
**DINÂMICA DE BURACOS
VERSUS
ORDEM MAGNÉTICA
EM
PEQUENOS AGLOMERADOS DO MODELO t-J**

ROGÉRIO COSTA REIS DE SOUSA

UNIDADE	IFGW
N.º CHAMADA:	I/UNICAMP
	So85d
V.	En.
TOMBO BC/	35570
PROC.	395/98
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	23/6/98
N.º CPT	40009680-5

1146/IF

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW- UNICAMP**

So85d

Sousa, Rogério Costa Reis de

Dinâmica de buracos *versus* ordem magnética em pequenos aglomerados do Modelo t-J / Rogério Costa Reis de Sousa . - Campinas, SP:[s.n.], 1998.

Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Materia condensada. 2. Magnetismo. 3. Problemas de muitos corpos. I. Cabrera Oyarzún, Guillermo Gerardo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Secretaria de Pós-Graduação

CAIXA POSTAL 6165

CEP 13083-970 - Campinas-SP - Brasil

Tel: (019) 788-5305

Fax: (019) 289-2424

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE ROGÉRIO COSTA REIS DE SOUSA APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 10/08/98.

COMISSÃO JULGADORA:

Guillermo Cabrera

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún (Orientador do Candidato) - IFGW/UNICAMP

Roberto Lago

Prof. Dr. Roberto Eugenio Lagos Monaco - IF/UNESP/Rio Claro - S.P.

Gaston Eduardo Barbens

Prof. Dr. ~~Gaston Eduardo Barbens~~ IFGW/UNICAMP

Este exemplar corresponde à redação final da Tese de Mestrado defendida pelo aluno Sr. Rogério Costa Reis de Sousa e aprovada pela Comissão Julgadora.

Guillermo Cabrera
11/08/98

DINÂMICA DE BURACOS VERSUS ORDEM MAGNÉTICA EM PEQUENOS AGLOMERADOS DO MODELO t -J

ROGÉRIO COSTA REIS DE SOUSA

Orientador: Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Tese apresentada ao Instituto de Física *Gleb Wataghin*

para obtenção do título de Mestre em Física

Área: Física da Matéria Condensada

Campinas, UNICAMP, 1998.

Banca Examinadora

- Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún (Orientador) - IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Gaston Barberis - IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Roberto Lagos - Unesp - Rio Claro
- Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva (Suplente) - IF/USP - São Paulo
- Prof. Dr. Mário Foglio (Suplente) - IFGW/UNICAMP

*À Fabiana, por todo amor e carinho a mim dedicados
durante este trabalho.*

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. G.G. Cabrera pela orientação, apoio e paciência durante estes quase três anos de trabalho. Agradeço também ao Grupo de Alunos do Prof. Cabrera, cujas reuniões foram de fato inspiradoras. Devo minha gratidão ao Prof. Eduardo Miranda pelo excelente curso de Mecânica Quântica de Sistemas de Muitos Corpos que com certeza influenciou na elaboração desta tese.

Nunca poderia esquecer o apoio dedicado pela Família da Fabiana nestes últimos anos passados em Campinas, muito menos o apoio constante de minha família que sempre aprovou todos os projetos desde meu precoce desejo de fazer ciência.

“I have attempted to deliver them [The Lectures on Computation] in a Spirit that should be recommended to all students embarking on the writing of their Ph.D. thesis: Imagine that you are explaining your ideas to your former smart, but ignorant self, at the beginning of your studies!”

Richard Feynman.

Resumo

Neste trabalho analisamos o efeito do *hopping* de buracos sobre o *background* de interações antiferromagnéticas do Modelo ' $t - J$ ', usando soluções analíticas exatas de pequenos aglomerados, que apesar de sofrerem fortes efeitos de tamanho, revelaram detalhes interessantes sobre a mudança da ordem magnética comumente descrita por tratamentos de campo médio. O *cluster* de 4 sítios com um buraco mostrou 3 comportamentos diferentes do estado fundamental: Uma fase antiferromagnética para $t \ll J$ com ondas de carga, onde o buraco parece estar parado, não afetando a ordem magnética da cadeia de Heisenberg; outra para $t \sim J$ que apresenta correlações ferro e antiferromagnéticas, o que pode ser o análogo da fase espiral obtida por campo médio, e finalmente para $t \gg J$, obtivemos fortes correlações ferromagnéticas (spin total máximo) e ausência de ondas de carga, sendo que as flutuações quânticas impedem a saturação do momento magnético. Este comportamento limite caracteriza traços de uma transição metal-isolante a medida que a energia cinética dos buracos compete com as interações antiferromagnéticas.

Abstract

We study the effect of the hole hopping in a doped antiferromagnet described by the ' t - J ' Model, using exact analytical solutions for small clusters. In spite of the small size, they reveal interesting details about the magnetic order, which is commonly described by Mean Field treatments. The 4-site cluster with one hole shows different behaviors for the ground state: An antiferromagnetic phase for $t \ll J$, with the presence of charge density waves, where the hole seems to be localized, not affecting the order of the Heisenberg chain; another regime for $t \sim J$ that presents mixed ferro and antiferro correlations, in what may be the analog of the spiral phase obtained in Mean Field solutions; and finally for $t \gg J$, we obtain strong ferromagnetic correlations (maximum spin) and no charge density waves, with quantum fluctuations precluding the saturation of the magnetic moment. This behavior shows traces of a metal-insulator transition as the hole kinetic energy compete with the antiferromagnetic interactions.

Índice

1	Introdução e Motivação	5
2	Modelos de Hubbard, Heisenberg e t-J	7
2.1	Introdução	7
2.2	Modelos Tight Binding, Hubbard	8
2.3	Descrição das excitações de baixa energia da Hamiltoniana de Hubbard: Modelo de Heisenberg	13
2.4	Modelo t-J	16
3	Materiais High T_c: Propriedades físicas e modelos eletrônicos¹	18
3.1	Estrutura e diagrama de fase	19
3.1.1	$La_{2-x}Sr_xCuO_4$	19
3.1.2	$YBa_2Cu_3O_{6+x}$	22
3.2	Propriedades do estado normal (não supercondutor)	23
3.3	Modelos eletrônicos	25
4	Teoria de Campo Médio	28
5	Cálculos em pequenos clusters: Efeito do movimento de buracos sobre a ordem magnética do modelo t-J²	35
5.1	Simetrias do modelo t-J	36
5.2	3 sítios com 1 buraco	37

¹Este capítulo é inspirado no excelente review de dagotto [11].

²Aqui começa a parte original da tese.

5.3	4 sítios com 2 buracos	38
5.3.1	Funções de onda do estado fundamental:	39
5.4	Uma solução variacional para t/J pequeno	41
5.4.1	Cadeia de Heisenberg aberta com 3 spins	41
5.4.2	Minimização da energia	43
6	Modelo t-J isotrópico de 4 sítios com 1 buraco: Solução analítica exata	44
6.1	Autoestados e autoenergias	44
6.1.1	Estado fundamental 1: $0 < \beta < \frac{1}{2}$	46
6.1.2	Estado fundamental 2: $\frac{1}{2} < \beta < \frac{4+\sqrt{13}}{2} \cong 3.8$	47
6.1.3	Estado fundamental 3: $\frac{4+\sqrt{13}}{2} < \beta < \infty$	48
6.2	Análise do estado fundamental para $t \sim J$	48
6.2.1	Análise da ordem magnética do estado uhp	50
7	Algumas Conclusões	53
	Apêndices	55
1	Funções de onda do caso de 3 sítios e 1 buraco	56
2	4 sítios e 2 buracos	57
3	Cadeia de Heisenberg aberta de 3 spins	59
4	4 sítios e 1 buraco	59

Capítulo 1

Introdução e Motivação

A Física dos compostos High T_c continua um mistério após 11 anos de grande desenvolvimento experimental. Problemas como o mecanismo que induz a supercondutividade continuam não entendidos, apesar do grande número de publicações na área; grandes teóricos possuem opiniões divergentes sobre o tratamento mais adequado que revele a essência do comportamento dos elétrons nos planos de Cobre e Oxigênio destes materiais.

Apesar de todas as divergências, a maioria dos teóricos de Matéria Condensada acredita que é indispensável incluir fortes correlações Coulombianas para descrever as propriedades eletrônicas dos planos CuO. Uma das razões para isso é que fases magnéticas aparecem próximas da fase supercondutora, em particular há ordem antiferromagnética de longo alcance a temperaturas e dopagens baixas. O aumento da dopagem leva à destruição da ordem antiferromagnética e em seguida à supercondutividade.

Em 1987 P.W. Anderson [1] propôs que o Modelo t-J continha a Física dos planos CuO. Este modelo descreve o movimento de buracos num background antiferromagnético (t modela a energia cinética dos buracos e J a interação entre os spins). Apesar da enorme quantidade de resultados sobre este modelo, na literatura ainda não há consenso sobre uma aproximação que revele suas principais propriedades físicas. Em particular, ainda não temos as ferramentas adequadas para tratar a supercondutividade do modelo (que aparece devido a uma atração efetiva dos buracos).

O efeito da dinâmica dos portadores sobre a ordem magnética ainda não é bem entendido na literatura, já que os tratamentos de campo médio do modelo t-J estimam dopagens críticas muito

altas (ao contrário do que é observado no composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$). Isto acontece porque eles desprezam as flutuações quânticas, que acredita-se são indispensáveis para a descrição destes compostos.

Neste trabalho fizemos cálculos analíticos exatos em pequenos clusters do Modelo t-J, que apesar de sofrerem de fortes efeitos de tamanho revelaram um comportamento interessante e até traços de uma transição metal-isolante. Acreditamos que de posse destas soluções podemos propor funções de onda variacionais que representem bem o comportamento magnético perante a movimentação de buracos na cadeia infinita.

Ao longo do texto damos ênfase a resultados e interpretações que achamos que ilustram bem a competição entre a mobilidade dos buracos e a interação entre os spins, para determinar a ordem magnética da rede.

Capítulo 2

Modelos de Hubbard, Heisenberg e t-J

2.1 Introdução

O problema básico da Física de muitos corpos é descrever as propriedades de um número muito grande de elétrons ($N \sim 10^{23}$) interagindo entre si e com a matriz atômica (que pode ser ordenada de forma cristalina ou não). As leis de movimento destes elétrons são as da Mecânica Quântica, cuja modelagem é dada pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2.1)$$

onde \mathbf{p}_i e \mathbf{r}_i são operadores que medem momento e posição do elétron i respectivamente.

Uma hipótese importante consiste em considerar a matriz atômica (que mantém estes N elétrons juntos) ordenada numa rede cristalina; de fato grande parte dos materiais no estado sólido se encontram desta forma na natureza. A interação dos elétrons com esta rede é dada pelo potencial

$$V(\mathbf{r}_i) = \sum_{j=1}^{N_S} \frac{-eQ_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|}, \quad (2.2)$$

onde \mathbf{R}_j dá a posição do j -ésimo íon na rede cristalina (temos N_S átomos nesta rede) e Q_j sua carga. Nesta tese não vamos nos preocupar com o desvio dos \mathbf{R}_j de uma estrutura cristalina

perfeita (uma boa descrição quântica destes desvios é dada pelos Fônons [2]).

Os dois primeiros termos da Hamiltoniana (2.1) descrevem elétrons não interagentes, a chamada Física de Estado Sólido de um corpo. A solução deste problema na presença de um potencial cristalino dá origem à Teoria de Estrutura de Bandas de Energia [2] que é capaz de descrever boa parte das propriedades físicas destes materiais, como energias de ligação e estrutura mais favorável (pequenas correções devido à interação Coulombiana entre os elétrons podem ser incluídas via Hartree-Fock). O desenvolvimento destas técnicas de um corpo para guiar a Física Experimental dos materiais cristalinos tiveram consequências dramáticas no desenvolvimento tecnológico de nossa sociedade, que viu toda a Microeletrônica nascer na segunda metade do século XX.

Entretanto o problema fica extremamente complicado se não podemos desprezar a repulsão Coulombiana entre os elétrons (3º termo da Hamiltoniana (2.1)). Isto é necessário para a descrição física de uma grande variedade de fenômenos cooperativos entre elétrons: Magnetismo e Supercondutividade são bons exemplos. É devido a este termo que a Física dos sistemas eletrônicos fortemente correlacionados é objeto de intensa dedicação por parte de teóricos e experimentais altamente capacitados nos dias de hoje.

2.2 Modelos Tight Binding, Hubbard

A linguagem geralmente usada para tratar sistemas de muitos corpos fortemente interagentes é a dos operadores de criação e destruição no formalismo de 2ª quantização [3], onde a Hamiltoniana (2.1) fica da forma

$$H = \sum_{\substack{i,j \\ \sigma}} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j,k,l \\ \sigma,\sigma'}} V_{ijkl} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} c_{k\sigma} , \quad (2.3)$$

$$t_{ij} = \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi_j(\mathbf{r}) , \quad (2.4)$$

$$V_{ijkl} = \int d^3r \int d^3r' \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_k(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}') . \quad (2.5)$$

O operador $c_{i\sigma}^\dagger$ cria um elétron no estado de uma partícula i com spin σ . Assim $c_{i\sigma}^\dagger$ satisfaz

uma álgebra de anticomutadores Fermiônicos,

$$\{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\} = \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = 0; \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (2.6)$$

Os estados de uma partícula $|i\sigma\rangle, |j\sigma'\rangle$ formam uma base completa ortonormal do problema de um elétron se movimentando na rede cristalina

$$\langle i\sigma | j\sigma' \rangle = \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \chi_\sigma^\dagger \phi_j(\mathbf{r}) \chi_{\sigma'} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}, \quad (2.7)$$

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Neste caso a base mais conveniente é a dos estados de Wannier, que representam estados eletrônicos ortogonais de certa forma localizados nos sítios da rede (em oposição às funções de Bloch que representam estados delocalizados com a simetria da rede de Bravais).

Caso o overlap entre as nuvens eletrônicas dos átomos que compõe o cristal seja pequeno, uma boa aproximação é supor que os estados de Wannier são os estados atômicos de cada átomo do cristal livre (como se o parâmetro de rede $a \rightarrow \infty$). Este esquema intuitivo propõe uma boa forma de se nomear as funções de Wannier

$$\phi_i^{(n)}(\mathbf{r}) = \Psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (2.9)$$

pois agora podemos incluir um índice de banda. Por exemplo, $n = 1$ pode ser a banda s que origina dos elétrons de valência no orbital s dos íons da rede. É bom ressaltar que as funções de Wannier formam um conjunto completo ortonormal de estados de um elétron na rede cristalina [2]. $\Psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ possui um máximo em $\mathbf{r} = \mathbf{R}_i$ (posição do i -ésimo íon) mas não é necessariamente bem localizada, já que a função pode oscilar bastante para $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i| \gg a$ (esta oscilação mantém a ortogonalidade com os outros sítios).

A Hamiltoniana (2.3) é equivalente a (2.1) e ainda é extremamente complicada. Grandes simplificações podem ser feitas sobre os números (em geral complexos) t_{ij} e V_{ijkl} que ainda mantém a essência da física de muitos elétrons. A primeira delas é supor apenas uma banda

(banda s por exemplo, $n = 1$). Esta suposição é realista para cristais iônicos em que cada átomo contribui com apenas um elétron de valência s para o gás eletrônico do material (por ex. Na, Cu). Outra suposição interessante é considerar $t_{ij} = -t \neq 0$ só para i, j primeiros vizinhos ($t_{ii} = \epsilon_0$). Evidentemente para que esta aproximação faça sentido o overlap entre as funções de onda de 2^{os} vizinhos deve ser bem menor que a dos 1^{os} , o que nem sempre é o caso. Desprezando também a interação Coulombiana obtemos o modelo Tight Binding

$$H_{Tight-Binding} = -t \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \sigma}} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) + \epsilon_0 \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (2.10)$$

que pode ser diagonalizado fazendo uma mudança de base para as funções de Bloch

$$c_{i\sigma}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}}{\sqrt{N_S}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \quad (2.11)$$

onde N_S é o número de sítios da rede e \mathbf{k} pertence à 1^a zona de Brillouin da rede em questão. A Hamiltoniana diagonal fica

$$H_{TB} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} , \quad (2.12)$$

com uma relação de dispersão que dá uma “Banda Tight Binding”

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\vec{\delta}} \cos(\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}) + \epsilon_0 . \quad (2.13)$$

$\vec{\delta}$ é o vetor base que gera a rede (por exemplo, numa rede cúbica tridimensional $\vec{\delta} = a\hat{x}, b\hat{y}$

ou $c_{\hat{z}}$. t modula a largura da banda, enquanto ϵ_0 dá o centro dela (veja fig 1).

