

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**Fases de *stripes* nos cupratos:
Um estudo do modelo t - J
anisotrópico ***

Daniela Kempf

Dissertação realizada sob orientação do Dr. Gerardo Martínez e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre
Março - 2003

*Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Agradecimentos

Ao meu orientador, Gerardo Martínez, pela paciência e bom humor constantes durante a realização deste trabalho;

Aos professores e funcionários do Instituto de Física da UFRGS;

A minha família: Dida, Hugo e Ricardo pelo apoio e compreensão;

Aos colegas Fernando, Ives e Karen por tornarem a sala NI201 um ambiente agradável;

Enfim, a todos aqueles que de alguma forma colaboraram para a realização deste trabalho;

Muito Obrigada.

Resumo

Neste trabalho realizamos um estudo de um buraco em um antiferromagneto, como parte de uma revisão de diferentes técnicas de abordagem das fases de “stripes” nos cupratos supercondutores. Estudamos a transição do formalismo de “strings” para um buraco no modelo t - J_z bidimensional, onde existe uma solução analítica, para a solução de pólaron de spin no modelo t - J isotrópico através da aproximação de Born auto-consistente. A forma funcional dos picos de quase-partícula, do peso espectral e do “gap” espectral foi investigada numericamente em detalhe, em função da anisotropia magnética. O movimento de um pólaron de spin na presença de uma parede de domínio antiferromagnética (ADW) em antifase, como uma realização da configuração de “stripes” nos planos CuO_2 dos cupratos de baixa dopagem, também foi analisada.

Abstract

In this work we analyze the motion of a hole in an antiferromagnet, as a part of a review of different approaches of stripe phases in superconducting cuprates. We study the transition from the string picture for one hole in the two-dimensional t - J_z model, where an analytical solution exists, to the full spin-polaron solution in the isotropic t - J model within the selfconsistent Born approximation. The functional form of quasiparticle peaks, spectral weight and the spectral gap for quasiparticles is investigated numerically in full detail, as a function of the magnetic anisotropy. The motion of a spin-polaron in the presence of a topological antiphase antiferromagnetic domain wall (ADW), as a realization of a stripe configuration in CuO_2 planes of underdoped cuprates, is also analyzed.

Sumário

1 Supercondutividade de Alta Temperatura Crítica	3
1.1 Introdução aos Supercondutores de Alta T_c	3
1.2 Estrutura e Fenomenologia dos Cupratos	8
1.3 Stripes	11
1.3.1 Evidências Experimentais	13
1.3.2 Relação de Yamada	17
1.3.3 O Problema do $\frac{1}{8}$	17
1.4 O Modo Ressonante de 41 meV	18
2 Modelos Fortemente Correlacionados	21
2.1 O Modelo de Hubbard de Uma Banda	22
2.1.1 Aproximação de Hartree-Fock	23
2.2 O Modelo de Hubbard de Três Bandas	25
2.3 O Modelo t - J	27
2.3.1 Limite de Acoplamento Forte	29
2.3.2 Singletos de Zhang-Rice	31
3 Abordagem Teórica do Modelo t-J	35
3.1 Técnicas de Bozonização: Hólons e Spínons	36
3.2 Aproximação Linear de Ondas de Spin (Transformação de Holstein-Primakoff)	37

3.3	Aproximação de Born Auto-consistente (SCBA)	48
3.3.1	Polarons de Spin	50
3.3.2	Comparação com Diagonalização Exata (ED)	51
4	Stripes nos Cupratos	53
4.1	Solução de Hartree-Fock de Zaanen/Gunnarsson	53
4.2	Férmions nodais de Zaanen	54
4.3	Abordagem de Kivelson/Emery	55
4.4	Outras abordagens: White (DMRG), Dagotto (ED)	55
4.5	Paredes de Domínio em Antifase e o Modelo t - J_z (Castro Neto)	56
4.5.1	Movimento Longitudinal do Hólón na ADW	58
4.5.2	Movimento Transversal do Hólón na ADW	61
5	O Efeito da Anisotropia	64
5.1	Solução do Modelo $t - J_z$: Reiter (1996)	64
5.2	Solução de Brinkman-Rice ($J = 0$)	66
5.3	O Modelo $t - J_z$ na Solução SCBA	66
5.4	Procedimento Numérico	68
5.5	Função Espectral em Função da Anisotropia	70
5.6	O Gap de Interação	74
5.7	Peso Espectral de Quase-partícula	77
6	Conclusões	79

Lista de Figuras

1.1	Diagrama de fases genérico para os cupratos.	4
1.2	Diagrama de fases do $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Extraída da Ref.[3].	5
1.3	Componentes fundamentais da estrutura cristalina dos cupratos.	6
1.4	Estrutura do YBCO.	6
1.5	Diagrama de fases do $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Extraída da Ref.[3].	7
1.6	Estrutura fcc do composto A_3C_{60} , o supercondutor orgânico de mais alta T_c	8
1.7	Estrutura cristalina do MgB_2 . Os átomos de Mg ocupam o centro dos hexágonos entre planos de B. Extraída da Ref. [4].	9
1.8	Estrutura perovskita ABO_3	10
1.9	Diagrama de fases comparativo de $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ e $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Extraída da Ref.[3].	10
1.10	Figura esquemática da fase de stripes ordenada. As setas representam a ordem magnética (spin) e a escala azul representa a densidade de carga local. Regiões de alta densidade de carga (stripes) situam-se entre regiões que apresentam ordem de spin similar a um antiferromagneto não dopado. Extraída da Ref. [5].	11
1.11	(a) Desdobramento dos picos de Bragg tipo carga (triângulos abertos) e tipo spin (quadrados abertos). (b) Figura pictórica das stripes nos cupratos. (c) Empilhamento sugerido dos planos de CuO_2 . Extraída da Ref. [7].	12

- 1.12 Espectro de espalhamento inelástico de nêutrons para $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ em diferentes condições experimentais de dopagem, $x = 0.06, 0.12$ e 0.25 . A incomensurabilidade δ é definida como a metade da distância de separação dos picos à $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \pm \delta, 0)$ indexados no plano recíproco $(h, k, 0)$. A posição $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ corresponde a um pico de Bragg na fase de ordenamento antiferromagnético de longo alcance. As unidades dos índices de Miller aqui são $\frac{\pi}{a}$, portanto $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ significa $(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, 0)$. Extraído da Ref. [10]. 14
- 1.13 Relação de Yamada $\delta = x_{efetivo}$. Incomensurabilidade das flutuações de spin em função da dopagem de Sr para $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Extraída da Ref. [10]. 18
- 1.14 Susceptibilidade magnética dependente da frequência para os modos acústicos (**A,B,C**) e ópticos (**D,E,F**) no $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$. O mais importante deste resultado é o aparecimento do modo ressonante a 41 meV abaixo da temperatura crítica, destacado em cinza nos gráficos **A**, **B** e **C**. Os dados foram coletados do plano de espalhamento (h, h, l) . Integrando-se a área sob o pico de ressonância e convertendo para momento quadrático, obtém-se $\langle m_{res}^2 \rangle = 0.06 \pm 0.04 \mu_B^2 f.u.^{-1}$ a 35 K e $\langle m_{res}^2 \rangle = 0.04 \pm 0.03 \mu_B^2 f.u.^{-1}$ a 80 K. Extraído da Ref.[12]. 19
- 1.15 Dependência da intensidade do pico de ressonância com a temperatura para (**A**) $(123)\text{O}_{6.6}$ à 34 meV, (**B**) $(123)\text{O}_{6.8}$ à 39 meV e (**C**) $(123)\text{O}_{6.93}$ à 40 meV. O eixo da esquerda mostra a intensidade normalizada à $\langle m_{res}^2 \rangle$ enquanto o eixo direito representa a intensidade do pico a baixas temperaturas. (**D**) Estimativa de $d\langle m_{res}^2 \rangle / dT$ para $(123)\text{O}_{6+x}$ de (A) à (C). (**E**) Anomalia do calor específico calculado na literatura, usando o modelo t - J , em unidades do SI. Compare os gráficos **D** e **E**. Extraída da Ref.[12]. 20
- 2.1 Representação de uma ligação ou hibridização entre um íon Cu^{2+} e um íon O^{2-} . Somente os elétrons $3d$ do Cu e os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ do O foram considerados. O número entre parênteses indica a ocupação no composto não dopado. Extraída da Ref.[3]. 27

2.2	Esquema da estrutura de bandas dos planos de CuO_2 . U_d é a repulsão coulombiana entre íons de Cu , Δ é a diferença de energia entre orbitais de Cu e O ($\Delta = \varepsilon_d - \varepsilon_p$). A ilustração inferior representa o modelo de Hubbard de 1 banda, simulando o gap de transferência de carga mediante uma interação efetiva (U_{eff}). Extraída da Ref.[3].	28
2.3	Orbitais do plano CuO_2 . Extraída da Ref. [19].	32
3.1	SCBA. Propagadores de hólons e de ondas de spin são representados por linhas sólidas e tracejadas, respectivamente. Extraída de Ref. [25].	50
3.2	(A) Primeira zona antiferromagnética com os pontos do grupo de simetria indicados. (B) Curva de dispersão do buraco ao longo da direção na zona de Brillouin para $J = 0.2$. Extraída da Ref.[3].	51
3.3	Superfície de Fermi. Extraída da Ref.[25].	51
4.1	(a) Estado de Néel homogêneo. (b) Dois domínios de um antiferromagneto com magnetização oposta separados por uma ADW "bond-centered". (c) Presença de um buraco estático, que é atraído para a ADW. Os arcos denotam ligações ferromagnéticas "erradas". Extraída da Ref.[37].	58
4.2	Movimento longitudinal do buraco (ao longo da ADW). $x = x_0$ pode ser considerado como uma cadeia de Ising. Extraída da Ref.[37].	59
4.3	Evolução do buraco ao longo da cadeia de Ising gerando uma separação de spínon e hólón. Extraída da Ref.[37].	60
4.4	Energia do hólón livre (curva sólida), energia por buraco na banda do hólón 1D semi-preenchida (linha tracejada) e a energia do polaron de spin no bulk (indicado). Extraída da Ref.[37].	61
4.5	(a) "String" gerado pelo movimento do buraco perpendicular à ADW. (b) Resultado da saída do buraco da ADW. (c) O mesmo que (b), porém evidenciando a direção dos spins. Extraída da Ref.[37].	62

4.6	(a) Processo de decaimento do hólón em um spínón e um polaron de spin. Observe a conservação dos números quânticos. (b) A auto-energia associada a este processo. Extraída da Ref.[37].	63
4.7	Energia de uma excitação elementar da ADW $E(k_y)$ versus k_y . A linha contínua representa a energia do polaron de spin no bulk e a curva sólida, a energia do hólón livre. A energia por buraco na banda do hólón 1D semi-preenchida é representada pela linha tracejada . Extraída da Ref.[37].	63
5.1	(A) Solução da Eq. (5.7). (B) Solução exata. Extraída da Ref. [25].	67
5.2	Processos de Trugman de quarta e sexta ordem. Este último leva a um deslocamento do buraco quando realiza um movimento de um ciclo e meio ao redor do <i>plaquette</i> . Extraída de Ref. [25].	68
5.3	Função espectral para $J = 0.3$ em diferentes anisotropias.	71
5.4	Função espectral para $J = 0.1$ em diferentes anisotropias.	72
5.5	Função espectral para $J = 0.01$ em diferentes anisotropias.	73
5.6	(a) Resultado obtido para uma rede de 64x64 através da aproximação de Born. (b) Resultado obtido para uma rede de 4x4 através de diagonalização exata [27].	74
5.7	Gap espectral em função da anisotropia. Efeito de tamanho finito na medida do gap espectral.	75
5.8	Gap espectral em função da anisotropia.	76
5.9	Gap espectral (Δ) em função de J . Este resultado é consistente com a relação $\Delta \sim J^{\frac{2}{3}}$ da literatura.	77
5.10	Peso espectral em função da anisotropia.	78

Introdução

Desde a descoberta da supercondutividade de alta temperatura, houve um crescente interesse em sistemas eletrônicos fortemente correlacionados, cuja descrição teórica representa um grande desafio. A busca por novos materiais tem sido basicamente empírica, uma vez que não há uma teoria definitiva para a supercondutividade. Ao mesmo tempo, as ferramentas teóricas disponíveis têm se mostrado insuficientes para descrever o comportamento destes sistemas. Particularmente nos cupratos, a dinâmica dos portadores de carga e, portanto, o estado supercondutor, é eminentemente determinada nos planos de CuO_2 . Isto sugere que estes planos sejam utilizados, em uma primeira aproximação, como um modelo genérico para descrever a física essencial dos portadores de carga nos supercondutores de alta temperatura crítica.

O desaparecimento anômalo da supercondutividade em $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ para $x = \frac{1}{8}$ é uma das muitas questões ainda em aberto, e foi tomada como tema motivador deste trabalho. Uma possível explicação envolve um acoplamento spin-carga no qual regiões de spins do cobre orientados antiferromagneticamente são separadas por paredes de domínio unidimensionais com um espaçamento periódico, denominadas genericamente de "stripes".

Entender esta fenomenologia é de fundamental relevância para uma descrição quantitativa do transporte eletrônico nos cupratos e dos mecanismos microscópicos que levam ao fenômeno da supercondutividade nestes materiais.

Em suma, este trabalho tem como principal objetivo entender o comportamento de um buraco em um antiferromagneto, bem como realizar um estudo das diferentes tendências e técnicas disponíveis na literatura para abordar este tema, para avançar no tema das stripes em cupratos.

A estrutura desta dissertação é a seguinte: No capítulo 1 faremos uma breve descrição dos conceitos fundamentais dos supercondutores de alta temperatura crítica envolvidos neste trabalho. No capítulo 2, descreveremos os principais modelos utilizados para o estudo de sistemas de forte correlação eletrônica. Dentre eles, uma atenção especial será dada ao modelo t - J no capítulo 3, reformulado segundo a técnica de bosonização, dentro do paradigma de polarons de spin. Faremos uma exposição detalhada das aproximações utilizadas, bem como uma discussão da validade das mesmas. O capítulo 4 será dedicado a um breve resumo das diferentes abordagens adotadas pelos principais grupos de pesquisa em stripes sob o ponto de vista teórico. No capítulo 5, discutiremos os casos limites do modelo t - J e suas soluções apresentadas na literatura. Faremos um estudo original do efeito da anisotropia magnética neste modelo, apresentando os resultados relevantes obtidos. Finalmente, no capítulo 6, faremos um apanhado geral do trabalho, discutindo os resultados através de um paralelo com soluções já conhecidas da literatura e explanando nossas conclusões e perspectivas de trabalho futuro.

Capítulo 1

Supercondutividade¹ de Alta Temperatura Crítica

1.1 Introdução aos Supercondutores de Alta T_c

O primeiro supercondutor de alta temperatura crítica (HTSC) foi descoberto em 1986 por Bednorz e Müller [1]. Tratava-se de um composto de Lantânio, Bário, Cobre e Oxigênio que, quando ótimamente dopado ($\text{La}_{1.85}\text{Ba}_{0.15}\text{CuO}_4$), era supercondutor à temperatura crítica (T_c)² de 36 K. Esta temperatura era suficientemente alta para a comunidade científica da época, quando as maiores temperaturas críticas atingiam a ordem de 20 K. Atualmente, a maior T_c registrada é de 138 K no composto $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8-\delta}$ [2]. Dada a grande variedade de supercondutores existentes, apresentaremos a seguir características importantes de alguns dos principais grupos de supercondutores de alta temperatura crítica. No entanto, todos os supercondutores conhecidos com $T_c > 50$ K são cupratos e, por esta razão, limitar-nos-emos ao estudo deles ao longo

¹Fenômeno quântico macroscópico caracterizado pela condução de corrente elétrica (DC) sem resistência, expulsão do campo magnético, boa condutividade térmica e alta refletividade ótica, abaixo de uma determinada temperatura. Uma vez colocada em movimento em um circuito supercondutor fechado, a corrente irá fluir de modo perpétuo. Os supercondutores são classificados pelo tipo (I ou II) e pela dimensionalidade (a maioria é 3-D, mas alguns compostos orgânicos são 2-D enquanto nano-tubos de carbono constituem exemplo de supercondutores 1-D).

² T_c (temperatura crítica de transição): Temperatura máxima na qual o material permanece supercondutor.

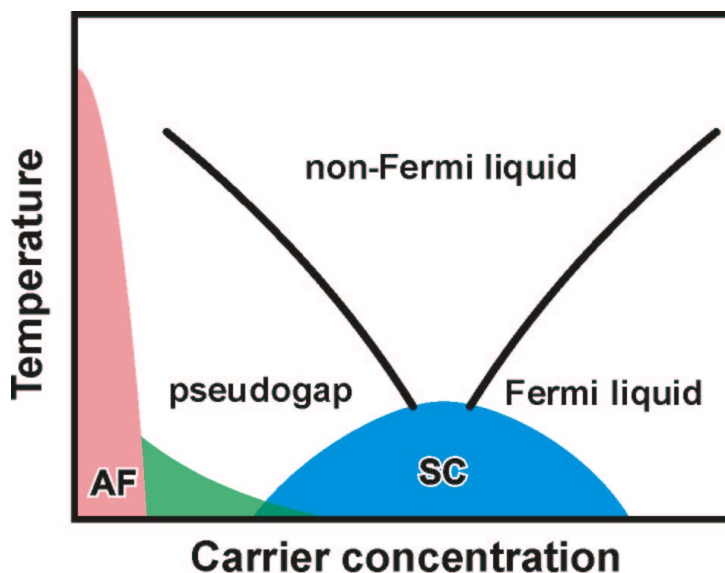


Figura 1.1: Diagrama de fases genérico para os cupratos.

deste trabalho.

Na figura 1.1, pode-se observar de forma esquemática um diagrama de fases genérico que descreve de forma aproximada o comportamento dos cupratos. Aumentando-se a concentração de portadores, a fase antiferromagnética cai abruptamente. O material passa então para uma fase ainda não entendida completamente, onde encontram-se as stripes. Após o aumento posterior da dopagem, o material entra na fase supercondutora, que se estende até uma determinada concentração de portadores. A superposição destas duas fases sugere que a fase de stripes e a fase supercondutora possam coexistir.

La_{2-x}Sr_xCuO₄: Este cuprato está entre os primeiros supercondutores de alta temperatura que foram descobertos. Apresenta uma transição de fase estrutural, passando da estrutura ortorrômbica (a baixas temperaturas) para a estrutura tetragonal de corpo centrado. Seus planos de CuO₂ estão separados por uma distância de cerca de 6.6 Å por dois planos de LaO, constituindo o reservatório de carga.

A valência dos átomos no composto é tal que os íons de cobre (Cu²⁺) possuem spin resultante $\frac{1}{2}$ e são cercados por um octaedro de oxigênios. Mas a importância maior é dos oxigênios

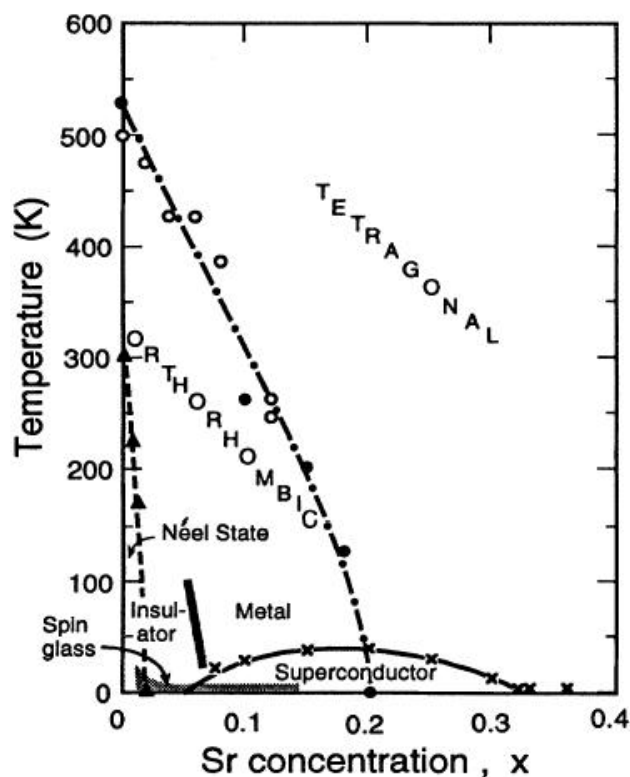


Figura 1.2: Diagrama de fases do $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Extraída da Ref.[3].

do plano de cobre; oxigênios apicais são praticamente irrelevantes pois apresentam ligações químicas mais fracas. Mediante dopagem, íons La^{3+} são substituídos aleatoriamente por íons Sr^{2+} , quando então alguns elétrons migram dos planos CuO_2 . A fase supercondutora é encontrada para dopagens de $x \sim 0.05$ a $x \sim 0.30$, com máximo valor de T_c para $x \sim 0.15$, conforme podemos ver na figura 1.2.

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$: Também conhecido por YBCO ou (123), este material possui estrutura tetragonal, apresentando dois planos de CuO_2 por célula unitária, separados por íons de ítrio a uma distância da ordem de 3.2 Å. Ver figuras 1.3 e 1.4 para entender a estrutura destes compostos.

A dopagem controla a quantidade de carga transferida entre os planos de condução e o reservatório de carga. Um diagrama típico pode ser visto na figura 1.5, onde δ representa a

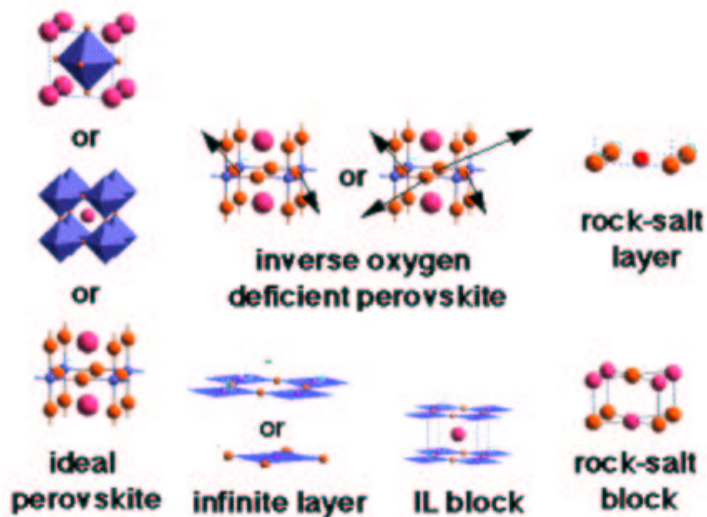


Figura 1.3: Componentes fundamentais da estrutura cristalina dos cupratos.

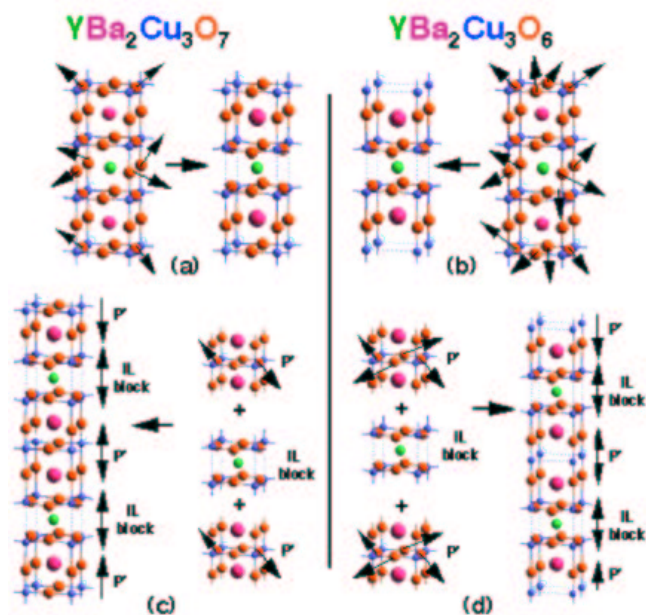


Figura 1.4: Estrutura do YBCO.

