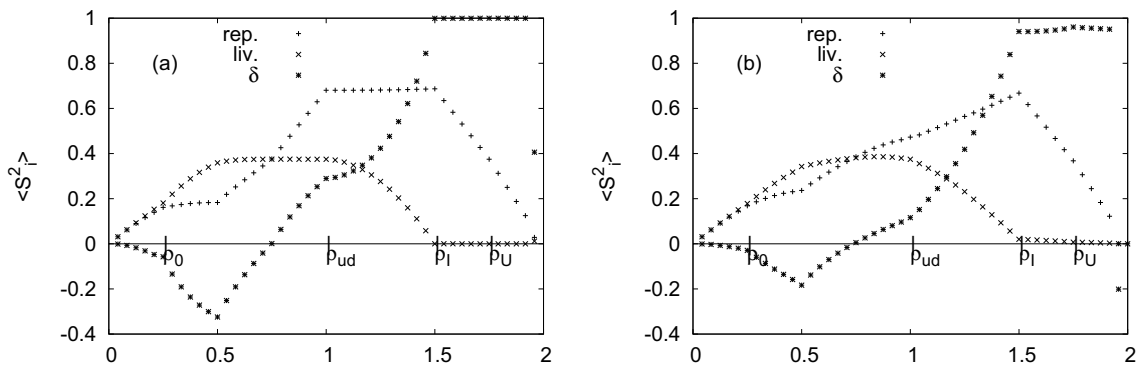


Figura 3.14: Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para  $L_U = L_0 = 2$  em função da densidade para (a)  $t_c = 0.1t$  e (b)  $t_c = t$ .

### 3.5 Correlações de spin

Nesta seção são exibidos os resultados para o fator de estrutura magnético, Eq. (1.35), o qual evidencia a periodicidade das correlações de spin.

Mostramos aqui os resultados apenas para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ , sendo os resultados para as demais super-redes exibidos na seção A.3 do Apêndice A. Para cada densidade são exibidos apenas os fatores de estrutura para os extremos de  $t_c$ ,  $0.1t$  e  $t$ , embora tenham sido calculados também para os casos intermediários.

Para os fatores de estrutura calculados desta super-rede, Fig. 3.15, são notáveis os casos com  $N_e = 104$ , para o qual o pico secundário em  $\pi/2$  se torna mais visível com a diminuição em  $t_c$ , e a existência de um pico secundário abaixo de  $\rho_{\uparrow\downarrow}$ , que não era previsto na literatura [9], um efeito que provavelmente é devido ao fato de termos aqui tanto  $L_U$  quanto  $L_0$ , maiores que 1. Cálculos adicionais serão realizados para confirmar esta hipótese.

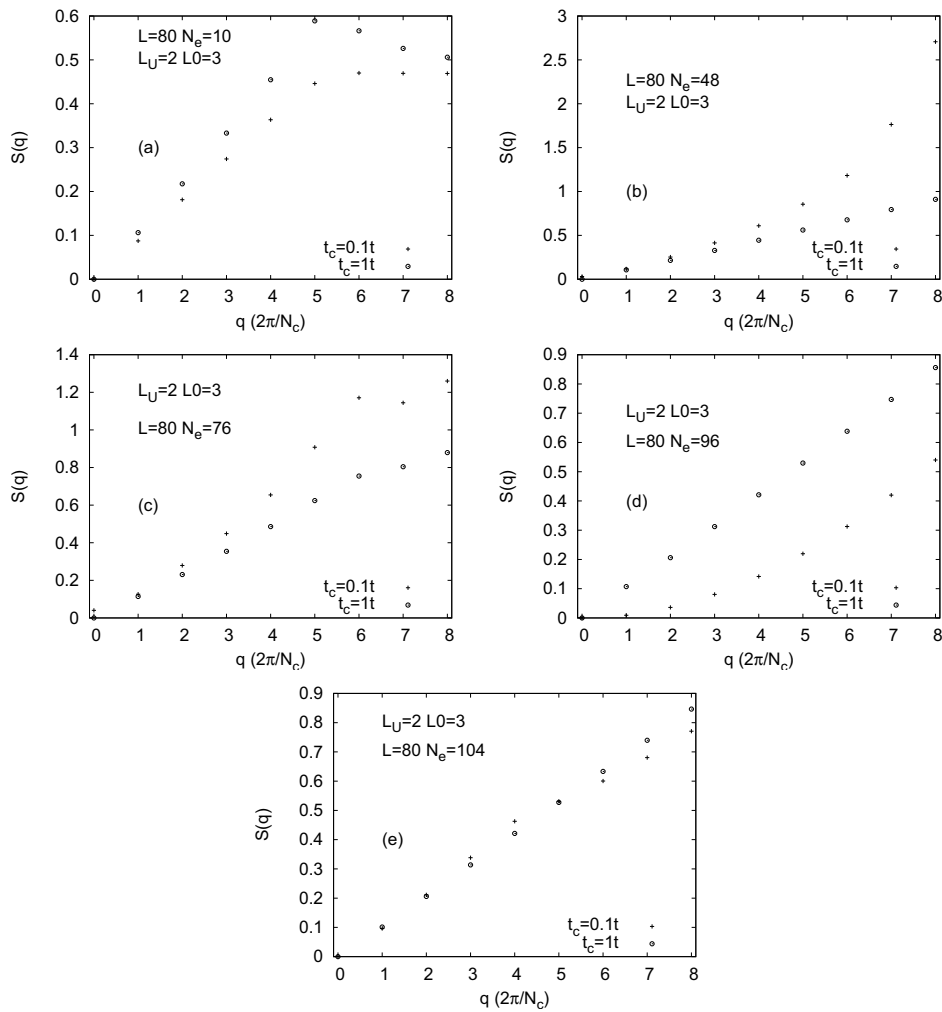


Figura 3.15: Fatores de estrutura magnético da rede  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ , para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . Em (a)  $\rho < \rho_0$  (b) e (c)  $\rho_0 < \rho < \rho_{\uparrow\downarrow}$  (d)  $\rho = \rho_{\uparrow\downarrow}$  e (e)  $\rho_{\uparrow\downarrow} < \rho < \rho_I$ . Vide texto para discussão.



Apesar dos fatos citados, não temos uma influência nos períodos das correlações de spin exercida pela modulação da condução entre camadas.

## 3.6 Correlações de carga

Nesta seção são exibidos os resultados para o fator de estrutura carga, Eq. (1.38).

Os resultados são agrupados de acordo com a estrutura da super-rede, e para cada densidade são mostrados apenas os fatores de estrutura para os extremos de  $t_c$ ,  $0.1t$  e  $t$ , exceto nos casos onde há mudança no comportamento, onde então são exibidos os fatores para valores intermediários de  $t_c$ .

### 3.6.1 $L_U = L_0 = 2$

A Fig. 3.16 apresenta os fatores de estrutura de carga das densidades estudadas. Para as densidades baixas, praticamente não há diferenças nas curvas, em densidades intermediárias a diminuição em  $t_c$  leva a uma diminuição no valor do fator de estrutura, o contrário do que ocorre para densidades altas nas quais, além desse efeito, o pico se torna mais pronunciado como podemos notar no caso de  $N_e = 88$ .

### 3.6.2 $L_U = 2, L_0 = 3$

A Fig. 3.17 apresenta os fatores de estrutura de carga das densidades estudadas, nos extremos do intervalo de  $t_c$  para  $L_U = 2, L_0 = 3$ .

Nesses resultados, existe uma mudança interessante na cadeia ocupada com 104 elétrons, onde o pico que está em  $\pi$  para  $t_c = 1t$  e em  $\pi/2$  para  $t_c = 0.1t$ , uma mudança de  $4k_F^*$ , Eq (1.39), para  $2k_F^*$ .

Na Fig. 3.18, essa mudança é exibida mais detalhadamente.

### 3.6.3 $L_U = 3, L_0 = 2$

A Fig. 3.19 apresenta os fatores de estrutura de carga das densidades estudadas, nos extremos do intervalo de  $t_c$  para  $L_U = 3, L_0 = 2$ .