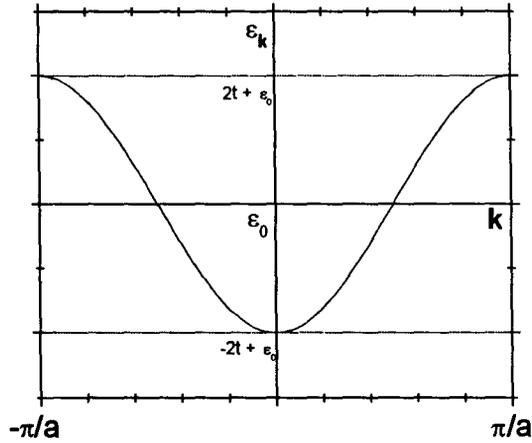


Fig 1: Relação de dispersão do modelo Tight-Binding para uma cadeia linear de parâmetro de rede a

Se a banda está semi-cheia este modelo descreve um metal perfeito. Por exemplo, a configuração atômica do Cu é $[Ar]3d^{10}4s^1$. No cristal o átomo de Cu doa um único elétron de valência ($4s^1$). Assim o modelo tight binding dá uma boa descrição com a banda cheia pela metade (“Half filled band”). De fato, o metal Cobre é um excelente condutor.

Podemos agora incluir correlações Coulombianas entre os elétrons. O maior dos termos V_{ijkl} é evidentemente $V_{iiii} = U > 0$ pois corresponde à interação Coulombiana de elétrons que ocupam o mesmo orbital de Wannier (evidentemente eles tem spin diferente). Considerando todos os outros V_{ijkl} nulos obtemos o termo de interação

$$\frac{1}{2} \sum_{i,\sigma,\sigma'} V_{iiii} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma} .$$

Como $c_{i\sigma}^2 = 0$ temos de ter $\sigma' = -\sigma$ e assim a interação fica

$$\frac{U}{2} \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{i\sigma} = \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

ou

$$H_{int} = U \sum_i n_{i+} n_{i-} . \quad (2.14)$$

A Hamiltoniana dada pelo termo tight binding juntamente com a interação intra-sítio é chamada de **Modelo de Hubbard**:

$$H_{Hubbard} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i+} n_{i-} . \quad (2.15)$$

Apesar de todas as simplificações feitas este ainda é um modelo extremamente difícil de se resolver em duas e três dimensões. Em uma dimensão existe uma solução exata através do Ansatz de Bethe [4]. Mesmo esta solução é extremamente complicada, difícil de interpretar. Para 2 e 3 dimensões existe uma quantidade enorme de aproximações e cálculos numéricos [11], mas não há nenhum consenso sobre qual a aproximação mais adequada.

Podemos analisar dois limites deste modelo:

- (a) $\frac{U}{t} \rightarrow 0$: Neste caso temos um sistema metálico se $N < 2N_S$ (N_S é o número de sítios e N o de elétrons). Os elétrons se movimentam numa banda tight-binding.
- (b) $\frac{U}{t} \rightarrow \infty$: Este é o limite atômico (parâmetro de rede $a \rightarrow \infty$). O modelo é apenas dado por (2.14) e é diagonal no espaço real; as autoenergias são

$$E_n = nU ; n = 0, 1, \dots \quad (2.16)$$

onde n é o número de sítios com ocupação dupla.

O subespaço das autofunções é dado por D_n onde

$$D_n = \{ |n_{1+}, n_{1-}; n_{2+}, n_{2-}; \dots \rangle ; n_{i+} + n_{i-} = 2 \text{ para } n \text{ sítios } i \} \quad (2.17)$$

Este sistema descreve um isolante (os elétrons não se movem) com gap U (também chamado de **Isolante de Mott**).

Para a banda cheia pela metade ($N = N_S$) é intuitivo esperar que à medida que aumentamos U de zero o sistema exiba uma transição metal-isolante. Esta é a chamada “transição de Mott-

Hubbard”, ainda estudada até hoje. No caso de 1 dimensão a solução exata nos diz que $U_c = 0$, ou seja quando ligamos a interação abre-se um gap [4]. Note que este é um gap aberto por correlações fortes, ao contrário do gap que aparece em estrutura de bandas que vem dos diferentes orbitais atômicos (s, p) dos íons da rede¹.

2.3 Descrição das excitações de baixa energia da Hamiltoniana de Hubbard: Modelo de Heisenberg

No sistema preenchido pela metade e com U grande ($U \gg U_c$) os graus de liberdade de carga dos elétrons estão essencialmente congelados mas ainda resta uma alta degenerescência de spin correspondente a todos os valores possíveis de $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N_S})$. Esta degenerescência de 2^{N_S} estados pode ser removida pelo termo de Hopping usando-se teoria de perturbação até 2ª ordem. A correção de 1ª ordem é diagonal e é dada por

$$\langle \sigma_1, \dots, \sigma_{N_S} | H_{Hopping} | \sigma_1, \dots, \sigma_{N_S} \rangle . \quad (2.18)$$

Este termo é claramente nulo, mesmo no caso $N \neq N_S$. A correção de 2ª ordem pode ser vista como uma Hamiltoniana efetiva [5] dada por

$$H_{eff} = P_0 H_{Hopping} P_1 \frac{1}{E_0 - H_{Interação}} P_1 H_{Hopping} P_0 . \quad (2.19)$$

P_0 é o projetor nos estados de ocupação simples, ou seja, $n = 0$. P_1 é o projetor nos espaços de $n = 1$ (uma dupla ocupação). Note que é P_1 que aparece na eq. (2.19) ao invés do complemento de P_0 pois $H_{Hopping}$ só conecta estados de 1 dupla ocupação a 0 duplas ocupações no caso $N = N_S$ (note que expandindo os projetores (2.19) fica idêntica a bem conhecida fórmula de teoria de perturbação de 2ª ordem). Agora vamos nos restringir ao caso $N = N_S$, senão o problema fica bem mais difícil de resolver. E_0 é a energia do estado fundamental de $H_{Interação}$, ou seja, $E_0 = 0$ (energia dos estados de ocupação simples). A energia de todos os estados com

¹Esta discussão foi inspirada nas notas de aula do curso FI-193 - Mecânica Quântica de Sistemas de Muitos Corpos, lecionada pelo Prof. Eduardo Miranda no 1º semestre de 1998.

1 dupla ocupação é claramente U e assim a eq. (2.19) fica reduzida a

$$H_{eff} = -\frac{1}{U} P_0 H_{Hop} P_1 H_{Hop} P_0 \quad (2.20)$$

Novamente podemos usar o fato de que H_{Hop} . só conecta estados de ocupação única com 1 ocup. dupla, assim para $N = N_S$ podemos substituir na eq. (2.20) o projetor P_1 pela unidade $\mathbf{1}$ sem cometer erro algum:

$$H_{eff} = -\frac{1}{U} P_0 H_{Hop}^2 P_0, \quad (2.21)$$

mas

$$H_{Hop}^2 = t^2 \sum_{\substack{i,\delta,\sigma \\ j,\rho,\sigma'}} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\sigma} + h.c. \right) \left(c_{j\rho}^\dagger c_{j+\rho,\sigma'} + h.c. \right) \quad (2.22)$$

e os termos do tipo $c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\sigma} c_{j\rho}^\dagger c_{j+\rho,\sigma'}$ só são não nulos no espaço de ocupação simples se $i = j + \hat{\rho}$ e $i + \hat{\delta} = j$, ou seja, $\hat{\rho} = -\hat{\delta}$; daí H_{Hop}^2 fica

$$\begin{aligned} P_0 H_{Hop}^2 P_0 &= 4t^2 \sum_{\substack{i,\delta \\ \sigma,\sigma'}} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\sigma} c_{i+\delta,\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} \\ &= 4t^2 \sum_{\substack{i,\delta \\ \sigma,\sigma'}} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i+\delta,\sigma} c_{i+\delta,\sigma'}^\dagger \\ &= -4t^2 \sum_{\substack{i,\delta \\ \sigma,\sigma'}} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i+\delta,\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\sigma'} + 2\gamma t^2 \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \end{aligned}$$

e o segundo termo é uma constante, $2\gamma N t^2$ (γ é o número de coordenação da rede). Desprezando-o podemos escrever H_{eff} como

$$H_{eff} = \frac{4t^2}{U} \sum_{\substack{i,\delta \\ \alpha\beta\lambda\mu}} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\beta} c_{i+\delta,\lambda}^\dagger c_{i+\delta,\mu} \cdot \quad (2.23)$$

Usando a identidade ($\vec{\sigma} = \sum_i \sigma_i \hat{e}_i$ e σ_i são as matrizes de Pauli)

$$\delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda} = \frac{1}{2} [\delta_{\alpha\beta} \delta_{\lambda\mu} + \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\sigma}_{\lambda\mu}]$$

temos que

$$\begin{aligned}
 H_{eff} &= \frac{2t^2}{U} \sum_{\substack{i,\delta \\ \alpha,\lambda}} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} c_{i+\delta,\lambda}^\dagger c_{i+\delta,\lambda} + \frac{2t^2}{U} \sum_{i,\delta} \sum_{\alpha,\beta} c_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta} \cdot \sum_{\lambda,\mu} c_{i+\delta,\lambda}^\dagger \vec{\sigma}_{\lambda\mu} c_{i+\delta,\mu} \\
 &= \gamma N \frac{t^2}{U} + \frac{8t^2}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,
 \end{aligned}$$

onde usamos que $\vec{S}_i = \sum_{\alpha,\beta} c_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}$ é a representação 2^o quantizada do operador de spin no espaço de ocupação única. Assim a Hamiltoniana efetiva que descreve os graus de liberdade de spin no modelo de Hubbard com U grande ($\frac{U}{t} \gg 1$) é dada por

$$H_{eff} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.24)$$

que também é chamado de **Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético**, pois $J = \frac{8t^2}{U} > 0$. Este cálculo simples mostra que os Isolantes de Mott (que não conduzem devido à forte repulsão Coulombiana intra-sítio) são antiferromagnéticos. Esta interação efetiva antiferromagnética é chamada de **Superexchange**, e foi idéia de P.W. Anderson [6]. Se considerarmos o efeito de V_{ijji} na Hamiltoniana eletrônica (2.3) podemos mostrar que ele leva a uma interação efetiva ferromagnética ($J < 0$ em (2.24)). Esta contribuição é chamada de **Exchange direto**, e compete com o Superexchange para determinar o caráter ferro ou antiferromagnético do composto fortemente correlacionado.

Vale notar que vários óxidos de metais de transição MnO , NiO , La_2CuO_4 que acredita-se são descritos pelo modelo de Hubbard semi-preenchido são isolantes antiferromagnéticos, o que concorda com a teoria acima.

Acredita-se que o modelo de Heisenberg (2.24) em duas e três dimensões possui **Ordem de Longo Alcance** [7], ou seja à temperatura suficientemente baixa ($T = 0$ para duas dimensões) temos

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \sim const., \quad |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \gg a \quad (2.25)$$

onde a constante independe da distância entre os sítios. No caso do Heisenberg ferromagnético a const. é sempre positiva, enquanto que no caso antiferromagnético ela é positiva se i, j pertencem à mesma subrede, e negativa senão (ou seja, a ordem é alternada através da rede).

No caso unidimensional a solução exata da cadeia de Heisenberg pelo Ansatz de Bethe [8] mostra que *não* há ordem de longo alcance no estado fundamental,

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \sim \frac{(\xi)^{|i-j|}}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (1 \text{ dim.}) \quad (2.26)$$

onde $\xi = +1$ no caso ferromagnético e -1 no antiferromagneto. A ordem de longo alcance pode ser medida usando-se espalhamento de nêutrons em vários compostos tri e bidimensionais, como veremos no próximo capítulo. As temperaturas críticas associadas a esta ordem são em geral altas, mostrando que J realmente tem uma origem Coulombiana como o Superexchange prevê ($T_c \sim |J|/k$). A interação dipolo-dipolo é muito mais fraca e nunca poderia prever T_c 's tão altas.

2.4 Modelo t-J

Se $N < N_S$ a situação fica bem mais complicada e o melhor tratamento é via uma transformação canônica que elimina termos acoplando estados com diferentes números de sítios duplamente ocupados [9]. A Hamiltoniana efetiva em primeira ordem de t/U é

$$H_{eff} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} P_0 \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) P_0 + \frac{8t^2}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} P_0 \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) P_0 + H_3 \quad (2.27)$$

onde H_3 é um termo envolvendo três sítios. Desprezando H_3 obtemos a Hamiltoniana do **Modelo t-J** :

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} P_0 \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) P_0 + J \sum_{\langle i,j \rangle} P_0 \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) P_0 \quad (2.28)$$

com $J = \frac{8t^2}{U} > 0$.

No modelo t-J a ordem antiferromagnética compete com a mobilidade dos buracos à medida que variamos o parâmetro t/J . Isto fica mais claro quando enunciamos o **Teorema de Nagaoka** [10] que diz que o caso de um buraco na banda semi-preenchida ($N = N_S - 1$) para $J = 0$ é *ferromagnético* para a rede cúbica simples (sc), bcc e rede quadrada bidimensional

(sq). Assim podemos imaginar que a medida que aumentamos a mobilidade dos buracos ocorre uma competição entre correlações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, ou seja, os buracos se movendo tendem a destruir a ordem antiferromagnética do estado fundamental do modelo t-J. Esta situação claramente ocorre nos compostos supercondutores de alta temperatura crítica (veja próx. cap.) onde o aumento do número de buracos destrói a ordem antiferromagnética de longo alcance.

Neste pequeno trabalho vamos analisar como se dá a competição entre a mobilidade de um buraco e a ordem antiferromagnética em um pequeno cluster de 4 sítios. Para isso vamos analisar soluções analíticas exatas do estado fundamental que vão revelar detalhes sobre a fase espiralada que aparece em todos os cálculos de campo médio (veja cap. 4).

Até o presente momento (1998) ainda não existe consenso sobre uma aproximação adequada que revele todas as propriedades físicas do modelo t-J. Tratamentos de campo médio desprezam as flutuações quânticas, enquanto que a enorme quantidade de cálculos numéricos (Monte Carlo Quântico, diagonalização exata) sofre de fortes efeitos de tamanho (um excelente artigo de revisão sobre resultados numéricos do modelo t-J é o de E. Dagotto [11]).

Capítulo 3

Materiais High T_c : Propriedades físicas e modelos eletrônicos¹

Em 1986 J.G. Bednorz e K.A. Müller anunciaram a descoberta de supercondutividade num material cerâmico à temperatura de aproximadamente 30 K [12]. Este material ($La_{2-x}Sr_xCuO_4$) tinha propriedades físicas bem diferentes dos supercondutores convencionais, e tal resultado foi visto com cuidado até a confirmação pelo grupo de Takagi [13], que observou temperaturas críticas acima do ponto de ebulição do Nitrogênio (77 K). A partir daí se deu início uma corrida frenética para obtenção de supercondutividade a temperaturas cada vez mais altas, sendo que hoje um material baseado em mercúrio tem a mais alta T_c (133 K). Novas tecnologias já aparecem como consequência desta descoberta, como SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) enquanto aplicações tecnológicas mais excitantes (como por exemplo trens que levitam sobre trilhos magnéticos e bobinas gigantes armazenadoras de energia) ainda aguardam o desenvolvimento de densidades de corrente crítica mais altas. Na tabela abaixo mostramos alguns dos materiais High T_c mais populares, seguidos de suas temperaturas críticas. Para comparação colocamos o composto Nb_3Ge que possuía a T_c mais alta até a descoberta dos novos materiais.