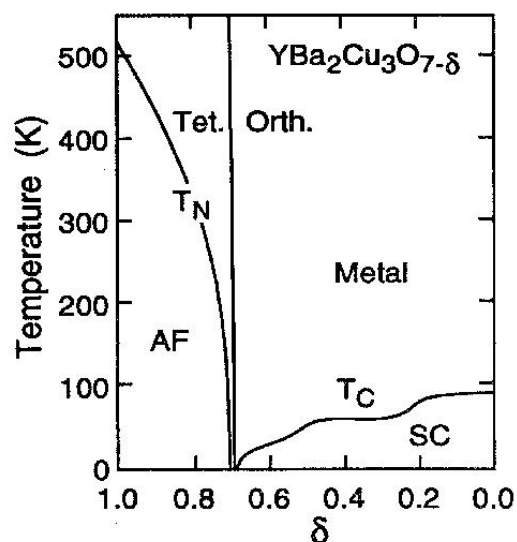


Figura 1.5: Diagrama de fases do $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Extraída da Ref.[3].

concentração de elétrons. A distância entre os pares de planos de condução é cerca de 8.2 \AA . Uma característica importante destes materiais é a presença de átomos de Cu no reservatório de carga que, combinados com átomos de oxigênio, formam cadeias "Cu-O". Acredita-se, no entanto, que estas estruturas unidimensionais não são relevantes para o mecanismo que leva à supercondução uma vez que nem todos os cupratos supercondutores as possuem.

A_3C_{60} : Compostos baseados no fulereno (estrutura esférica fechada de 60 átomos de carbono). Quando dopados com um ou mais metais alcalinos (A), o fulereno torna-se um fullereto e, freqüentemente, supercondutor com T_c de 8 K ($\text{Na}_2\text{Rb}_{0.5}\text{Cs}_{0.5}\text{C}_{60}$) a 40 K (Cs_3C_{60}). Os fulerenos foram descobertos em 1985 e os fulleretos-metal-alcalinos em 1991 (K_3C_{60} foi descoberto como supercondutor a 18 K). Ver figura 1.6.

MgB_2 : O diborato de magnésio torna-se supercondutor a 39 K, uma das maiores T_c 's conhecidas de supercondutores que não possuem planos CuO_2 . Descoberta sua fase supercondutora somente em 2001, uma de suas características mais extraordinárias consiste em possuir mais de um gap de energia supercondutora. Acredita-se que esta propriedade anômala (calculada por primeiros princípios) provém de duas populações de elétrons, que formam diferentes tipos

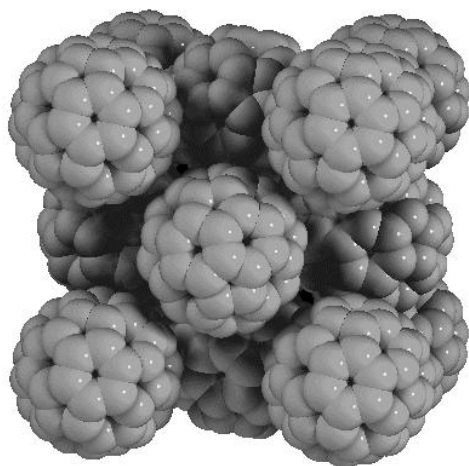


Figura 1.6: Estrutura fcc do composto A_3C_{60} , o supercondutor orgânico de mais alta T_c .

de ligações entre os átomos deste material [4]. A estrutura do diborato de magnésio consiste em planos hexagonais de átomos de boro separados por planos de magnésio de forma que os átomos de magnésio fiquem centrados acima e abaixo dos hexágonos de boro, conforme vemos na figura 1.7.

1.2 Estrutura e Fenomenologia dos Cupratos

Os cupratos são óxidos de cobre de estrutura perovskita³ (Fig. 1.8) que possuem, como característica primordial, um ou mais planos de cobre e oxigênio. A geometria dos cupratos é tipicamente tetragonal (ou ortorrômbica próxima à tetragonal), contendo os planos CuO_2 normais à direção c . Estes planos possuem portadores de cargas móveis e, por esta razão, acredita-se que sejam os responsáveis pela supercondutividade.

Os planos CuO_2 formam uma rede aproximadamente quadrada e com orbitais atômicos que contém exatamente um buraco por célula CuO_2 . O sistema é dito "semi-preenchido", uma vez que o princípio de Pauli permite o máximo de dois elétrons por orbital. Nestas circunstâncias,

³Cerâmicas cristalinas cujo nome provém do mineral perovskita (homenagem ao mineralogista russo Count Lev Aleksevich von Perovski), mineral abundante com uma taxa metal-oxigênio da ordem de 2:3. Os cupratos são perovskitas empilhadas.

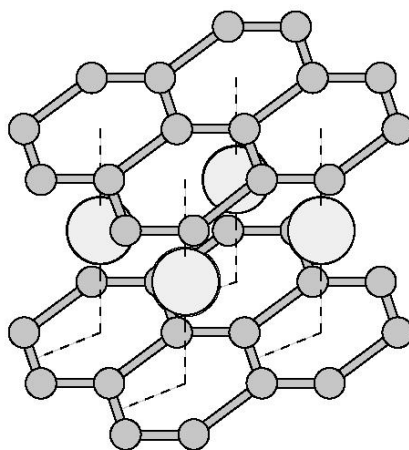


Figura 1.7: Estrutura cristalina do MgB_2 . Os átomos de Mg ocupam o centro dos hexágonos entre planos de B. Extraída da Ref. [4].

esperaríamos normalmente um comportamento metálico, já que cada elétron pode se mover pelo sistema através de hopping para sítios vizinhos. No entanto, devido à repulsão coulombiana entre elétrons, é energeticamente desfavorável que mais de um elétron ocupe um mesmo sítio. Desta forma, o sistema semi-preenchido é um isolante, pois cada elétron que se mover para um sítio vizinho deverá "pagar" uma certa energia devido à interação repulsiva. Existe, portanto, um gap de energia para o estado condutor, e o que temos é um isolante de transferência de carga. Isto explica a natureza isolante dos cupratos não dopados. Ver figura 1.9.

Por outro lado, a energia necessária para manter o elétron fixo em um único sítio também é alta. Isto pode ser minimizado se o elétron fizer um hopping virtual para um sítio vizinho e retornar, o que só poderá ser feito se o spin do elétron vizinho for anti-paralelo. Assim, a configuração antiferromagnética nos cupratos não-dopados é favorecida pelas interações.

A dopagem é feita adicionando-se outro elemento ao composto, que irá se estabelecer nas camadas que separam os planos CuO_2 , fazendo com que o antiferromagnetismo desapareça e o material passe a ser um condutor metálico (e supercondutor a baixas temperaturas). O caráter metálico dos cupratos é caracterizado por uma forte anisotropia, favorecendo os planos CuO_2 , o que nos dá embasamento para tratá-los, muitas vezes, como bidimensionais.

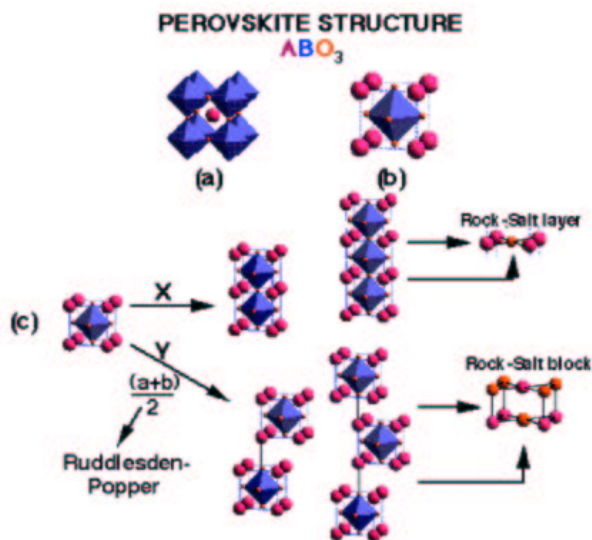


Figura 1.8: Estrutura perovskita ABO_3 .

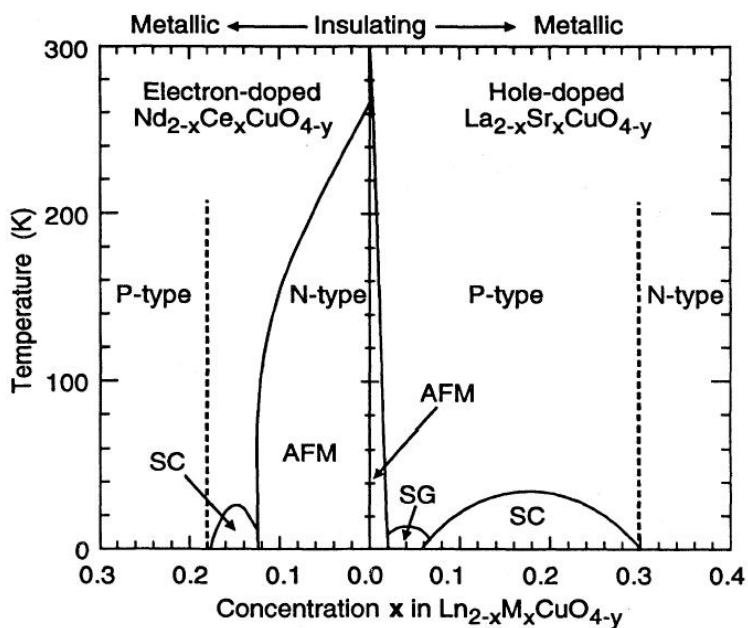


Figura 1.9: Diagrama de fases comparativo de $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ e $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Extraída da Ref.[3].

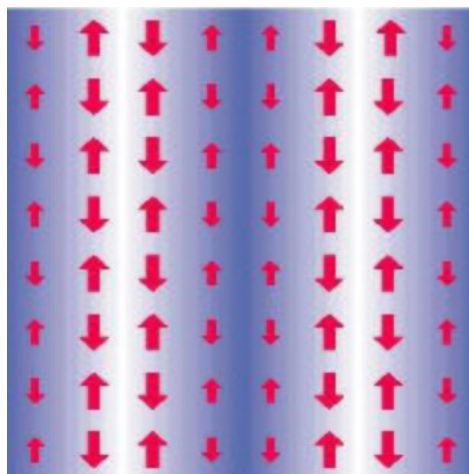


Figura 1.10: Figura esquemática da fase de stripes ordenada. As setas representam a ordem magnética (spin) e a escala azul representa a densidade de carga local. Regiões de alta densidade de carga (stripes) situam-se entre regiões que apresentam ordem de spin similar a um antiferromagneto não dopado. Extraída da Ref. [5].

1.3 Stripes

Mediante a dopagem destes antiferromagnetos bidimensionais, diferentes estados de quebra de simetria podem ocorrer. Um deles é a fase de stripes, caracterizada pelo ordenamento simultâneo não-homogêneo de carga e spin no espaço real (ver figura 1.10). Estas estruturas eletrônicas auto-organizadas unidimensionais desenvolvem-se particularmente a baixas dopagens, onde as T_c 's são relativamente baixas, e parecem desaparecer em dopagens cujas T_c 's são altas..

As stripes foram teoricamente previstas através de cálculos Hartree-Fock com condições de contorno periódicas [6], sendo mais tarde verificadas através de observações experimentais de correlação de spins em $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ por espalhamento de nêutrons [7], evidenciando a formação de domínios estáticos antiferromagnéticos em antifase nos planos de CuO_2 separados por stripes quase-1D contendo os portadores dopados. Em outras palavras, as cargas dopadas se concentram ao longo de paredes de domínio geradas espontaneamente entre regiões antiferromagnéticas (ADW - Antiferromagnetic Domain Walls). Assim, a fase de stripes ocorre

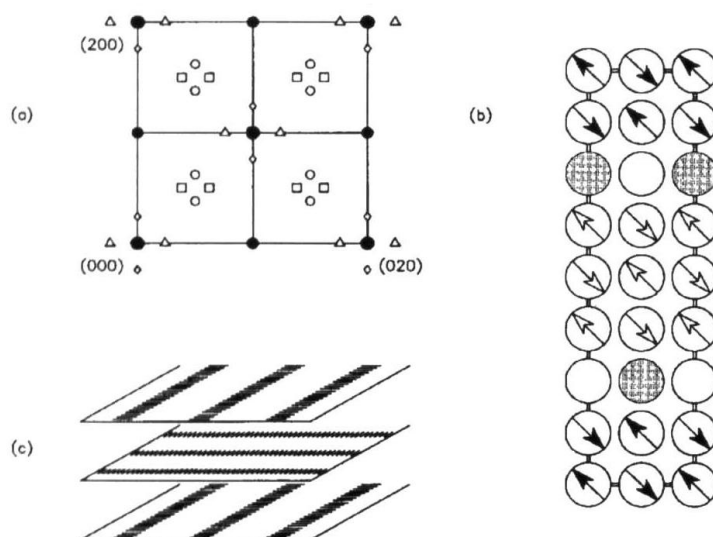


Figura 1.11: **(a)** Desdobramento dos picos de Bragg tipo carga (triângulos abertos) e tipo spin (quadrados abertos). **(b)** Figura pictórica das stripes nos cupratos. **(c)** Empilhamento sugerido dos planos de CuO_2 . Extraída da Ref. [7].

como um compromisso entre as interações antiferromagnéticas (entre íons magnéticos e interações coulombianas entre cargas), que favorecem elétrons localizados, e a energia cinética de ponto-zero dos buracos dopantes, que tendem a uma deslocalização de carga.

Em contraste aos niquelatos, onde as paredes de domínio são diagonais, nos cupratos elas são horizontais (ou verticais), o que pode ser explicado por uma fraca interação coulombiana a primeiros vizinhos (Fig. 1.11 (b)). Os planos de CuO_2 são empilhados seguindo uma orientação relativa ao padrão de stripes em planos vizinhos (Fig. 1.11 (c)), o que explica o desdobramento dos picos de Bragg observados em experimentos de espalhamento de nêutrons (Fig. 1.11 (a)).

Alguns autores defendem que as stripes em sistemas de $S = \frac{1}{2}$ podem ser formadas por pares de buracos, o que sugere conexão com a supercondutividade. Outros sugerem que as stripes são uma generalização bidimensional de excitações topológicas unidimensionais. Sob este ponto de vista, pensando em uma stripe como uma fileira de hólons, quando um hólón individual salta para um sítio vizinho, o spin se move de volta. Como as stripes possuem uma

vizinhança em antifase⁴, não há a formação de uma ligação ferromagnética com a vizinhança. Como todos os hólons podem a priori saltar de um sítio para outro, isto tende a se proliferar, fazendo com que a stripe não seja mais localizada. Fala-se, então, em stripes dinâmicas.

A instabilidade das stripes vem de flutuações quânticas, as quais, em uma dimensão, implicam no fenômeno de separação spin-carga. Experimentalmente, as stripes são mais claramente detectadas em materiais isolantes (onde a stripe é relativamente estática), mas existe uma forte evidência crescente de flutuações na correlação de stripes em compostos metálicos e supercondutores.

As diferentes técnicas para a formulação de uma teoria definitiva que pudesse explicar a fase de stripes leva a interpretações distintas, gerando polêmica em torno deste assunto. Mas apesar da controvérsia, a existência de stripes força-nos a considerar novos mecanismos para o transporte de carga e a supercondutividade nestes materiais.

1.3.1 Evidências Experimentais

A maior evidência para a fase de stripes nos antiferromagnetos dopados vem de experimentos de espalhamento inelástico de nêutrons. A difração de um feixe de nêutrons por modulações de longo período de densidade de spin e carga leva a picos de Bragg extras (Fig. 1.12). A posição de tal superestrutura de picos mede o período e a orientação espacial da modulação de densidade correspondente, visto que a intensidade fornece uma medida da amplitude da modulação. Como os nêutrons não possuem carga, não são espalhados diretamente pela densidade modulada de elétrons. Ao invés disto, são espalhados pelos deslocamentos iônicos induzidos pela modulação de carga. A modulação da rede também é mensurável por difração de elétrons e raios-X.

A ordem antiferromagnética encontrada nos compostos que dão origem aos cupratos supercondutores é destruída rapidamente à medida que buracos são introduzidos por dopagem. As primeiras indicações de modulações de densidade de spin de longo período foram fornecidas

⁴Embora seja amplamente aceito, o conceito de paredes de domínio em antifase é controverso. Ver [9].

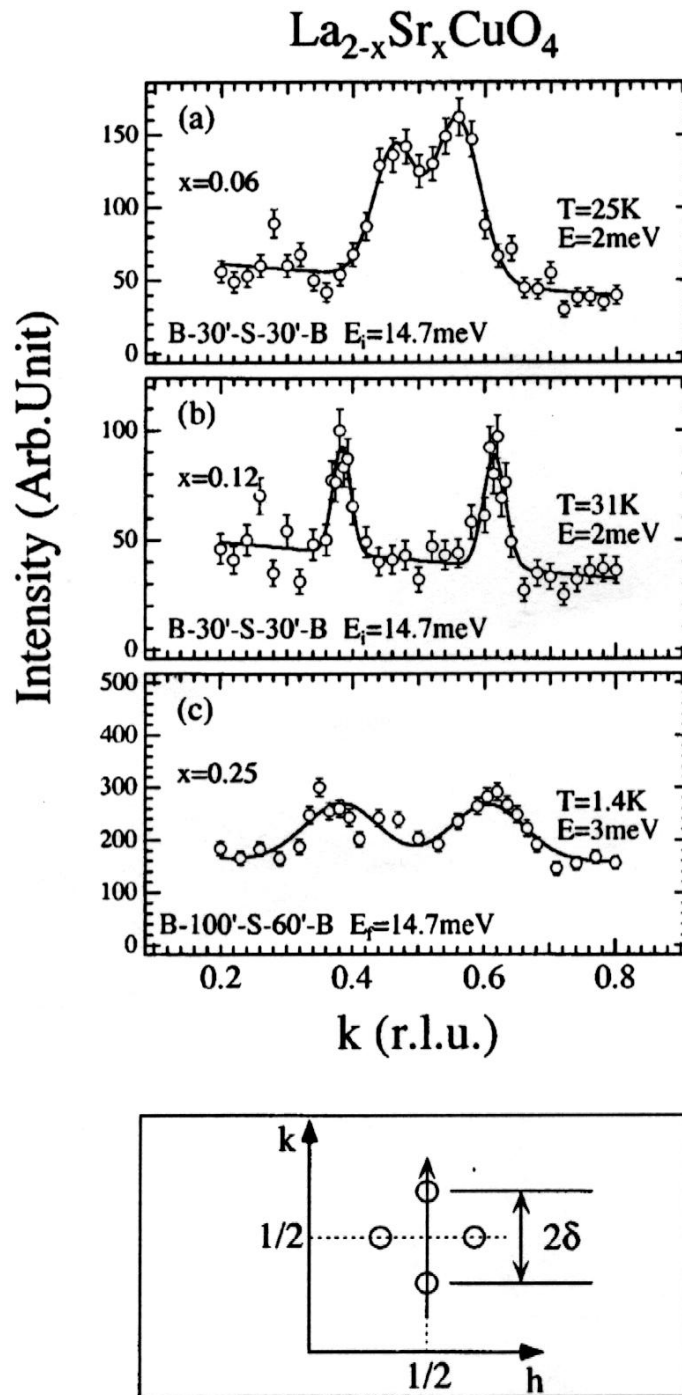


Figura 1.12: Espectro de espalhamento inelástico de nêutrons para $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ em diferentes condições experimentais de dopagem, $x = 0.06, 0.12$ e 0.25 . A incomensurabilidade δ é definida como a metade da distância de separação dos picos à $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \pm \delta, 0)$ indexados no plano recíproco $(h, k, 0)$. A posição $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ corresponde a um pico de Bragg na fase de ordenamento antiferromagnético de longo alcance. As unidades dos índices de Miller aqui são $\frac{\pi}{a}$, portanto $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ significa $(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, 0)$. Extraído da Ref. [10].

por espalhamento inelástico de nêutrons do supercondutor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [8]. Após a descoberta do ordenamento de carga incommensurável deste sistema por difração de elétrons, a conexão apropriada entre os picos de ordem magnética e de ordem de carga foi determinada em um experimento de difração de nêutrons de $\text{La}_2\text{NiO}_{4.125}$ [10]. A posição dos picos observados indicou que as stripes de carga são diagonais ao longo dos planos NiO_2 (ao contrário dos cupratos onde as stripes são verticais/verticais).

O ordenamento de carga é sempre observado a uma temperatura mais alta do que o ordenamento magnético, o que tipicamente caracteriza uma transição que é promovida pela carga. Também é importante ressaltar que o período da ordem de carga é geralmente dependente da temperatura, o que significa que a concentração de buracos ao longo de cada stripe também varia com a temperatura; isto é característico de estruturas que apresentam interações competitivas. Estas observações são consistentes com a idéia de que as stripes são geradas pela competição entre interações coulombianas e a tendência de formação de aglomerados ("clusters") de buracos. Portanto, os cupratos apresentam tendência à separação de fases.

A ordem de carga é mais facilmente detectada quando as stripes são estáticas, mas um ordenamento de carga perfeitamente estático é incompatível com o comportamento metálico dos cupratos. Embora as stripes de carga sejam difíceis de se observar diretamente, os estudos de espalhamento de nêutrons de correlações magnéticas existentes são mais facilmente entendidos em termos do conceito de fase de stripes.

Para entender por que ocorre uma segregação de carga, é interessante considerarmos os compostos de óxidos de cobre fundamentais dos quais os supercondutores são formados. Ao invés de terem orbitais preenchidos ou vazios, os átomos de cobre nos planos CuO_2 têm 1 elétron faltante no nível $3d$, na configuração d^{9+} , de forma que cada átomo de cobre possui um spin resultante $\frac{1}{2}$. Normalmente, esperaríamos que estes elétrons desemparelhados pudessem tunelar livremente de um sítio atômico para outro em um condutor metálico, mas não é o que acontece. Ao invés disto, a forte repulsão coulombiana entre elétrons evita a dupla ocupação em um mesmo sítio, de forma que eles tendem a ficar localizados. No entanto, a energia do

estado fundamental do composto pode ser reduzida se os elétrons desemparelhados fizerem um "hopping virtual" para sítios vizinhos, i.e., tunelarem para o sítio vizinho e voltarem novamente. Como o Princípio de Exclusão de Pauli proíbe que elétrons com os mesmos números quânticos ocupem o mesmo lugar ao mesmo tempo, este hopping somente é possível quando os spins dos elétrons desemparelhados em átomos vizinhos são anti-paralelos. Portanto, é energeticamente favorável para o material que ele se torne antiferromagnético. Em outras palavras, o antiferromagnetismo que tem sido observado experimentalmente nos cupratos é uma consequência do estado isolante correlacionado.

Vários estudos experimentais têm demonstrado que o antiferromagnetismo sobrevive nos cupratos dopados. Ao mesmo tempo, no entanto, a supercondutividade requer portadores de carga móveis. A questão, portanto, é a possibilidade de buracos dinâmicos e antiferromagnetismo local coexistirem. Diversas teorias propostas têm argumentado que as interações eletrônicas que competem nos planos podem levar à segregação espacial dos buracos. Experimentos de espalhamento de nêutrons têm mostrado que esta segregação toma a forma de stripes de carga regularmente espaçadas, separadas por domínios antiferromagnéticos. As stripes são facilmente detectadas quando estáticas, mas nos cupratos a temperatura de transição supercondutora cai abruptamente. Enquanto alguns têm argumentado que a tendência de segregação de carga desempenha um papel crucial no mecanismo de pareamento de buracos (essencial à supercondutividade), outros argumentam que as stripes são incompatíveis com a supercondutividade. Se as stripes são relevantes à supercondutividade de alta temperatura, elas devem ser comuns a todos os cupratos supercondutores. Além do mais, como o conceito de stripe estática não é conveniente para a supercondutividade, as stripes devem ser dinâmicas.

Experimentos recentes de espalhamento de nêutrons em $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ supercondutor têm mostrado que a resposta magnética é consistente com o modelo de stripe dinâmica. Estes resultados não são conclusivos. Para que a interpretação de stripes seja mais convincente é necessária a evidência de modulação espacial da densidade de buracos.

Os nêutrons não interagem diretamente com os portadores de carga (são espalhados pelos

núcleos). Stripes de carga estáticas causam o deslocamento dos íons da rede, e é através destes deslocamentos que as stripes têm sido detectadas. O período espacial correspondente à modulação de carga, ou o padrão de deslocamento, é precisamente metade do período de modulação magnética. Isto está de acordo com a idéia de que a carga é concentrada nas paredes que separam os domínios antiferromagnéticos. Em contraste ao caso estático, stripes de carga dinâmicas devem modificar as vibrações da rede. Assim, observar a dependência da ressonância com o comprimento de onda vibracional seria uma evidência circunstancial de stripes dinâmicas.