Para essa estrutura de super-rede encontramos um comportamento análogo ao que encontramos anteriormente mas de maneira oposta, pois temos uma mudança de  $2k_F^*$  em  $t_c = t$ , para

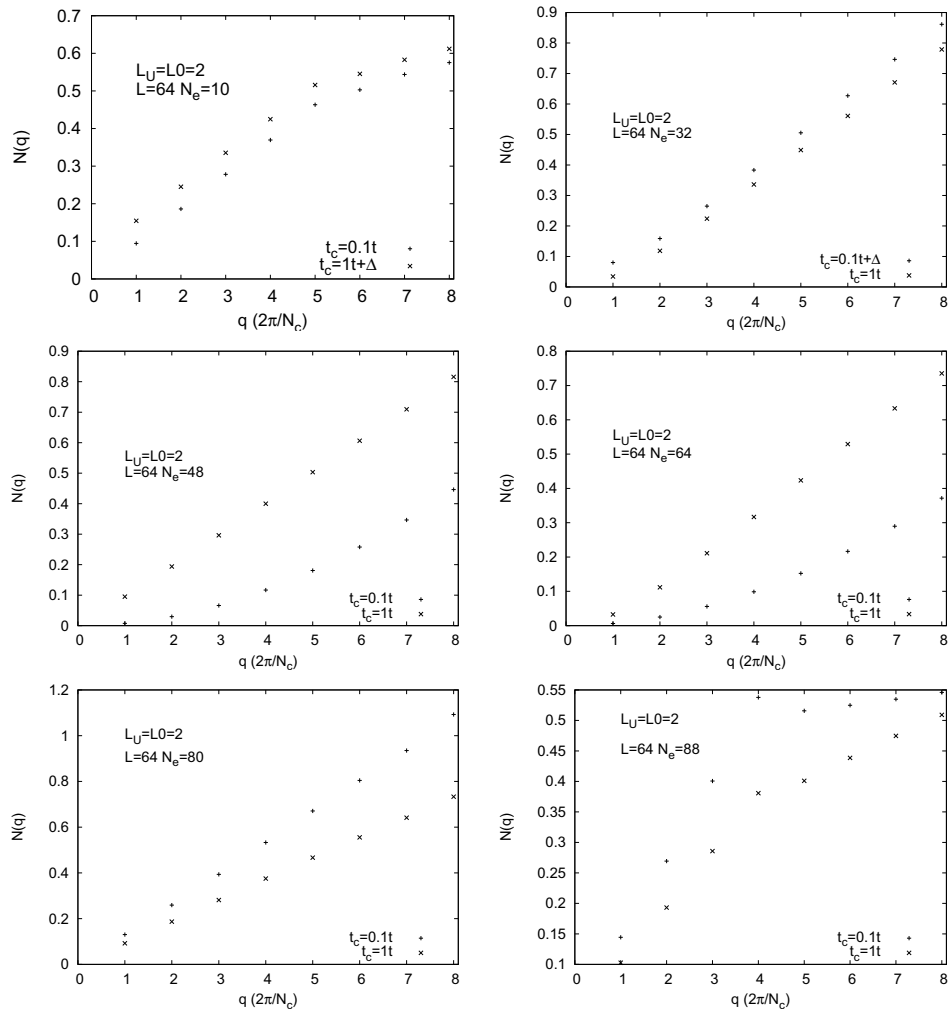


Figura 3.16: Fatores de estrutura de carga da rede  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ , em diversas densidades para,  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . Vide texto para discussão.

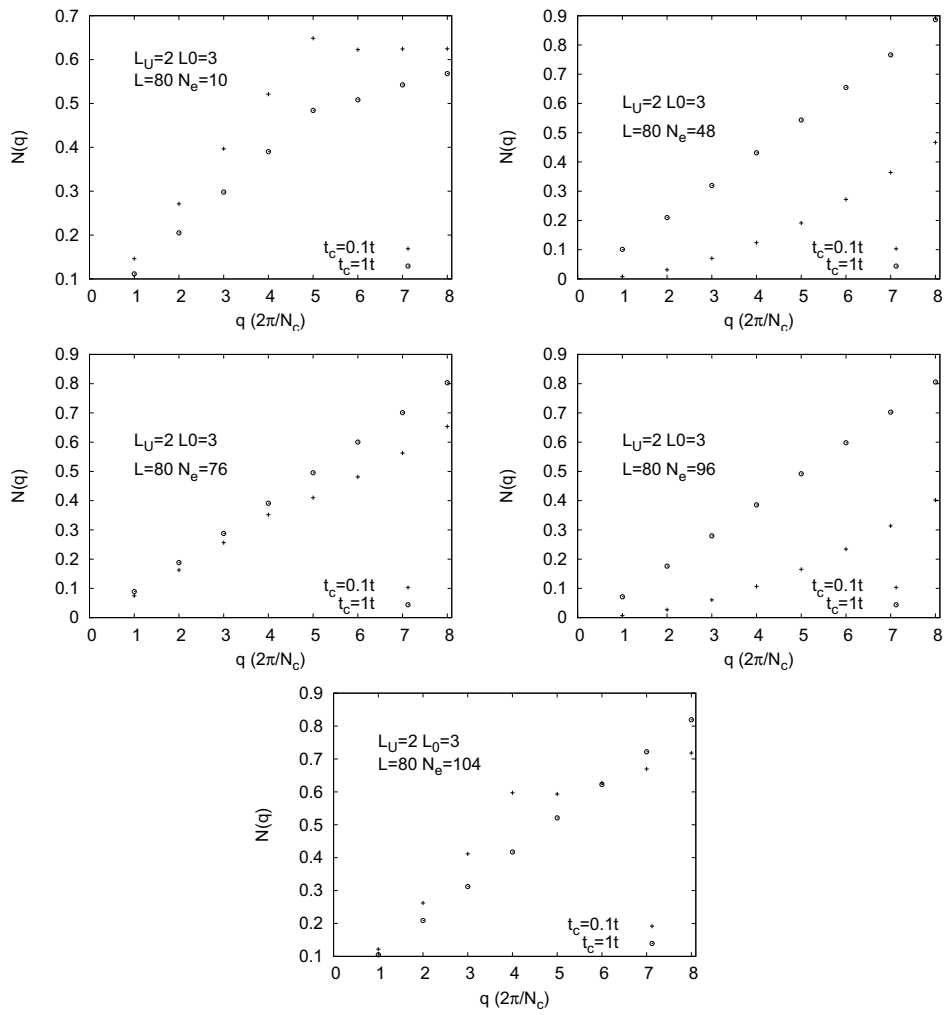


Figura 3.17: Fatores de estrutura de carga da rede  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ , em diversas densidades para,  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . Vide texto para discussão.