¹ Este capítulo é inspirado no excelente review de dagotto [11].

<i>Material</i>	$T_c(K)$
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$	133
$YBa_2Cu_3O_7$	92
$La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$	39
Nb_3Ge	23.2

Um composto supercondutor pertence à família “*High T_c*” se ele possui planos CuO_2 . Como veremos, são nesses planos que se acredita ocorre a supercondução. Este caráter bidimensional somado a comportamentos magnéticos próximos da fase supercondutora coloca grandes desafios à Física de Matéria Condensada no final deste século, que ainda não estabeleceu consenso algum sobre o mecanismo dominante na descrição teórica das propriedades eletrônicas destes óxidos de cobre.

3.1 Estrutura e diagrama de fase

Para discutir um pouco das propriedades experimentais dos materiais High T_c vamos apresentar dois dos mais populares compostos presentes na literatura.

3.1.1 $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

Este composto cristaliza numa estrutura bct (“Body centered tetragonal”) onde os planos CuO apresentam-se a 6.6\AA de distância, e cada Cu se encontra dentro de uma estrutura tetragonal

de 6 oxigênios (veja fig. 2).

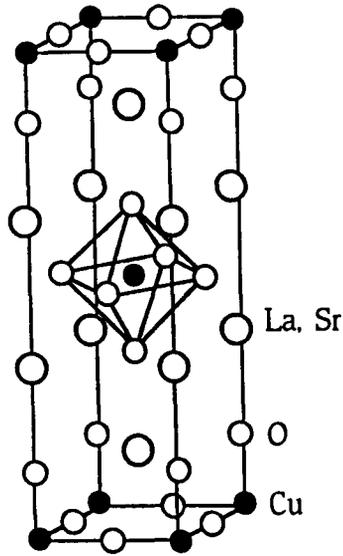


Fig 2: Estrutura cristalina do $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

A dopagem é feita substituindo-se *La* por *Sr*. Estes ficam localizados no chamado **reservatório de carga** que vai prover os planos *CuO* de portadores. No composto sem dopagem ($x = 0$) o reservatório de carga é formado por dois planos *LaO* que mantêm o oxigênio na configuração O^{2-} com a camada $2p$ completa e o cobre Cu^{2+} com um buraco no orbital d que dá ao átomo spin $1/2$ (veja a tabela).

Fora do Cristal	Dentro do Cristal
$Cu : [Ar]3d^{10}4s^1$	$Cu^{2+} : [Ar]3d^9$
$O : [He]2s^22p^4$	$O^{2-} : [Ne]$
$La : [Xe]5d^16s^2$	$La^{3+} : [Xe]$
$Sr : [Kr]5s^2$	$Sr^{2+} : [Kr]$

Ao substituir *La* por *Sr* um elétron deixa de ser doado para o plano *CuO*, e um oxigênio passa a configuração O^- , com um buraco no orbital $2p$. A dopagem muito baixa ($x \gtrsim 0.04$) o material que era isolante apresenta comportamento metálico, com o sinal do Coeficiente Hall positivo indicando que os portadores de carga são buracos. Em seguida, ainda com dopagem bem baixa

($x \gtrsim 0.07$) temos a fase supercondutora que pode ser vista no diagrama de fase $x \times T$ (fig. 3).

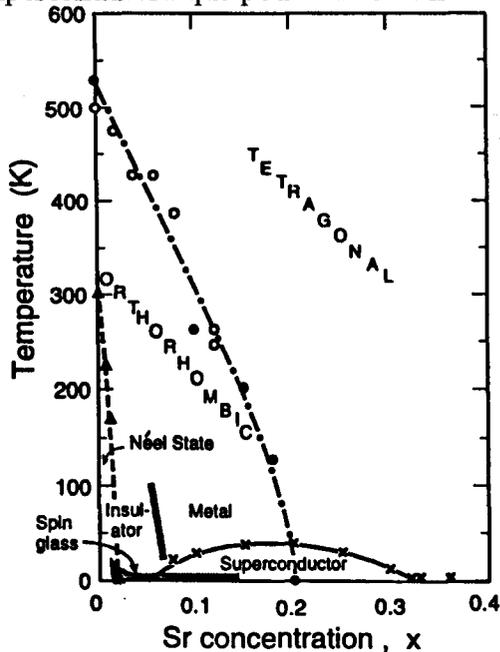


Fig 3: Diagrama de fase do $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

Note a presença de uma fase Néel (ordem de longo alcance antiferromagnética). Esta pode ser explicada notando que o composto La_2CuO_4 se comporta como um Isolante de Mott, onde os spins dos cobres interagem via Superexchange e podem ser descritos pelo modelo de Heisenberg antiferromagnético (2.24) [14]. Porém é importante ressaltar que os oxigênios nos planos CuO se encontram bem mais próximos dos cobres (1.9\AA) do que os oxigênios apicais O_z (2.4\AA ; interessante dizer que esta distância é praticamente igual para todos os compostos). Isto sugere que as ligações Cu-O são mais fortes no plano, reduzindo o modelo de Heisenberg a 2 dimensões. Uma interação magnética residual entre os planos CuO explica a $T_{Néel}$ tão maior que zero ($\sim 300K$); vale lembrar que o teorema de Mermin-Wagner [7] demonstra que só pode haver ordem de longo alcance a $T = 0$ em duas dimensões (para o caso da interação isotrópica).

A fase supercondutora aparece logo após a destruição da ordem antiferromagnética de longo alcance ($0.05 \lesssim x \lesssim 0.3$). Mesmo na fase supercondutora correlações antiferromagnéticas de muitos parâmetros de rede de distância são observadas no plano, o que sugere que correlações Coulombianas entre os elétrons do composto estão de alguma forma relacionadas com o mecanismo de supercondutividade.

Outra característica importante do diagrama de fase é a transição de fase estrutural que

ocorre distorcendo o octaedro CuO_6 transformando o composto numa fase ortorrômbica ($a \neq b \neq c$) a baixa dopagem e temperatura. Em geral esta leve distorção não é levada em conta na descrição das propriedades eletrônicas.

3.1.2 $YBa_2Cu_3O_{6+x}$

A supercondutividade neste material (YBCO) já ocorre acima da temperatura do nitrogênio líquido e sua estrutura é claramente mais complicada (fig.4). A primeira coisa que notamos é a presença de dois planos CuO_2 por célula unitária (distantes 3.2\AA , com Y entre eles). Os pares de planos distam 8.2\AA , e são separados por íons de Ba, Cu e O. Um fato interessante é que o alto valor da T_c parece estar relacionado com o número de planos CuO_2 por célula unitária; de fato o composto com Hg ($T_c = 133K$) possui três planos por célula unitária.

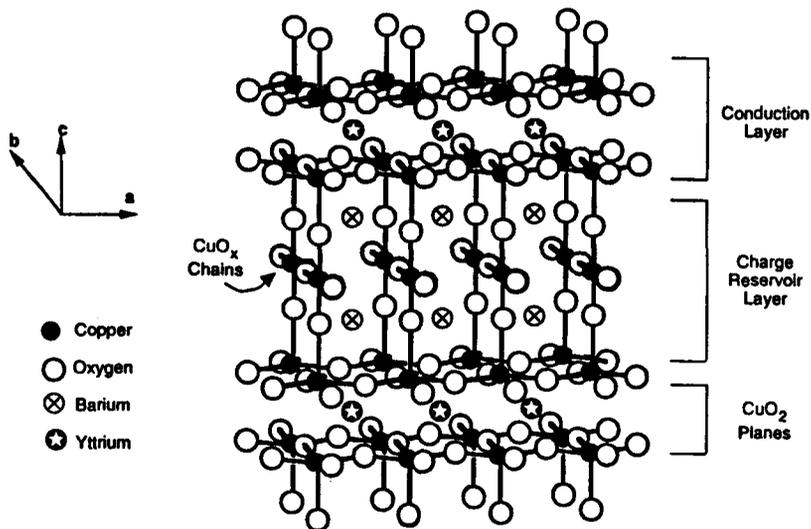


Fig 4: Estrutura do $YBa_2Cu_3O_{6+x}$

Outra característica interessante são as cadeias lineares de CuO_x que aparecem no reservatório de carga entre os pares de planos. A dopagem é feita acrescentando oxigênios a estas cadeias, que por sua vez “roubam” elétrons dos planos. A possibilidade de haver buracos nas cadeias (oxigênios O^- ao invés de O^{2-}) complica ainda mais a situação, podendo haver condutividade nestas estruturas. A distância Cu-O nas cadeias é a mesma que nos planos, 1.9\AA . Este fato parece refletir numa forte dependência do coeficiente Hall com a temperatura. A influência da

presença de buracos nas cadeias ainda traz bastante controvérsia, para mais detalhes veja [15].

<i>Fora do Cristal</i>	<i>Dentro do Cristal</i>
$Y : [Kr]5s^24d^1$	$Y^{3+} : [Kr]$
$Ba : [Xe]6s^2$	$Ba^{2+} : [Xe]$

Na fig. 5 vemos o diagrama de fase deste material. Note a semelhança com o diagrama do composto de La, só que agora a faixa de dopagem é grande, permitindo que o composto mude de isolante para supercondutor. Com $x \sim 0.3$ a ordem antiferromagnética é destruída, dando lugar a fase supercondutora que ocorre até $x = 1$. A mais alta T_c ocorre para x um pouco menor que 1. Note que a mudança de fase estrutural também ocorre, só que curiosamente parece depender pouco da temperatura.

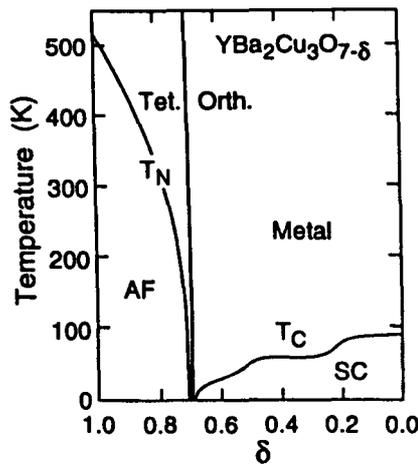


Fig 5: Diagrama de fase do $YBa_2Cu_3O_{6+x}$

3.2 Propriedades do estado normal (não supercondutor)

Além da supercondutividade diferente da usual, os materiais High T_c chamam a atenção devido ao seu estranho comportamento fora da fase supercondutora, que apresenta características de comportamento diferente de um Líquido de Fermi (LF), como por exemplo a resistividade linear com a temperatura (em um LF canônico $\rho \propto T^2$ devido ao espalhamento elétron-elétron).

Nos supercondutores convencionais mediados por Fônons temos $\rho \propto a + bT^5$ para T baixa (mas maior que T_c), devido ao espalhamento elétron-fônon que domina a resistividade. Isto sugere um mecanismo diferente de espalhamento presente nos novos materiais (veja fig. 6).

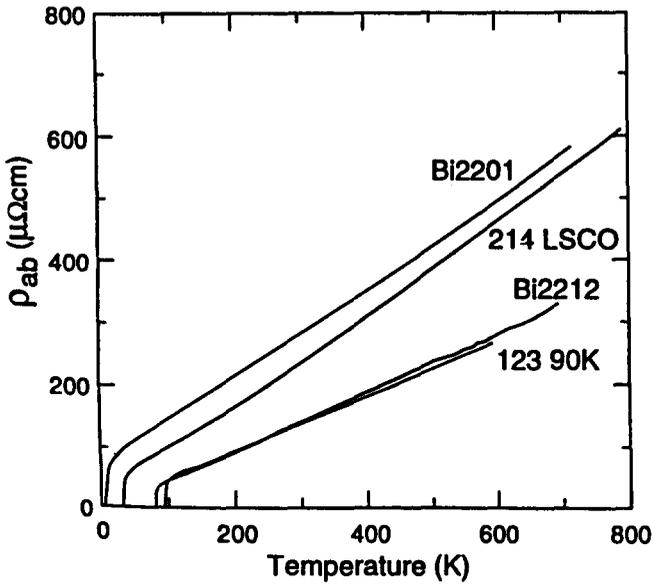


Fig 6: Resistividade no plano CuO_2 para diversos compostos High T_c

É interessante notar que este comportamento linear só ocorre para uma pequena janela de dopagem correspondente às maiores temp. críticas de supercondução (fig. 7).

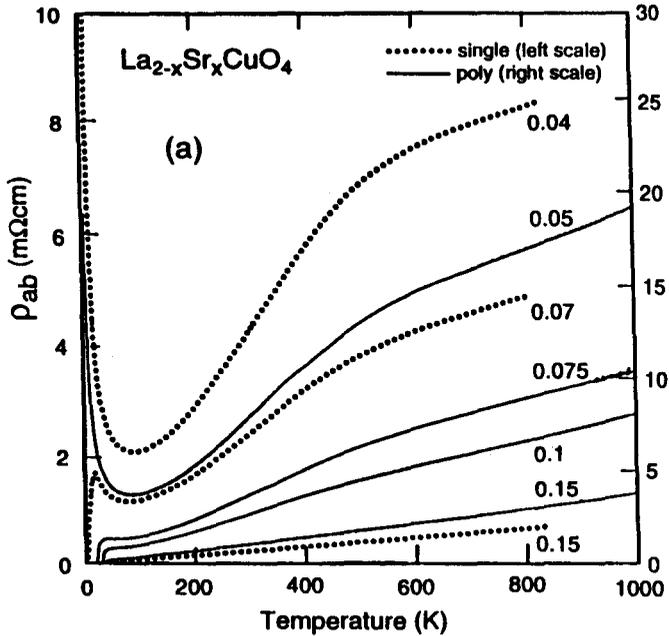


Fig 7: Resistividade no plano ρ_{ab} para várias dopagens de $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

Se considerarmos esta resistividade relacionada com o espalhamento de quase-partículas nos planos CuO_2 temos um comportamento estranho para o tempo de vida das quase-partículas

$$\tau \propto \frac{1}{\rho} \propto \frac{1}{T} \propto \frac{1}{(E - E_F)}$$

o que torna questionável a representação das excitações elementares como quase-partículas e mesmo a existência da superfície de Fermi na descrição eletrônica destes materiais. Outro comportamento tido como estranho é a forte dependência do coeficiente Hall com a temperatura ($R_H \propto 1/T$ a altas temperaturas), bem diferente do comportamento que aparece em modelos simples de elétrons interagentes (como LF) onde R_H não depende da temperatura. É por estas propriedades e muitas outras que se acredita que o entendimento do comportamento “anômalo” do estado normal pode revelar as características principais do mecanismo da supercondutividade. Assim o estado normal destes materiais têm recebido considerável atenção na literatura científica atual.

3.3 Modelos eletrônicos

Para descrever as propriedades eletrônicas dos compostos *High T_c* é preciso encontrar uma Hamiltoniana o mais simples possível que capture a essência do comportamento dos elétrons nestes compostos, como a presença de correlações antiferromagnéticas e sua destruição pela dopagem, e a supercondutividade.