1.3.2 Relação de Yamada

A técnica de espalhamento de nêutrons permite detectar flutuações de spin. Sabe-se que a introdução de buracos nos planos de CuO_2 destrói a ordem de longo alcance magnética (para pequenos valores de x ($x \sim 0.02$)). O aumento abrupto da dopagem cria um estado com correlações de spin dinâmicas, ou seja, correlações de spin moduladas por flutuações de spin de longo período (incomensuradas).

Medidas sistemáticas de espalhamento de nêutrons a baixas energias foram feitas por Yamada et al. [10] para determinar quantitativamente como a modulação espacial das correlações de spin se relaciona com a dopagem x . Desta forma, para $0.04 < \delta < 0.12$, obtiveram $\delta = x$ (relação de Yamada). Para $x \gg 0.12$, a incomensurabilidade δ parece saturar ao valor $\delta \rightarrow \frac{1}{8}$. Ou seja, acima da dopagem de $\frac{1}{8}$ as stripes (semi-preenchidas) absorvem cada vez mais buracos com o aumento da dopagem. Ao atingir a dopagem de $\frac{1}{8}$ ("quarter-filling"), verifica-se o menor afastamento entre stripes. Para dopagens maiores, onde há uma saturação, as stripes são simplesmente preenchidas por buracos (Fig.1.13).

1.3.3 O Problema do $\frac{1}{8}$

O desaparecimento anômalo da supercondutividade em $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ quando a dopagem é próxima de $x \sim \frac{1}{8}$ é também uma das questões que ainda esperam por uma explicação conclu-

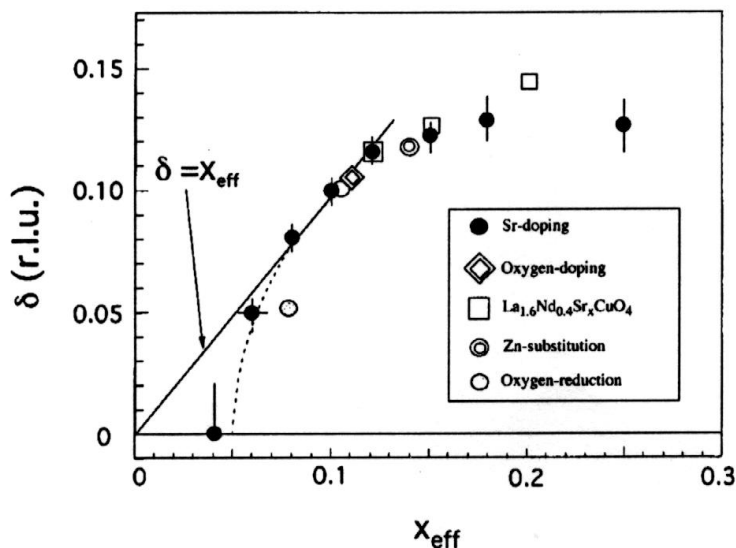


Figura 1.13: Relação de Yamada $\delta = x_{\text{efetivo}}$. Incomensurabilidade das flutuações de spin em função da dopagem de Sr para $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Extraída da Ref. [10].

siva. Este fenômeno foi observado pela primeira vez em um estudo sistemático da supercondutividade em função da composição das amostras [11]. Uma possível explicação deste fenômeno envolve um acoplamento spin-carga, no qual stripes antiferromagnéticas de spins do cobre são separadas por paredes de domínios de buracos espaçadas periodicamente.

1.4 O Modo Ressonante de 41 meV

Além das stripes, que evidenciam as correlações entre os portadores de carga e de spin, foi observado recentemente um modo ressonante [12] na susceptibilidade dinâmica em certos cupratos, e cuja origem é devida ao acoplamento com as flutuações de spin. Usando espalhamento inelástico de nêutrons, os autores encontraram uma ressonância na susceptibilidade magnética dinâmica ($\chi''(\omega)$) integrada nos momentos a uma energia de 41 meV, de acordo com as figuras 1.14 e 1.15, para os modos acústicos mas não para os modos ópticos. Esta ressonância aparece abaixo da temperatura crítica (T_C) e coincide com o aparecimento do "pseudogap" determinado pelas propriedades de transporte. Esta ressonância foi associada às flutuações de spin através de

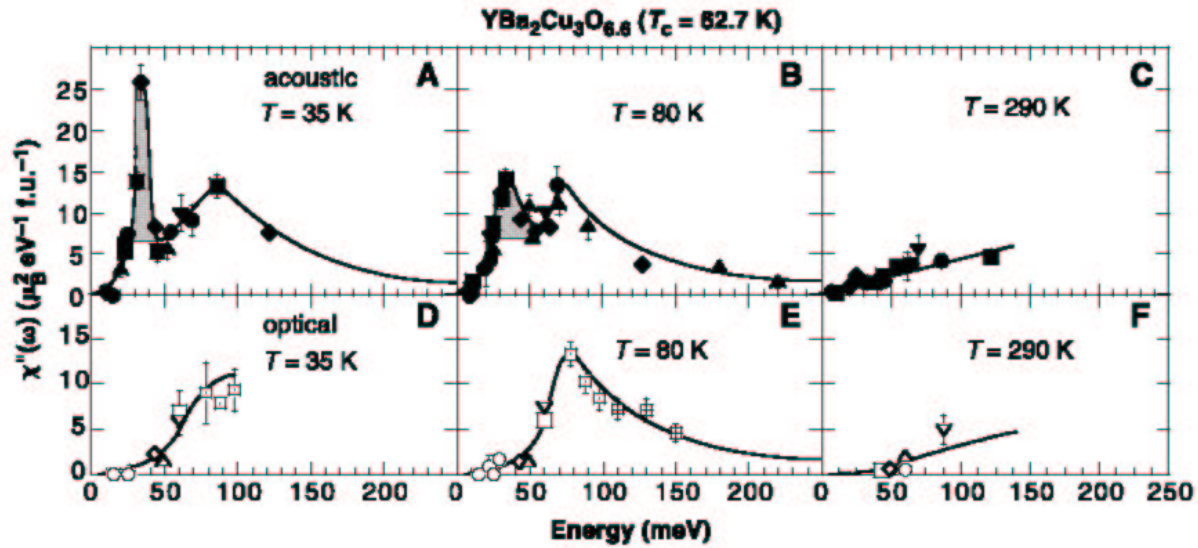


Figura 1.14: Susceptibilidade magnética dependente da frequência para os modos acústicos (A,B,C) e ópticos (D,E,F) no $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$. O mais importante deste resultado é o aparecimento do modo ressonante a 41 meV abaixo da temperatura crítica, destacado em cinza nos gráficos A, B e C. Os dados foram coletados do plano de espalhamento (h, h, l) . Integrando-se a área sob o pico de ressonância e convertendo para momento quadrático, obtém-se $\langle m_{res}^2 \rangle = 0.06 \pm 0.04 \mu_B^2 f.u.^{-1}$ a 35 K e $\langle m_{res}^2 \rangle = 0.04 \pm 0.03 \mu_B^2 f.u.^{-1}$ a 80 K. Extraído da Ref.[12].

cálculos da energia de intercâmbio no modelo t - J , o que comprova o caráter eletrônico da fase supercondutora destes cupratos (ver figura 1.15E). Este problema, ainda sem completo entendimento, consiste em um dos fenômenos mais relevantes da física dos supercondutores de alta temperatura crítica no momento, e relaciona pela primeira vez a anomalia do calor específico da fase supercondutora às flutuações de spin.

Como consequência da existência das stripes, do problema do $\frac{1}{8}$, da relação de Yamada e do modo ressonante, além de motivação, percebe-se a importância do estudo de modelos de elétrons fortemente correlacionados em uma tentativa de compreender a física dos cupratos aqui exposta.

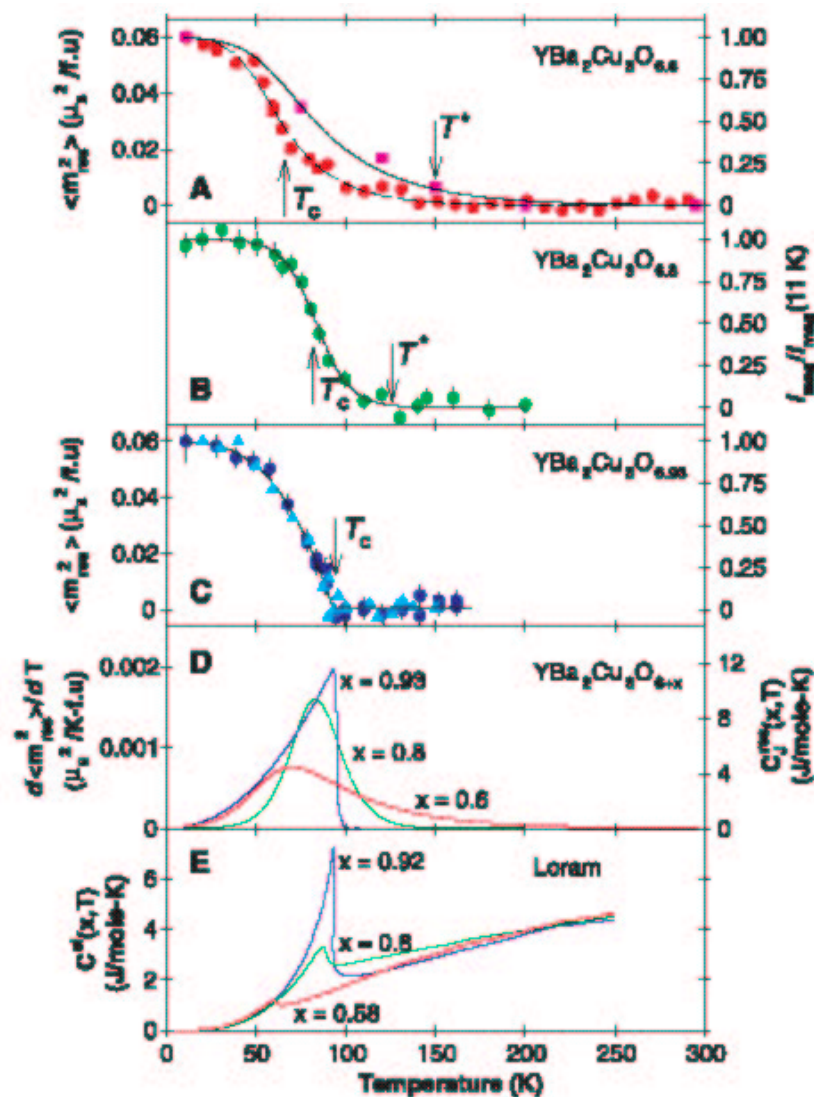


Figura 1.15: Dependência da intensidade do pico de ressonância com a temperatura para (A) $(^{123}\text{O})_{6.6}$ à 34 meV, (B) $(^{123}\text{O})_{6.8}$ à 39 meV e (C) $(^{123}\text{O})_{6.93}$ à 40 meV. O eixo da esquerda mostra a intensidade normalizada à $\langle m_{res}^2 \rangle$ enquanto o eixo direito representa a intensidade do pico a baixas temperaturas. (D) Estimativa de $d\langle m_{res}^2 \rangle / dT$ para $(^{123}\text{O})_{6+x}$ de (A) à (C). (E) Anomalia do calor específico calculado na literatura, usando o modelo t - J , em unidades do SI. Compare os gráficos D e E. Extraída da Ref.[12].

Capítulo 2

Modelos Fortemente Correlacionados

O propósito da física da matéria condensada é explicar as propriedades eletrônicas, magnéticas e estruturais da matéria. No caso dos metais, esta difícil tarefa foi enormemente simplificada com o desenvolvimento da teoria de Fermi-Landau. No modelo do gás de elétrons ("jellium"), cada elétron de condução dos átomos é livre e, ao invés de todas as interações serem descritas separadamente, a repulsão Coulombiana entre elétrons pode ser ignorada através de um processo de renormalização com um fundo de carga positiva. As propriedades de transporte do sistema podem ser descritas de forma efetiva como interações fracas entre quase-partículas¹ independentes, isto é, elétrons e vacâncias com uma massa modificada.

Em sistemas fortemente correlacionados, as interações entre os pares são tão fortes que não podem ser consideradas separadamente, e uma descrição como soma de partes fracamente interagentes torna-se inadequada. Fatores como antiferromagnetismo, defeitos da rede e forte anisotropia dificultam a interpretação dos resultados para uma modelagem adequada e o desenvolvimento de uma teoria apropriada do gás de elétrons. De fato, ainda não se sabe explicar o comportamento dos cupratos, pois o comportamento coletivo refletido nas propriedades macroscópicas requer que adotemos um ensemble fortemente interagente, tornando complexa a

¹Partículas "vestidas" por uma nuvem de outras partículas. Comportam-se de forma similar a partículas normais, porém geralmente possuem uma massa efetiva maior devido à nuvem que blinda interações com outras partículas.

análise destes sistemas. No entanto, várias teorias têm sido propostas, baseadas em modelos que descrevem de forma aproximada as características do comportamento eletrônico dos cupratos supercondutores.

Para que se possa extrair as informações desejadas do sistema físico de interesse, é fundamental que seja feita uma escolha cuidadosa do modelo adequado. Discutiremos aqui, brevemente, alguns destes modelos.

2.1 O Modelo de Hubbard de Uma Banda

Sob o ponto de vista teórico, o desenvolvimento sistemático de modelos teve uma grande contribuição nos anos 60 quando Hubbard [14] introduziu um modelo de uma banda, que é provavelmente o modelo mais simples que pode ser usado para se estudar os aspectos de muitos corpos das propriedades eletrônicas da matéria condensada. Uma característica deste modelo está no fato de que, enquanto um de seus limites descreve um líquido de Fermi metálico, o outro descreve um líquido quântico fortemente correlacionado que possui comportamento de um isolante de Mott. Por ser o modelo mais simples capaz de descrever estes dois limites, começamos por discutí-lo.²

O hamiltoniano do modelo de Hubbard pode ser escrito como

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.1)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representa interação a primeiros vizinhos, $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$ são os operadores de criação (aniquilação) de um elétron de spin σ ($\equiv \uparrow, \downarrow$). $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número, que simplesmente conta o número de elétrons de spin σ no sítio i . O primeiro termo ("hopping") corresponde à energia cinética promovida pela ligação química. Esta contribuição favorece elétrons itinerantes. O segundo termo corresponde à repulsão coulombiana entre dois elétrons no mesmo

²A solução exata do modelo de Hubbard unidimensional foi encontrada em 1968 [15] usando o método do Ansatz de Bethe, porém esta solução não pode ser expandida a duas dimensões.

sítio. A contribuição de longo alcance é desprezada e somente as interações quando ambos os elétrons estão no mesmo átomo são mantidas, rendendo uma energia adicional de U quando o átomo é duplamente ocupado. Mas a competição entre ligação química e repulsão coulombiana de curto alcance no modelo de Hubbard ainda sofre a influência do princípio de exclusão de Pauli. Assim, a interpretação do modelo de Hubbard está fundamentada na competição destes três fatores e das correlações eletrônicas que eles induzem.

No limite de forte acoplamento ($U \gg t$) o termo dominante é o da repulsão de Hubbard e, no caso de banda semi-cheia, este termo impõe a condição de ocupação simples em cada sítio. A degenerescência associada à direção do spin de cada elétron em qualquer direção é aumentada pelo termo cinético em segunda ordem em teoria de perturbação. O estado intermediário possui um único átomo duplamente ocupado. Este processo pode ser pensado como um elétron tunelando para um sítio vizinho, que é de forma breve duplamente ocupado, e então um dos dois elétrons deste sítio tunela de volta. Dois elétrons somente podem ocupar o mesmo átomo se eles estiverem em um singleto relativo, de tal forma que a interação aja somente em pares de elétrons, preferindo estes a pares de tripletos. Este processo físico é conhecido como troca cinética [16]. O hamiltoniano que descreve este processo é:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j}{4} \right], \quad (2.2)$$

que é o modelo de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagneticamente acoplado, com interação de Heisenberg $J = \frac{4t^2}{U}$ por ligação. Assim, o modelo de Heisenberg é o modelo padrão para um sistema de interação dependente de spin (*a priori*, qualquer sistema magnético).

2.1.1 Aproximação de Hartree-Fock

Partindo do hamiltoniano do modelo de Hubbard de uma banda (Eq. (2.1)) quando $U \leq t$, podemos reescrevê-lo na aproximação de campo médio como:

$$H_{HF} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i (\langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle) \quad (2.3)$$

Consideremos o caso de banda semi-preenchida ($n = 1$) e, por simplicidade, uma rede bidimensional que se divide em duas sub-redes A e B com momento de sub-rede polarizada ao longo do eixo de quantização de spin \hat{z} (antiferromagneto de Néel). Isto implicará em uma redução da zona de Brillouin (**ZBAF**), que descreverá a periodicidade dos novos estados Hartree-Fock. Assim, o hamiltoniano fica

$$H_{HF}^{AF} = \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. + \sum_i \frac{U}{2} (1 - m_s \sigma e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_i}) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (2.4)$$

onde $\sigma = \pm 1$, m_s é a magnetização da sub-rede e o vetor \mathbf{Q} é escolhido de forma que descreva a periodicidade da rede. Mas por tratar-se de um potencial periódico, $\frac{U}{2} m_s \sigma e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_i}$, para cada vetor \mathbf{k} dentro da zona de Brillouin, haverá um estado $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ fora da mesma.

Os autovalores no espaço de momentum são

$$E^\pm(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + \varepsilon(\mathbf{k}) + U \pm \sqrt{\Delta^2 + (\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) - \varepsilon(\mathbf{k}))^2} \right\} \quad (2.5)$$

onde $\Delta = m_s U$ e $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$. Então, podemos diagonalizar o problema mediante uma transformação dos operadores de criação de Bloch da seguinte forma:

$$\{c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger\} \longrightarrow \{\alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger\} \quad (2.6)$$

onde

$$\alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = \left(\frac{1 + \cos \theta_{\mathbf{k}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \sigma \left(\frac{1 - \cos \theta_{\mathbf{k}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger$$

$$\beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = -\sigma \left(\frac{1 - \cos \theta_{\mathbf{k}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \left(\frac{1 + \cos \theta_{\mathbf{k}}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \quad (2.7)$$

com o parâmetro $\cos \theta_{\mathbf{k}} = \frac{\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) - \varepsilon(\mathbf{k})}{\sqrt{\Delta^2 + (\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) - \varepsilon(\mathbf{k}))^2}}$, de forma que o hamiltoniano Hartree-Fock fique diagonal

$$H_{HF}^{AF} = \sum_{\mathbf{k},\sigma \in \mathbf{ZBAF}} \left\{ E^-(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{k},\sigma} + E^+(\mathbf{k}) \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k},\sigma} \right\} \quad (2.8)$$

Mas a rede possui a simetria $\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{k})$, onde $\mathbf{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right)$. Assim, $E^-(\mathbf{k}) < E^+(\mathbf{k})$ e o estado de menor energia (com 1 elétron/sítio) será a banda semi-preenchida. A energia do estado fundamental é, portanto,

$$E_{HF_{GS}}^{AF} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\sigma \in \mathbf{ZBAF}} E^-(\mathbf{k}) - \frac{U}{4} (1 - m_s^2) \quad (2.9)$$

No limite $U \rightarrow \infty$, $m_s \rightarrow 1 + O\left(\frac{t}{U}\right)$ leva à $E_{HF_{GS}}^{AF} = -\frac{2t^2}{U}$. A banda de energia $E^-(\mathbf{k})$ é centrada em energia 0 e $E^+(\mathbf{k})$ em energia U . As flutuações de spin não são levadas em conta na aproximação Hartree-Fock e, portanto, esta descrição não é boa para temperatura finita sendo, no entanto, tem sido usada para temperatura nula., desde que $U \ll t$.

Ainda na aproximação Hartree-Fock, se um buraco é adicionado ao "background" antiferromagnético, haverá um custo energético de $\frac{U}{2} - J$. Considerando a possibilidade do "background" antiferromagnético apresentar um defeito topológico como uma parede que separa dois domínios antiferromagnéticos com uma diferença de fase igual a π , os buracos se localizarão na parede pois isto implica em redução da energia da ordem de J , como veremos mais adiante.

2.2 O Modelo de Hubbard de Três Bandas

Como vimos na seção 1.2, os planos CuO_2 , característica intrínseca dos cupratos, possuem portadores de cargas itinerantes e, portanto, acredita-se que contenham a física fundamental que

leva à supercondutividade. Desta forma, surge a necessidade de um modelo mais detalhado que os leve em conta.

Cada um destes planos consistem de uma rede aproximadamente quadrada e com orbitais atômicos que contêm exatamente um buraco por célula de CuO_2 . Um hamiltoniano geral que descreva os estados d dos sítios de Cu, os estados p dos sítios de O, a hibridização entre estados Cu-O, entre estados O-O e a repulsão coulombiana, pode ser dado por :

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{i\sigma} \varepsilon_d d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_{l\sigma} \varepsilon_p p_{l\sigma}^\dagger p_{l\sigma} + \sum_{\langle l,i \rangle \sigma} t_{pd} (p_{l\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + h.c.) + \\
& + \sum_i U_d n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d + \sum_{\langle l,l' \rangle \sigma} t_{pp} (p_{l\sigma}^\dagger p_{l'\sigma} + h.c.) + \\
& + \sum_{\langle i,l \rangle \sigma \sigma'} U_{pd} n_{i\sigma}^p n_{l\sigma'}^d + \sum_l U_p n_{l\uparrow}^p n_{l\downarrow}^p
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Na Eq. (2.10), o operador $d_{i\sigma}^\dagger$ cria um buraco no orbital $3d$ do Cu no sítio i e $p_{l\sigma}^\dagger$ cria um buraco no orbital $2p$ do oxigênio no sítio l . U_d é a repulsão coulombiana em um sítio de Cu. O terceiro termo mostra uma superposição direta de orbitais Cu-O. O quinto termo descreve o hopping direto entre oxigênios. U_{pd} no sexto termo é a repulsão coulombiana a primeiros vizinhos Cu-O, enquanto U_p é a repulsão coulombiana em sítios de oxigênio. Vale lembrar que estamos utilizando a notação de buracos por ser esta mais conveniente, pois o estado de referência tem 1 buraco/átomo de Cu. Ver figuras 2.1 e 2.2 sobre este modelo.

Nesta representação, se a amplitude de hibridização for nula e $(U_d, \varepsilon_p) > 0$, então todos os sítios de cobre estarão simplesmente ocupados e todos os sítios de oxigênio vazios. Se a hibridização for finita, os processos de hopping virtual envolvendo estados de buraco no sítio do Cu duplamente ocupados produzem uma interação de intercâmbio antiferromagnético entre buracos de cobre vizinhos. O hamiltoniano, então, se reduz ao modelo de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$

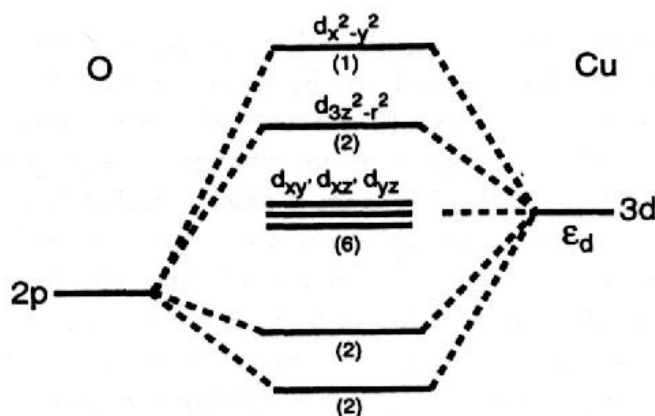


Figura 2.1: Representação de uma ligação ou hibridização entre um íon Cu^{2+} e um íon O^{2-} . Somente os elétrons $3d$ do Cu e os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ do O foram considerados. O número entre parênteses indica a ocupação no composto não dopado. Extraída da Ref.[3].

para a rede quadrada de sítios de cobre (Eq. 2.2).