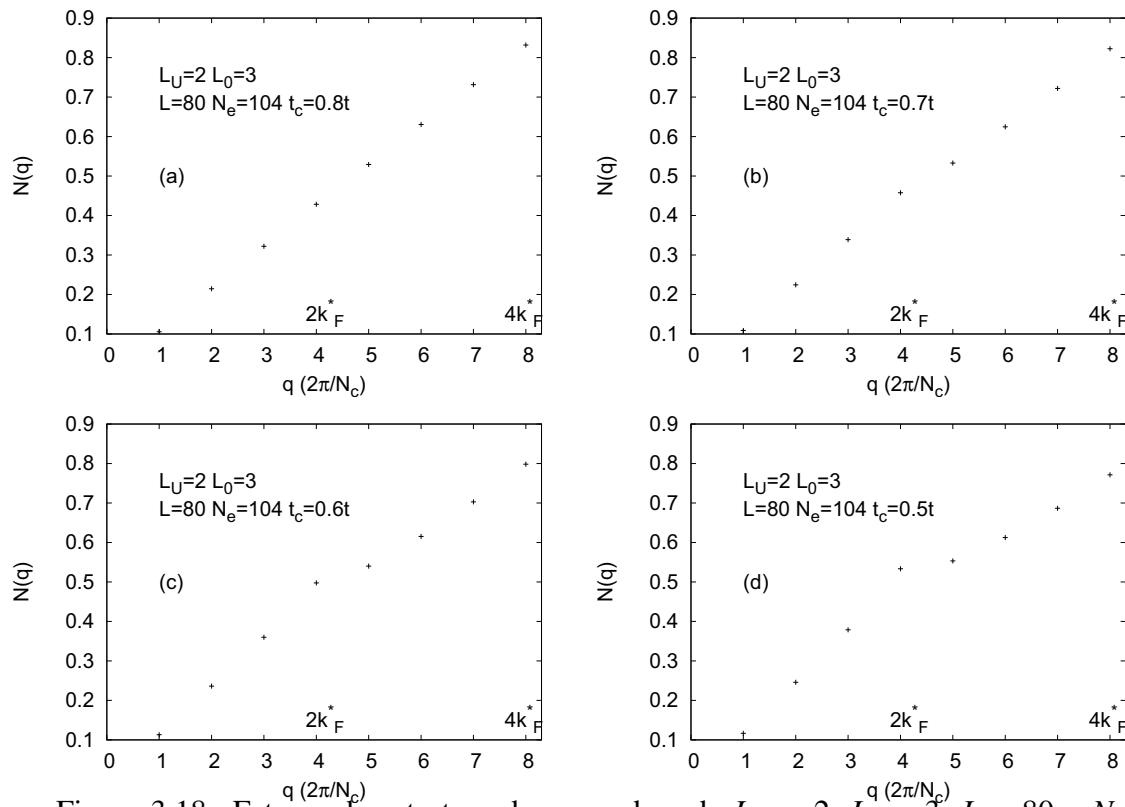


Figura 3.18: Fatores de estrutura de carga da rede  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 104$  em (a)  $t_c = 0.8t$ , (b)  $t_c = 0.7t$ , (c)  $t_c = 0.6t$  e (d)  $t_c = 0.5t$ . Vê-se que um pico surge em  $q = \pi/2 = 2k_F^*$  à medida que  $t_c$  decresce.

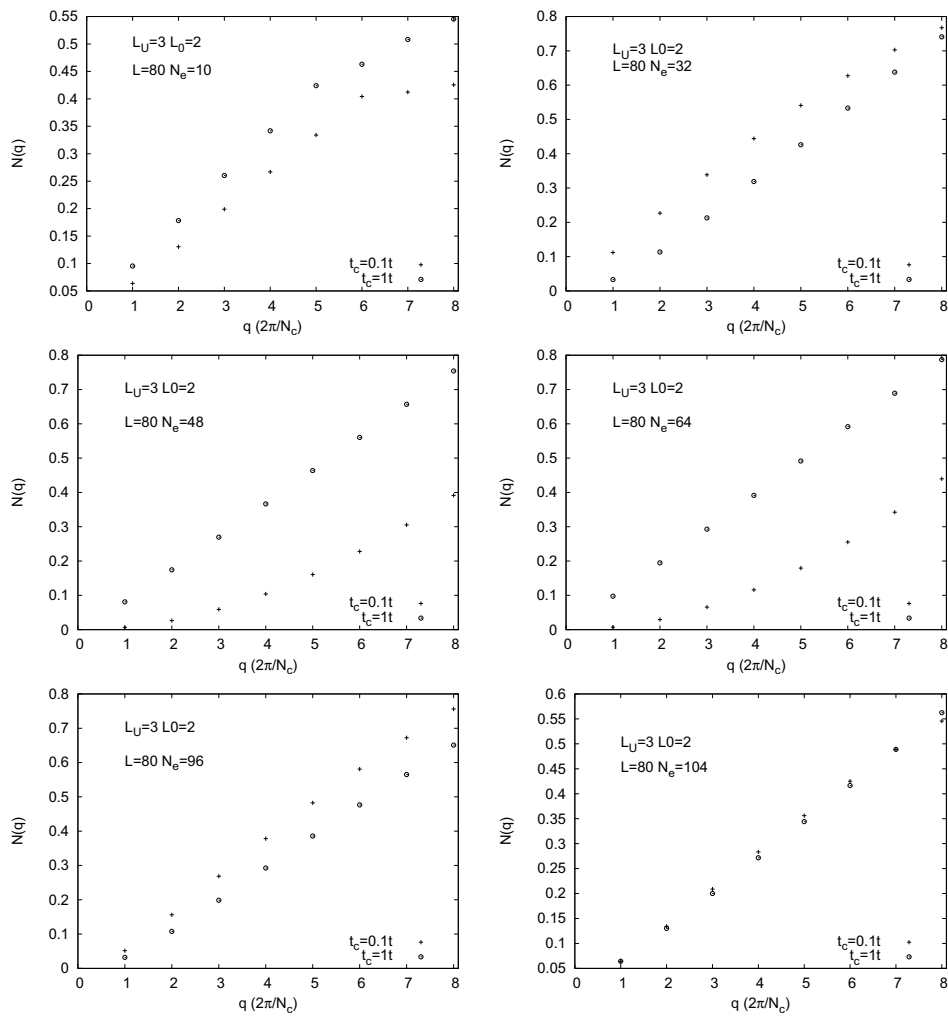


Figura 3.19: Fatores de estrutura de carga da rede  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ , em diversas densidades para,  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ . Vide texto para discussão.

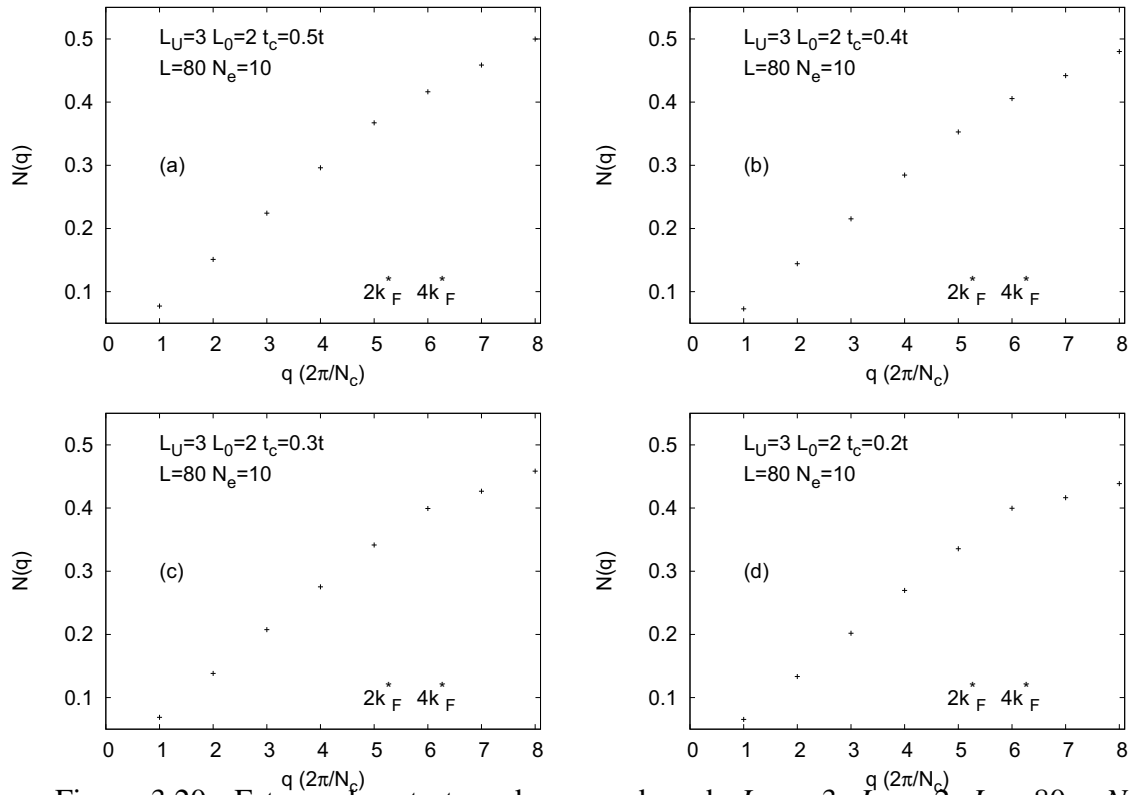


Figura 3.20: Fatores de estrutura de carga da rede  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 10$  em (a)  $t_c = 0.5t$ , (b)  $t_c = 0.4t$ , (c)  $t_c = 0.3t$  e (d)  $t_c = 0.2t$ . Vê-se que o pico move-se de  $2k_F^*$  para  $4k_F^*$  à medida que  $t_c$  decresce.