A primeira simplificação necessária a fazer é construir uma Hamiltoniana restrita aos planos CuO_2 . É claro que isto não explica características importantes do diagrama de fase, como $T_{Néel} > 0$ mas espera-se que estes detalhes sejam acrescentados depois (por ex. um acoplamento fraco entre os planos via campo médio explicaria a ordem de longo alcance a temp. maior que zero). A quebra de simetria rotacional devido ao potencial cristalino remove a degenerescência dos orbitais d do Cu fazendo com que o buraco ocupe o orbital $d_{x^2-y^2}$ no material não dopado; assim o modelo eletrônico é o de Heisenberg de spins 1/2 numa rede quadrada de Cu^{2+} (2.24).

O que acontece quando dopamos o material? O elétron não pode ser retirado do orbital d criando um Cu^{3+} devido a fortes repulsões Coulombianas entre dois buracos. Assim ele é retirado de um dos orbitais p dos oxigênios (isto concorda com experimentos de Espectroscopia

Eletrônica, EELS) e usando este raciocínio é possível construir o modelo “Três Bandas” [16]

$$H_{3-Band} = -t_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle} (d_i^\dagger p_j + h.c.) - t_{pp} \sum_{\langle j,j' \rangle} (p_j^\dagger p_{j'} + h.c.) + \varepsilon_p \sum_j n_j^p + \varepsilon_d \sum_i n_i^d \quad (3.1)$$

$$+ U_p \sum_j n_{j+}^p n_{j-}^p + U_d \sum_i n_{i+}^d n_{i-}^d + U_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^d n_j^p$$

O vácuo é definido como os orbitais 3d e 2p cheios. p^\dagger e d^\dagger criam buracos nos orbitais p e d respectivamente. Note que desta forma $\varepsilon_p - \varepsilon_d > 0$. De um cálculo de estrutura de bandas [17] podemos estimar os valores destes parâmetros. Em eV:

$\varepsilon_p - \varepsilon_d$	t_{pd}	t_{pp}	U_d	U_p	U_{pd}
3.6	1.3	0.65	10.5	4	1.2

Veja como U_d é alto; os buracos na dopagem vão para os oxigênios.

O modelo de três bandas ainda é muito complicado. Seria bom colocá-lo numa forma ainda mais simples, substituindo os orbitais p e d por um estado físico somente. Zhang e Rice avançaram nesta direção [18] supondo que o buraco introduzido pela dopagem possa ser descrito por uma função de onda que é combinação linear dos orbitais p dos 4 oxigênios ao redor do íon Cu^{2+} . Esta combinação pode ser simétrica ou antissimétrica. O spin deste buraco vai casar com o do orbital d do cobre para formar singletos e tripletos dependendo da simetria espacial escolhida. Eles mostraram através de teoria de perturbação até 2ª ordem sobre os estados atômicos que a energia do estado tripleto é maior, e uma Hamiltoniana efetiva pode ser obtida projetando o espaço de Hilbert sobre os singletos. Assim o buraco originalmente presente no oxigênio passa a ser representado por um singlete centrado no cobre. O modelo efetivo corresponde a spins e buracos (ausência de spin) e como temos forte interação Coulombiana no mesmo sítio a Hamiltoniana efetiva é dada pelo modelo t-J (2.28)

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} P_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) P_0 + J \sum_{\langle i,j \rangle} P_0 \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) P_0 .$$

Lembre que este modelo se reduz automaticamente ao Heisenberg spin 1/2 na ausência de dopagem. É importante ressaltar que a redução para o modelo t-J é extremamente controversa.

Emery e Reiter [19] argumentaram que as quase partículas no modelo de 3 bandas possuem carga e spin, enquanto no modelo t-J imagina-se um esquema de desacoplamento entre carga e spin (holons e spinons), o que também é controverso. Alguns autores acham necessária a inclusão de um hopping entre 2^{os} vizinhos para simular o espectro do modelo 3 bandas (modelo t'-t-J).

Uma maneira razoável de se entender a redução do modelo a uma banda é imaginar que um modelo de Hubbard (2.15) com U_{eff} pode simular o gap de transferência de carga que aparece quando dopamos a rede CuO_2 (veja fig. 8).

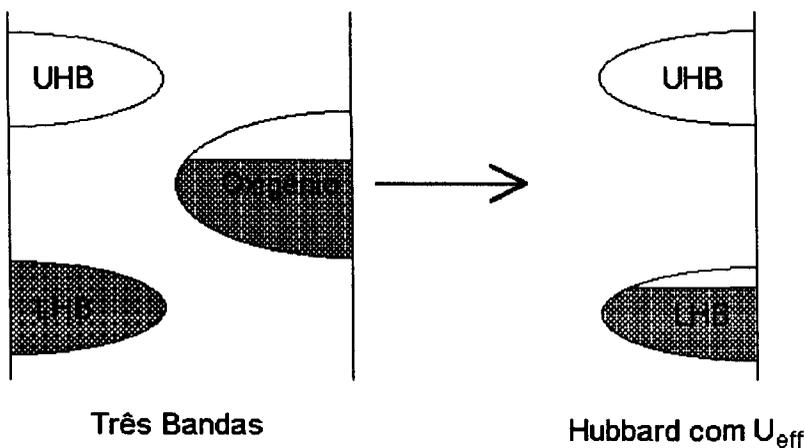


Fig 8: Redução para Hubbard de uma banda

P.W. Anderson acha bem clara a descrição pelo modelo t-J (ou Hubbard 1 banda). Ele acredita que as ligações Cu-O no plano são fortes e rígidas, "...isto requer que as combinações ligantes dos orbitais do Cu e O sejam localizadas bem abaixo do nível de Fermi, de modo que nenhuma liberdade dinâmica é deixada para tratar orbitais d e p separadamente". Uma boa discussão informal aparece no artigo "A dialogue on the theory of High T_c ", P.W. Anderson e R. Schrieffer [20].

Alguns autores mostraram usando cálculo em sistemas finitos que o espectro do modelo 3 bandas pode ser reproduzido usando um modelo de Hubbard com $U_{eff} = 5.4eV$, $t = 0.43eV$ e incluindo um pequeno hopping entre 2^{os} vizinhos, $t' = -0.07eV$ ($U/t \sim 12$) [21, 22]. Eles também mostraram que o modelo $t' - t - J$ com os mesmos t , t' e $J = 0.128eV$ também reproduz bem o espectro do 3 bandas.

Capítulo 4

Teoria de Campo Médio

Como primeiro passo para entender o comportamento físico do modelo t-J é útil fazer uma teoria de campo médio autoconsistente, que despreza as flutuações quânticas. Isto foi feito nos anos 1989-1990 por três grupos: C. Jayaprakash et al. [24], C.L. Kane et al. [25], e D. Yoshioda [23], no qual este capítulo é baseado. Vamos apresentar aqui um resumo das considerações feitas e dos resultados, indicando ao leitor a referência ao artigo original de Yoshioda para preencher os detalhes.

Em primeiro lugar escrevemos a Hamiltoniana do modelo t-J (2.28) usando os operadores $\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger = (1 - n_{i-\sigma})c_{i\sigma}^\dagger$ que projetam sobre os estados de ocupação simples. Daí não precisamos mais escrever os projetores P_0 e H_{t-J} fica

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle_\sigma} \left(\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right). \quad (4.1)$$

Agora vamos usar a representação $\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger = e_i s_{i\sigma}^\dagger$ onde $s_{i\sigma}^\dagger$ cria um bóson de Schwinger no sítio i com spin σ e e_i é um operador fermiônico que destrói um buraco no sítio i . Esta representação aumenta o espaço de Hilbert, e para mantê-lo precisamos respeitar o vínculo local

$$\sum_\sigma s_{i\sigma}^\dagger s_{i\sigma} + e_i^\dagger e_i = 1 \quad (4.2)$$

ou seja, apenas 1 spin ou 1 buraco pode ocupar o mesmo sítio. Esta representação é conhecida como a dos Férmions escravos (em oposição à dos bósons escravos que dá resultados inferiores

[23]). É fácil ver que ela é exata desde que mantivermos o vínculo (4.2), ou seja

$$\{\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger, \tilde{c}_{j\sigma'}\} = \{e_i s_{i\sigma}^\dagger, s_{j\sigma'} e_j^\dagger\} \text{ e } \{\tilde{c}_{i\sigma}, \tilde{c}_{j\sigma'}\} = \{s_{i\sigma} e_i^\dagger, s_{j\sigma'} e_j^\dagger\}$$

e a ação dos dois é a mesma no espaço de ocupação única. Escrevendo (4.1) nesta representação temos

$$H_{t-J} = 2t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\kappa_{ij} e_j^\dagger e_i + h.c. \right) - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - e_i^\dagger e_i) \Delta_{ij}^\dagger \Delta_{ij} (1 - e_j^\dagger e_j), \quad (4.3)$$

$$\kappa_{ij} = \frac{1}{2} \left(s_{i+}^\dagger s_{j+} + s_{i-}^\dagger s_{j-} \right), \quad (4.4)$$

$$\Delta_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \left(s_{i+}^\dagger s_{j-}^\dagger - s_{i-}^\dagger s_{j+}^\dagger \right). \quad (4.5)$$

A teoria de campo médio consiste em escrever os operadores Δ_{ij}^\dagger , κ_{ij} , $e_j^\dagger e_i$ da forma

$$\Delta_{ij}^\dagger = \langle \Delta_{ij}^\dagger \rangle + \underbrace{\left(\Delta_{ij}^\dagger - \langle \Delta_{ij}^\dagger \rangle \right)}_{\text{Flutuações Quânticas}}$$

e considerar as flutuações pequenas, expandindo o parênteses até 1ª ordem. A média dos operadores é sobre o Ensemble Canônico (ou o estado fundamental se $T = 0$). Este procedimento também é conhecido como **Fatoração de Hartree Fock**. Vamos definir os parâmetros de ordem

$$\Delta = \langle \Delta_{ij}^\dagger \rangle \quad (4.6)$$

$$\kappa = \langle \kappa_{ij} \rangle \quad (4.7)$$

$$\varepsilon = \langle e_j^\dagger e_i \rangle \quad (4.8)$$

e vamos considerá-los todos reais e uniformes (pode-se mostrar que esta escolha minimiza a energia livre).

Podemos agora fatorar o Hamiltoniano (4.3), fazendo por exemplo

$$\begin{aligned} \left(\kappa_{ij} e_j^\dagger e_i + h.c. \right) &\approx \langle \kappa_{ij} \rangle e_j^\dagger e_i + (e_j^\dagger e_i) \kappa_{ij} - \langle e_j^\dagger e_i \rangle \langle \kappa_{ij} \rangle + h.c. \\ &= \left(\kappa e_j^\dagger e_i + \varepsilon \kappa_{ij} + h.c. \right) - 2\kappa\varepsilon. \end{aligned}$$

Esta fatoração reduz o Hamiltoniano a uma forma quadrática, facilmente diagonalizável no espaço de Fourier para os férmions e por uma transformação de Bogoliubov para os bósons. A forma como é feita esta fatoração depende fortemente da escolha dos parâmetros de ordem. Vamos tratar o vínculo de dopagem $\langle e_i^\dagger e_i \rangle = \delta$ por um multiplicador de Lagrange μ , e o espaço de Hilbert será conservado na média introduzindo um único multiplicador λ (isto claramente é uma aproximação incontrolada),

$$H_{t-J} \approx H_{t-J}^{MF} = H_{t-J}^{Fat.} - \mu \sum_i e_i^\dagger e_i - \lambda \sum_{i,\sigma} s_{i\sigma}^\dagger s_{i\sigma}$$

A Hamiltoniana da direita é quadrática; diagonalizando por Bogoliubov e Fourier obtemos as relações de dispersão (para a rede quadrada 2d)

$$\varepsilon_k = 4(t\kappa + J\varepsilon\Delta^2) [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] - \mu \quad (\text{Holons}) \quad (4.9)$$

$$E_k = \sqrt{[\lambda + J(1 - \delta) - 2\tilde{t}\varepsilon(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))]^2 - 4J^2\Delta^2(\sin(k_x a) + \sin(k_y a))^2} \quad (\text{Spinons}) \quad (4.10)$$

com $\tilde{t} = t + \frac{J\kappa}{2\varepsilon}$. A Hamiltoniana diagonal fica

$$H_{t-J}^{MF} = \sum_k \varepsilon_k e_k^\dagger e_k + \sum_{K \neq K_\pm} \left(E_k + \frac{1}{2} \right) \left(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k \right) + 2\lambda \sum_\sigma \left(s_{K_\pm\sigma}^\dagger s_{K_\pm\sigma} - \frac{1}{2} \right) + const. \quad (4.11)$$

onde a const. depende de Δ , κ e ε . Note a presença dos modos K_\pm ; eles vêm do fato de que a transformação de Bogoliubov $\alpha_k^\dagger = u_k s_{k+}^\dagger + v_k s_{-k-}$, $\beta_k = \dots$ é tal que $u_k \propto \frac{1}{E_k}$; assim ela não funciona nos K_\pm tais que $E(K_\pm) = 0$. Isto só acontece no estado fundamental, quando se pode mostrar que $\lambda = \lambda_{\min} = 4\sqrt{(\tilde{t}\varepsilon)^2 + (J\Delta)^2}$ e $\vec{K}_\pm = \pm(K_0, K_0)$ com $\cos(K_0) = \frac{-\tilde{t}\varepsilon}{\sqrt{(\tilde{t}\varepsilon)^2 + (J\Delta)^2}}$. Daí ocorre uma **Condensação de Bose** no modo \vec{K}_\pm dos bósons de Schwinger:

$$\sum_\sigma \langle s_{K_\pm\sigma}^\dagger s_{K_\pm\sigma} \rangle = n_0 \sim N$$

Em 2d é óbvio que isto só acontece a $T = 0$ (Se $T > 0$ pode-se mostrar que $E_k > 0$ sempre,

portanto não há K_{\pm}). As equações que determinam os potenciais químicos μ e λ são

$$\sum_i \langle e_i^\dagger e_i \rangle = N\delta \quad (4.12)$$

$$\sum_i \left(e_i^\dagger e_i + \sum_\sigma s_{i\sigma}^\dagger s_{i\sigma} \right) = N \text{ ou } \sum_{i,\sigma} \langle s_{i\sigma}^\dagger s_{i\sigma} \rangle = N(1 - \delta), \text{ corrigindo para incluir } n_0$$

$$\sum_{k \neq K_{\pm}} \sum_\sigma \langle s_{k\sigma}^\dagger s_{k\sigma} \rangle + n_0 = N(1 - \delta). \quad (4.13)$$

As equações (4.12), (4.13), (4.6), (4.7), (4.8) definem um sistema não linear complicado nas variáveis μ , λ , Δ , κ , ε . Algumas destas variáveis podem se calculadas analiticamente, enquanto outras necessitam um cálculo numérico. É importante agora interpretar o significado físico dos parâmetros de ordem. Note que um $\langle \Delta_{ij} \rangle$ não nulo indica a presença de um singlete na ligação ij . É por isso que o chamamos de parâmetro de ordem RVB (Resonating Valence Bond) [27]. Obviamente estes indicam correlações antiferromagnéticas. O parâmetro κ pode ser interpretado como o medidor da mobilidade dos bósons de Schwinger, enquanto ε da mobilidade dos buracos (veja na fig. 10 abaixo que a mobilidade dos bósons implica na mobilidade dos buracos e vice-versa, como era de se esperar).