A inconveniência do modelo de três bandas vem do fato de que este possui muitos parâmetros, tornando sua análise complexa. Em uma tentativa de simplificar este modelo, Zhang e Rice fizeram algumas considerações que levaram a uma alternativa, baseada em estados singletons como veremos posteriormente.

2.3 O Modelo t - J

A supercondutividade de alta temperatura ocorre quando um composto isolante antiferromagnético é dopado por buracos. Este composto pode ser modelado pelo modelo de Hubbard de forte acoplamento de banda semi-cheia. A questão, portanto, é o efeito de se adicionar buracos extras e a competição resultante entre o movimento dos buracos e as interações de Heisenberg. Nosso interesse está em um modelo que descreva um sistema que apresente interações dependentes de spin, além de mobilidade de portadores na rede. Daremos, portanto, especial atenção ao modelo t - J .

O modelo t - J , inicialmente introduzido como uma conjectura [17], pode ser obtido de duas

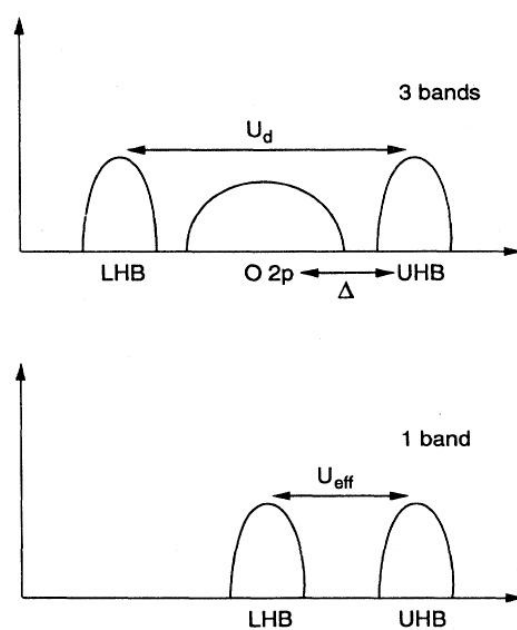


Figura 2.2: Esquema da estrutura de bandas dos planos de CuO_2 . U_d é a repulsão coulombiana entre íons de Cu , Δ é a diferença de energia entre orbitais de Cu e O ($\Delta = \varepsilon_d - \varepsilon_p$). A ilustração inferior representa o modelo de Hubbard de 1 banda, simulando o gap de transferência de carga mediante uma interação efetiva (U_{eff}). Extraída da Ref.[3].

maneiras distintas: A partir do limite de forte acoplamento ($U \gg t$) do modelo de Hubbard de uma banda, ou a partir do limite de baixa energia de um modelo de três bandas para os planos de CuO_2 (que representam a estrutura eletrônica mais significativa dos cupratos). O hamiltoniano completo deste modelo é dado por:

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j,\sigma} + H.c.) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\left(S_i^z S_j^z - \frac{n_i n_j}{4} \right) + \frac{\alpha}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] \quad (2.11)$$

onde $J = \frac{t^2}{U}$, α corresponde a um fator de anisotropia magnética e $\tilde{c}_{i,\sigma} = c_{i,\sigma} (1 - n_{i,-\sigma})$ são os operadores de Gutzwiller que mantêm a proibição de dupla ocupação. O último termo $\left[\frac{J\alpha}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right]$ foi introduzido para explicitar o caráter anisotrópico.

Este modelo descreve o que acontece quando os cupratos são dopados (através da remoção de alguns elétrons), de forma que haja sítios vazios na rede. O sistema passa, então, a ter caráter metálico uma vez que os elétrons podem se mover indiscriminadamente próximos de sítios vazios, diminuindo sua energia cinética em uma quantidade proporcional a t . Os elétrons vizinhos irão preferir permanecer em alinhamento antiferromagnético com energia J e sem dupla ocupação. A presença deste vínculo no termo cinético indica que não existe um parâmetro pequeno na teoria que permita que se faça um tratamento perturbativo. Esta é a física básica do modelo t - J e, devido à ausência de ordem magnética de longo alcance em duas dimensões, t e J representam interações competitivas.

2.3.1 Limite de Acoplamento Forte

Consideremos agora o limite de forte acoplamento ($U \gg t$) do modelo de Hubbard de uma banda. Para diferentes subespaços de Hilbert com números totais de sítios duplamente ocupados D distintos, podemos decompor os termos de energia cinética da Eq.(2.1) em

$$H_t = H_t^h + H_t^d + H_t^{mis} \quad (2.12)$$

onde H_t^h descreve o transporte de buracos, H_t^d de sítios duplamente ocupados e H_t^{mis} de uma mistura de diferentes subespaços de Hilbert com

$$H_t^h = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c.$$

$$H_t^d = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} n_{i,-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + h.c.$$

$$H_t^{mis} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} n_{i,-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. -$$

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + h.c. \quad (2.13)$$

Para que eliminemos o termo misto, aplicamos uma transformação unitária definida pela matriz S à Eq. (2.13), eliminando assim H_t^{mis} em sua ordem mais baixa:

$$H_{eff} = e^{iS} H e^{-iS} = H + i[S, H] + \frac{(i)^2}{2!} [[S, H], H] + \dots \quad (2.14)$$

O segundo termo de (2.14) permite achar uma matriz S que cancela H_t^{mis} . O hamiltoniano efetivo no caso de forte interação no subespaço sem dupla ocupação ($D = 0$) é dada por

$$H_{eff} = H_t^h + J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j}{4} \right] \quad (2.15)$$

com energia de troca $J = \frac{4t^2}{U}$ e H_t^h correspondendo ao primeiro termo de (2.13).

Portanto, obtivemos o hamiltoniano que descreve o modelo t - J a partir do modelo de Hubbard no limite de forte acoplamento ($U \gg t$):

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j}{4} \right) \right] \quad (2.16)$$

2.3.2 Singletos de Zhang-Rice

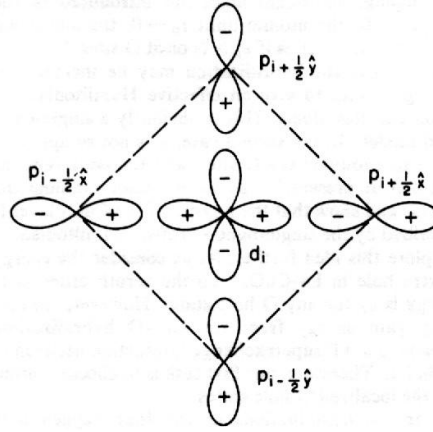
Particularmente nos cupratos, a dinâmica dos portadores de carga é eminentemente determinada nos planos de CuO_2 , onde forma-se um sistema de elétrons (ou buracos) de forte anisotropia e caráter essencialmente bidimensional. Portanto, outra maneira de se obter o modelo t - J é a partir do modelo de três bandas para os planos de CuO_2 , que possuem a estrutura de uma rede quadrada com um átomo de oxigênio entre cada par cobre-cobre a primeiros vizinhos, característica estrutural dos supercondutores de alta temperatura crítica. A concentração média de elétrons nestes planos corresponde à valência na camada $\text{Cu}^{2+\delta}\text{O}_2^{-4}$, com $\delta > 0$.

Os planos de CuO_2 com valência Cu^{2+} são isolantes de transferência de carga com acoplamento antiferromagnético J muito menor do que as energias de excitação de carga. Já os planos com valência $\text{Cu}^{2+\delta}$ são supercondutores de alta temperatura ($\delta \geq 0.05$).

Utilizando-se como aproximação para descrever a estrutura eletrônica do estado de referência (o plano $\text{Cu}^{2+}\text{O}_2^{4-}$), partiremos de orbitais hibridizados de um plano de CuO_2 . A superposição máxima ocorre entre orbitais $x^2 - y^2$ do cobre e orbitais $2p_\sigma$ do oxigênio, constituindo os singletos de Zhang-Rice.

Mediante dopagem, buracos adicionais são introduzidos nos planos CuO_2 e irão se depositar primeiramente em orbitais p do oxigênio e não formarão íons Cu^{3+} . Pode-se mostrar que a hibridização liga fortemente o buraco em cada célula de CuO_2 no quadrado de átomos de oxigênio com um íon central Cu^{2+} para formar um singlete local (ver figura 2.3). Este singlete irá se mover pela rede quadrada de íons de Cu^{2+} de um modo similar ao do buraco em um hamiltoniano efetivo de uma banda.

Baseados nisso, consideremos portanto, a energia de um buraco extra em um plano de CuO_2 [19] e a combinação dos quatros estados de buracos localizados em orbitais do oxigênio em


 Figura 2.3: Orbitais do plano CuO_2 . Extraída da Ref. [19].

torno de um íon de cobre. Neste caso, poderá haver a formação de um estado simétrico ou anti-simétrico das funções de onda dos estados p e d em relação ao íon central Cu.

$$p_i^A = \frac{1}{2} (p_{i+\frac{y}{2}} + p_{i+\frac{x}{2}} - p_{i-\frac{x}{2}} - p_{i-\frac{y}{2}}) \quad (2.17)$$

$$p_i^S = \frac{1}{2} (p_{i+\frac{y}{2}} + p_{i+\frac{x}{2}} + p_{i-\frac{x}{2}} + p_{i-\frac{y}{2}}) \quad (2.18)$$

Ambos estados simétricos e anti-simétricos podem se combinar com buracos do Cu de onda- d para formar estados singletos ou tripletos. Em segunda ordem em teoria de perturbação, as energias calculadas para os estados das Eqs. (2.17) e (2.18) são, conforme Ref.[19],

$$E_{\text{singlete}}^S = -8(t_1 + t_2), \quad E_{\text{tripleto}}^S = 0, \quad E^{AS} = -4t_1 \quad (2.19)$$

onde

$$t_1 = \frac{t_{pd}^2}{\varepsilon_p - \varepsilon_d} \quad (2.20)$$

$$t_2 = \frac{t_{pd}^2}{U_d + \varepsilon_d - \varepsilon_p} \quad (2.21)$$

A grande energia de ligação no estado singleto simétrico é devido à coerência de fase. Esta energia deve ser comparada com a energia de um buraco situado em um sítio fixo de oxigênio. Neste caso, a energia de ligação da combinação de um singleto de um buraco em um sítio de oxigênio com buracos dos sítios de Cu vizinhos é $-2(t_1 + t_2)$, ou seja, $\frac{1}{4}E_{\text{singleto}}^S$. Além disso, devido ao fato de que a energia de hopping efetivo de um buraco do oxigênio é t_1 ou t_2 (dependendo da configuração do spin) e de que é muito menor do que a energia de separação destes estados localizados, podemos desprezar o estado anti-simétrico de um buraco do oxigênio e trabalhar no subespaço de estados simétricos. Não obstante, a energia dos dois buracos do oxigênio de uma mesma célula unitária, isto é, a configuração $p_{i\uparrow}^S p_{i\downarrow}^S d_{i\sigma}$, é $-(6t_1 + 4t_2)$, muito maior do que a energia de dois buracos do oxigênio separados. Assim, dois buracos sentem uma forte repulsão se estiverem situados em uma mesma célula.

No entanto, os estados localizados das Eqs. (2.17) e (2.18) não são ortogonais, pois quadrados vizinhos compartilham um átomo de oxigênio. Então,

$$\langle p_{i\sigma}^S | p_{j\sigma'}^S \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \left(\delta_{ij} - \frac{1}{4} \delta_{\langle ij \rangle, 0} \right) \quad (2.22)$$

onde $\delta_{\langle ij \rangle, 0} = 1$ se i, j forem primeiros vizinhos. Podemos contornar este problema construindo um conjunto de funções de Wannier:

$$\phi_{i\sigma} = N_s^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (2.23)$$

$$p_{\mathbf{k}\sigma} = N_s^{-\frac{1}{2}} \beta_{\mathbf{k}} \sum_i p_{i\sigma}^S e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (2.24)$$

N_s é o número de quadrados e $\beta_{\mathbf{k}}$ é o fator de normalização. As funções $\phi_{i\sigma}$ definidas desta forma são ortogonais e completas no espaço simétrico de buracos do oxigênio. $\phi_{i\sigma}$ se combina

com o buracos do Cu no sítio i para formar um singleto (-) ou um tripleto (+) de spin.

$$\psi_i^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{i\uparrow} d_{i\downarrow} \pm \phi_{i\downarrow} d_{i\uparrow}) \quad (2.25)$$

Como os buracos do oxigênio são criados em um "background" com sítios de cobre simplesmente ocupados, quando ψ^- se move do sítio i para o sítio j , um buraco do cobre se move simultaneamente do sítio j para o sítio i . Este movimento é representado pelo processo $\psi_i^- d_{j\sigma} \longrightarrow \psi_j^- d_{i\sigma}$, com energia cinética descrita pelo hamiltoniano de hopping:

$$H_t = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} (\psi_j^- d_{i\sigma})^\dagger \psi_i^- d_{j\sigma} \quad (2.26)$$

Da Eq. (2.26), quando um buraco é criado em um orbital d do Cu no sítio i , o estado singleto é destruído no mesmo sítio. Portanto, o estado ψ_i^- é equivalente à ausência de um buraco do orbital d no sítio i . Desta forma, o hamiltoniano de hopping adquire a mesma forma do hamiltoniano no caso de uma única banda:

$$H_t = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. \quad (2.27)$$

Combinando a Eq. (2.27) com a interação antiferromagnética entre buracos de orbitais d (Heisenberg), obtemos o hamiltoniano do modelo t - J :

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.28)$$

Vale lembrar que, nesta aproximação, considerou-se nulos U_p , U_{pd} e t_{pp} na Eq. (2.10).

Capítulo 3

Abordagem Teórica do Modelo t - J

Uma teoria definitiva para descrever estes sistemas ainda não foi completamente desenvolvida. Uma vez que estes sistemas são inadequados para uma descrição baseada na Teoria do Líquido de Fermi de Landau [13], uma técnica utilizada consiste em trabalhar com soluções exatas de teorias de muitos corpos, pois os sistemas que podem ser resolvidos exatamente permitem a obtenção de relevantes informações, ainda que qualitativas, sobre as propriedades físicas de interesse. Uma das técnicas de abordagem teórica que provém bons resultados é transformar o problema de estado sólido em um problema equivalente usando a teoria de campos. Esta tentativa de reformular sistemas interagentes complexos (não perturbativos) de tal forma que eles se tornem perturbativos consiste na idéia básica da teoria de bosonização: A descrição de sistemas fermiônicos em termos de suas excitações bosônicas. Este método apresenta solução exata para sistemas fermiônicos unidimensionais, a qual levou mais tarde ao conceito de Líquido de Luttinger [21]. A utilização desta técnica se justifica pelo fato de que sistemas eletrônicos unidimensionais apresentam quase-partículas completamente instáveis e de meia-vida curta, constituindo uma exceção à descrição em termos da teoria de Landau.

3.1 Técnicas de Bozonização: Hólons e Spínons

A função de Green nos permite obter diversas informações a respeito do sistema através da análise da função espectral. Uma vez que já obtivemos o hamiltoniano do modelo t - J , queremos agora calcular a função de Green de uma única partícula, dada por um buraco que se propaga em um "background" de spins antiferromagnético bidimensional. Para que isto seja possível, utilizaremos a técnica de bozonização: Uma ferramenta de teoria de campos que permite a obtenção de informações relevantes ao sistema pela caracterização do espectro de excitações de baixas energias.

A técnica consiste basicamente em um mapeamento sistemático do sistema fermiônico em um sistema bosônico auxiliar, facilitando a compreensão de algumas propriedades físicas. Assim, definiremos operadores que atuam somente em portadores de informação relativa ao spin e operadores que atuam em portadores de informações relativas à carga, podendo tratar o sistema eletrônico como constituído de férmions desprovidos de spin (hólons) e de spins que existem independentemente de qualquer carga (spínons). O fenômeno de separação spin-carga e o conseqüente surgimento destas quase-partículas estão baseados em uma propriedade especial de sistemas unidimensionais: Próximo da superfície de Fermi, todas as excitações partícula-buraco a um momentum fixo possuem a mesma energia cinética. Em dimensões mais altas, a energia depende da magnitude e da direção de momentum relativa à superfície de Fermi local. Em uma dimensão existe somente uma direção e, portanto, fixar o momentum implica em determinar a energia cinética completamente.

Apesar de nosso problema constituir um caso bidimensional e de $S = \frac{1}{2}$, estudos anteriores [25] mostram que utilizar a técnica de bosonização não consiste em uma aproximação tão drástica.

3.2 Aproximação Linear de Ondas de Spin (Transformação de Holstein-Primakoff)

Para que possamos escrever o hamiltoniano do modelo t - J em termos de hólons e spínons, é necessário que o diagonalizemos parcialmente. Isto será feito dentro da teoria linear de ondas de spin (LSWT). Iniciaremos, portanto, reescrevendo o hamiltoniano H_{t-J} para um sistema bidimensional de tunelamento isotrópico, embora nosso sistema apresente uma anisotropia magnética dada por α ,

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j}{4} \right] \quad (3.1)$$

Reescrevendo os vetores de spin em termos de suas componentes,

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{\alpha}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z - \frac{n_i n_j}{4} \right) \quad (3.2)$$

Implementaremos a transformação de Holstein-Primakoff para antiferromagnetos dentro da teoria de ondas de spin para uma rede d -dimensional [22]. Assim, ao invés de trabalharmos com operadores de spin, utilizaremos operadores de desvio de spin, modificando os vetores de base sobre os quais atuam os operadores.

Definamos o operador número de desvios de spin por

$$\hat{n}_r \equiv S - \hat{S}_r^z \quad (3.3)$$

onde o sítio r é de uma sub-rede, digamos A , e

$$\hat{n}_r \equiv S + \hat{S}_r^z \quad (3.4)$$

para um sítio r na sub-rede B . Nesta representação, o espaço de Hilbert é varrido por

$$|\{n_r\}\rangle \equiv \prod_r |n_r\rangle \quad (3.5)$$

e os autovalores de n_r são $0, 1, \dots, 2S$. Um estado geral pode ser expresso por

$$|\psi\rangle = \sum_{\{n_r\}} C(\{n_r\}) |\{n_r\}\rangle \quad (3.6)$$

Nesta representação, o operador \hat{S}^z é diagonal enquanto S_r^+ e S_r^- têm as seguintes propriedades, quando r está na sub-rede A :

$$S_r^+ |n_r\rangle = \left[2S \left[1 - \frac{n_r - 1}{2S}\right] n_r\right]^{\frac{1}{2}} |n_r - 1\rangle \quad (3.7)$$

$$S_r^- |n_r\rangle = \left[2S (n_r + 1) \left[1 - \frac{n_r}{2S}\right]\right]^{\frac{1}{2}} |n_r + 1\rangle \quad (3.8)$$

Quando o sítio r está na sub-rede B , os operadores acima têm sua ação trocada. Introduzimos, então, operadores de Bose a_r^\dagger e a_r para a sub-rede A e b_r^\dagger e b_r para a sub-rede B , os quais obedecem as seguintes relações de comutação:

$$[a_r, a_{r'}^\dagger] = [b_r, b_{r'}^\dagger] = \delta_{r,r'} \quad (3.9)$$

$$[a_r, a_{r'}] = [a_r^\dagger, a_{r'}^\dagger] = [b_r, b_{r'}] = [b_r^\dagger, b_{r'}^\dagger] = 0 \quad (3.10)$$

$$[a_r, b_{r'}] = [a_r^\dagger, b_{r'}^\dagger] = [a_r, b_{r'}^\dagger] = [a_r^\dagger, b_{r'}] = 0 \quad (3.11)$$

Estas equações podem ser obtidas aplicando os operadores a um estado geral (Eq. (3.6)). Assim, para a sub-rede A , ficamos com

$$S_r^+ = \sqrt{2S} f_s(\hat{n}_r) a_r \quad (3.12)$$

$$S_r^- = \sqrt{2S} a_r^\dagger f_s(\hat{n}_r) \quad (3.13)$$

$$\hat{S}_r^z = S - \hat{n}_r \quad (3.14)$$

$$\hat{n}_r = a_r^\dagger a_r \quad (3.15)$$

$$f_s(\hat{n}_r) \equiv \left[1 - \frac{\hat{n}_r}{2S} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.16)$$

e para a sub-rede B com

$$S_r^+ = \sqrt{2S} b_r^\dagger f_s(\hat{n}_r) \quad (3.17)$$

$$S_r^- = \sqrt{2S} f_s(\hat{n}_r) b_r \quad (3.18)$$

$$\hat{S}_r^z = -S + \hat{n}_r \quad (3.19)$$

$$\hat{n}_r = b_r^\dagger b_r \quad (3.20)$$

Nas equações (3.7) e (3.8), o autovalor n_r é livre para assumir qualquer valor de 0 a ∞ ao invés de 0 a $2S$. Deste modo, o hamiltoniano H_{t-J} pode ser expresso em termos dos operadores de Bose, passando a ser equivalente ao problema de bósons interagentes:

$$H = -NdJS^2 + 2dJS \sum_r \hat{n}_r + J_{xy}S \sum_{\langle r,r'l \rangle} \left[f_s(\hat{n}_r) a_r f_s(\hat{n}_{r'l}) b_{r'l} + a_r^\dagger f_s(\hat{n}_r) b_{r'l}^\dagger f_s(\hat{n}_{r'l}) \right] - J \sum_{\langle r,r'l \rangle} \hat{n}_r \hat{n}_{r'l} \quad (3.21)$$

e o operador $f_s(\hat{n}_r)$ pode ser expandido como

$$f_s(\hat{n}_r) = 1 - \frac{\hat{n}_r}{4S} - \frac{\hat{n}_r^2}{32S^2} - \dots \quad (3.22)$$

Se restringirmo-nos ao subespaço físico de $2S + 1$ dimensões, este operador pode ser escrito como

$$f_s(\hat{n}_r) = \sum_{m=0}^{2S} d_m(S) \hat{n}_r^m \quad (3.23)$$

Na aproximação linear de ondas de spin para antiferromagnetos, se desprezarmos termos de ordem superior à quadrática em operadores bosônicos, $f_s(\hat{n}_r)$ é aproximadamente 1, e o último termo da Eq.(3.21) desaparece, isto é,

$$H_{LSW} = -NdJS^2 + 2dJS \sum_r \hat{n}_r + J_{xy}S \sum_{\langle r,r'l \rangle} \left(a_r b_{r'l} + a_r^\dagger b_{r'l}^\dagger \right) \quad (3.24)$$

Devido à necessidade de distinção entre as sub-redes, é conveniente que façamos uma transformação canônica, cujo gerador é uma matriz de rotação, no intuito de simplificar a notação. Desta forma, faremos uma rotação de π rad nos spins de uma das sub-redes em torno do eixo-x, obtendo

$$S_j^\pm \rightarrow S_j^\mp, \quad S_j^z \rightarrow -S_j^z, \quad c_{j\sigma} \rightarrow c_{j-\sigma} \quad (3.25)$$

A relação entre os operadores S^+ e S^- e os operadores de desvio de spin é dada por:

$$S^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} a \quad (3.26)$$

$$S^- = \sqrt{2S} a^\dagger \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} \quad (3.27)$$

Da Eq.(3.22) à Eq.(3.27), percebemos que

$$S^+ = a \quad S^- = a^\dagger \quad (3.28)$$

Substituindo a Eq.(3.28) na Eq.(3.2), ficamos com

$$\begin{aligned} H_{t-J} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} (1 - n_{j\sigma}) + h.c. + \\ &+ J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left[- \left(\frac{1}{2} - a_i^\dagger a_i \right) \left(\frac{1}{2} - a_j^\dagger a_j \right) + \frac{1}{2} - (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) - \frac{1}{4} n_i n_j \right] = \\ &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} (1 - n_{j\sigma}) + h.c. + \\ &+ J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left[\frac{1}{2} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) - a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} n_i n_j \right] \end{aligned} \quad (3.29)$$

O fato de termos utilizado teoria linear de ondas de spin permitiu que fizéssemos aproximações de campo médio e, portanto, que considerássemos $\sqrt{1 - \langle a_i^\dagger a_i \rangle} \sim 1$, onde os operadores bosônicos atuam criando e aniquilando desvios da rede ferromagnética (uma vez que fizemos uma rotação de π rad nos spins de uma das sub-redes).