$4k_F^*$  em  $t_c = 0.1t$ , em uma cadeia ocupada com baixa densidade eletrônica, enquanto no caso anterior tínhamos uma mudança de  $4k_F^*$  para  $2k_F^*$ , em uma cadeia com um grande número de elétrons. A mudança citada se dá em  $N_e = 10$ , com o pico se deslocando de  $5\pi/8$  em  $t_c = t$  para  $6\pi/8$  em  $t_c = 0.1t$ . A Fig. 3.20 exibe essa mudança mais detalhadamente.

Como mencionado na Seção 1.2.4, esse tipo de mudança no ordenamento carga já foi observado nas super-redes Hubbard com função de  $U$ . Estamos descrevendo agora algo semelhante em função da modulação do parâmetro de *hopping* entre camadas. No entanto, ainda não foi possível determinar um padrão deste novo comportamento.

## 4 *Conclusões*

Neste trabalho estudou-se numericamente, utilizando o DMRG, propriedades eletrônicas de super-redes Hubbard em uma dimensão espacial, nas quais introduziu-se um novo parâmetro que controla o *hopping* de elétrons entre sítios de camadas diferentes da super-rede. Essa modificação no modelo é inédita na literatura e, portanto, nossos resultados são todos originais.

A partir dos resultados obtidos, pode-se concluir que, para determinadas densidades eletrônicas, a diminuição do parâmetro de *hopping* de elétrons entre camadas diferentes, leva a uma distribuição dos elétrons na rede que é comensurável com a estrutura subjacente da super-rede. Isso sugere o surgimento de uma fase isolante, visto que tal efeito é acompanhado por um aumento significativo na lacuna de carga. Tal aumento parece ocorrer, ao menos em alguns casos (ver, por exemplo, a Fig. 3.10 (a)), à partir de um valor finito de  $t_c$ . Cálculos adicionais estão sendo realizados para testar essa possibilidade. A natureza dessa transição de fase seria, em princípio, idêntica a da transição de Mott que ocorre em  $\rho_I$ . No entanto, o efeito de comensurabilidade observado sugere também a presença de um ordenamento de carga no estado fundamental.

Para a correlação de carga, conclui-se que a inclusão dessa nova modulação no modelo pode levar a uma mudança no período dominante das ondas de densidade de carga, mudança esta que depende da estrutura da super-rede e da densidade em questão. Um comportamento semelhante é conhecido para as super-redes [10], mas como função da repulsão coulombiana.

O estudo realizado até o momento não está completo, podendo ser melhorado, por exemplo, ao se estudar outros tamanhos de cadeias para as estruturas de super-rede já investigadas, possibilitando a extrapolação para o limite termodinâmico das quantidades mais sensíveis ao tamanho finito do sistema. Também se faz importante estudar outras estruturas, com células unitárias contendo mais sítios, o que permitiria investigar o efeito do tamanho e da proporção entre as camadas sobre os comportamentos observados.

## APÊNDICE A – Gráficos adicionais

Neste Apêndice são exibidos gráficos que concordam com os resultados exibidos na Seção 3, não sendo exibidos naquele para não se tornar redundantes.

### A.1 Gráficos relativos à seção 3.2

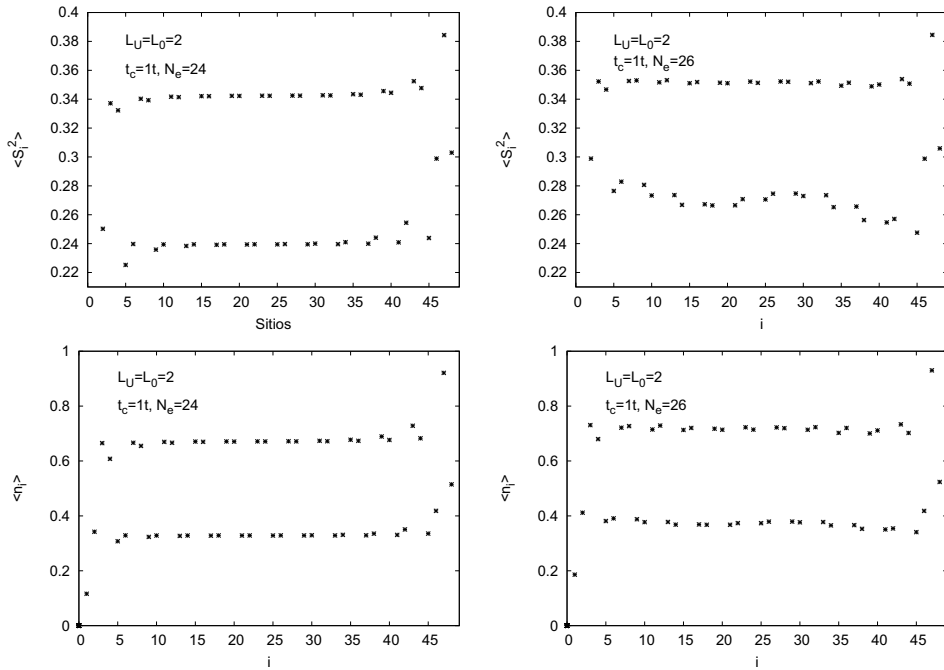


Figura A.1: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $U = 6$  entre  $\rho = 0.5$  ( $N_e = 24$ ) e a densidade adjacente acima, para  $t_c = t$ .



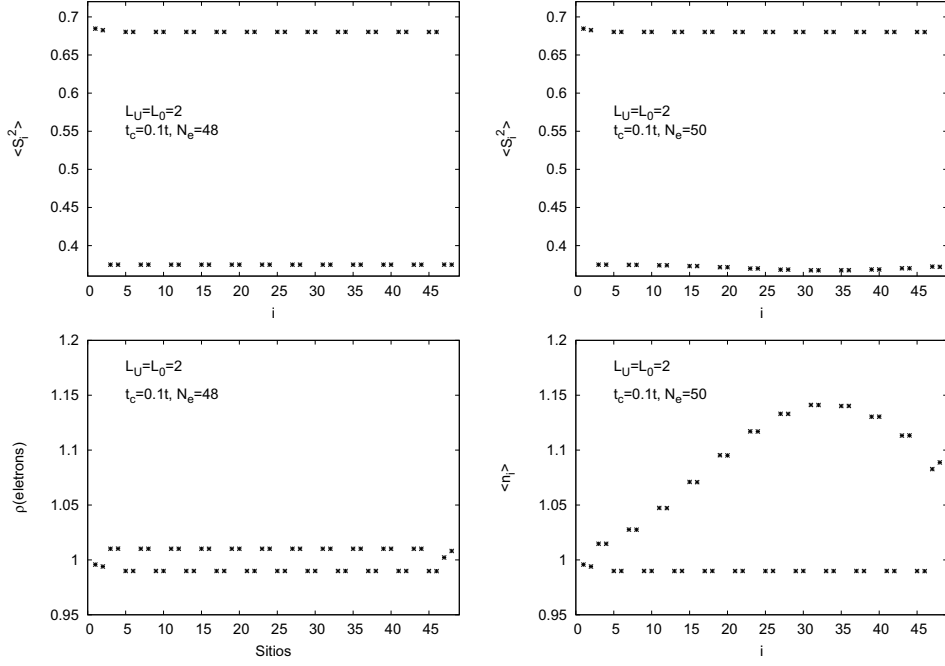


Figura A.2: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $U = 6$  entre  $\rho = 1$  ( $N_e = 48$ ) e a densidade adjacente acima, para  $t_c = 0.1t$ .