Com um cálculo simples podemos mostrar que a condensação de Bose descreve uma ordem de longo alcance a $T = 0$:

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \approx \frac{3}{2} \left(\frac{n_0}{N} \right)^2 \cos \left[2\vec{K}_+ \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right], \text{ para } |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \gg a \quad (4.14)$$

Veja que o período da ordem é incomensurável (forma uma espiral), exceto a $\delta = 0$ quando o estado é *Néel* (fig. 12). Quando $\delta > \delta_c = 0.2217$ o período passa a ser infinito, indicando uma

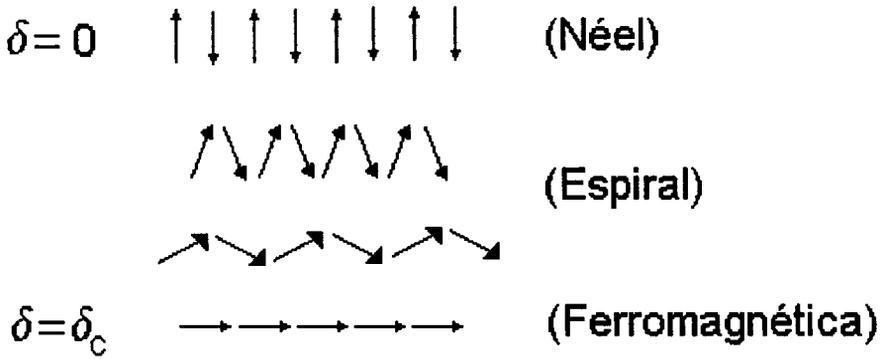


Fig 9: Distorção da ordem magnética com o aumento da dopagem via campo médio

Neste esquema a destruição da ordem antiferromagnética se revela pela distorção contínua de uma configuração Néel para um alinhamento ferromagnético perfeito. Isto claramente aparece porque desprezamos as flutuações quânticas. Assim o aparecimento de uma fase ferromagnética com alinhamento perfeito pode nos sugerir que as flutuações quânticas não podem ser desprezadas para $\delta > \delta_c$. Comparando este resultado com o diagrama de fase do $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (fig. 3) não há concordância, pois a fase antiferromagnética é destruída a baixíssima dopagem. Entretanto experimentos de difração de nêutrons revelam dois picos no espaço recíproco, o que sugere a presença de uma fase magnética espiralada perto da fase supercondutora [26]. Já o valor de δ_c compara razoavelmente bem com $x_c \approx 0.3$ do $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. O problema é que neste composto acredita-se que nem todos os buracos vão para os planos (alguns vão para a cadeia). Daí a necessidade de incluir flutuações quânticas para explicar a rápida destruição da ordem magnética com a dopagem. Nas figuras abaixo vemos os resultados numéricos para os parâmetros de ordem a $T = 0$ (figs. 11, 12, 13). Na fig. 10 vemos as temperaturas de transição

RVB, ε , κ . Todos os cálculos foram feitos para $t/J=5$ com exceção da fig. 13.

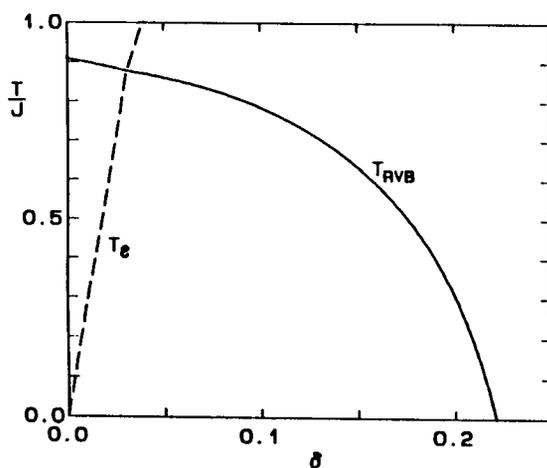


Fig 10: Temp. de transição vs dopagem δ . O parâmetro de ordem Δ fica não nulo abaixo de T_{RVB} (linha sólida), e os parâmetros de ordem ε e κ ficam não nulos abaixo de T_ε (linha pontilhada)

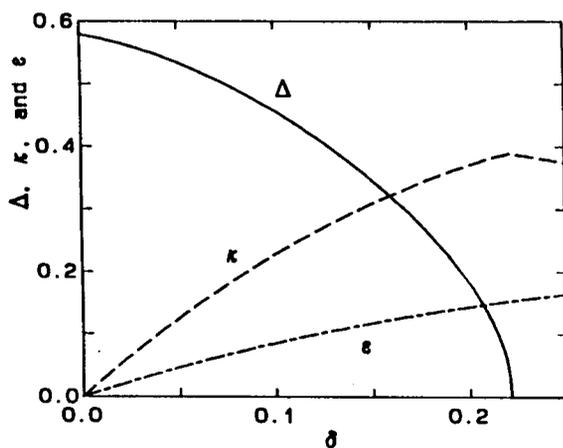


Fig 11: Parâmetros de ordem a $T = 0$

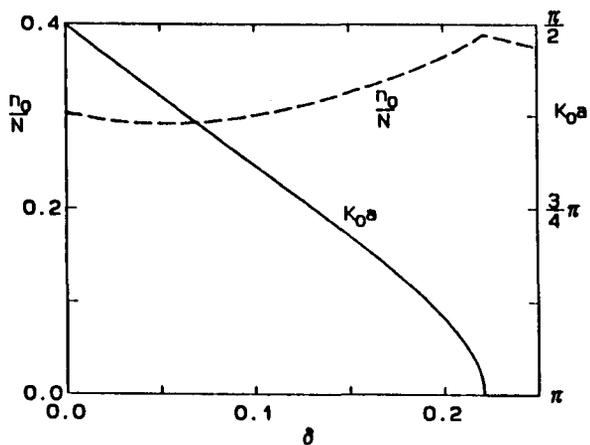


Fig 12: Ordem de longo alcance incomensurável. Note a transição para o estado ferromagnético para $\delta_c = 0.2217$

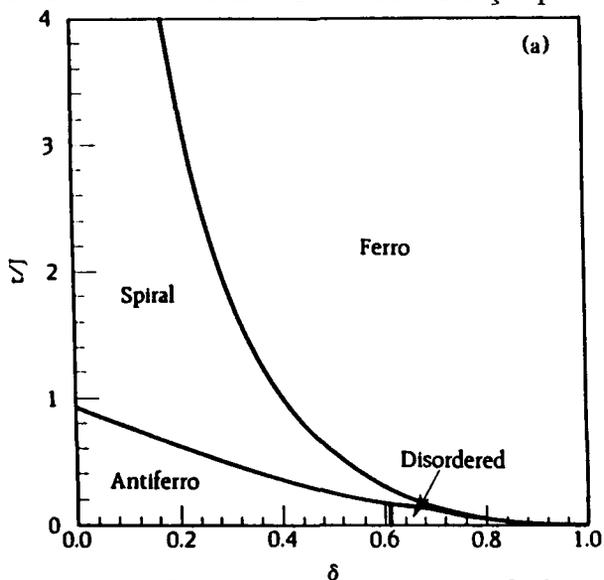


Fig 13: Diagrama de fase a $T = 0$ [24]

Capítulo 5

Cálculos em pequenos clusters: Efeito do movimento de buracos sobre a ordem magnética do modelo t - J ¹

Como vimos no capítulo anterior o tratamento de campo médio estabelece o aparecimento da ordem magnética espiral mediante o aumento da dopagem. Apesar disso ele não dá a descrição correta da rápida destruição da ordem antiferromagnética pela dopagem, o que nos sugere que é preciso incluir flutuações quânticas no cálculo. Aqui escolhemos tratar este problema com soluções analíticas em pequenos clusters, que apesar de sofrerem de fortes efeitos de tamanho mostraram um comportamento interessante. Neste capítulo vamos tratar clusters bem simples, que nos motivarão a fazer perguntas na interpretação de um caso bem menos simples, que é o cluster de 4 sítios com um buraco (próximo cap.). Uma utilidade clara destas pequenas soluções é nos guiar para formulação de funções de onda variacionais que podem ser aplicadas ao cálculo de propriedades da rede infinita. Vamos propor uma solução variacional para o caso de 4 sítios e 1 buraco, que depois vai se mostrar exata demonstrando o poder deste método.

O parâmetro principal do modelo t - J é a razão t/J , que definiremos como β . Assim ao au-

¹Aqui começa a parte original da tese.

mentar β podemos interpretar como um aumento na mobilidade dos buracos, que ganham maior energia cinética. Analisaremos o efeito da mobilidade dos buracos sobre a ordem magnética ao aumentar β . Note que isto é diferente do que acontece experimentalmente nas amostras de $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, onde t/J fica fixo e aumentamos a dopagem. Não há razão nenhuma para se relacionar este efeito com o que calculamos à medida que β aumenta.

A partir de agora o estudo do Mod. t-J passa a ser feito independentemente de sua condição de limite de alta correlação do Mod. de Hubbard, onde $\beta = \frac{t}{J} = \frac{U}{8t}$ (veja cap. 2). Assim o limite $\beta \rightarrow 0$ é entendido como $t \rightarrow 0$ com J fixo, ou seja, a energia cinética dos buracos ficando desprezível em relação à interação antiferromagnética.

5.1 Simetrias do modelo t-J

Ao longo destas soluções vamos fazer uso constante das propriedades de simetria da Hamiltoniana (4.1). Entre elas:

- (a) $N = \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}$ comuta com $H_{t-J} \implies$ Só estados de igual número de buracos entram no espaço de Hilbert.
- (b) $S_T^z = \sum_i S_i^z$ comuta com H_{t-J} ; isto é bem geral pois não há necessidade de haver condições periódicas de contorno nem de interação isotrópica (pode haver uma anisotropia α na interação magnética, veja abaixo). O operador S_T^z gera as rotações de todos os spins ao mesmo tempo; girando-os todos juntos não alteramos a energia magnética. Girando os operadores de hopping não muda nada também. Isto dá uma forma bastante útil de classificar as funções de onda, pois a matriz do Hamiltoniano separa em blocos de magnetização z definida. De agora em diante chamaremos o autovalor de S_T^z de magnetização.
- (c) S_T^2 comuta com H_{t-J} . Isso agora não é tão mais geral, pois a rede deve ser periódica e não deve ter anisotropia ($\alpha = 1$). Entretanto foi unicamente devido à esta propriedade que conseguimos resolver analiticamente o cluster de 4 sítios e um buraco (próx. cap.). Note que, para spins 1/2 podemos escrever

$$S_T^2 = \left(\sum_i \vec{S}_i \right)^2 = \sum_i S_i^2 + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{3}{4}N + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{para spins } 1/2). \quad (5.1)$$

Chamaremos os autovalores de S_T^2 de spin total.

- (d) Simetrias espaciais da rede. No caso de clusters finitos ainda há mais simetrias do que na rede infinita. Não foi necessário usar estas simetrias nesta tese, mas sua importância é claramente reconhecida para reduzir o tempo computacional em clusters maiores [28].

5.2 3 sítios com 1 buraco

Queremos resolver a Hamiltoniana

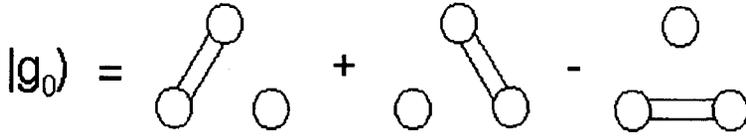
$$H'_{t-J} = \frac{H_{t-J}}{J} = -\beta \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + \sum_{\langle i,j \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{\alpha}{2} \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) - \frac{n_i n_j}{4} \right]. \quad (5.2)$$

Note que $H = H_t + H_J$. Quando há apenas 1 buraco o termo $n_i n_j$ contribui com uma constante, e pode ser desprezado (Mesmos nos outros casos a importância deste termo não é clara [11]). No caso de 3 sítios e 1 buraco o espaço de Hilbert tem dimensão $3 \times 2^2 = 12$ (O buraco pode ocupar 3 posições, temos 2 spins cada um podendo estar para cima ou para baixo). H_{t-J} aparece dividida em 3 blocos de magnetização $M_z = 1$ (3×3), 0 (6×6), -1 (3×3). Os blocos são facilmente diagonalizáveis por um programa de computação simbólica (usamos o *Mathematica*[®]). As funções de onda tem uma estrutura simples e não dependem nem de β , nem de α . Estado fundamental: (listamos os outros estados no apêndice I)

$$|g_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\begin{aligned} & \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \uparrow \downarrow 0 \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \downarrow \uparrow 0 \right\rangle \right) + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left| 0 \uparrow \downarrow \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left| 0 \downarrow \uparrow \right\rangle \right) - \\ & \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \downarrow 0 \uparrow \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \uparrow 0 \downarrow \right\rangle \right) \end{aligned} \right] \quad (5.3)$$

$$E_0 = -2t - \frac{J}{2} \left(\alpha + \frac{1}{2} \right)$$

Este claramente é um estado do tipo RVB, uma dimerização de singletos:



Note a convenção usada: definimos um singlete com ket positivo quando o sítio de menor número (numeração dos sítios: $\left| \begin{smallmatrix} 1 \\ 32 \end{smallmatrix} \right\rangle$) tem spin para cima. Existe outra forma interessante de ver este estado; observando que o est. fundamental do modelo de Heisenberg (2.24) anisotrópico com apenas 2 spins é um singlete de energia $-\frac{J}{2}(\alpha + \frac{1}{2})$ notamos que o efeito da inclusão de um buraco neste estado não afetou a ordem magnética em (5.3), pois ela continua de singletos só que o buraco fica ressonando sobre os sítios apenas mudando a fase deles (no caso, só um sinal). O efeito do movimento do buraco sobre a ordem magnética é realmente simples, mas isso já era de se esperar: para $N = 3$, $[H_t, H_J] = 0$ pois $H_J \propto S_T^2$; assim a energia de movimento do buraco $-2t$ se soma à energia magnética $-\frac{J}{2}(\alpha + \frac{1}{2})$; o estado fundamental de H_t e H_J é o mesmo.

5.3 4 sítios com 2 buracos

A dimensão do espaço de Hilbert é $\binom{4}{2} \times 2^2 = 24$. Nossa numeração de sítios vai ser $\left| \begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 4 & 3 \end{array} \right\rangle$. Novamente, as magnetizações são 1 (Bloco 6×6), 0 (12×12), -1 (6×6). Desta vez é necessário escrever o bloco $M_z = 0$ na base do spin total para diagonalizá-lo. Para isto basta calcular a matriz de transformação O , que é a transposta dos autovetores de S_T^2 , e transformar o Hamiltoniano H'_{t-J} da seguinte forma: $O^{-1} \cdot H'_{t-J} \cdot O$. Isto diagonaliza os dois blocos 6×6 (que tem spin total 1) e divide o bloco 12×12 em dois blocos 6×6 , um de spin total 0 outro 1. O espectro tem uma dependência simples com β e α , novamente linear nas duas variáveis (fig.

14). Ocorre um cruzamento de nível no estado fundamental em $\beta = \frac{\alpha}{2(\sqrt{2}-1)} \cong 1.21\alpha$.

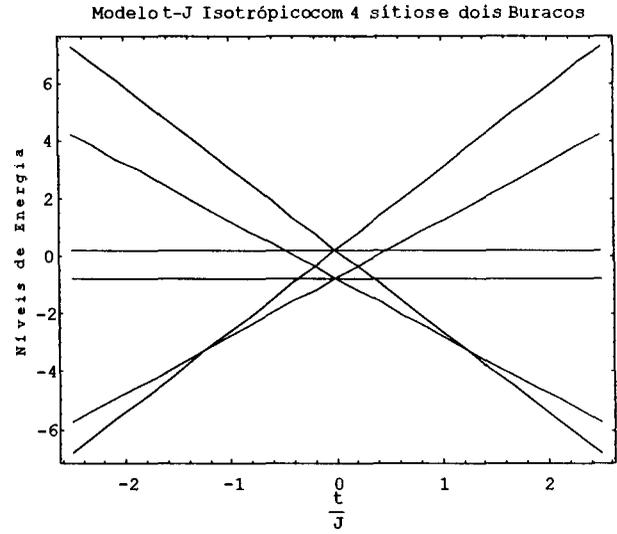


Fig. 14: Níveis de energia do cluster de 4 sítios e 2 buracos; temos 24 autoestados, muitos degenerados. Este cruzamento indica claramente a mudança da ordem magnética do estado fundamental com o aumento de β . Ele tem degenerescência 2 e 3 respectivamente.