Necessitamos, neste ponto, definir novos operadores para que possamos caracterizar o sistema eletrônico como se este fosse constituído por buracos sem spin e spin independentes de carga. Definindo o operador de criação de hólons

$$h_i^\dagger = c_{i\uparrow} \quad (3.30)$$

onde $c_{i\uparrow}$ atua sobre o espaço de Hilbert original, destruindo um elétron no sítio i com spin \uparrow , isto é, criando um hólón.

Podemos expressar o operador fermiônico que destrói um elétron em um sítio i com spin \downarrow como um operador composto (hólón + spínón),

$$c_{i\downarrow} = h_i^\dagger S_i^+ \quad (3.31)$$

que é o mesmo que destruir um desvio de spin e, em seguida, criar um hólón:

$$c_{i\downarrow} = h_i^\dagger a_i \quad (3.32)$$

Assim, podemos definir os novos operadores:

$$c_{i\downarrow} = h_i^\dagger a_i \quad (3.33)$$

$$c_{i\uparrow} = h_i^\dagger \quad (3.34)$$

$$c_{i\downarrow}^\dagger = a_i^\dagger h_i \quad (3.35)$$

$$c_{i\uparrow}^\dagger = h_i \quad (3.36)$$

Desta forma, o espaço de Hilbert é varrido por três vetores de base por sítio (pois não há dupla ocupação) e mapeado no produto tensorial $|número\ de\ buracos\rangle \otimes |número\ de\ desvios\ de\ spin\rangle$, onde o número de buracos em cada sítio é 0 ou 1 e o desvio de spins $S = \pm \frac{1}{2}$.

Nesta notação de hólons e spínons, existe um spin a cada sítio mesmo na presença de um bu-

raco e operadores de spin e hólons comutam. Mas ao descrevermos o sistema através de bósons sem carga associados aos spins e de férmions sem spin associados às cargas, deparamo-nos com o aumento do espaço de Hilbert, quando comparado ao espaço fermiônico original (com três vetores de base), ou seja, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ e $|0\rangle$. Haverá, então, quatro estados: $|0, \uparrow\rangle$, $|0, \downarrow\rangle$, $|1, \uparrow\rangle$ e $|1, \downarrow\rangle$ onde 0 (1) denota a ausência (presença) de um buraco e \uparrow (\downarrow) denotam a ausência (presença) de um desvio de spin.

Para garantir a dimensionalidade correta do espaço no qual trabalharemos, é necessário que se estabeleça um vínculo proibindo um dos quatro estados acima. Adotaremos a condição de que um hólon e um desvio de spin não podem ocupar um mesmo sítio ao mesmo tempo, eliminando o vetor $|1, \downarrow\rangle$. Formalmente, este vínculo é incorporado ao modelo reescrevendo-se o hamiltoniano com os novos operadores, definidos nas Eqs.(3.33-3.36),

$$\begin{aligned}
 H_{t-J} = & -t \sum_{i,j} \left(1 - a_i^\dagger h_i h_i^\dagger a_i\right) h_i h_j^\dagger a_j \left(1 - h_j h_j^\dagger\right) - \\
 & -t \sum_{i,j} \left(1 - h_i h_i^\dagger\right) a_i^\dagger h_i h_j^\dagger \left(1 - a_j^\dagger h_j h_j^\dagger a_j\right) + \\
 & + J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left[\frac{\alpha}{2} \left(a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j\right) - a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} n_i n_j \right] \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_{t-J} = & -t \sum_{i,j} \left(h_i h_j^\dagger a_j - h_i h_j^\dagger a_j h_j h_j^\dagger - a_i^\dagger h_i h_i^\dagger a_i h_i h_j^\dagger a_j + a_i^\dagger h_i h_i^\dagger a_i h_i h_j^\dagger a_j h_j h_j^\dagger\right) - \\
 & -t \sum_{i,j} \left(a_i^\dagger h_i h_j^\dagger - a_i^\dagger h_i h_j^\dagger a_j^\dagger h_j h_j^\dagger a_j - h_i h_i^\dagger a_i^\dagger h_i h_j^\dagger + h_i h_i^\dagger a_i^\dagger h_i h_j^\dagger a_j^\dagger h_j h_j^\dagger a_j\right) +
 \end{aligned}$$

$$+J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left[\frac{\alpha}{2} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) - a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} n_i n_j \right] \quad (3.38)$$

Desprezando os termos que permitem um hólón e um spínón no mesmo sítio, ficamos com

$$H_{t-J} = -t \sum_{i,j} (h_i h_j^\dagger a_j + a_i^\dagger h_i h_j^\dagger) +$$

$$+J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} h_i h_i^\dagger \left[\frac{\alpha}{2} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) - a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} n_i n_j \right] h_j h_j^\dagger \quad (3.39)$$

Desprezando o termo de cargas, uma vez que nossa aproximação é válida para o limite de baixa dopagem, e substituindo $(h_i h_i^\dagger)$ por $(1 - h_i^\dagger h_i)$, reescrevemos o hamiltoniano como

$$H_{t-J} = -t \sum_{i,j} (h_i h_j^\dagger a_j + h.c.) + \frac{\alpha J}{2} \sum_{i,j} h_i h_i^\dagger (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) h_j h_j^\dagger - \frac{z J N}{4} (1 - \delta)^2 \quad (3.40)$$

onde z é o número de coordenação da rede, δ é a concentração de buracos ($\delta = \langle h_i h_i^\dagger \rangle$).

É interessante que passemos para a representação de momentum. Através de uma transformada de Fourier discreta nos operadores de hólons [23], o operador criação de hólons fica

$$h_j^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) h_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (3.41)$$

De forma análoga, obtemos a transformada para os demais operadores. Substituindo na Eq. (3.40), ficamos com

$$H_{t-J} = -t \sum_{i,j} \left[\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} h_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} h_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_i} a_{\mathbf{p}} + h.c. \right] +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{J(1-\delta)^2}{2} \sum_{i,j} \left[\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} a_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} a_{\mathbf{q}}^\dagger \right] + \\
 & + \frac{J(1-\delta)^2}{2} \sum_{i,j} \left[\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} a_{\mathbf{q}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} a_{\mathbf{k}} \right] \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Como o sítio i é vizinho do sítio j , podemos escrever $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{R}$ e somar no índice i , ou seja, $\sum_i \exp i(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_i = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$. Substituindo na Eq.(3.42), obtemos a expressão no hamiltoniano no espaço de momentum:

$$\begin{aligned}
 H_{t-J} &= -t \sum_{\Delta\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\Delta\mathbf{R}} h_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + h.c. + \\
 & + \frac{J(1-\delta)^2}{2} \sum_{\Delta\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\Delta\mathbf{R}} (a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger) + J_z (1-\delta)^2 \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (3.43)
 \end{aligned}$$

Faremos, agora uma transformação de Bogoliubov, para que os novos operadores em função dos operadores da Eq.(3.43) continuem obedecendo as relações de comutação bosônicas. Definimos, então,

$$\alpha_{\mathbf{q}} = u_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}}^\dagger \quad (3.44)$$

$$\alpha_{\mathbf{q}}^\dagger = u_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger - v_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} \quad (3.45)$$

$$\alpha_{-\mathbf{q}} = u_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger \quad (3.46)$$

$$\alpha_{-\mathbf{q}}^\dagger = u_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}}^\dagger - v_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} \quad (3.47)$$

Para determinar os coeficientes $u_{\mathbf{q}}$ e $v_{\mathbf{q}}$, impomos como condições que estes sejam reais e esféricamente simétricos, obedecendo às relações de comutação de bósons. Desta forma, fica evidente que $|u_{\mathbf{q}}|^2 - |v_{\mathbf{q}}|^2 = 1$. Invertendo as Eqs. (3.44-3.47), encontramos

$$a_{\mathbf{q}} = u_{\mathbf{q}}\alpha_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}}\alpha_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \quad (3.48)$$

$$a_{\mathbf{q}}^{\dagger} = u_{\mathbf{q}}\alpha_{\mathbf{q}}^{\dagger} + v_{\mathbf{q}}\alpha_{-\mathbf{q}} \quad (3.49)$$

$$a_{-\mathbf{q}} = u_{\mathbf{q}}\alpha_{-\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}}\alpha_{\mathbf{q}}^{\dagger} \quad (3.50)$$

$$a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} = u_{\mathbf{q}}\alpha_{-\mathbf{q}}^{\dagger} - v_{\mathbf{q}}\alpha_{\mathbf{q}} \quad (3.51)$$

Substituindo as Eqs. (3.48-3.51) no hamiltoniano (3.43), obtém-se

$$\begin{aligned} H_{t-J} = & t \sum_{\Delta \mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{R}} h_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \left(u_{\mathbf{q}}\alpha_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}}\alpha_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) + h.c. + \\ & + \frac{J(1-\delta)^2}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[\alpha \left[\sum_{\Delta \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{R}} \left(|u_{\mathbf{q}}|^2 + |v_{\mathbf{q}}|^2 \right) + 2zv_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{q}} \right] \left(\alpha_{\mathbf{q}}\alpha_{-\mathbf{q}} + \alpha_{\mathbf{q}}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) + \right. \\ & \left. + \left[2 \sum_{\Delta \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \Delta \mathbf{R}} v_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{q}} + z|u_{\mathbf{q}}|^2 \right] \alpha_{\mathbf{q}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{q}} + \left[2 \sum_{\Delta \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \Delta \mathbf{R}} v_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{q}} + z|v_{\mathbf{q}}|^2 \right] \alpha_{-\mathbf{q}}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{q}} \right] \quad (3.52) \end{aligned}$$

Para simplificar a Eq.(3.52), definimos

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{z} \sum_{\Delta \mathbf{R}} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \Delta \mathbf{R}) \quad (3.53)$$

$$\nu_{\mathbf{q}} = \sqrt{1 - (\alpha\gamma_{\mathbf{q}})^2} \quad (3.54)$$

e através da condição $|u_{\mathbf{q}}|^2 - |v_{\mathbf{q}}|^2 = 1$, juntamente com $\gamma_{\mathbf{q}} (|u_{\mathbf{q}}|^2 + |v_{\mathbf{q}}|^2) + 2zv_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{q}} = 0$, pode-se obter os coeficientes da transformação de Bogoliubov:

$$|u_{\mathbf{q}}| = \left(\frac{1 + \nu_{\mathbf{q}}}{2\nu_{\mathbf{q}}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.55)$$

$$|v_{\mathbf{q}}| = -\text{sgn}(\gamma_{\mathbf{q}}) \left(\frac{1 - \nu_{\mathbf{q}}}{2\nu_{\mathbf{q}}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.56)$$

Vale notar que a anisotropia está imbutida em $\nu_{\mathbf{q}}$ e, por conseguinte, em $v_{\mathbf{q}}$.

Desta forma, o hamiltoniano completo do modelo t - J é dado por

$$H_{t-J} = \frac{zt}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (\gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}}) \alpha_{\mathbf{q}} + h.c. + \alpha J \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{q}} + E_J^0 \quad (3.57)$$

onde $\omega_{\mathbf{q}} = sz(1 - \delta)^2 \nu_{\mathbf{q}}$ é a energia da onda de spin.

Portanto, através deste formalismo de diagonalização parcial, o termo de interação da Eq.(3.57) fornece um termo diagonal do hamiltoniano, dado pela energia de ondas de spin linearizadas e pela energia do estado fundamental. Já a parte cinética desta equação fornece um termo de interação entre hólons e mágnons, similar ao hamiltoniano de Fröhlich, nos remetendo imediatamente ao problema do polaron. A interação de hólons e mágnons é dada pelos elementos da matriz de espalhamento

$$M(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = (\gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}}) \quad (3.58)$$

onde $\gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ e $\gamma_{\mathbf{k}}$ são os fatores de estrutura. Vale observar que a ausência de um termo de hólons livres indica que o hólón só possui dispersão quando cercado por uma nuvem de spínons, o que nos leva a adotar o conceito de polaron de spin.

3.3 Aproximação de Born Auto-consistente (SCBA)

O desenvolvimento da teoria de cordas nos levou a substituir o conceito de partícula pelo conceito de objeto estendido (a corda). Neste contexto, surge o polaron de spin, onde um buraco é cercado (em uma certa amplitude) por um rastro de spins desalinados.

Como já mencionamos, a função de Green nos permite obter diversas informações a respeito do sistema. Podemos calcular a função de Green do sistema, bem como sua auto-energia, através da aproximação de Born auto-consistente (SCBA).

Definindo a função de Green do estado fundamental por:

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \psi_0 | c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \frac{1}{\omega - H + E_0} c_{\mathbf{k}\sigma} | \psi_0 \rangle \quad (3.59)$$

A função de Green que descreve o movimento de um hólón é dada por:

$$G^h(\mathbf{k}, \omega) = \langle 0 | h_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - H + E_0} h_{\mathbf{k}}^{\dagger} | 0 \rangle \quad (3.60)$$

onde o vácuo para operadores de hólons é o estado sem buracos e em relação aos operadores $\alpha_{\mathbf{q}}$ é o estado de Néel quântico,

$$|0\rangle_{spin} = \exp\left(\sum_{\mathbf{q}} \frac{v_{\mathbf{q}}}{u_{\mathbf{q}}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{-\mathbf{q}}^{\dagger}\right) |N\rangle \quad (3.61)$$

e $|N\rangle$ é o estado de Néel clássico. Trabalhando agora com as duas sub-redes, A (spin \uparrow) e B (spin \downarrow), podemos escrever os operadores de criação como:

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{i \in A} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_i} h_i^{\dagger} a_i a_i^{\dagger} + \sum_{j \in B} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_j} h_j^{\dagger} a_j a_j^{\dagger} \right) \quad (3.62)$$

Dado um estado fundamental $|\psi_0\rangle$ com flutuações quânticas, Eq. (3.61), os operadores $a_i a_i^{\dagger}$ e a_j determinam a probabilidade de encontrar um spin "up" nas sub-redes A e B , respectivamente. Considerando este efeito na média, podemos escrever

$$\begin{aligned}
c_{\mathbf{k}\uparrow} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sqrt{1-n_0} \sum_{i \in A} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_i} h_i^\dagger + \sqrt{n_0} \sum_{j \in B} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_j} h_j^\dagger \right) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1-n_0} h_{\mathbf{k},\mathbf{A}}^\dagger + \sqrt{n_0} h_{\mathbf{k},\mathbf{B}}^\dagger \right)
\end{aligned} \tag{3.63}$$

onde $(1 - n_0)$ e n_0 definem as probabilidades de encontrarmos um spin "up" nas sub-redes A e B , respectivamente. Os desvios de spin são dados por $n_0 = \langle a_i a_i^\dagger \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_i^z \rangle \approx 0.2$ em 2D [25]. Assumindo que a orientação do spin removido quando se cria um buraco é irrelevante, o que conta é somente o efeito da propagação do hólón sobre os demais spins durante seu movimento. Assim,

$$\begin{aligned}
G_\uparrow(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{2} \left\{ (1 - n_0) G_{AA}^h(\mathbf{k}, \omega) + n_0 G_{BB}^h(\mathbf{k}, \omega) + \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{1-n_0} \sqrt{n_0} [G_{AB}^h(\mathbf{k}, \omega) + G_{BA}^h(\mathbf{k}, \omega)] \right\}
\end{aligned} \tag{3.64}$$

A função de Green dos hólons pode ser calculada através da equação de Dyson [24], que nos leva à

$$G^h(\mathbf{k}, \omega) = [\omega - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} \tag{3.65}$$

Finalmente, podemos obter a expressão para a auto-energia, calculada diretamente através da SCBA, que é equivalente a série de diagramas da figura 3.1.

A soma destes diagramas em infinita ordem nos leva à seguinte expressão para a auto-energia à temperatura zero:

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{z^2 t^2}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{M^2(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\omega - \omega_{\mathbf{q}} - \Sigma(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \omega_{\mathbf{q}})} \tag{3.66}$$

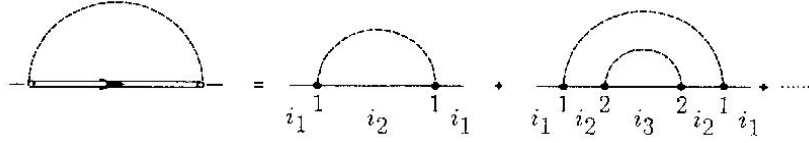


Figura 3.1: SCBA. Propagadores de hólons e de ondas de spin são representados por linhas sólidas e tracejadas, respectivamente. Extraída de Ref. [25].

onde $M(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ é dado pela expressão 3.58.

3.3.1 Polarons de Spin

No problema de um elétron movendo-se em uma rede cristalina, podemos tratar este elétron mais as excitações da rede (fônons) como se fossem uma única partícula. Surge, então, o conceito de polaron: A quase-partícula correspondente a um elétron e os fônons que o cercam. A quase-partícula com a qual estamos trabalhando, possui características semelhantes as de um polaron, daí adotarmos o conceito de polaron de spin para caracterizar um hólton cercado pelas excitações do meio magnético no qual se encontra (spínons).

O polaron de spin é a solução da função espectral, definida como:

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\mathbf{k}, \omega + \mathbf{i}0) \quad (3.67)$$

que produz um estado ligado e um fundo incoerente. Analisando o caminho $\Gamma \rightarrow M \rightarrow X \rightarrow \Gamma$ da figura 3.2(A) e a curva de dispersão 3.2(B), observamos a presença de um mínimo global em $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ e um ponto de sela em $(\pi, 0)$. Isto fica mais claro observando-se a superfície de Fermi 3.3, o plano definido pelo momentum nas direções k_x e k_y nos planos de cobre e oxigênio. Os pontos $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ são regiões onde há um acúmulo de buracos, caracterizando os "hole-pockets". Já o ponto de sela em $(\pi, 0)$ caracteriza a região denominada "pseudogap". Isto está em pleno acordo com espectros de experimentos de fotoemissão com resolução angular (ARPES). É importante ressaltar que, por estarmos interessados na propagação de um buraco, estamos tratando de bandas de buracos ao invés de bandas de elétrons. Então, o nível de Fermi

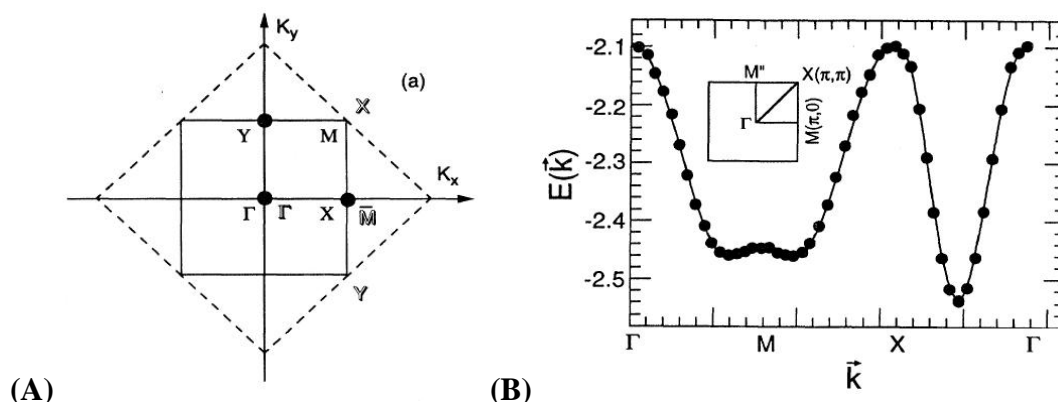


Figura 3.2: (A) Primeira zona antiferromagnética com os pontos do grupo de simetria indicados. (B) Curva de dispersão do buraco ao longo da direção na zona de Brillouin para $J = 0.2$. Extraída da Ref.[3].

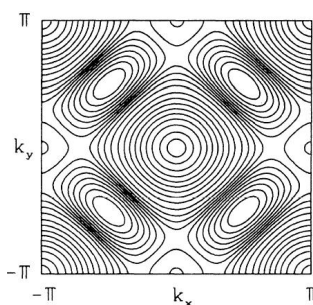


Figura 3.3: Superfície de Fermi. Extraída da Ref.[25].

está situado na menor energia do sistema, isto é, em $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. Assim, se o sistema com uma dopagem maior pudesse ser descrito por um esquema de banda rígida e se as quase-partículas fossem fracamente interagentes (como um gás de elétrons), o preenchimento seria iniciado pelos "hole-pockets" e seguido pelo "pseudogap". (Ver figura 3.2(B)).

3.3.2 Comparação com Diagonalização Exata (ED)

A vantagem do método de diagonalização exata para redes finitas com condições periódicas de contorno consiste no fato de que as aproximações podem ser testadas de forma mais rigorosa. Através de resultados conhecidos da literatura, torna-se evidente a confiabilidade dos métodos.

Como exemplo, podemos citar o estreitamento da banda para o caso $J=0$ predito por Brinkman-Rice por um tratamento analítico, que veremos mais adiante (seção 5.2), em pleno acordo com os resultados numéricos [26]. O mesmo ocorre para a aproximação de Born auto-consistente, cujas soluções têm demonstrado concordância com estudos numéricos de diagonalização exata [26], [27]. Assim, a aproximação de Born auto-consistente parece-nos um método eficiente e confiável para fornecer a energia de quase-partícula do sistema que estamos estudando.

Capítulo 4

Stripes nos Cupratos

Embora não haja uma descrição teórica completa dos cupratos supercondutores, existem diferentes abordagens capazes de caracterizar algumas propriedades físicas destes sistemas, mesmo que de forma qualitativa. Por esta razão, as circunstâncias e mecanismos que levam à fase de stripes constituem um assunto polêmico. Ainda há controvérsias na interpretação de diferentes grupos. No entanto, diferentes técnicas como Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG), Diagonalização Exata (ED) e Hartree-Fock fornecem uma mesma evidência: A existência de stripes, ou configurações eletrônicas inomogêneas de carga e spin.

4.1 Solução de Hartree-Fock de Zaanen/Gunnarsson

Observações experimentais já mostravam a queda abrupta do comprimento de correlação antiferromagnética, além de uma ordem de spin de longo período em sistemas como $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Ao estudarem o efeito da dopagem em cupratos, J. Zaanen e O. Gunnarsson verificaram a tendência de formação de linhas de carga e spin mediante a introdução de buracos, predizendo teoricamente a fase de stripes [6]. Utilizando aproximações Hartree-Fock no modelo de Hubbard de três bandas [18], conseguiram mostrar que havia a condensação dos buracos excedentes em sólitons de carga.

A verificação experimental veio anos mais tarde através de um estudo de espalhamento de nêutrons em $\text{La}_{1.48}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$ [7]. Não demorou muito para que percebessem que soluções de campo médio não eram suficientes para um estudo sistemático capaz de descrever completamente as stripes. Este tipo de aproximação é auto-consistente, fornecendo resultados cuja precisão não pode ser estimada a menos que comparada com outras técnicas.

Na solução Hartree-Fock, as stripes são caracterizadas por um preenchimento de 1 buraco por célula unitária da parede de domínio ("half-filling"), enquanto os experimentos com cupratos a baixas dopagens evidenciam um preenchimento de 1 buraco por duas células unitárias ("quarter-filling").

Para o caso da banda semi-preenchida, os resultados de campo médio são consistentes com resultados numéricos, de forma que as aproximações analíticas apresentam uma aparente eficiência. Entretanto, esta técnica (mesmo sendo boa para descrever tanto o limite de $\frac{U}{t}$ grande quanto pequeno) não permite a inclusão de flutuações quânticas, que são fundamentais para explicar a origem da instabilidade das stripes, o fenômeno de separação spin-carga e, principalmente, para incluir a supercondutividade neste contexto.

4.2 Férmions nodais de Zaanen

Atualmente, J. Zaanen representa um dos principais grupos no estudo de stripes, cuja tentativa é de formular uma teoria que concilie a física das stripes com férmions nodais [28], isto é, a coexistência da ordem de curto alcance com a ordem de longo alcance da teoria BCS. Sua hipótese central consiste em tratar o supercondutor como um condensado de excitações topológicas associadas à fase de stripes. Sob este ponto de vista, o conceito de stripes deve envolver algum tipo de ordem topológica de longo alcance, que seria responsável pelo fenômeno de separação spin-carga, além da ordem de carga e spin que indiscutivelmente ocorre nos cupratos. Segundo Zaanen, stripes dinâmicas são uma visão muito clássica deste fenômeno. Suas suposições consistem na dualidade de estados e competição de ordem: A coexistência de um estado desor-

denado, ou seja, o estado supercondutor, visto como um condensado de excitações topológicas associadas ao estado ordenado (o estado de stripes estáticas).