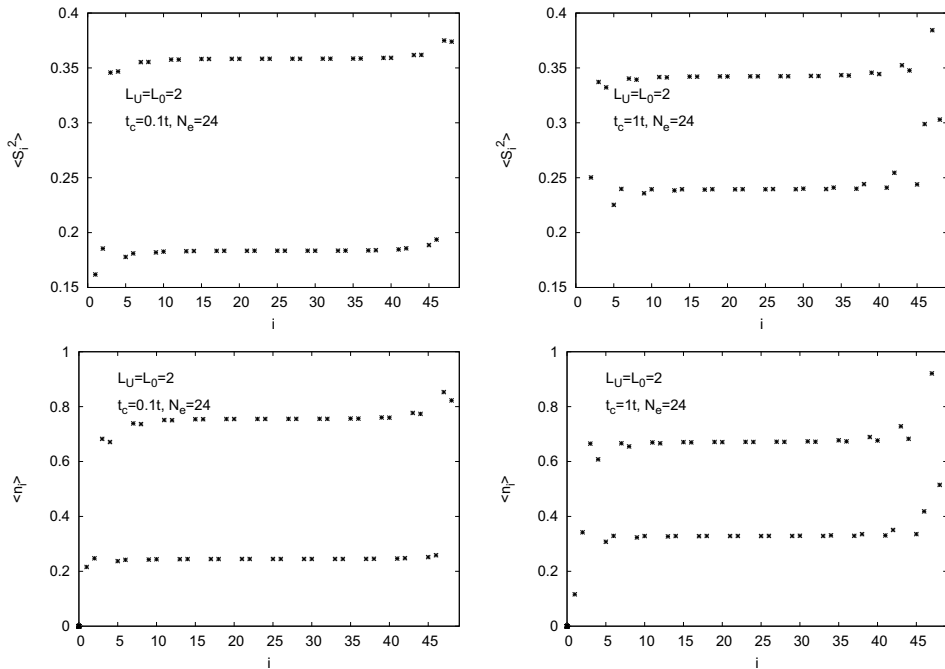


Figura A.3: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $U = 6$  em  $\rho = 0.5$  ( $N_e = 24$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = 1t$ .

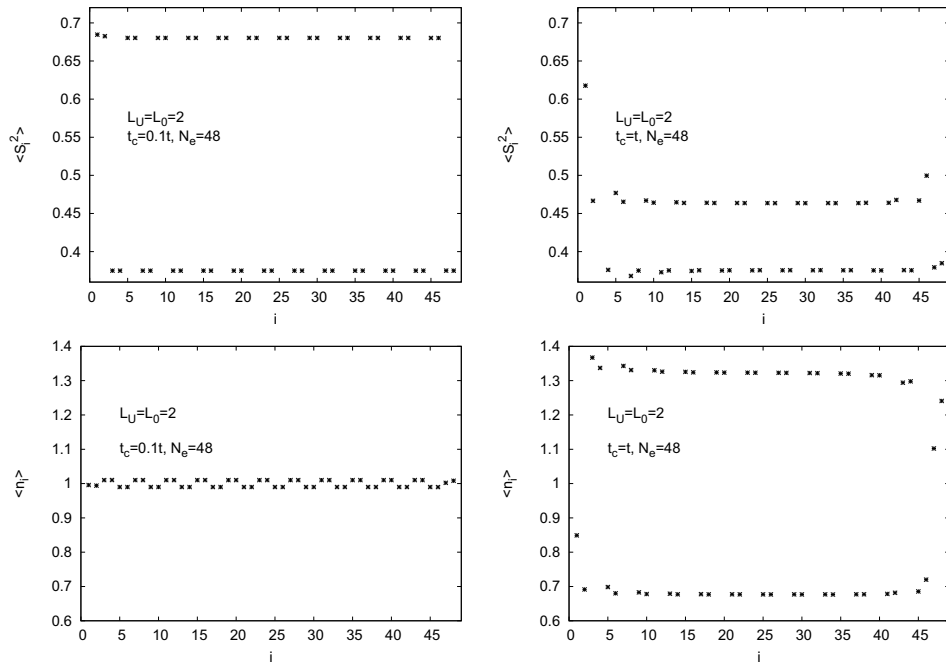


Figura A.4: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 2$ ,  $U = 6$  em  $\rho = 1$  ( $N_e = 48$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = 1t$ .

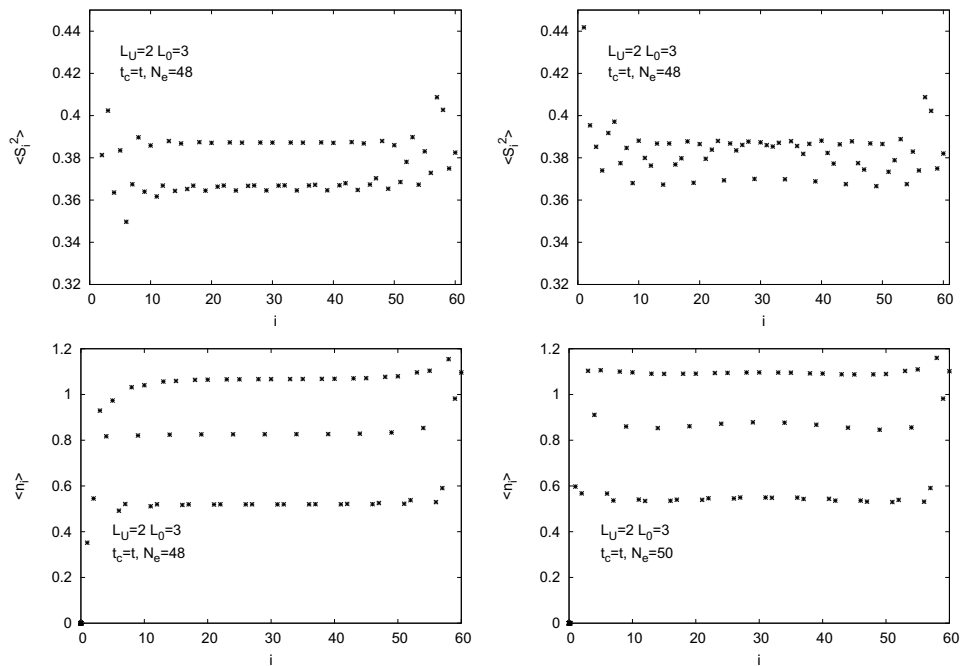


Figura A.5: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $U = 6$  entre  $\rho = 0.8$  ( $N_e = 48$ ) e a densidade adjacente acima, para  $t_c = t$ .

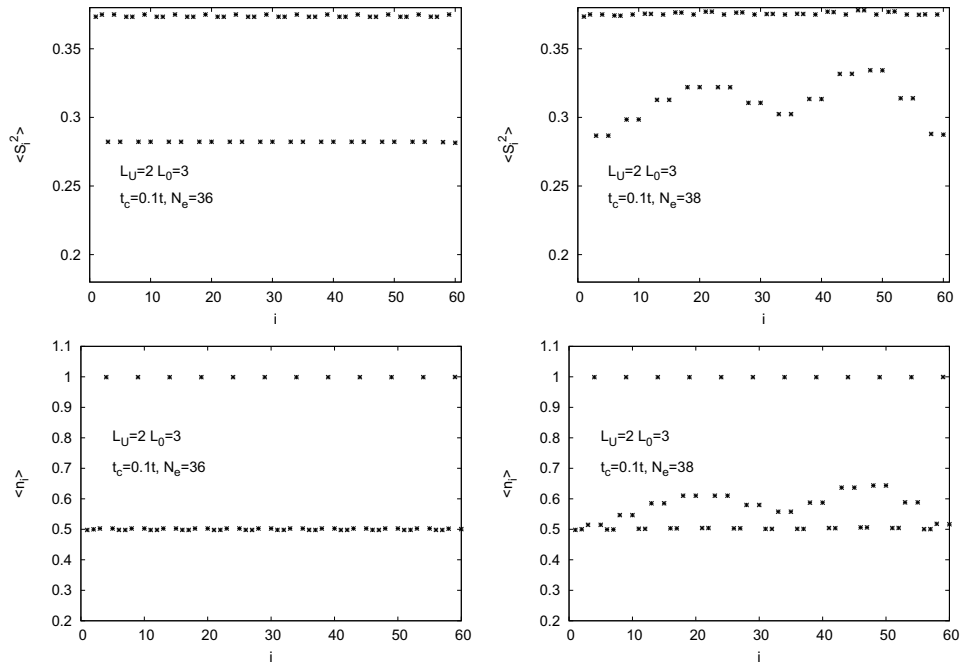


Figura A.6: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $U = 6$  entre  $\rho = 0.6$  ( $N_e = 36$ ) e a densidade adjacente acima, para  $t_c = 0.1t$ .