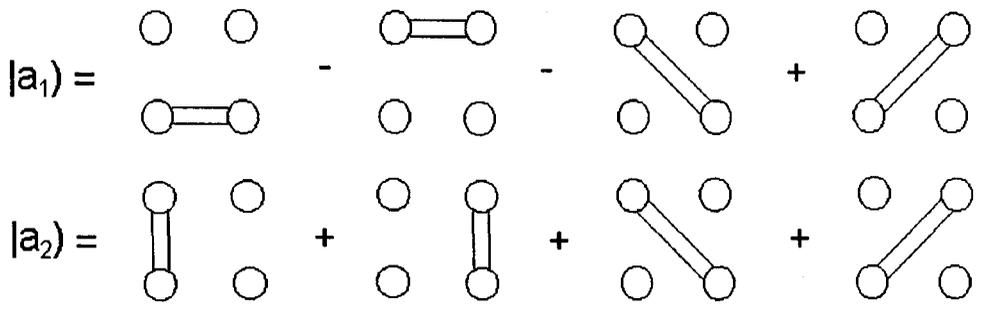
Estado Fundamental :

$E_1 = -\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{2} - 2\beta$, deg. 2 $0 < \beta < \frac{\alpha}{2(\sqrt{2}-1)}$

 \rightarrow

$E_2 = -\frac{1}{4} + \frac{\alpha}{2} - 2\sqrt{2}\beta$, deg. 3 $\frac{\alpha}{2(\sqrt{2}-1)} < \beta < \infty$
--

5.3.1 Funções de onda do estado fundamental:



Estado 1: $0 < \beta < \frac{\alpha}{2(\sqrt{2}-1)}$; os traços duplos são singletos

Novamente estes são estados RVB, com spin total 0 e magnetização 0. O movimento dos buracos ainda não afetou a ordem magnética da cadeia de Heisenberg 2 spins (singletos). A

energia de Hopping é aditiva: $E_1 = (-2t) + (-\frac{J}{4} - \frac{J\alpha}{2})$, a primeira parte é a energia cinética, a segunda a magnética. As correlações antiferromagnéticas são fortes. Podemos formar **Ondas de carga**, por exemplo $\frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle - |a_2\rangle)$ localiza os buracos nos sítios 2 e 4. Podemos eliminar uma das diagonais; mas não podemos eliminar uma das laterais. Note também que a probabilidade de se medir os buracos juntos é sempre igual a de se medi-los separados.

$$|b_1\rangle = \frac{1}{4} \left[\begin{array}{c} \left| \begin{array}{cc} \circ & \circ \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \circ \\ \downarrow & \uparrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \downarrow \\ \circ & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \downarrow & \uparrow \\ \circ & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \circ \\ \downarrow & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \downarrow & \circ \\ \uparrow & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \uparrow \\ \circ & \downarrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \downarrow \\ \circ & \uparrow \end{array} \right\rangle \\ + \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\left| \begin{array}{cc} \circ & \downarrow \\ \uparrow & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \uparrow \\ \downarrow & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \downarrow & \circ \\ \circ & \uparrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \circ \\ \circ & \downarrow \end{array} \right\rangle \right] \end{array} \right]$$

$$|b_2\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\left| \begin{array}{cc} \circ & \circ \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \circ & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \circ \\ \uparrow & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \uparrow \\ \circ & \uparrow \end{array} \right\rangle \right] + \frac{1}{2} \left[\left| \begin{array}{cc} \uparrow & \circ \\ \circ & \uparrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \uparrow \\ \uparrow & \circ \end{array} \right\rangle \right]$$

$$|b_3\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\left| \begin{array}{cc} \downarrow & \downarrow \\ \circ & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \circ \\ \downarrow & \downarrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \downarrow & \circ \\ \downarrow & \circ \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \downarrow \\ \circ & \downarrow \end{array} \right\rangle \right] + \frac{1}{2} \left[\left| \begin{array}{cc} \downarrow & \circ \\ \circ & \downarrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \circ & \downarrow \\ \downarrow & \circ \end{array} \right\rangle \right]$$

Estado 2: $\frac{\alpha}{2(\sqrt{2}-1)} < \beta < \infty$

Vamos analisar agora o estado 2, para β maior. A primeira coisa que notamos é que estes estados tem spin 1 e correlações ferromagnéticas aparecem (ao invés de singletos, temos tripletos). Todos os 24 kets-base de nosso espaço de Hilbert entram neste est. fundamental, o que caracteriza uma certa desordem induzida pelo hopping dos buracos. Note que um ket com spins na diagonal tem peso 2 vezes maior que um outro com spins na lateral. Isto acontece para minimizar a energia magnética (apesar disso a prob. de se medir os buracos juntos é a mesma de medi-los separados). Agora uma característica muito interessante destes estados: Note que cada ket base dentro de $|b_i\rangle$ não aparece em nenhum outro $|b_j\rangle$. Isto significa que fazendo combinações lineares $\sum_i |b_i\rangle$ não vai haver interferência destrutiva entre os kets (eles são ortogonais) e assim não poderemos favorecer a presença de nenhum par de buracos específico em nosso estado. Em outras palavras, *não há Onda de Carga* como havia na situação anterior. As ligações entre os elétrons podem ser só ferromagnéticas ou só antiferromagnéticas.

O Estado 2 tem característica de metal (Ferromagnetismo, alta mobilidade de carga), enquanto o Estado 1 tem traços de isolante (Antiferromagnetismo, ondas de carga). É impressionante como podemos ver traços de uma transição metal-isolante em um sistema tão simples. (As outras funções de onda e autoenergias aparecem no Apêndice II).

5.4 Uma solução variacional para t/J pequeno

Para demonstrar o poder da análise de um pequeno cluster vamos aplicar o comportamento que aprendemos nas seções anteriores para formular uma solução variacional para β pequeno. Queremos que as funções de onda remontem de alguma forma a solução do modelo de Heisenberg (2.24) quando $\beta \rightarrow 0$.

Vamos propor uma função de onda para o caso de 1 buraco na rede de 4 sítios (3 spins). O espaço de Hilbert tem dimensão $4 \times 2^3 = 32$. Um ket base típico é $\left| \begin{array}{c} 0 \quad \uparrow \\ \downarrow \quad \uparrow \end{array} \right\rangle$; queremos saber qual o efeito do hopping de buracos no estado fundamental deste sistema. Ora, uma boa proposta variacional para β pequeno deve remontar a ordem magnética da *cadeia aberta* de Heisenberg de 3 spins quando $\beta \rightarrow 0$. De posse do estado fundamental desta cadeia vamos propor a seguinte função variacional

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^4 \frac{1}{2} e^{i\theta_j} |\phi_j\rangle \quad (5.4)$$

onde $|\phi_j\rangle$ é a função de onda com o buraco localizado no sítio j , e a ordem magnética da solução exata da cadeia aberta de 3 spins. θ_j são nossos parâmetros variacionais, sendo que temos apenas 3 livres. Em outras palavras estamos propondo que o efeito do movimento de um buraco na cadeia é ressonar sobre o background antiferromagnético, apenas alterando as fases das funções de onda que são soluções para $\beta = 0$. Para por isto em prática vamos calcular o estado fundamental da cadeia aberta com 3 spins.

5.4.1 Cadeia de Heisenberg aberta com 3 spins

Temos $2^3 = 8$ elementos na base, que possui kets com magnetização $\frac{3}{2}$ (1×1), $\frac{1}{2}$ (3×3), $-\frac{1}{2}$ (3×3) e $-\frac{3}{2}$ (1×1). Depois de uma álgebra bem simples obtemos o estado fundamental da

Hamiltoniana de Heisenberg anisotrópica , que é bi-degenerado (o outro estado pode ser obtido flipando todos os spins)

$$|g_0\rangle = \frac{1}{N_{\pm}(\alpha)} \left\{ |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{2\alpha} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right\} \quad (5.5)$$

$$\text{Energia} : -\frac{1}{4}J \left(1 + \sqrt{1 + 8\alpha^2} \right)$$

onde $N_{\pm}(\alpha) = \sqrt{4 \pm \frac{\pm 1 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{2\alpha^2}}$ (Mostramos no apêndice III as outras soluções).

Análise do estado fundamental: Interpretação física da anisotropia

Primeiro notamos que a anisotropia α provoca a presença de ligações paralelas entre os spins (no caso Ising, $\alpha = 0$, o estado fund. é simplesmente $|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$). Por ser em cadeia aberta, (5.5) é bem mais complicada que o caso periódico que é diagonal na base de S_T^z . Para determinar a estrutura do est. fund. vamos definir as funções de correlação e magnetização (numeração $|123\rangle$): $\rho_{curta} = 4\langle S_1^z S_2^z \rangle$, $\rho_{longa} = 4\langle S_1^z S_3^z \rangle$, $M_2^z = 2\langle S_2^z \rangle$, $\sigma_2^z = 2\sqrt{\langle (S_2^z)^2 \rangle - \langle S_2^z \rangle^2}$. Veja a fig. 15.

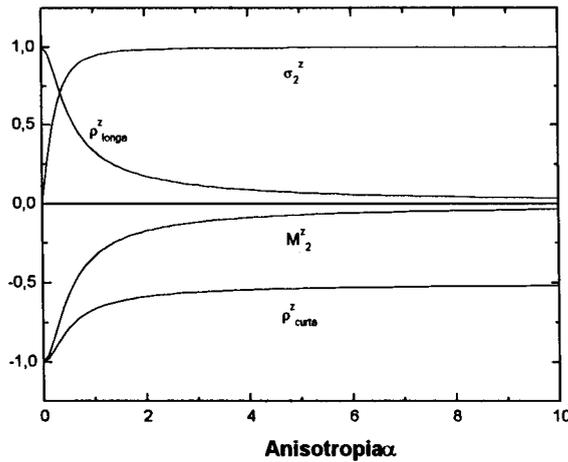


Fig 15: Efeito da anisotropia na cadeia aberta de Heisenberg com 3 spins

A anisotropia aumenta as flutuações quânticas do spin na direção z; note como M_2^z vai a zero e σ_2^z assume o valor máximo quando $\alpha \rightarrow \infty$. A anisotropia descorrelaciona completamente os spins 1 e 3, mas não é capaz de descorrelacionar 1 e 2.

5.4.2 Minimização da energia

Usando (5.4) e (5.5) temos que as funções $|\phi_j\rangle$ são por exemplo

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{N_+(\alpha)} \left\{ \begin{vmatrix} 0 & \uparrow \\ \downarrow & \uparrow \end{vmatrix} - \frac{1 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{2\alpha} \begin{vmatrix} 0 & \uparrow \\ \uparrow & \downarrow \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & \downarrow \\ \uparrow & \uparrow \end{vmatrix} \right\}, \quad (5.6)$$

$|\phi_2\rangle$ com o buraco no sítio 2, etc. Vamos minimizar em relação a θ_i a energia média $E(\theta_1, \dots, \theta_4) = \langle \Psi | H_{t-J} | \Psi \rangle$. Depois de alguns cálculos simples a energia é dada por

$$E = -\frac{J}{4} \left(1 + \sqrt{1 + 8\alpha^2} \right) + \frac{t}{8} \left[\frac{1 + 8\alpha}{\sqrt{1 + 8\alpha^2}} - 1 \right] [\cos(\theta_1 - \theta_2) + \cos(\theta_2 - \theta_3) + \cos(\theta_3 - \theta_4) + \cos(\theta_1 - \theta_4)]$$

É óbvio que o valor mínimo da soma dos cossenos é -4 . Isto acontece quando $\theta_1 = 0, \theta_2 = \pi, \theta_3 = 2\pi, \theta_4 = 3\pi$. Assim o valor mínimo da energia é dado por

$$\begin{aligned} E_{Min.} &= -\frac{J}{4} \left(1 + \sqrt{1 + 8\alpha^2} \right) - \frac{t}{2} \left[\frac{1 + 8\alpha}{\sqrt{1 + 8\alpha^2}} - 1 \right] \\ E_{Min.}(\alpha = 1) &= -J - t \end{aligned} \quad (5.7)$$

e a função de onda otimizada é dada por

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} (|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle - |\phi_4\rangle) \quad (5.8)$$

Será que este estado representa bem o resultado exato? Veremos no próximo capítulo.

Capítulo 6

Modelo t-J isotrópico de 4 sítios com 1 buraco: Solução analítica exata

Como já dito, o espaço de Hilbert tem dim. 32 mas a matriz se divide em 4 blocos de magnetização $\frac{3}{2}$ (4×4), $\frac{1}{2}$ (12×12), $-\frac{1}{2}$ (12×12), $-\frac{3}{2}$ (4×4). Só é necessário diagonalizar os dois primeiros blocos, pois as outras autofunções podem ser obtidas das de magnetização positiva flipando os spins da base; as autoenergias são as mesmas. Assim só trabalharemos no subespaço de magnetização positiva, e uma degenerescência 2 fica subentendida.

6.1 Autoestados e autoenergias

Para diagonalizar analiticamente o bloco 12×12 precisamos escrevê-lo na base do spin total; assim só foi possível resolver o problema para o caso isotrópico ($\alpha = 1$) que comuta com S_T^2 . Fazendo isso a matrix 12×12 quebra em 2 blocos, 8×8 (Spin 1/2) e 4×4 (Spin 3/2). A diagonalização destes blocos foi feita sem problemas usando o programa *Mathematica*[®]. Veja

nas figs. 16 e 17 o gráfico dos níveis de energia em função de β .

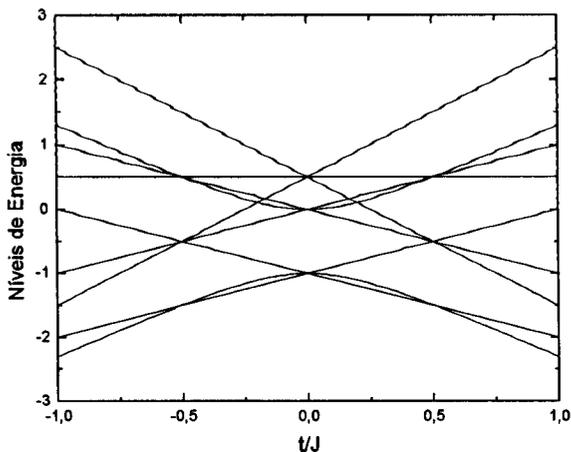


Fig 15: Níveis de energia para o caso de 4 sítios e 1 buraco

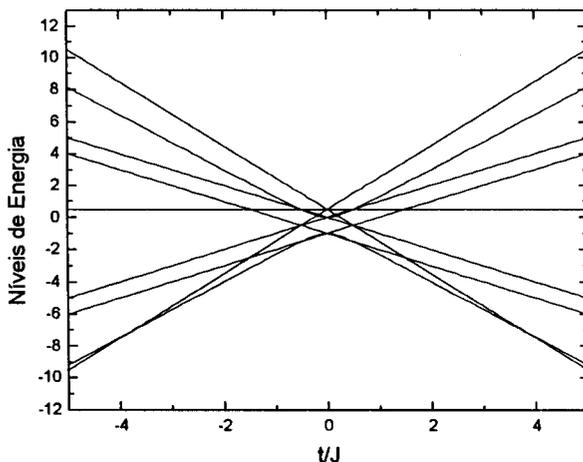


Fig 16: Visão mais geral do espectro. Note os 3 cruzamentos de nível

A primeira coisa que notamos é o grande número de cruzamentos de nível para $\frac{t}{J} = \frac{1}{2}$. Este é o caso supersimétrico, que tem algumas simetrias a mais na rede infinita. É nesse único ponto que temos solução por Ansatz de Bethe em 1d [29], e também temos a exata separação entre carga e spin (de novo apenas em 1d) [30]. Agora, além da dependência linear em β

aparecem também duas hipérboles. Os autoestados com energias lineares em β possuem uma estrutura simples (não dependem de β). Já as hipérboles possuem autoestados extremamente difíceis de analisar, e vamos dedicar uma seção inteira abaixo para esta análise. O estado fundamental muda de comportamento 3 vezes para $\beta > 0$; ocorrem 2 cruzamentos de nível. O spin total é $\frac{1}{2}$ no primeiro, $\frac{1}{2}$ no segundo e $\frac{3}{2}$ no terceiro. Este efeito cascata de spin já havia sido reportado nos cálculos numéricos de clusters com 8 sítios [28]. Vamos passar à discussão do estado fundamental.