4.3 Abordagem de Kivelson/Emery

Outro grupo importante no estudo das stripes segue a linha de Kivelson e Emery, argumentando que as stripes surgem da competição entre a separação de fases e as interações coulombianas de longo alcance. Esta visão alternativa baseia-se no modelo de Hubbard ou t - J a baixas dopagens que, na ausência de interações de Coulomb e com os parâmetros da teoria ajustados para incluir a física relevante às stripes, apresenta uma separação de fase em regiões uniformes de alta e de baixa concentração de buracos. Sob este ponto de vista, as stripes são determinadas por processos em grandes escalas de energia e surge a formação de pares como um efeito secundário. Este pareamento estaria associado à transferência de um gap de spin da região de baixa dopagem do diagrama de fases para a região das stripes, seguido de uma transferência de pares entre stripes, o que sugere alguma conexão com a supercondutividade. Desta forma, considerar as stripes como paredes de domínio em antifase consiste em um efeito cinético secundário.

4.4 Outras abordagens: White (DMRG), Dagotto (ED)

Uma das técnicas numéricas para investigar a existência da fase de stripes é o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG) [29, 30]. Estudos do modelo t - J bidimensional para a dopagem $\delta = \frac{1}{8}$ utilizando esta técnica [31] mostram a presença de paredes de domínio separando regiões antiferromagnéticas com uma diferença de fase de π . Além disso, mostram que stripes "bond-centered" (centradas nas cadeias de oxigênio) e "site-centered" (centradas nos átomos de cobre) possuem praticamente a mesma energia, o que sugere que as paredes de domínio podem flutuar na ausência de efeitos de "pinning". No entanto, sob esta abordagem, as forças coulombianas de longo alcance não são necessárias para a formação das paredes de

domínio [34], diferentemente da visão de Kivelson e Emery.

Sendo assim, quando dois buracos são adicionados ao sistema não dopado, há a formação de um par à medida que os buracos se reorganizam localmente, de forma a satisfazer os requisitos para minimizar a energia cinética e a energia de troca proveniente de perturbações ao background [32]. Pela mesma razão energética, ocorre a formação de paredes de domínio à dopagem finita; uma forma de sustentar a diferença de fase de π , reduzir as interações de troca e diminuir a energia cinética transversal dos buracos. Ainda neste contexto, a mudança adequada nos parâmetros do sistema leva a um estado de forte pareamento na ausência de stripes. A mobilidade de pares desestabiliza as stripes, sugerindo competição com a supercondutividade.

Uma técnica alternativa consiste em uma diagonalização exata (ED) do hamiltoniano [27], onde se encontrou pela primeira vez as correlações antiferromagnéticas através do buraco, sugerindo a existência de paredes de domínio em antifase (ADW).

4.5 Paredes de Domínio em Antifase e o Modelo t - J_z (Castro Neto)

Conforme descrito nas seções anteriores, sabe-se que os buracos dopantes nos cupratos tendem a uma auto-organização em paredes de domínio antiferromagnéticas. Para baixas dopagens $x < \frac{1}{8}$, estas paredes de domínio parecem ser "bond-centered", isto é, centradas nos sítios de oxigênio, que ligam dois sítios de cobre. Já para dopagens maiores $x > \frac{1}{8}$ as paredes do domínio aparentam ser "site-centered" (centradas nos sítios de cobre). Entretanto, para $x \sim 0.21$, ambas as stripes "site-centered" e "bond-centered" tornam-se degeneradas [35].

Uma alternativa para estudarmos as stripes em um antiferromagneto é considerá-las como um sistema de excitações compostas hólón-spin-polaron condensadas em uma parede de domínio antifase (ADW) auto-induzida dos spins antiferromagnéticos. Uma figura pictórica da stripe como uma banda unidimensional efetiva de tais excitações (dentro do paradigma de polarons de spin) descreve a excitação de um único buraco como um buraco "vestido" por uma excitação de

spin do tipo corda ("string-like") [37]. Duas destas quase-partículas tendem a formar um estado ligado de simetria de onda- d .¹

Estudos anteriores no modelo t - J com redes pequenas demonstram que as stripes no estado fundamental são paredes de domínio no antiferromagneto de Néel. A criação espontânea das ADW's tem sido considerada como alternativa topológica ao background homogêneo de Néel. Assim, o estado fundamental de muitos buracos torna-se bem diferente do de poucos buracos. Isto é, a tentativa de se generalizar o problema de poucas vacâncias para muitas vacâncias é baseada no fato de que o background antiferromagnético permanece inalterado. Sabe-se, no entanto, que o efeito de feedback dos buracos em um background antiferromagnético é relevante (o movimento dos buracos deixa um rastro de spins desalinhados). O caráter unidimensional das stripes de carga leva a tentativas de generalização da física estritamente 1D (onde as excitações são de hólons e spinons) a dimensões mais altas. Por outro lado, existe um entendimento crescente de que as excitações de carga na fase de stripes têm muito a ver com polarons de spin. Esta seção pretende demonstrar que as stripes podem ser consideradas como um estado ligado coletivo de buracos com uma parede de domínio em antifase auto-induzida. Em tal sistema, as excitações são compostas (hólon-spin-polaron) e populam uma banda unidimensional efetiva.

A aproximação analítica parte do modelo t - J_Z :

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. + J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - \frac{n_i n_j}{4} \quad (4.1)$$

onde t é a energia cinética, J é a energia de troca antiferromagnética. Este modelo é tomado como o limite anisotrópico ($\alpha = 0$) da Eq.(2.11) na ausência de flutuações de spin. A quase-partícula de carga é entendida como um polaron de spin. O movimento de um buraco em um meio antiferromagnético homogêneo é frustrado devido a um rastro de spins desalinhados. A idéia de que a ADW pode ser a configuração mais favorável para buracos baseia-se no fato de

¹A razão pela ausência de pareamento de onda- s é uma troca mediada por um mágnon que gera uma repulsão no canal de onda- s .

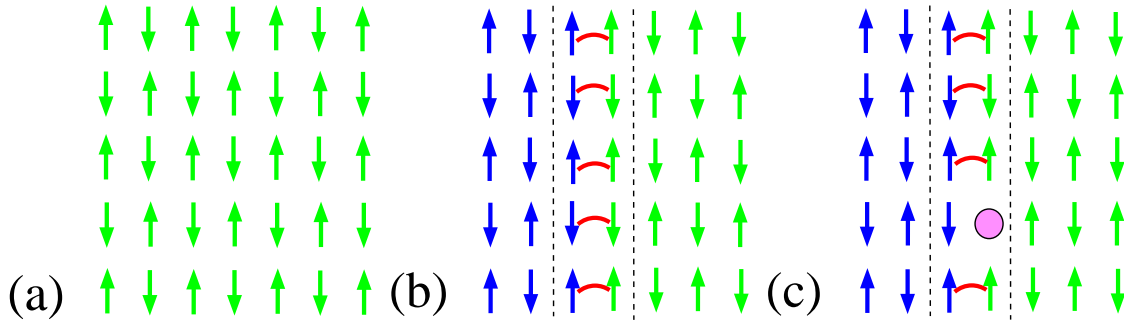


Figura 4.1: (a) Estado de Néel homogêneo. (b) Dois domínios de um antiferromagneto com magnetização oposta separados por uma ADW "bond-centered". (c) Presença de um buraco estático, que é atraído para a ADW. Os arcos denotam ligações ferromagnéticas "erradas". Extraída da Ref.[37].

que tal frustração da energia cinética dos buracos pode ser evitada por um movimento dentro da ADW, de tal forma que o buraco seja essencialmente livre em uma estrutura unidimensional.

4.5.1 Movimento Longitudinal do Hólon na ADW

Como a stripe corresponde a uma ADW em um "background" de spins, quer-se estudar a natureza das excitações de carga em tais paredes de domínio. Então, considerando-se primeiramente o sistema vazio e desprezando-se flutuações de spin, o estado fundamental é dado pela configuração clássica de spins de Néel, conforme Fig.4.1(a). Quando uma antifase é estabelecida entre dois domínios antiferromagnéticos, o estado de menor energia será o de uma ADW "bond-centered" com ligações ferromagnéticas (Fig. 4.1(b)). Agora, supondo que se coloque um buraco estático ($t = 0$) no sistema, ele será atraído para uma ADW pois irá quebrar uma das ligações "erradas" (ferromagnéticas) de forma que haja uma redução de energia (J diminui). Então, considerando um único buraco no sistema, quando a energia cinética é negligenciada, o estado fundamental é definido pela quebra de uma ligação. O buraco é atraído para a parede de domínio porque a energia potencial (termo em J) é diminuída quando o buraco remove uma ligação "errada", pois se o buraco dopante possui primeiros vizinhos anti-paralelos, $S_i^z, S_j^z < 0$ e como $J > 0$ (antiferromagneto), a energia diminui (Fig.4.1(c)).

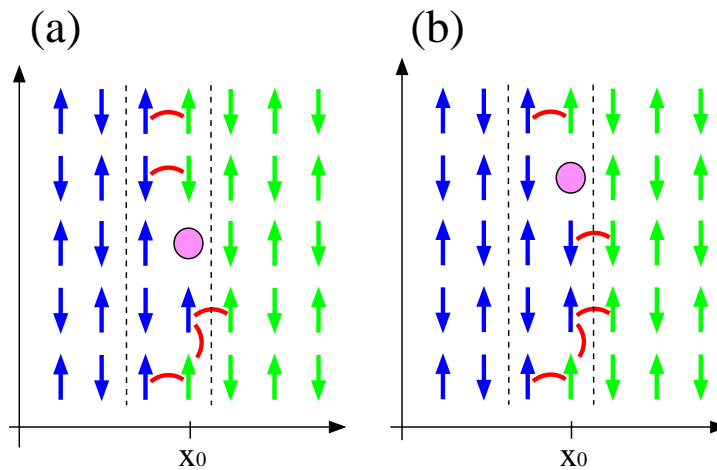


Figura 4.2: Movimento longitudinal do buraco (ao longo da ADW). $x = x_0$ pode ser considerado como uma cadeia de Ising. Extraída da Ref.[37].

Porém, quando a energia cinética é levada em consideração, deve-se fazer as seguintes observações: Se restringirmos o movimento do buraco ao longo da ADW, conforme Fig.4.2, o problema é idêntico ao problema do movimento de um buraco em uma cadeia de Ising unidimensional. Isto é, podemos ver que depois do primeiro passo, um defeito de spin 1D (spínon) é criado e assim o movimento do buraco não causa nenhum distúrbio posterior ao meio de spins.

O buraco simplesmente rearranja as ligações "erradas" enquanto se move por tunelamento. A restrição do movimento do buraco ao longo da ADW é expresso formalmente pela separação do termo de energia cinética do hamiltoniano em uma parte longitudinal e uma parte transversal. O movimento livre do buraco na stripe é do tipo "retraceable-path" Como a carga não carrega nenhuma "memória" sobre o spin do lugar onde ela foi criada, esta excitação é um hólón. Quando o spínon e o hólón são separados, ambos carregam um "kink" ou um "anti-kink" da ordem magnética "staggered". Em outras palavras, eles são ADW's zero dimensionais no problema de cadeia unidimensional, conforme Fig.4.3. É mais conveniente usarmos a magnetização "staggered" ao invés da magnetização on-site para enfatizar a direção oposta do parâmetro de ordem nos domínios antiferromagnéticos de spin.

O fato de que o buraco pode evitar uma frustração de um background antiferromagnético

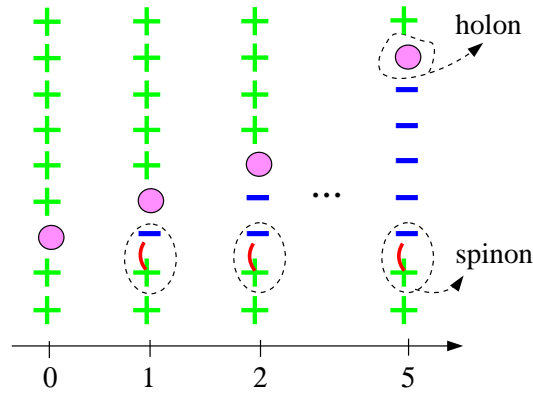


Figura 4.3: Evolução do buraco ao longo da cadeia de Ising gerando uma separação de spinon e hólón. Extraída da Ref.[37].

na presença de uma ADW em comparação ao estado de Néel homogêneo, onde o movimento do buraco sempre leva a um defeito de spin do tipo corda, é conhecida desde a descoberta da fase de stripes. No entanto, isto não é suficiente para justificar a formação de stripes. Este argumento é deduzido do limite não-físico (pois de fato $t > J$) do modelo, $t \ll J$, uma vez que a energia cinética do buraco é menor no estado da ADW do que no estado homogêneo com polaron de spin ($E_{cin}^{ADW} \sim -t$, $E_{cin}^{PS} \sim -\frac{t^2}{J}$). No entanto, o custo de energia da parede de domínio ($E^{DW} \sim \frac{J}{L}$), (L : unidade de comprimento) supera o ganho da energia cinética no limite $t \ll J$. Além disso, o verdadeiro estado fundamental neste limite não é nem a stripe nem o estado de Néel homogêneo com buracos, mas ao invés disto, uma separação de fase entre estados ricos em buracos e estados sem buracos.

Conforme a figura 4.4, para um valor escolhido $\frac{J}{t} = 0.4$, a menor energia do sistema ainda é mais baixa do que a energia da banda semi-preenchida ($E_{semi-prench} = \frac{J}{2} - \frac{4}{\pi}$). Observa-se que esta energia é maior do que a energia do hólón livre ($E_k = 2t \cos k$) e da ordem de t maior do que a energia do sistema de polarons de spin no estado de Néel homogêneo. Portanto, ao comparar a energia do polaron no bulk com a energia de uma stripe estritamente unidimensional, foi verificado que esta não favorece a formação de stripes. Portanto, é necessário que se considere o termo de energia cinética transversal à ADW no hamiltoniano, uma vez que o termo longitudinal por si só não favorece a formação de stripes.

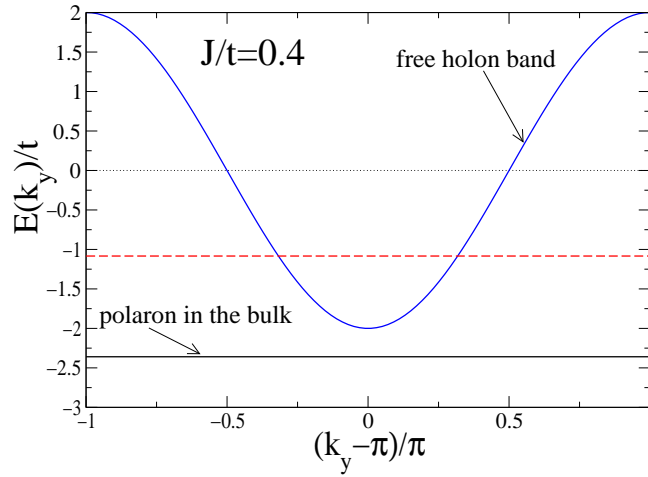


Figura 4.4: Energia do hólon livre (curva sólida), energia por buraco na banda do hólon 1D semi-preenchida (linha tracejada) e a energia do polaron de spin no bulk (indicado). Extraída da Ref.[37].

4.5.2 Movimento Transversal do Hólon na ADW

Primeiramente, consideremos como movimento "transversal" à ADW todos os caminhos possíveis além, é claro, do movimento perpendicular à mesma. Isto é equivalente a um movimento do buraco do tipo "corda". Entretanto, processos de Trugman permitem uma propagação à próximos vizinhos sem que fique um rastro de spins desalinhados no caminho. Se renormalizarmos o movimento "transversal" do buraco a um processo de decaimento da excitação de carga unidimensional em uma excitação de spin unidimensional (spínon) e uma excitação de carga spin-polaron, podemos proibir os processos de Trugman pela condição de conservação dos números quânticos (Fig. 4.6). Isto torna justificável o uso da "retraceable-path approximation". Portanto, a função de Green completa pode ser dada por

$$G_{x_0}(k_y, \omega) = \frac{1}{\omega - 2t \cos k_y - \Sigma(\omega) + i0} \quad (4.2)$$

onde a auto-energia $\Sigma(\omega)$ tem a forma de fração continuada:

$$\Sigma(\omega) = \frac{(z-2)t^2}{\omega - \omega_1 - \frac{(z-1)t^2}{\omega - \omega_1 - \omega_2 - \dots}} \quad (4.3)$$

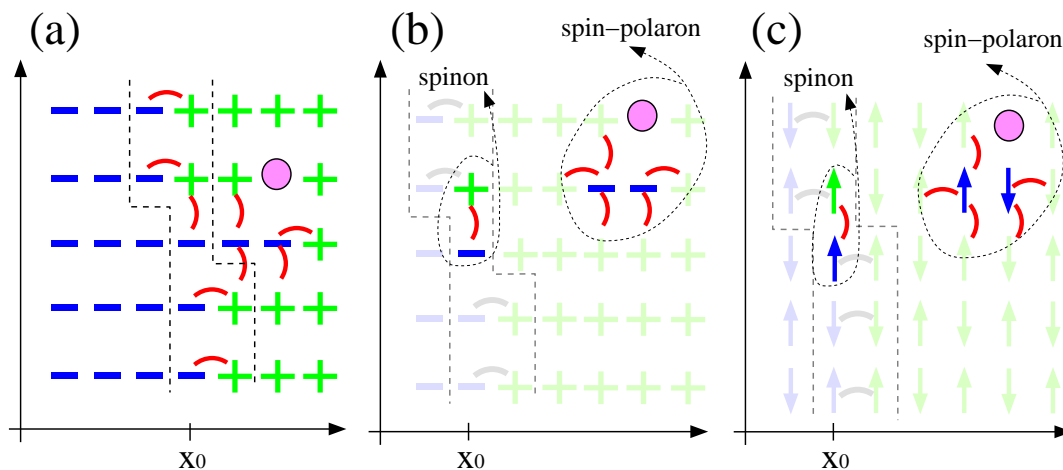


Figura 4.5: **(a)** "String" gerado pelo movimento do buraco perpendicular à ADW. **(b)** Resultado da saída do buraco da ADW. **(c)** O mesmo que (b), porém evidenciando a direção dos spins. Extraída da Ref.[37].

Sob o ponto de vista analítico, isto é equivalente a considerar todas as frequências ω_i idênticas (aproximação de Einstein), de tal forma que a energia do "string" é proporcional ao comprimento do caminho, independentemente do caminho do buraco.

Deste modo, Chernyshev et al. encontram uma configuração favorável à formação de stripes, conforme figura 4.7.

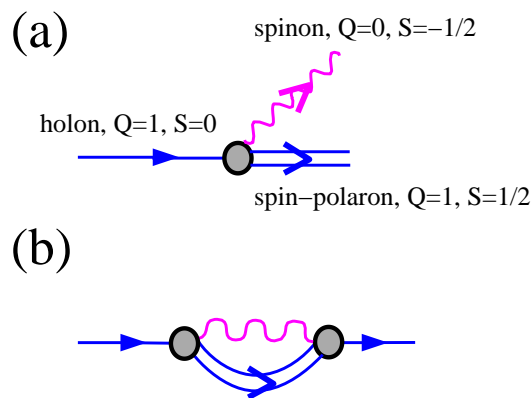


Figura 4.6: (a) Processo de decaimento do hólón em um spínón e um polaron de spin. Observe a conservação dos números quânticos. (b) A auto-energia associada a este processo. Extraída da Ref.[37].

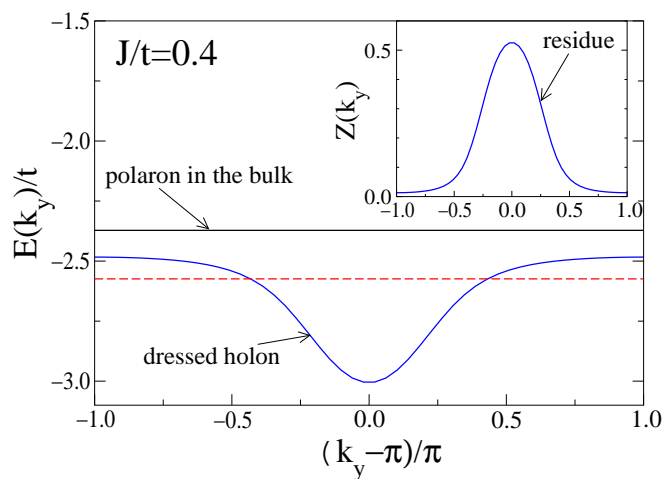


Figura 4.7: Energia de uma excitação elementar da ADW $E(k_y)$ versus k_y . A linha contínua representa a energia do polaron de spin no bulk e a curva sólida, a energia do hólón livre. A energia por buraco na banda do hólón 1D semi-preenchida é representada pela linha tracejada. Extraída da Ref.[37].

Capítulo 5

O Efeito da Anisotropia

5.1 Solução do Modelo $t - J_z$: Reiter (1996)

Utilizando o modelo t - J dentro da aproximação linear de ondas de spin, Starykh e Reiter [39] estudaram o movimento de um buraco em um antiferromagneto de Ising através do método recursivo, também conhecido por técnica de Lanczos. Embora a aproximação linear de ondas de spin não possua justificativa formal para o limite Ising, a física do problema permanece essencialmente a mesma, não constituindo uma aproximação tão drástica. Entretanto, o método recursivo torna-se rapidamente intratável, uma vez que a ação do hamiltoniano em estados com mágnons leva a coeficientes com uma complexa dependência de momentum.

A exceção ocorre justamente para o caso Ising, quando $\alpha = 0$ na Eq.(2.11) e a energia independe dos momenta. Com o objetivo de encontrar uma aproximação alternativa à SCBA, Starykh e Reiter calcularam a energia, omitindo a contribuição de todos os ciclos fechados, ou seja, sob o ponto de vista diagramático, não incluíram as correções de vértice. Isto é equivalente a resolver o problema utilizando uma rede de Bethe ou considerando o limite de dimensão infinita.

Uma vez que tinham uma expressão para o hamiltoniano $t - J_z$ na forma tridiagonal em um espaço varrido por vetores $|n\rangle$, para qualquer vetor deste espaço $|\Psi\rangle = \sum_n \Psi_n |n\rangle$, a equação

de Schrödinger $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ toma a forma

$$(E - a_n)\Psi_n - b_{n-1}\Psi_{n-1} - b_{n+1}\Psi_{n+1} = 0 \quad (5.1)$$

com a condição de contorno $\Psi_0 = 0$ (por construção). Os coeficientes são dados por [39]:

$$a_n = (n - 1)J_z$$

$$b_n^2 = zt^2, \quad \forall n \geq 2 \quad (5.2)$$

No limite de J pequeno e considerando um sistema de muitas partículas, assume-se a aproximação do contínuo, que leva à equação

$$\pm\sqrt{zt}\frac{\partial^2\Psi_n}{\partial n^2} \pm 2\sqrt{zt}\Psi_n + (n - 1)J_z\Psi_n = E\Psi_n \quad (5.3)$$

que é justamente a equação de Schrödinger para o movimento de uma partícula em uma semi-reta $n \geq 0$ submetido a um potencial linear $V(n) = (n - 1)J_z$, cujas soluções são conhecidas. Assim, os valores da auto-energia no fundo da banda (-) apresentam o comportamento $J^{\frac{2}{3}}$:

$$E_n = -2\sqrt{zt} - J_z + \beta_n J_z^{\frac{2}{3}} \left(\sqrt{zt^2}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.4)$$

onde β_n são os zeros da função de Airy.

Por outro lado, utilizando uma aproximação distinta, através da função de Green de um buraco, que possui a forma de fração continuada,

$$G_{11}(\omega) = \frac{1}{\omega - \frac{zt^2}{\omega - J_z - \frac{zt^2}{\omega - 2J_z - \dots}}} \quad (5.5)$$

encontraram como solução:

$$G_{11}(\omega) = \frac{J_z}{\sqrt{zt}} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\omega - E_n} \quad (5.6)$$

onde E_n é dado pela Eq.(5.4), correspondendo ao mesmo resultado da equação de Schrödinger. Este resultado, conhecido como "retraceable-path approximation", já havia sido introduzido por Brinkman-Rice nos anos 70.