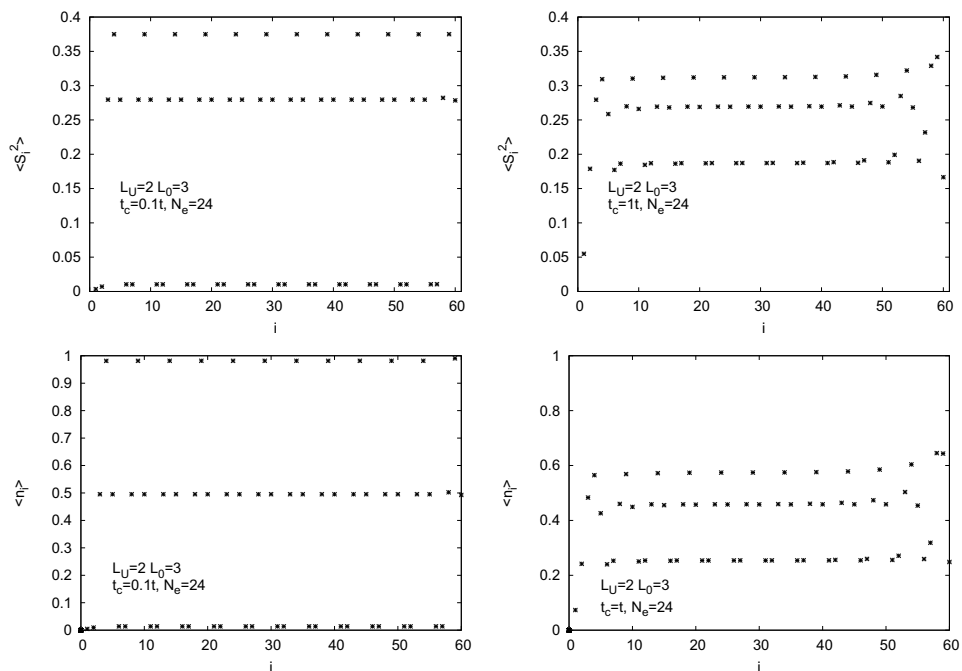


Figura A.7: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $U = 6$  em  $\rho = 0.5$  ( $N_e = 24$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ .

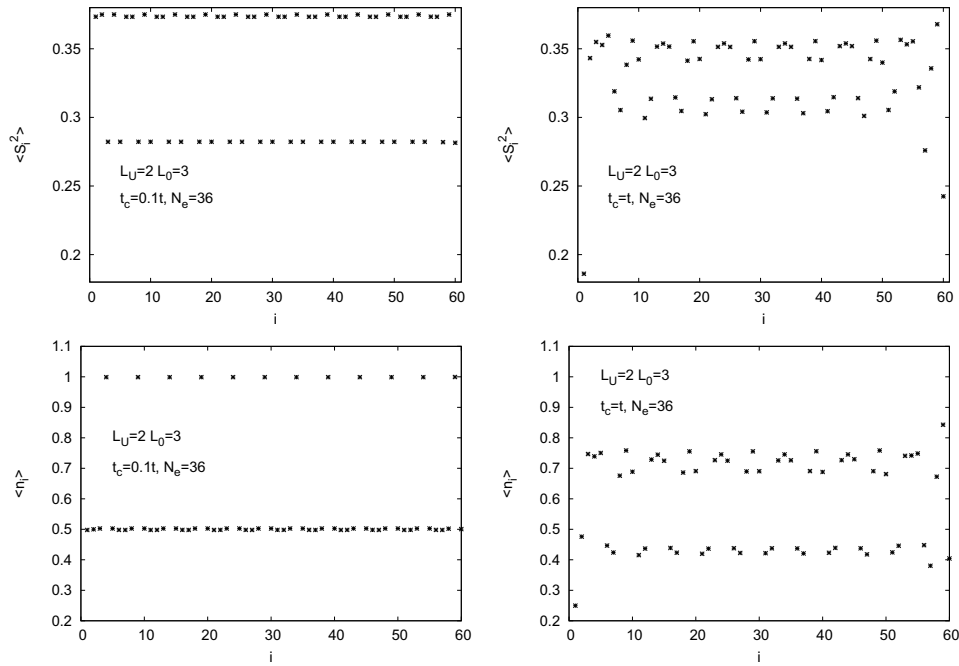


Figura A.8: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $U = 6$  em  $\rho = 0.6$  ( $N_e = 36$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ .

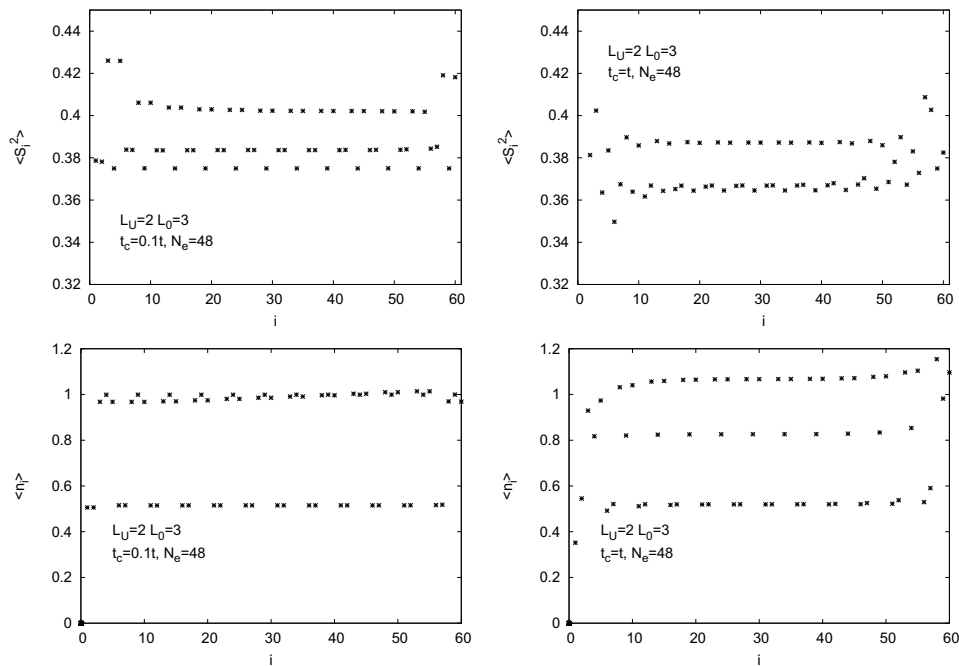


Figura A.9: Comparação de momentos magnéticos locais e densidade eletrônica para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $U = 6$  em  $\rho = 0.8$  ( $N_e = 48$ ), para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ .

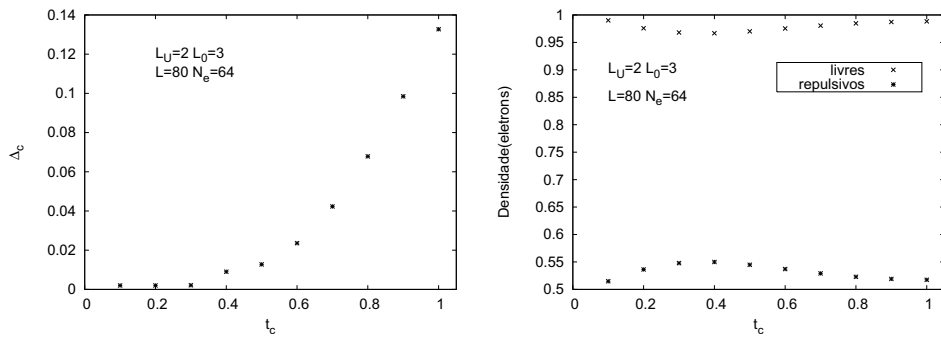


Figura A.10: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 64$ .