6.1.1 Estado fundamental 1: $0 < \beta < \frac{1}{2}$

Este estado possui spin $\frac{1}{2}$ e magnetização $\frac{1}{2}$. Função de onda e energia:

$$|a_1\rangle = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} + \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} 0 \uparrow \\ \downarrow \uparrow \end{array} \right] - \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{array}{c} 0 \uparrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right] + \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} 0 \downarrow \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right] \\ - \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} \downarrow 0 \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right] - \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{array}{c} \uparrow 0 \\ \downarrow \uparrow \end{array} \right] + \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} \uparrow 0 \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right] \\ + \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \uparrow 0 \end{array} \right] - \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{array}{c} \downarrow \uparrow \\ \uparrow 0 \end{array} \right] + \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} \uparrow \uparrow \\ \downarrow 0 \end{array} \right] \\ - \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} \uparrow \uparrow \\ 0 \downarrow \end{array} \right] - \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ 0 \uparrow \end{array} \right] + \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{array}{c} \downarrow \uparrow \\ 0 \uparrow \end{array} \right] \end{array} \right\} \quad (6.1)$$

Energia : $-J - t$

É exatamente igual à solução variacional proposta! (veja (5.8) para $\alpha = 1$; a energia é a mesma que (5.7)). Isto mostra o poder deste tipo de análise; obtivemos a solução exata variacionalmente. Podemos interpretar este resultado notando que neste cluster finito $\beta < \frac{1}{2}$ não dá mobilidade suficiente para os buracos afetarem a ordem antiferromagnética. É como se os buracos estivessem parados. Fica a pergunta se à medida que aumentamos o tamanho do cluster o β crítico até a qual vale esta solução vai a 0 ou não. Se ele tender a um valor fixo (E quem sabe o caso supersimétrico $\beta = \frac{1}{2}$ é um bom candidato?) nossa solução variacional poderá se tornar uma ferramenta valiosa na análise do modelo t-J (pelo menos em 1 dimensão; como generalizá-lo para dim. mais altas?). Apesar do antiferromagnetismo lembrar um isolante aqui não podemos ter ondas de carga, pois não há degenerescência suficiente para isto.

6.1.2 Estado fundamental 2: $\frac{1}{2} < \beta < \frac{4+\sqrt{13}}{2} \cong 3.8$

Este estado também tem spin $\frac{1}{2}$ e magnet. $\frac{1}{2}$. Agora aparece uma degenerescência 2 (4 contando $M_z = -\frac{1}{2}$), e a energia tem a forma de uma hipérbole $E(\beta) = -\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + 12\beta^2}\right)$. Esta forma um pouco mais complicada também aparece nos 2 autoestados, que normalizados ficam bem difíceis de analisar. Sendo assim estes dois autoestados são os primeiros a aparecer com uma dependência em β nos coeficientes, o que mostra que eles mudam de estrutura continuamente à medida que β aumenta. Abaixo mostramos estes estados não normalizados; note a ordem da base.

$$\begin{aligned}
 |b_1\rangle &= \{-1, 1, 0, a, b, c, -a, -b, -c, 1, -1, 0\} \\
 |b_2\rangle &= \{-1, 0, 1, -b, 2b, -b, b, -2b, b, 1, 0, -1\} \\
 a(\beta) &= \frac{-2 + \sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}; \quad b(\beta) = \frac{1 + \sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}; \quad c(\beta) = \frac{1 - 2\sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta} \\
 \text{Energia} &= -\frac{1}{2} \left(J + \sqrt{J^2 + 12t^2} \right) \\
 \text{Base} &: \left\{ \begin{array}{l} \left| \begin{array}{l} \uparrow \downarrow \\ \uparrow 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \downarrow \uparrow \\ \uparrow 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow \uparrow \\ \downarrow 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \downarrow 0 \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow 0 \\ \downarrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow 0 \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right\rangle, \\ \left| \begin{array}{l} \uparrow \uparrow \\ 0 \downarrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow \downarrow \\ 0 \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \downarrow \uparrow \\ 0 \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} 0 \uparrow \\ \downarrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} 0 \uparrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} 0 \downarrow \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right\rangle \end{array} \right\}
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

Curiosamente os kets $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$ obedecem a mesma periodicidade no sinal que (6.1) à medida que o buraco muda de sítio. Talvez a regra de mudança de sinal que obtivemos variacionalmente seja algo mais geral.

Gostaríamos de verificar se esta nova “fase” que aparece entre os dois comportamentos (antiferro e ferromagnético, que foram vistos no caso de 2 buracos) corresponde à fase espiralada obtida no tratamento de campo médio. Para isso a primeira coisa que vamos fazer é montar uma combinação linear de $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$ que faça mais sentido físico. Daí analisaremos este estado calculando médias de spin sobre os sítios. Também mostraremos que estes estados formam ondas de carga. Isto será feito abaixo.

6.1.3 Estado fundamental 3: $\frac{4+\sqrt{13}}{2} < \beta < \infty$

Este estado é composto simplesmente de todos os kets da base combinados com a mesma intensidade; a degenerescência é 2, ambos os kets tem spin $\frac{3}{2}$. $|c_1\rangle$ tem magnet. $\frac{1}{2}$, e $|c_2\rangle$ $\frac{3}{2}$.

$$\begin{aligned}
 |c_1\rangle &= \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\} \text{ (Veja a base em 6.2)} & (6.3) \\
 |c_2\rangle &= \{1, 1, 1, 1\} \\
 \text{Base para } |c_2\rangle &: \left\{ \left| \begin{array}{cc} 0 & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{cc} \uparrow & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ 0 & \uparrow \end{array} \right\rangle \right\} \\
 \text{Energia} &= \frac{J}{2} - 2t
 \end{aligned}$$

Novamente aparecem as correlações ferromagnéticas, que juntamente com todos os outros kets da base (estão todos presentes) anunciam uma certa desordem provocada pela mobilidade dos buracos. Note a diferença entre este caso e o de 2 buracos, onde os kets com os buracos na diagonal apareciam com mais intensidade. Aqui também não há onda de carga, pela mesma razão do caso de 2 buracos. No apêndice IV mostramos todas as outras autofunções do cluster.

6.2 Análise do estado fundamental para $t \sim J$

Podemos comparar nossos resultados no cluster de 4 sítios com a fig. 13 que dá o diagrama de fase $\frac{t}{J} \times \delta$ da teoria de campo médio. Para o caso de um buraco, $\delta = \frac{1}{4}$ e os cruzamentos de nível $\frac{t}{J} = \frac{1}{2}$ e $\frac{t}{J} \cong 3.8$ concordam muito bem com a mudança de fase antiferromagnética (Néel na teoria de campo médio) para espiral, e espiral para ferromagnética. Isto nos sugere 2 coisas: (1) A fase ordenada ferromagnética obtida na teoria de campo médio carece de flutuações, e na verdade é uma fase desordenada com contribuição de todos os kets do espaço de Hilbert; isto acontece devido à alta mobilidade dos buracos. (2) O estado 2 que obtivemos ($|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$) pode ser associado com a fase espiral obtida no campo médio. É preciso agora escolher uma combinação linear que represente bem esta espiral para podermos analisá-la tirando médias de spin nos sítios.

Para fazer isto primeiro vamos mostrar que $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$ descrevem ondas de carga à medida que variamos β . É fácil calcular a probabilidade de medir o buraco no sítio i , p_i . Basta definir

os projetores P_j que dão 1 se aplicados num ket-base com buraco no sítio j , zero se o buraco não está no j . Daí a prob. de se medir o buraco no sítio i do estado $|b_1\rangle$ é dado por

$$p_i = \langle b_1 | P_i | b_1 \rangle, \quad (6.4)$$

e assim montamos os gráficos que aparecem nas figs. 17 e 18.

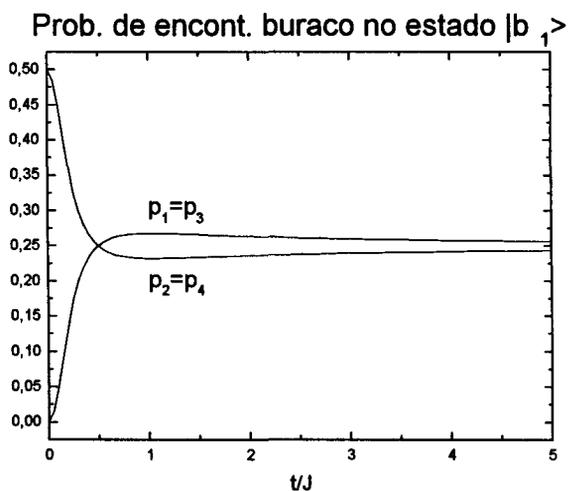


Fig 17: Ondas de carga no estado $|b_1\rangle$

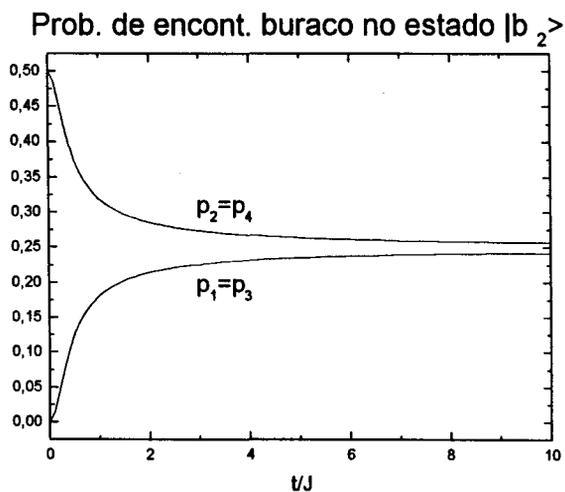


Fig 18: Ondas de carga no estado $|b_2\rangle$

Na fig. 17 vemos que $|b_1\rangle$ para β pequeno concentra os buracos na diagonal 2, 4 ; depois a situação se inverte e com o aumento de β as prob. tendem a se uniformizar em todos os buracos ($\frac{1}{4}$). Na fig. 18 vemos que $|b_2\rangle$ sempre concentra os buracos na diagonal 2,4 , mas com $\beta \rightarrow \infty$ ocorre novamente a uniformização.

Olhando para estas flutuações na densidade de carga fazemos a seguinte pergunta: Será que existe um estado que possui $p_i = \frac{1}{4}$ para todo β ? Este estado seria um ótimo candidato para analisarmos em busca da espiral. De fato, após alguns cálculos notamos que uma combinação linear de $|b_1\rangle$, $|b_2\rangle$ com coeficientes complexos dá o estado uhp (uniform hole probability) que possui prob. $\frac{1}{4}$ de medir um buraco em qualquer sítio:

$$\begin{aligned} |uhp\rangle &= \sqrt{1-u^2}|b_1\rangle \pm iu|b_2\rangle \\ u(\beta) &= \frac{1}{6} \sqrt{-\frac{1-12\beta^2 + \sqrt{1+12\beta^2}}{\beta^2}}, \quad \beta > \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (6.5)$$

Curiosamente a solução uhp só existe para $\beta > \frac{1}{2}$ (i é o número imaginário). Isto indica um comportamento interessante destes estados, ou seja, só quando os buracos tem mobilidade suficiente é que eles podem visitar toda a rede ao mesmo tempo. Por convenção vamos sempre escolher o sinal de + em (6.5). Agora podemos analisar a ordem magnética do estado uhp para verificar se ele tem mesmo uma ordem espiral.

6.2.1 Análise da ordem magnética do estado uhp

Para analisar a ordem magn. deste estado a primeira coisa que observamos é que pode vir a ser essencial a inclusão dos estados de magnetização $-\frac{1}{2}$. Assim definimos $|uhp+\rangle$ como o estado uhp com magnetização $+\frac{1}{2}$, e $|uhp-\rangle$ com magn. $-\frac{1}{2}$. Vamos tirar médias do operador \vec{S} sobre os sítios do estado

$$|\Psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|uhp+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\phi}|uhp-\rangle. \quad (6.6)$$

Definimos as médias \vec{n}_{ij} como

$$\vec{n}_{ij} = \langle \Psi | P_i \vec{S}_j P_i | \Psi \rangle \quad (6.7)$$

onde P_i projeta sobre os estados com o buraco no sítio i e \vec{S}_j é o operador de spin do sítio j.

Evidentemente $\vec{n}_{ii} = 0$ e após calcular estas médias podemos representar $|\Psi\rangle$ por

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{cc} 0 & \vec{n}_{12} \\ \vec{n}_{14} & \vec{n}_{13} \end{array} \right\rangle + \frac{1}{2} \left| \begin{array}{cc} \vec{n}_{21} & 0 \\ \vec{n}_{24} & \vec{n}_{23} \end{array} \right\rangle + \dots$$

O resultado obtido é muito simples: Obtivemos dois vetores \vec{A} e \vec{B} paralelos que em coordenadas esféricas tem latitude θ e azimute ϕ (veja (6.6)). Estes vetores se distribuem pelos kets de uma forma periódica:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \left\{ \left| \begin{array}{cc} 0 & \vec{A} \\ \vec{0} & \vec{B} \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \vec{A} & 0 \\ \vec{B} & \vec{0} \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \vec{B} & \vec{0} \\ \vec{A} & 0 \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \vec{0} & \vec{B} \\ 0 & \vec{A} \end{array} \right\rangle \right\}; \quad (\beta > \frac{1}{2}) \quad (6.8)$$

$$\vec{A} = r_A(\beta) (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta); \quad r_A(\beta) = \frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1+12\beta^2}} \right)$$

$$\vec{B} = r_B(\beta) (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta); \quad r_B(\beta) = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{1+12\beta^2}} \right)$$

Lembre que o estado uhp só existe para $\beta > \frac{1}{2}$. O $\vec{0}$ aparece acima porque a média do spin foi nula, enquanto 0 simboliza o buraco. \vec{A} e \vec{B} são paralelos, o que indica correlações ferromagnéticas; mas este estado tem spin total $\frac{1}{2}$, ou seja, ele mistura correlações ferromagnéticas e antiferromagnéticas. A média dos spins sem os projetores em (6.7) dá

$$|\Psi\rangle = \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{4} (\vec{A} + \vec{B}) & \frac{1}{4} (\vec{A} + \vec{B}) \\ \frac{1}{4} (\vec{A} + \vec{B}) & \frac{1}{4} (\vec{A} + \vec{B}) \end{array} \right\rangle \quad (6.9)$$

onde $\left| \frac{1}{4} (\vec{A} + \vec{B}) \right| = \frac{1}{8}$. Isto indica que o estado uhp tem a intensidade de seus spins drasticamente atenuada pelo movimento dos buracos.

Ao comparar estes resultados com a teoria de campo médio, fica a dúvida se a ausência de uma ordem espiral evidente em nosso cluster é decorrente de seu pequeno tamanho. Talvez seja

necessário um cluster maior (3×3 por ex.) para dar lugar a um passo de espiral menor.