5.2 Solução de Brinkman-Rice ($J = 0$)

O problema de um buraco extra no modelo de Hubbard foi extensivamente estudado por Brinkman e Rice [40] em uma formulação baseada no número de caminhos necessários para voltar à origem, deixando a configuração de spins intacta, denominada "retraceable-path approximation" (aproximação de caminhos retrilháveis). Eles calcularam a função espectral para um único buraco no limite atômico do modelo de Hubbard semi-preenchido, no qual a transferência de energia t foi tomada como muito menor do que a repulsão coulombiana U . A análise dos primeiros cinco momentos não nulos indicou um estreitamento da banda da ordem de 20-25% para o caso antiferromagnético. Ou seja, o movimento de um buraco em um antiferromagneto com forte anisotropia Ising produz um rastro de spins desalinhados que confinam o buraco à origem do seu caminho, fazendo com que o movimento do buraco seja completamente incoerente. Entretanto, a aproximação analítica para a função de Green que utilizaram excluía todos os caminhos que representavam um circuito fechado.

5.3 O Modelo $t - J_z$ na Solução SCBA

O modelo $t - J_z$ é o limite de forte anisotropia (Ising) do modelo $t-J$ com $\alpha = 0$ (Eq.(2.11)). Estudos utilizando a aproximação de Born auto-consistente (SCBA) têm demonstrado que esta é uma boa aproximação para prever a energia da quase-partícula, a qual se obtém do limite $\alpha = 0$ da Eq. (3.66). Esta fornece a seguinte equação, independente dos momenta, onde $\omega_0 = 2J_z$:

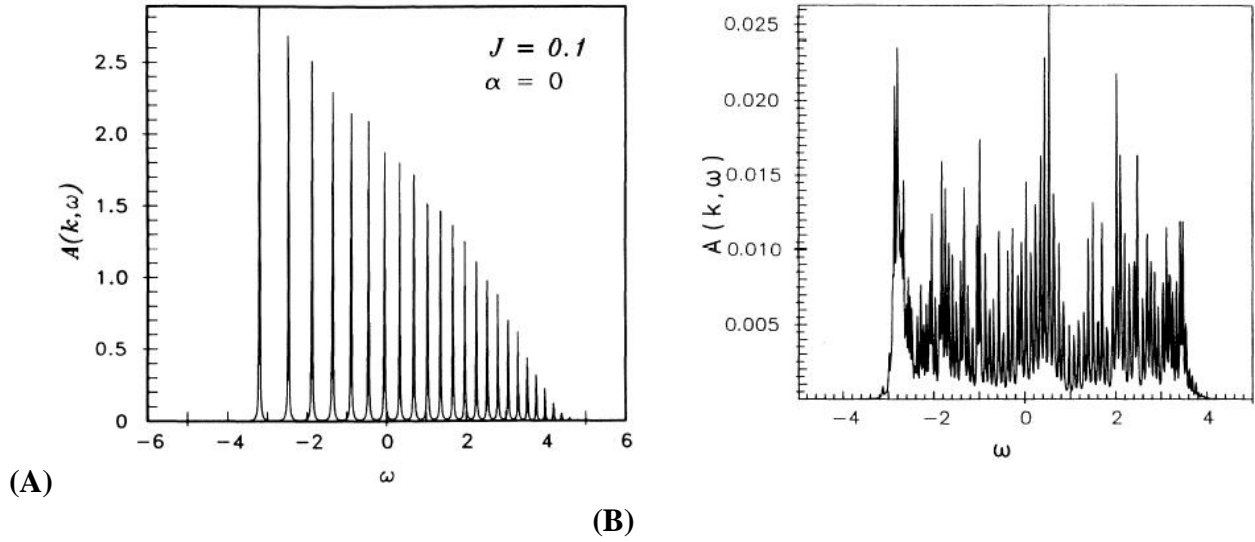


Figura 5.1: **(A)** Solução da Eq. (5.7). **(B)** Solução exata. Extraída da Ref. [25].

$$\Sigma(\omega) = \frac{zt^2}{\omega - \omega_0 - \Sigma(\omega - \omega_0)} \quad (5.7)$$

Esta auto-energia fornece espectros como da figura 5.1 **(A)**, onde observa-se em espectro de escada consistente com a solução de Reiter, Eq. (5.6). Devemos deixar claro que a solução SCBA não é uma solução exata, como pode-se ver na comparação com a figura 5.1 **(B)**. Agora entendemos o motivo desta diferença: A solução SCBA no modelo $t - J_z$ é equivalente à solução de Reiter da seção 5.1 e, portanto, corresponde a processos virtuais que omitem a contribuição de ciclos fechados (como aquele da figura 5.2), chamados de *processos de Trugman*. Estes processos, de sexta ordem em $\frac{t^6}{J^5}$, correspondem a um ciclo e meio ao redor de um "plaquette" $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow i_3 \rightarrow i_4 \rightarrow i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow i_3$, deixando inalterado o entorno de spins alinhados antiferromagneticamente, porém com o buraco deslocado da posição de origem. Esta dispersão ou deslocamento do buraco sem envolver flutuações de spin dá conta da diferença entre a figura 5.1 **(A)**, sem dispersão, e a figura 5.1 **(B)**, onde se observa a formação de um polaron de spin ao redor de $\omega \sim -2.9$.

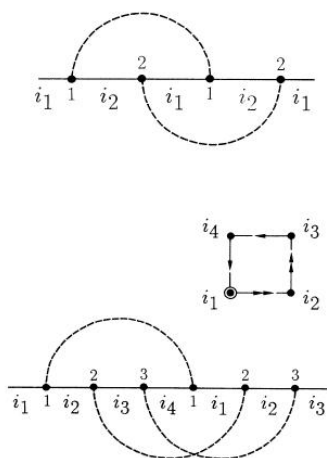


Figura 5.2: Processos de Trugman de quarta e sexta ordem. Este último leva a um deslocamento do buraco quando realiza um movimento de um ciclo e meio ao redor do *plaquette*. Extraída de Ref. [25].

5.4 Procedimento Numérico

O primeiro passo do nosso trabalho foi explorar propriedades de simetria que pudessem minimizar o trabalho, já que deveríamos efetuar uma soma sobre todos os vetores da rede recíproca. O fato de estarmos interessados no movimento de um buraco em um meio antiferromagnético fez com que a primeira zona de Brillouin se reduzisse à primeira zona antiferromagnética, o que ajudou a reduzir o número de pontos que levaríamos em consideração. Além disso, impusemos condições de contorno periódicas ao sistema, de forma que a primeira zona antiferromagnética se reduzisse ainda mais. Outro fator que ajudou a reduzir o número de pontos foi o fato de efetuarmos os cálculos para redes quadradas, explorando também as simetrias provenientes da geometria da rede. Isto fez com que o fator de estrutura dependesse somente dos cossenos das componentes do vetor de onda, e o sistema passasse a apresentar simetria em relação à troca q por $-q$. Existe ainda uma outra simetria: A troca entre si das duas componentes do vetor de onda \mathbf{q} , o que não altera a expressão do fator de estrutura. Vale lembrar que ao utilizarmos estas simetrias devemos sempre ter em mente uma relação entre os pontos da zona irreduzível sobre a qual calcularemos e os pontos da zona que deixamos de fora. Isto

foi desenvolvido mediante uma técnica de "folding" da zona de Brillouin. Assim, a qualquer momento, recuperamos as informações do sistema completo.

Mas há uma característica importante da equação da auto-energia Eq.(3.66) que devemos mencionar. Calcularemos a auto-energia para vetores \mathbf{k} através de uma soma sobre vetores \mathbf{q} . Entretanto, do lado direito desta equação, aparece a auto-energia calculada para $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ e $\omega - \omega_{\mathbf{q}}$, ou seja, para calcular a auto-energia atual, precisaremos sempre de uma auto-energia anterior. Então, se varreremos as frequências da menor para a maior energia, sempre teremos a informação de todas as auto-energias anteriores, podendo calcular a auto-energia atual sem maiores problemas. Portanto, não é necessário resolver este problema de forma rigorosamente auto-consistente, isto é, inserir valores para a auto-energia até atingirmos a convergência. Deste modo, utilizamos a expressão assintótica da auto-energia para frequências que tendem ao infinito, através da expressão assintótica da função de Green (Teorema de Luttinger):

$$\lim_{|\omega| \rightarrow \infty} G(\mathbf{k}, \omega) \sim \frac{1}{\omega}$$

Analisando esta expressão, fica evidente que o limite assintótico da auto-energia é o mesmo da função de Green. Deste modo, ao encontrarmos a frequência que será nosso infinito negativo numérico, definimos que toda auto-energia abaixo deste valor seja nula. Assim, evitamos trabalhar com um método auto-consistente, que requer grandes recursos computacionais. Isto contribuiu para a otimização dos programas, permitindo que utilizássemos redes maiores, usando a linguagem *Fortran 90*.

Feito isso, calculamos a auto-energia para os pontos da zona irreduzível do espaço- \mathbf{k} , desde redes 4x4 até redes 64x64, considerando diferentes valores de anisotropia, desde $\alpha = 0$ (modelo t - J_Z) até $\alpha = 1$ (modelo t - J isotrópico), bem como para diferentes valores da energia de intercâmbio J ($J = 0.01, 0.1$ e 0.3), medidos em unidades de t .

Os resultados que obtivemos para redes de 64x64 podem ser vistos na Fig. 5.3, para $J = 0.3$, na Fig. 5.4 para $J = 0.1$ e na Fig. 5.5 para $J = 0.01$. Como nosso interesse consiste

em investigar as energias mais baixas do sistema, apresentamos apenas os espectros de quase-partícula para o ponto $\mathbf{k} = \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ por ser este um ponto de mínima energia (conforme seção 3.4).

Pelos espectros obtidos, vemos que a descrição do sistema segundo o conceito de quase-partícula é adequada. A presença de um pico com amplitude muito maior do que a amplitude do fundo incoerente é característica de uma quase-partícula. Não obstante, vale observar a ausência de um estado ligado bem separado do fundo incoerente para J muito pequeno. De fato, o conceito de polaron de spin parece ter validade para $0.1 < J < 0.3$, mas não para $J = 0.01$.

5.5 Função Espectral em Função da Anisotropia

Para que pudéssemos extrair informações a respeito do nosso sistema, partimos para a solução numérica da equação da auto-energia:

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{z^2 t^2}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{M^2(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\omega - \omega_{\mathbf{q}} - \Sigma(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \omega_{\mathbf{q}})} \quad (5.8)$$

A função espectral é obtida a partir de

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\mathbf{k}, \omega + \mathbf{i}0)$$

Os resultados para $\mathbf{k} = \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ são mostrados nas figuras 5.3, 5.4 e 5.5.

Nas figuras 5.6 (a) e (b) comparamos o espectro que obtivemos para uma rede 64x64, $\alpha = 1$ e $J = 0.1$ com o resultado obtido através de diagonalização exata para uma rede de 4x4, $\alpha = 1$ e $J = 0.2$ [27]. Embora os cálculos de diagonalização exata sejam efetuados para redes pequenas, ambas as técnicas evidenciam a presença de um estado ligado separado de um fundo. A semelhança destes espectros, obtidos por técnicas distintas, é um indício de nosso método constitui um boa aproximação. A presença de um pseudogap em 5.6(b) pode ser proveniente

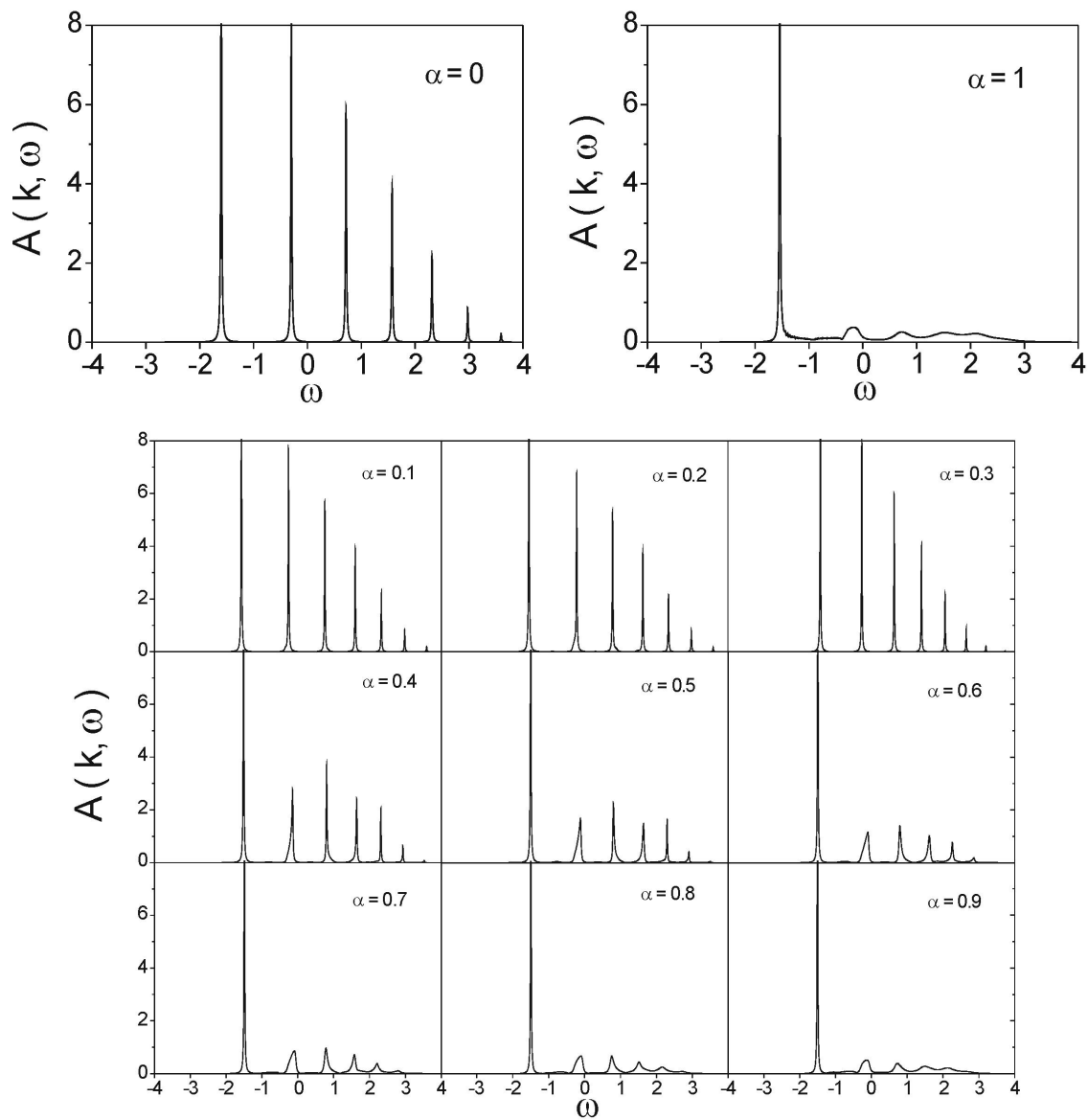


Figura 5.3: Função espectral para $J = 0.3$ em diferentes anisotropias.

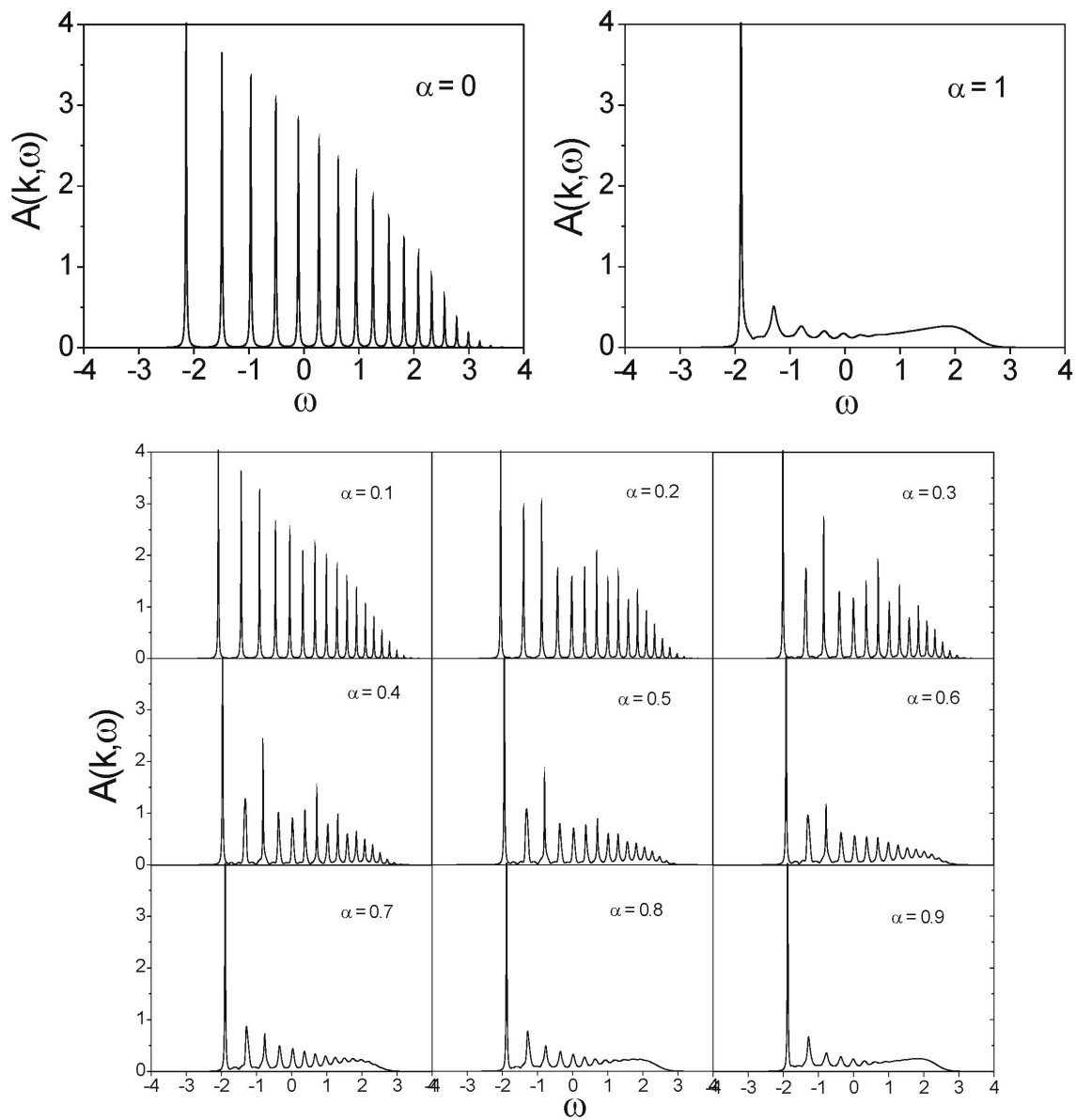


Figura 5.4: Função espectral para $J = 0.1$ em diferentes anisotropias.

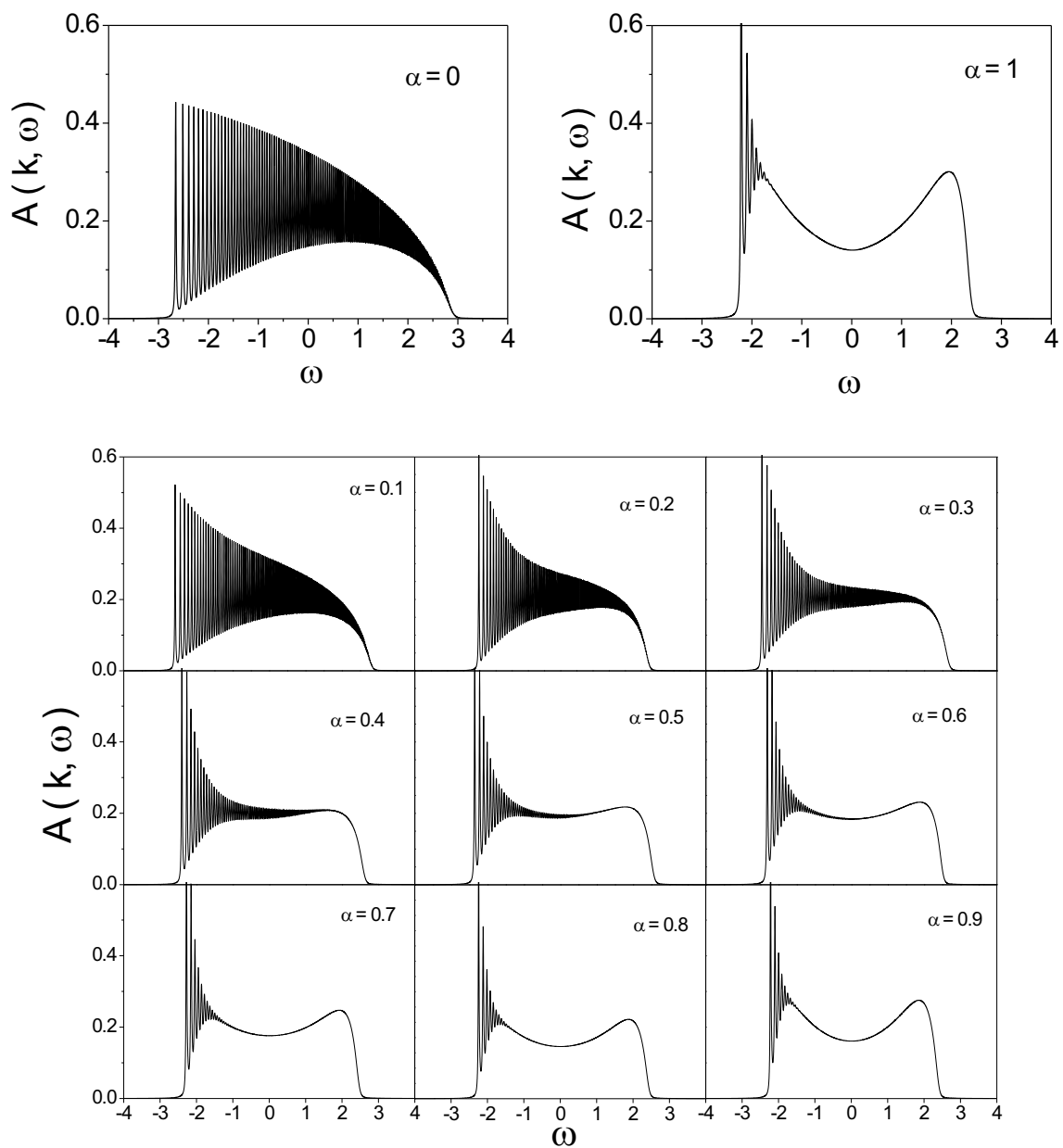


Figura 5.5: Função espectral para $J = 0.01$ em diferentes anisotropias.

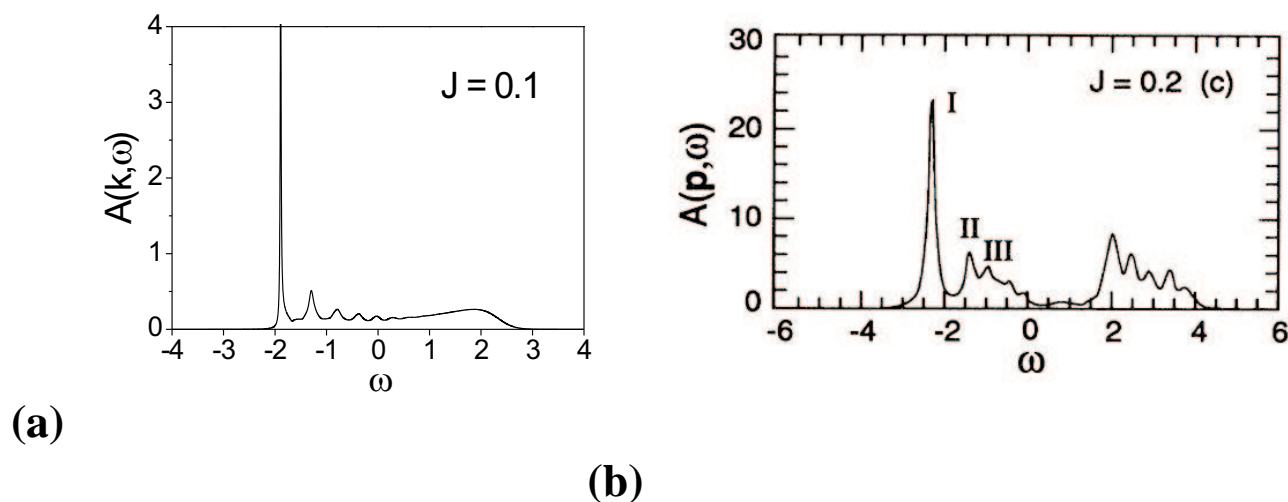


Figura 5.6: (a) Resultado obtido para uma rede de 64x64 através da aproximação de Born. (b) Resultado obtido para uma rede de 4x4 através de diagonalização exata [27].

de efeitos de tamanho finito.