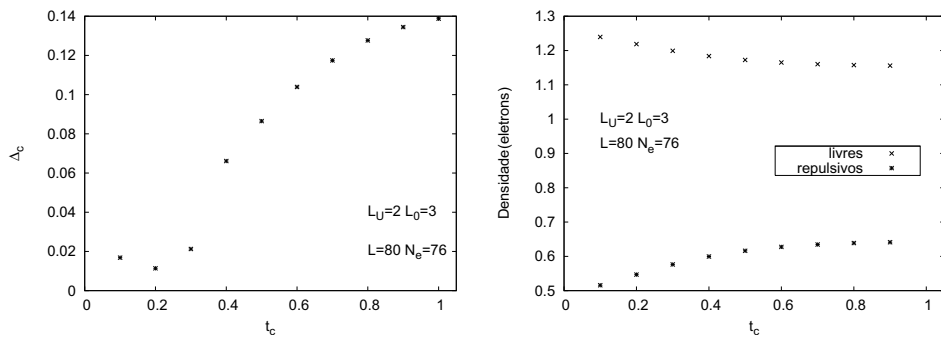


Figura A.11: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 76$ .

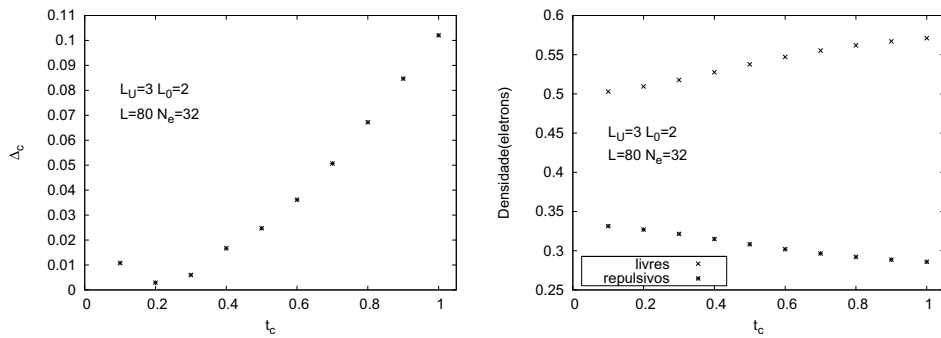


Figura A.12: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 32$ .

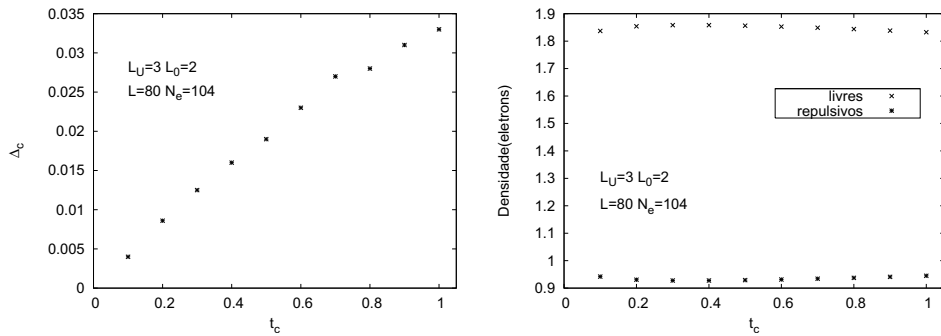


Figura A.13: (a) Lacuna de carga, e (b) média da ocupação eletrônica média nos sítios em função de  $t_c$  para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ ,  $L = 80$  e  $N_e = 104$ .

## A.2 Momentos magnéticos locais

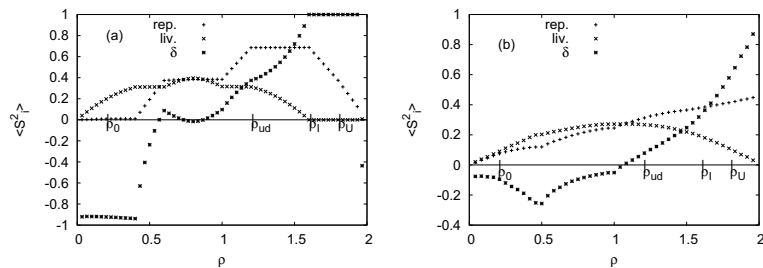


Figura A.14: Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para  $L_U = 2$ ,  $L_0 = 3$ , em função da densidade eletrônica para (a)  $t_c = 0.1t$  e (b)  $t_c = t$ .

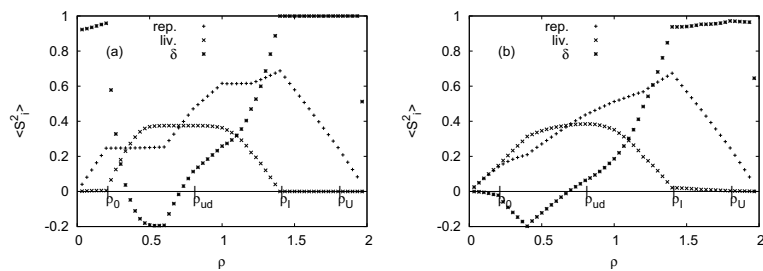


Figura A.15: Comportamento dos momentos magnéticos locais em função da densidade, para  $L_U = 3$ ,  $L_0 = 2$ , em função da densidade eletrônica para (a)  $t_c = 0.1t$  e (b)  $t_c = t$ .

## A.3 Correlações de spin

### A.3.1 $L_U = 2, L_0 = 2$

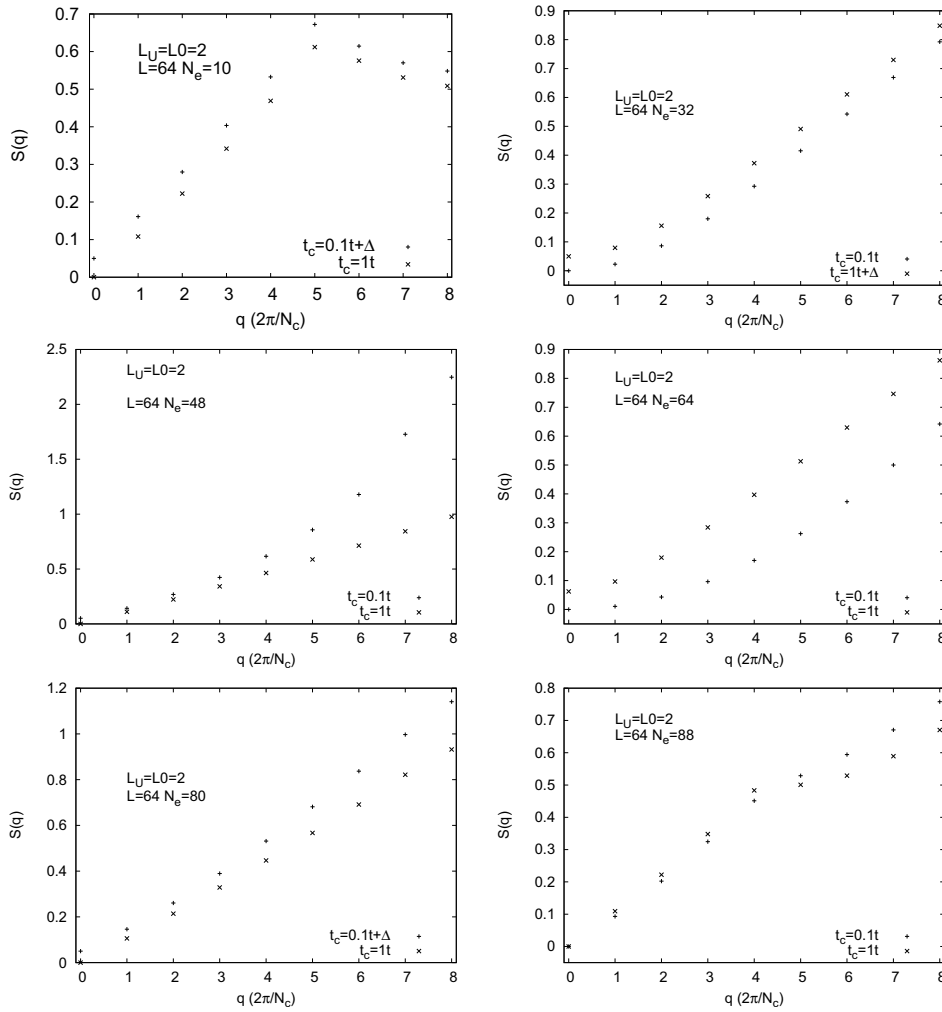


Figura A.16: Fatores de estrutura magnético da rede  $L_U = 2, L_0 = 2$ , em diversas densidades, para  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ .