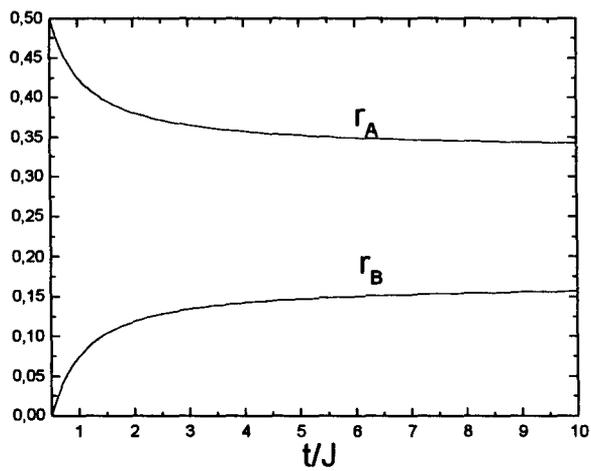


Fig 19: Raios dos vetores \vec{A} e \vec{B}

Capítulo 7

Algumas Conclusões

Com a solução do cluster de 4 sítios caracterizamos três tipos de comportamento: (1) Para β pequeno os buracos parecem estar parados, mantendo o caráter antiferromagnético da rede (a ordem magnética fica muito similar à solução da cadeia aberta de Heisenberg). No caso de 2 buracos observamos ondas de carga, enquanto que no caso de 1 buraco parece imprescindível a condição $p_i = \frac{1}{4}$ (a prob. de se medir o buraco é igual para todos os sítios). (2) Para β grande aparecem correlações ferromagnéticas, e os buracos parecem estar uniformemente espalhados pela rede. O spin é máximo ($\frac{3}{2}$ no caso de 1 buraco e 1 no caso de 2 buracos), e as flutuações quânticas impedem a saturação do momento magnético (ao contrário do que é observado no tratamento de campo médio). Não há onda de carga nos dois casos. (3) No caso de 1 buraco aparece uma fase intermediária entre estes dois extremos, que mistura correlações ferro e antiferromagnéticas. É preciso ir além de 4 sítios para determinar se esta fase tem uma ordem espiralada como no campo médio.

Este comportamento limite caracteriza traços de uma transição metal-isolante na medida que a energia cinética dos buracos é grande o suficiente para quebrar as correlações antiferromagnéticas; é impressionante poder observar estes efeitos em aglomerados tão pequenos.

Uma boa proposta variacional para a rede infinita com 1 buraco seria combinar estados RVB [27] ou teoria de ondas de spin linear [31] com uma alternância de sinal à medida que o buraco avança (como em (5.8)). Talvez este seja um bom representante para a fase com ordem antiferromagnética de longo alcance nos compostos High T_c (seria imediato implementar esta função para a cadeia linear, enquanto que a rede quadrada apresentaria algumas dificuldades).

O caso de mais buracos seria um pouco mais complicado, pois apresenta ondas de carga.

Apêndices

1 Funções de onda do caso de 3 sítios e 1 buraco

Autoenergias	Autoestados
$-2t - \frac{J}{2}(\alpha + \frac{1}{2})$	$\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \downarrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow 0 \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \uparrow \\ 0 \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \uparrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow 0 \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \downarrow \\ 0 \uparrow \end{array} \rangle \right)$
$t - \frac{J}{2}(\alpha + \frac{1}{2})$	$\frac{1}{2} \left(\begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \uparrow \\ 0 \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \uparrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \downarrow \\ 0 \uparrow \end{array} \rangle \right)$
$t - \frac{J}{2}(\alpha + \frac{1}{2})$	$\frac{1}{2} \left(\begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow 0 \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \uparrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow 0 \end{array} \rangle \right)$
$-t + \frac{J}{2}(\alpha - \frac{1}{2})$	$\frac{1}{2} \left(\begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \uparrow \\ 0 \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \uparrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \downarrow \\ 0 \uparrow \end{array} \rangle \right)$
$-t + \frac{J}{2}(\alpha - \frac{1}{2})$	$\frac{1}{2} \left(\begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow 0 \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \uparrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow 0 \end{array} \rangle \right)$
$2t + \frac{J}{2}(\alpha - \frac{1}{2})$	$\frac{1}{\sqrt{6}} \left(- \begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \downarrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow 0 \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \uparrow \\ 0 \downarrow \end{array} \rangle - \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \uparrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow 0 \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \downarrow \\ 0 \uparrow \end{array} \rangle \right)$
$-t + \frac{J}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \uparrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \uparrow \\ 0 \uparrow \end{array} \rangle \right)$
$-t + \frac{J}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{c} \circ \\ \uparrow \uparrow \end{array} \rangle + \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow 0 \end{array} \rangle \right)$

$2t + \frac{J}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(- \left \begin{smallmatrix} 0 \\ \uparrow \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle + \left \begin{smallmatrix} \uparrow \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle + \left \begin{smallmatrix} \uparrow \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle \right)$
$-t + \frac{J}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left \begin{smallmatrix} 0 \\ \downarrow \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle + \left \begin{smallmatrix} \downarrow \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle \right)$
$-t + \frac{J}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left \begin{smallmatrix} 0 \\ \downarrow \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle + \left \begin{smallmatrix} \downarrow \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle \right)$
$2t + \frac{J}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(- \left \begin{smallmatrix} 0 \\ \downarrow \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle + \left \begin{smallmatrix} \downarrow \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle + \left \begin{smallmatrix} \downarrow \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle \right)$

2 4 sítios e 2 buracos

Base ($M_z = 0$, note a ordem)¹:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} \downarrow & \uparrow \\ 0 & 0 \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} \uparrow & 0 \\ \downarrow & 0 \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} 0 & \downarrow \\ 0 & \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} \downarrow & 0 \\ 0 & \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} 0 & \downarrow \\ \uparrow & 0 \end{smallmatrix} \right\rangle, \\ \left| \begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ \downarrow & \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} \uparrow & \downarrow \\ 0 & 0 \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} \downarrow & 0 \\ \uparrow & 0 \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} 0 & \uparrow \\ 0 & \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} \uparrow & 0 \\ 0 & \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} 0 & \uparrow \\ \downarrow & 0 \end{smallmatrix} \right\rangle \end{array} \right\}$$

Autoenergias	Autoestados
$M_z = 0$	$S_T^2 = 0$
$-\frac{1}{4}(1 + 2\alpha + 8\beta)$	$(-1, 1, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 0, 0, -1, 1)$
$-\frac{1}{4}(1 + 2\alpha + 8\beta)$	$(0, 0, -1, 1, 1, 1, 0, 0, 1, -1, -1, -1)$
$-\frac{1}{4}(1 + 2\alpha - 8\beta)$	$(-1, 1, 0, 0, -1, 1, 1, -1, 0, 0, 1, -1)$
$-\frac{1}{4}(1 + 2\alpha - 8\beta)$	$(0, 0, -1, 1, -1, -1, 0, 0, 1, -1, 1, 1)$
$-\frac{1}{4}(1 + 2\alpha)$	$(-1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0)$
$-\frac{1}{4}(1 + 2\alpha)$	$(0, 0, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0)$

¹ Apesar da interação anisotrópica o caso de 2 buracos em 4 sítios tem a simetria de S_T^2 . Isto acontece porque as autofunções não dependem de α .

$M_z = 0$	$S_T^2 = 1$
$\frac{1}{4}(-1 + 2\alpha)$	$(1, 0, 0, -1, 0, 0, 1, 0, 0, -1, 0, 0)$
$\frac{1}{4}(-1 + 2\alpha)$	$(0, 1, 0, -1, 0, 0, 0, 1, 0, -1, 0, 0)$
$\frac{1}{4}(-1 + 2\alpha)$	$(0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0)$
$\frac{1}{4}(-1 + 2\alpha)$	$(0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1)$
$-\frac{1}{4}(1 - 2\alpha + 8\sqrt{2}\beta)$	$(1, 1, 1, 1, \sqrt{2}, \sqrt{2}, 1, 1, 1, 1, \sqrt{2}, \sqrt{2})$
$-\frac{1}{4}(1 - 2\alpha - 8\sqrt{2}\beta)$	$(1, 1, 1, 1, -\sqrt{2}, -\sqrt{2}, 1, 1, 1, 1, -\sqrt{2}, -\sqrt{2})$

Base $M_z = 1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} |0\ 0\rangle \\ |\uparrow\ \uparrow\rangle \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\ \uparrow\rangle \\ |0\ 0\rangle \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\ 0\rangle \\ |\uparrow\ 0\rangle \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} |0\ \uparrow\rangle \\ |0\ \uparrow\rangle \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\ 0\rangle \\ |0\ \uparrow\rangle \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} |0\ \uparrow\rangle \\ |\uparrow\ 0\rangle \end{array} \right\}$$

Autoenergias	Autofunções
$M_z = +1$	$S_T^2 = 1$
$\frac{1}{4}$	$(0, 0, 0, 0, -1, 1)$
$\frac{1}{4}$	$(-1, 0, 0, 1, 0, 0)$
$\frac{1}{4}$	$(-1, 0, 1, 0, 0, 0)$
$\frac{1}{4}$	$(-1, 1, 0, 0, 0, 0)$
$\frac{1}{4} - 2\sqrt{2}\beta$	$(1, 1, 1, 1, \sqrt{2}, \sqrt{2})$
$\frac{1}{4} + 2\sqrt{2}\beta$	$(1, 1, 1, 1, -\sqrt{2}, -\sqrt{2})$

As autofunções com $M_z = -1$ podem são as mesmas, só que a base é com os spins para baixo.

3 Cadeia de Heisenberg aberta de 3 spins

Autoenergias	Autoestados
$-\frac{J}{4}(1 + \sqrt{1 + 8\alpha^2})$	$\frac{1}{N_{\pm}(\alpha)} \left(\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1+\sqrt{1+8\alpha^2}}{2\alpha} \uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right)$
0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\uparrow\rangle)$
$-\frac{J}{4}(1 - \sqrt{1 + 8\alpha^2})$	$\frac{1}{N_{-}(\alpha)} \left(\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1-\sqrt{1+8\alpha^2}}{2\alpha} \uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right)$
$\frac{J}{2}$	$ \uparrow\uparrow\uparrow\rangle$

$N_{\pm}(\alpha) = \sqrt{4 \pm \frac{\pm 1 + \sqrt{1+8\alpha^2}}{2\alpha^2}}$. Mais 4 estados são obtidos com magnetização $-\frac{1}{2}$.

4 4 sítios e 1 buraco

Base $M_z = \frac{1}{2}$ (Note a ordem):

$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \begin{array}{l} \uparrow \downarrow \\ \uparrow 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \downarrow \uparrow \\ \uparrow 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow \uparrow \\ \downarrow 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \downarrow 0 \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow 0 \\ \downarrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow 0 \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right\rangle, \\ \left| \begin{array}{l} \uparrow \uparrow \\ 0 \downarrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \uparrow \downarrow \\ 0 \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} \downarrow \uparrow \\ 0 \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} 0 \uparrow \\ \downarrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} 0 \uparrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{l} 0 \downarrow \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right\rangle \end{array} \right\}$$

Autoenergias	Autofunções
$M_z = 0$	$S_T^2 = \frac{3}{2}$
$\frac{1}{2}$	$(1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, -1, -1, -1)$
$\frac{1}{2}$	$(0, 0, 0, 1, 1, 1, -1, -1, -1, 0, 0, 0)$
$\frac{1}{2} - 2\beta$	$(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$
$\frac{1}{2} + 2\beta$	$(1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, 1, 1, 1)$

Autoenergias	Autofunções
$M_z = 0$	$S_T^2 = \frac{1}{2}$
$-\beta$	$(-1, 2, -1, 1, -2, 1, 1, -2, 1, -1, 2, -1)$
$-1 + \beta$	$(-1, 2, -1, -1, 2, -1, -1, 2, -1, -1, 2, -1)$
$-\beta$	$(-1, 0, 1, 1, 0, -1, 1, 0, -1, -1, 0, 1)$
β	$(-1, 0, 1, -1, 0, 1, -1, 0, 1, -1, 0, 1)$
$-\frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 12\beta^2})$	$(-1, 1, 0, a, b, c, -a, -b, -c, 1, -1, 0)$
$-\frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 12\beta^2})$	$(-1, 0, 1, -b, 2b, -b, b, -2b, b, 1, 0, -1)$
$\frac{1}{2}(-1 + \sqrt{1 + 12\beta^2})$	$(-1, 1, 0, -d, -e, -f, d, e, f, 1, -1, 0)$
$\frac{1}{2}(-1 + \sqrt{1 + 12\beta^2})$	$(-1, 0, 1, e, -2e, e, -e, 2e, -e, 1, 0, -1)$

$$a(\beta) = \frac{-2 + \sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}; \quad b(\beta) = \frac{1 + \sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}; \quad c(\beta) = \frac{1 - 2\sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}$$

$$d(\beta) = \frac{2 + \sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}; \quad e(\beta) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}; \quad f(\beta) = -\frac{1 + 2\sqrt{1 + 12\beta^2}}{6\beta}$$

Base $M_z = +\frac{3}{2}$: (Todas as autofunções obviamente têm spin $\frac{3}{2}$)

$$\left\{ \left| \begin{array}{c} 0 \uparrow \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{c} \uparrow 0 \\ \uparrow \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{c} \uparrow \uparrow \\ \uparrow 0 \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{c} \uparrow \uparrow \\ 0 \uparrow \end{array} \right\rangle \right\}$$

Autoenergias	Autofunções
$\frac{1}{2}$	$(0, -1, 0, 1)$
$\frac{1}{2}$	$(-1, 0, 1, 0)$
$\frac{1}{2} - 2\beta$	$(1, 1, 1, 1)$
$\frac{1}{2} + 2\beta$	$(-1, 1, -1, 1)$

Os outros estados tem a mesma forma só que com magnetização negativa.

Bibliografia

- [1] P.W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [2] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, "Solid State Physics", Saunders Coll. Publish. Co. (1976).
- [3] A. Fetter and J. Walecka, "Quantum Theory of Many Particle Systems ", Mc Graw Hill, NY (1971).
- [4] E.H. Lieb and F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [5] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, "Quantum Mechanics: non relativistic theory ", Pergamon, London (1977).
- [6] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **115**, 2 (1959).
- [7] Assa Auerbach, "Interacting Electrons and Quantum Magnetism ", Springer, NY (1994).
- [8] H.A. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [9] A.H. Macdonald et al., *Phys. Rev. B* **37**, 9753 (1988).
- [10] Y. Nagaoka, *Solid State Comm.* **3**, 409 (1965).
- [11] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [12] J.G. Bednorz and K.A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [13] H. Takagi et al., *Jpn. J. App. Phys. (Lett.)* **26**, L123 (1987).
- [14] S. Chakravarty in "High Temperature Superconductivity", ed. by K. Bedell et al., Addison Wesley, Reading-MA, p.136 (1990).

- [15] G. Burns, "High Temperature Superconductivity", Academic Press, NY (1992).
- [16] V.J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
- [17] M.S. Hybertsen et al., Phys. Rev. B **39**, 9028 (1989).
- [18] F.C. Zhang and T.M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
- [19] V.J. Emery and G. Reiter, Phys. Rev. B **38**, 11938 (1988).
- [20] P.W. Anderson and J.R. Schrieffer, Physics Today, June, p.55 (1991).
- [21] M.S. Hybertsen et al., Phys. Rev. B **41**, 11068 (1990).
- [22] S. Bacci et al., Phys. Rev. B **44**, 7504 (1991).
- [23] D. Yoshida, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 32, 1516 (1989).
- [24] C. Jayaprakash et al., Phys. Rev. B **40**, 2610 (1989).
- [25] C.L. Kane et al., Phys. Rev. B **41**, 2653 (1990).
- [26] R.J. Birgeneau et al., Phys. Rev. B **39**, 2868 (1989).
- [27] P.W. Anderson, Mat. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
- [28] J.K. Freericks and L.M. Falicov, Phys. Rev. B **42**, 4960 (1990).
- [29] S. Sarkar, J. Phys. A **23**, L409 (1990).
- [30] P.A. Bares and G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **64**, 2567 (1990).
- [31] P.W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).