5.6 O Gap de Interação

Após obtermos os espectros de quase-partícula, calculamos primeiramente a relação entre a anisotropia e a diferença energética entre o estado de mais baixa energia e o primeiro estado excitado. É neste contexto que utilizamos a expressão "gap": a diferença de energia entre os dois estados de mais baixa energia do espectro.

Para testar a validade do método numérico, calculamos a auto-energia para os pontos da zona irredutível do espaço-k, desde redes 4x4 (pois estas possuem uma simetria característica que auxiliaria na confiabilidade dos resultados) até redes 64x64, sem a necessidade de testar sistemas maiores, uma vez que os resultados convergiram para a rede 64x64, indicando ser esta uma boa aproximação (ver figura 5.7).

Os resultados para redes de 64x64 são mostrados na figura 5.8. Podemos perceber que o gap espectral se mantém praticamente constante em função da anisotropia.

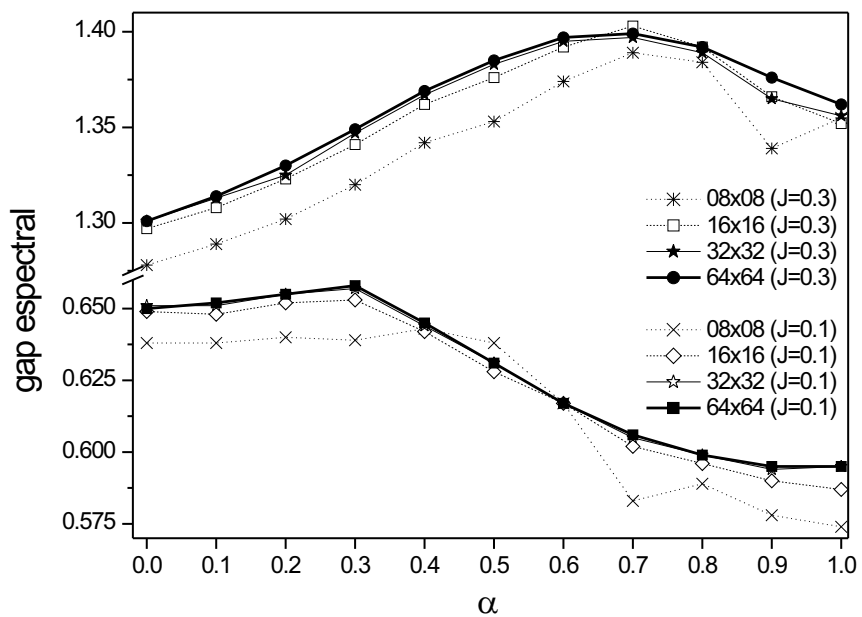


Figura 5.7: Gap espectral em função da anisotropia. Efeito de tamanho finito na medida do gap espectral.

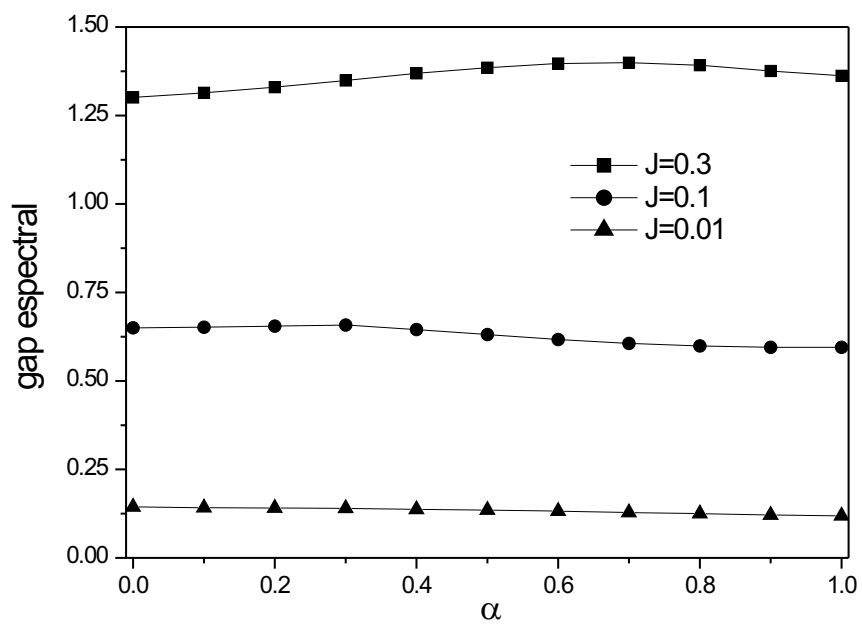


Figura 5.8: Gap espectral em função da anisotropia.

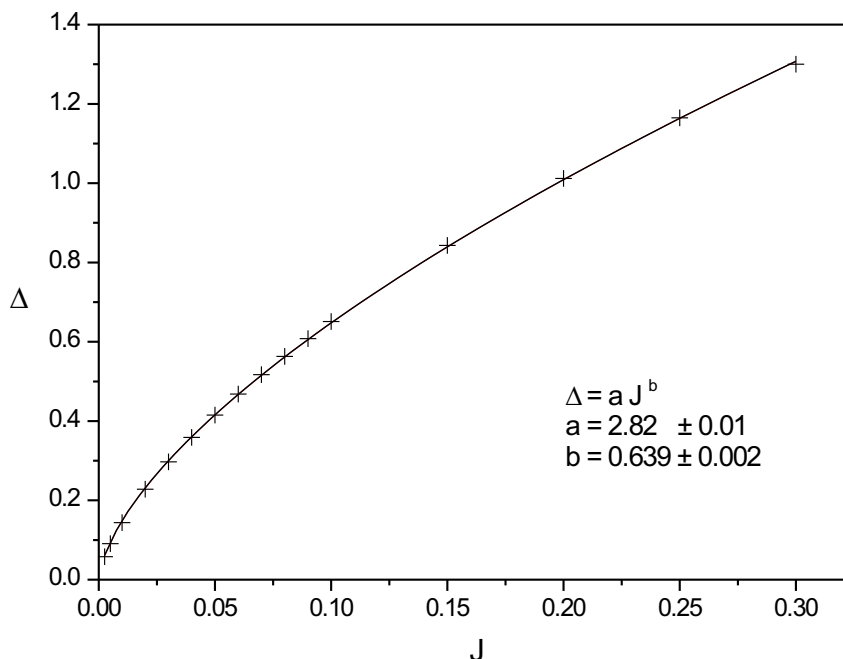


Figura 5.9: Gap espectral (Δ) em função de J . Este resultado é consistente com a relação $\Delta \sim J^{\frac{2}{3}}$ da literatura.

Calculamos também a largura do gap espectral em função de J para $\alpha = 0$. Como podemos ver na Fig. 5.9, obtivemos uma relação da ordem de $J^{\frac{2}{3}}$ com um pré-fator de 2.82 ± 0.01 . Isto está de acordo com resultados já conhecidos da literatura [39].

5.7 Peso Espectral de Quase-partícula

Outro resultado que obtivemos foi o peso espectral de quase-partícula em função da anisotropia, normalizado à 1 pelo peso total do espectro que inclui a parte incoerente de multi-mágnons. O peso espectral foi calculado através da integração numérica do pico de quase-partícula e subsequente ajuste por uma Lorenziana, descontando o fundo de multi-mágnons. Como podemos ver na figura 5.10, o peso praticamente não varia com a anisotropia. Ou seja,

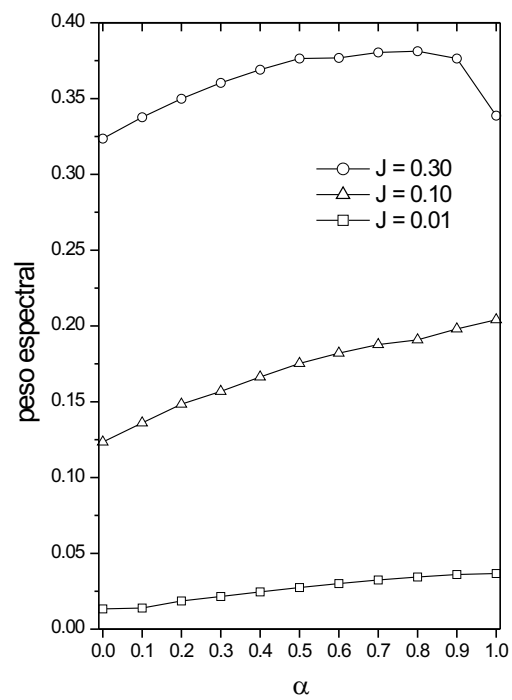


Figura 5.10: Peso espectral em função da anisotropia.

não há transferência de peso espectral na formação do polaron de spin desde $\alpha = 0$ até $\alpha = 1$.

Capítulo 6

Conclusões

Aparentemente, as stripes observadas nos cupratos são uma manifestação da forte correlação presente no sistema. A primeira manifestação vem da correlação antiferromagnética observada em $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ a baixa dopagem, quando as evidências experimentais indicam que as stripes são regiões inhomogêneas de carga e spin da fase antiferromagnética, formando nanoestruturas unidimensionais nos planos de CuO_2 , empilhados de acordo com a configuração cruzada de planos vizinhos ao longo do eixo c . Isto justifica o desdobramento horizontal e vertical dos picos de Bragg no espectro de nêutrons.

Como a stripe é um fenômeno puramente eletrônico, a pesquisa tem se voltado para o estudo de modelos de forte correlação, entre eles o modelo t - J , por representar o espectro de baixas energias do modelo de Hubbard. Por esta razão, mesmo na questão ainda em aberto do modo ressonante de 41 meV, foi tomada uma explicação usando flutuações de spin baseada no modelo t - J .

Acreditamos que novas manifestações fenomenológicas surgirão na física dos cupratos para evidenciar ainda mais a presença de flutuações de spin no estado supercondutor.

A observação de um picode quase-partícula mais um espectro incoerente, correspondente às excitações de multi-mágnons, deixa claro que o problema não pode ser estudado dentro do paradigma do líquido de Fermi. Conseqüentemente, achamos consistente o estudo de modelos

como o de Hubbard de 1 banda, Hubbard de 3 bandas, além é claro do modelo $t - J$.

Zaanen e Gunnarsson [6] estudaram estes sistemas no modelo de Hubbard utilizando o método de Hartree-Fock irrestrito em cluster finitos, ou seja, a ocupação em cada sítio foi encontrada explicitamente de forma a minimizar a energia total. Este método fornece a carga e a orientação do spin em cada sítio, o que permitiu que encontrassem stripes verticais, diagonais e circulares. Esta predição teórica feita em 1989 foi verificada experimentalmente em 1995.

Sob o ponto de vista da aproximação de Born auto-consistente (SCBA), a caracterização de quase-partículas para um buraco no modelo $t-J$ está em pleno acordo com resultados obtidos através de diagonalização exata [25]. Não obstante, também foram encontradas recentemente stripes no modelo $t-J$ através de grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG) para dopagens finitas.

Sob o ponto de vista de resultados obtidos por cálculos de Dagotto et al. [33], o método recursivo no modelo $t-J$ evidencia correlações antiferromagnéticas através da posição do buraco, o que é um indício de formação de uma ADW ou antifase. Entretanto, mesmo com estas técnicas disponíveis, os modelos estudados ainda não constituem uma boa descrição, pois soluções numéricas em pequenos clusters, como DMRG e diagonalização exata, são fortemente dependentes das condições de contorno e a extração de informações relevantes no limite termodinâmico representa um grande desafio.

Em uma tentativa de minimizar este efeito, White [34] coloca condições periódicas ou moduladas de contorno, conseguindo assim, eliminar parcialmente os efeitos de tamanho finito. Isto abriu caminho para novos estudos [37], impondo a presença de uma parede de domínio em antifase (ADW) como condição inicial, sem maiores preocupações com o motivo do surgimento da mesma. Esse resultado parece indicar uma instabilidade das excitações elementares ("hólons vestidos") na presença de uma ADW, ao menos quando não há flutuações de spin.

O que fizemos neste trabalho foi desenvolver um estudo da anisotropia no modelo $t-J$ utilizando a aproximação de Born auto-consistente, em uma tentativa de prover novas perspectivas para estudos futuros. O objetivo deste estudo foi identificar o efeito das flutuações de spin

no espectro de quase-partícula. Conhecendo as soluções analíticas apresentadas na literatura (Brinkman-Rice e Reiter), fizemos uma análise das propriedades espectrais de uma partícula variando a anisotropia de 0 à 1, isto é, estudamos o efeito da anisotropia magnética nas soluções do modelo $t-J_z$ ao $t-J$ isotrópico. A formação do polaron de spin foi uma parte importante do nosso interesse neste estudo.

Através da análise das curvas obtidas no nosso tratamento numérico, pôde-se verificar claramente que, para uma energia de intercâmbio fixa, o peso espectral não varia com a anisotropia, embora a física encontrada seja completamente diferente, como descrito nesta dissertação.

Concluimos que a função espectral quando $\alpha = 0$ (solução de "string"), que é equivalente à solução do potencial linear da equação de Schrödinger unidimensional, produz um estado ligado sem dispersão. O polaron de spin forma-se a partir do estado de mais baixa energia desta solução "string". Ao ligar as flutuações de spin, um estado ligado separa-se por um gap espectral do fundo de multi-mágnons (espectro incoerente). Isto é mais evidente quando J é muito pequeno, embora não pudemos atingir o limite $J = 0$ e $t = 0$, pois fizemos perturbações em $\frac{t}{J}$.

O gap espectral de quase-partícula praticamente não varia com a anisotropia, lembrando que definimos gap espectral como a diferença energética entre o estado de mais baixa energia e o primeiro estado excitado da solução de "string".

O peso espectral também não varia apreciavelmente com a anisotropia. Quando não há dispersão ($\alpha = 0$) o sistema independe dos momenta. À medida que incluímos as flutuações de spin adiabaticamente, surge uma dispersão que aumenta com α . Entretanto, o fundo de multi-mágnons acompanha este deslocamento, mantendo o gap espectral praticamente constante.

Se o peso espectral não varia com a anisotropia, o primeiro pico da solução de "string" vira um polaron de spin praticamente sem mudar seu caráter analítico, isto é, o polaron de spin é uma delta de Dirac para valores entre $0.1 < J < 0.3$. Em outras palavras, não há transferência de peso espectral na região válida para os cupratos, o que significa que a formação do polaron

de spin surge a partir da solução analítica de Reiter (Eq.5.6).¹

Portanto, comprova-se numericamente que deve haver uma conexão analítica da solução de "string" do modelo $t-J_z$ com o polaron de spin do modelo $t-J$ na região de parâmetros dos cupratos, justificando assim o tratamento do movimento transversal do hólón na ADW sem flutuações de spin ($t-J_z$) apresentado no capítulo 4 [37]. Isto nos faz pensar que uma expansão da anisotropia em primeira ordem em α [41] com uma ADW seria de grande valia para estudos futuros sobre stripes, recuperando as flutuações de spin no sistema, tão importantes para descrever a física dos cupratos supercondutores como indicado no capítulo 1, *verbi gratia*: o aparecimento do modo ressonante de 41 meV.

¹Este aspecto parece deixar de ser válido para $J = 0,01$ ou menores. Porém, dada a extensão do problema, este estudo poderia dar origem a uma outra dissertação. Este problema equivale a entender a extensão da solução de Reiter ($t-J_z$) para Brinkman-Rice ($J=0$).

Referências Bibliográficas

- [1] BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Z. Phys. B*, Berlin, v. 64, n. 2, p. 189-193, Sept. 1986.
- [2] DAI, P.; CHAKOUMAKOS, B. C.; SUN, G. F.; WONG, K. W.; XIN, Y.; LU, D. F. Synthesis and neutron powder diffraction study of the superconductor $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8-\delta}$ by Tl substitution. *Physica C*, Amsterdam, v. 243, n. 3/4, p. 201-206, Mar. 1995.
- [3] DAGOTTO, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, Woodbury, v. 66, n. 3, p. 763-840, July 1994.
- [4] CHOI, H. J.; ROUNDY, D.; SUN, H.; COHEN, M. L.; LOUIE, S. G. The origin of the anomalous superconducting properties of MgB_2 . *Nature*, London, v. 418, n. 6899, p. 758-760, Aug. 2002.
- [5] EMERY, V. J.; KIVELSON, S. A.; TRANQUADA, J. M. Stripe phases in high-temperature superconductors. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, Washington, v. 96, p. 8814-8817, 1999.
- [6] ZAAANEN, J.; GUNNARSSON, O. Charged magnetic domain lines and the magnetism of high- T_c oxides. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 40, n. 10, p. 7391-7394, Oct. 1989.
- [7] TRANQUADA, J. M.; STERNLIEB, B. J.; AXE, J. D.; NAKAMURA, Y.; UCHIDA, S. Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors. *Nature*, London, v. 375, p. 561-563, 1995.

- [8] TRANQUADA, J. M.; AXE, J. D.; ICHIKAWA, N.; NAKAMURA, Y.; UCHIDA, S.; NACHUMI, B. Neutron-scattering study of stripe-phase order of holes and spins in $\text{La}_{1.48}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 54, n. 10, p. 7489-7499, Sept. 1996.
- [9] ZACHAR, O. Stripes formation: antiphase and in-phase domain walls. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 65, n. 17, p. 174411 11p., May 2002.
- [10] YAMADA, K.; LEE, C. H.; KURAHASHI, K.; WADA, J.; WAKIMOTO, S.; UEKI, S.; KIMURA, H.; ENDOH, Y.; HOSOYA, S.; SHIRANE, G.; BIRGENEAU, R. J.; GREVEN, M.; KASTNER, M. A.; KIM, Y. J. Doping dependence of the spatially modulated dynamical spin correlations and the superconducting-transition temperature in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 57, n. 10, p. 6165-6172, Mar. 1998.
- [11] MOODENBAUGH, A. R.; XU, Y.; SUENAGA, M.; FOLKERTS, T. J.; SHELTON, R. N. Superconducting properties of $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 38, n. 7, p. 4596-4600, Sept. 1988.
- [12] DAI, P.; MOOK, H. A.; HAYDEN, S. M.; AEPPLI, G.; PERRING, T. G.; HUNT, R. D.; DOAN, F. The magnetic excitation spectrum and thermodynamics of high-Tc superconductors. *Science*, Washington, v. 284, p. 1344-1347, May 1999.
- [13] LANDAU, L. D. The theory of a Fermi liquid. *Sov. Phys.-JETP*, New York, v. 3, n. 6, p. 920-925, Jan. 1957.
- [14] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc. A*, London, v. 276, n. 1365, p. 238-257, Nov. 1963.
- [15] LIEB, E. H.; WU, F. Y. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension *Phys. Rev. Lett.*, New York, v. 20, n. 25, p. 1445-1448, June 1968.

- [16] ANDERSON, P. W. New approach to the theory of superexchange interactions. *Phys. Rev.*, New York, v. 115, n. 1, p. 2-13, July 1959.
- [17] ANDERSON, P. W. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, Washington, v. 235, n. 4793, p. 1196-1198, Mar. 1987.
- [18] EMERY, V. J. Theory of high- T_c superconductivity in oxides. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 58, n. 26, p. 2794-2797, June 1987.
- [19] ZHANG, F. C.; RICE, T. M. Effective hamiltonian for the superconducting Cu oxides. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 37, n. 7, p. 3759-3761, Mar. 1988.
- [20] RICE, T. M. Lectures on high T_c and related topics. In: WINTER WORKSHOP ON CONDENSED MATTER PHYSICS, 3., 1989, Puri, India. *Electronic correlation and disorder effects in metals*. Singapore: World Scientific, 1991. p. 186-254.
- [21] LUTTINGER, J. M. An exactly soluble model of a many-fermion system. *J. Math. Phys.*, New York, v. 4, n. 9, p. 1154-1162, Sept. 1963.
- [22] MANOUSAKIS, E. The spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides. *Rev. Mod. Phys.*, Woodbury, v. 63, n. 1, p. 1-62, Jan. 1991.
- [23] FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. *Quantum theory of many-particle systems*. New York: McGraw-Hill, 1971.
- [24] MATTUCK, R. D. *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*. New York: Dover, 1992.
- [25] MARTÍNEZ, G.; HORSCH, P. Spin polarons in the t-J model. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 44, n. 1, p. 317-331, July 1991.

- [26] SZCZEPANSKI, K. J. van; HORSCH, P.; STEPHAN, W.; ZIEGLER, M. Single-particle excitations in a quantum antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 41, n. 4, p. 2017-2029, Feb. 1990.
- [27] DAGOTTO, E.; MOREO, A.; JOYNT, R.; BACCI, S.; GAGLIANO, E. Dynamics of one hole in the t-J model. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 41, n. 4, p. 2585-2588, Feb. 1990.
- [28] ZAAANEN, J.; NUSSINOV, Z. Stripes and nodal fermions as two sides of the same coin. Disponível em: <<http://lanl.arXiv.org/abs/cond-mat/?0006193>>. Acesso em: 25 mar. 2003.
- [29] WHITE, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 69, n. 19, p. 2863-2866, Nov. 1992.
- [30] WHITE, S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 48, n. 14, p. 10345-10356, Oct. 1992.
- [31] WHITE, S. R.; SCALAPINO, D. J. Density matrix renormalization group study of the striped phase in the 2D t-J model. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 80, n. 6, p. 1272-1275, Feb. 1998.
- [32] WHITE, S. R.; SCALAPINO, D. J. Competition between stripes and pairing in a t-t'-J model. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 60, n. 2, p. R753-R756, July 1999.
- [33] MARTINS, G. B.; GAZZA, C.; XAVIER, J. C.; FEIGUIN, A.; DAGOTTO, E. Doped stripes in models for the cuprates emerging from the one-hole properties of the insulator. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 84, n. 25, p. 5844-5847, June 1998.
- [34] WHITE, S. R.; SCALAPINO, D. J. Energetics of domain walls in the 2D t-J model. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 81, n. 15, p. 3227-3230, Oct. 1998.

- [35] LORENZANA, J.; SEIBOLD, G. Metallic mean-field stripes, incommensurability, and chemical potential in cuprates. *Phys. Rev. Lett.*, Melville, v. 89, n. 13, p. 136401 4p., Sept. 2002.
- [36] CASTRO NETO, A. H. Stripes, vibrations and superconductivity. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 64, n. 10, 104509 26p., Sept. 2001.
- [37] CHERNYSHEV, A. L.; WHITE, S. R.; CASTRO NETO, A. H. A stripe as an effective one-dimensional band of composite excitations. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 65, n. 21, p. 214527 19p., June 2002.
- [38] TRUGMAN, S. A. Interaction of holes in a Hubbard antiferromagnet and high-temperature superconductivity. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 37, n. 4, p. 1597-1603, Feb. 1988.
- [39] STARYKH, O. A.; REITER, G. F. Hole motion in the ising antiferromagnet: an application of the recursion method. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 53, n. 5, p. 2517-2522, Feb. 1996.
- [40] BRINKMAN, W. F.; RICE, T. M. Single-particle excitations in magnetic insulators. *Phys. Rev. B*, New York, v. 2, n. 5, p. 1324-1338, Sept. 1970.
- [41] CHERNYSHEV, A. L.; LEUNG, P. W. Holes in the t - J_z model: a diagrammatic study. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 60, n. 3, p. 1592-1606, July 1999.