### A.3.2 $L_U = 3, L_0 = 2$

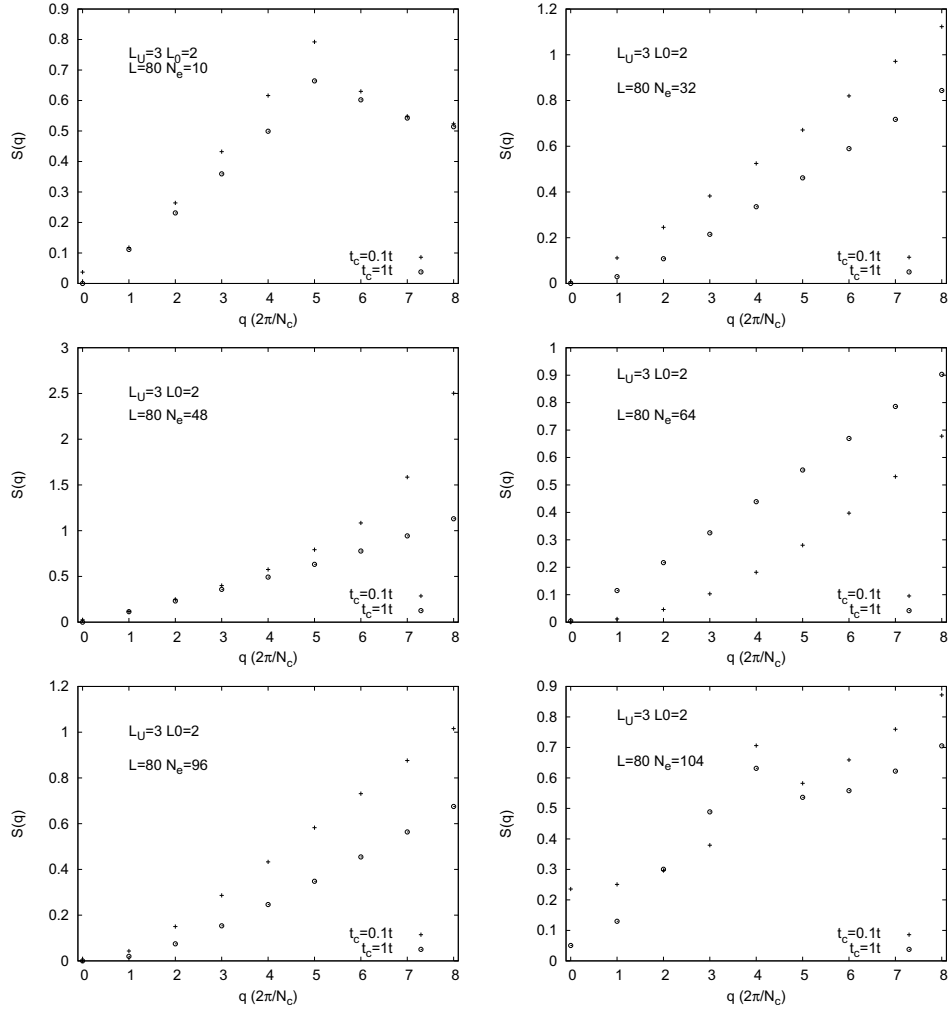


Figura A.17: Fatores de estrutura magnético da rede  $L_U = 3, L_0 = 2$ , em diversas densidades para,  $t_c = 0.1t$  e  $t_c = t$ .



## *Referências Bibliográficas*

- [1] Ver, e.g., F. V. Kursmartsev (Editor) - **Introduction to Strongly Correlated Electrons in New Materials** - *J. Phys. A: Math. and General* **36**, fascículo 35 (2003) (Special Issue: *Papers from the International Workshop on Strongly Correlated Electrons in New Materials, 14-17 December 2002, Loughborough University, UK*).
- [2] J. Hubbard - **Electronic correlations in narrow energy bands** - *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
- [3] Dziurzik, Christian - **Competition of magnetic and superconducting ordering in one-dimensional generalized Hubbard models** - Cologne: University of Cologne, 2003, p. 22-25.
- [4] H. Tasaki - **The Hubbard model - an introduction and selected rigorous results** - *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 4353 (1998).
- [5] T. Paiva e R. R. dos Santos - **Electronic correlations in one-dimensional superlattices** - *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1126 (1996).
- [6] T. Paiva e R. R. dos Santos - **Metal-insulator transition in one-dimensional Hubbard superlattices** - *Phys. Rev. B* **58**, 9607 (1998).
- [7] T. Paiva e R. R. dos Santos - **Magnetism in one-dimensional Hubbard superlattices** - *Phys. Rev. B* **62**, 7007 (2002).
- [8] T. Paiva e R. R. dos Santos - **Charge-density waves in one-dimensional Hubbard superlattices** - *Phys. Rev. B* **65**, 153101 (2002).
- [9] A. L. Malvezzi, T. Paiva e R. R. dos Santos - **Multiperiodic magnetic structures in Hubbard superlattices** - *Phys. Rev. B* **66**, 064430 (2002).
- [10] A. L. Malvezzi, T. Paiva e R. R. dos Santos - **Modulation of charge-density waves by superlattice structures** - *Phys. Rev. B* **73**, 193407 (2006).
- [11] M. F. Silva, N. A. Lima, A. L. Malvezzi e K. Capelle - **Effects of nanoscale spatial inhomogeneity in strongly correlated systems** - *Phys. Rev. B* **71**, 125130 (2005).
- [12] J. Silva-Valencia, E. Miranda e R. R. dos Santos - **Luttinger liquid superlattices** - *J. Phys. Condens. Matter* **13**, L619 (2001).
- [13] J. Silva-Valencia, E. Miranda e R. R. dos Santos - **Luttinger liquid superlattices: Realization of gapless insulating phase** - *Phys. Rev. B* **65**, 115115 (2002).
- [14] M. N. Baibich, R. B. Muniz - **Oscillatory interlayer coupling and magnetoresistance in magnetic metallic multilayers** - *Braz. J. Phys.* **22**, 253 (1992).

- [15] G. Grüner, - **The dynamics of charge-density waves** - *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1129 (1988).
- [16] Para um estudo de álgebra linear e multilinear, no contexto de mecânica quântica, recomenda-se, *e. g.* o capítulo 2 de Cohen-Tannoudji, Claude; Diu, Bernard; Laloe, Franck - **Quantum mechanics** Susan Reid Hemley (Trad.) New York: John Wiley, (1977) v.1.
- [17] Santos, José Plínio de Oliveira; Mello, Margarida P.; Murari, Idani, T. C. - **Introdução a análise combinatória**. 2 ed. Campinas: UNICAMP (1998).
- [18] Feynman, Richard Philip - **Statistical mechanics: a set of lectures** Jacob Shaham (Ed.). Reading: W.A. Benjamin (1974). - (Frontiers in Physics. A Lecture Note and Reprint Series; v.36).
- [19] Balescu, Radu - **Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics** Florida: Krieger (1991).
- [20] K. Wilson - **The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem** - *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [21] S. R. White e R. M. Noack - **Real-space quantum renormalization groups** - *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3487 (1992).
- [22] S. R. White - **Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups** - *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [23] S. R. White - **Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups** - *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [24] A. L Malvezzi - **An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems** - *Braz. J. Phys.* **33**, 55 (2003) (Special issue: Brazilian School on Statistical Mechanics - 2002).