



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Estudo do magnetismo diluído no modelo de Hubbard repulsivo sobre uma rede de Lieb

Lucas Oliveira Lima

Teresina-PI
2019

Estudo do magnetismo diluído no modelo de Hubbard repulsivo sobre uma rede de Lieb

Lucas Oliveira Lima

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Piauí como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física da Matéria Condensada.

Orientador

José Pimentel de Lima - DF-UFPI

Coorientador

Natanael de Carvalho Costa - SISSA-ITA

Teresina-PI

2019

FICHA CATALOGRÁFICA

Serviço de Processamento Técnico da Universidade Federal do Piauí
Biblioteca Setorial de Ciências da Natureza - CCN

L732e Lima, Lucas Oliveira.
Estudo do magnetismo diluído no modelo de Hubbard repulsivo sobre uma rede de Lieb / Lucas Oliveira Lima. – Teresina: 2019.
50 f. il.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Piauí, Centro de Ciências da Natureza, Pós-graduação em Física, 2019.

Orientador: Prof. Dr. José Pimentel de Lima.

Coorientador: Natanael de Carvalho Costa.

1. Matéria Condensada. 2. Magnetismo Diluído. 3. Modelo de Hubbard. 4. Teorema de Lieb. 5. Monte Carlo Quântico Determinantal. I. Título.

CDD 530.41

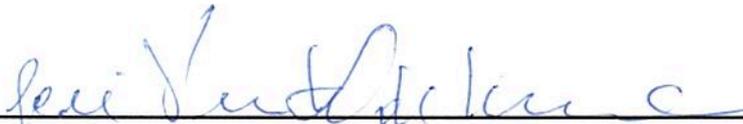
Bibliotecária: Caryne Maria da Silva Gomes CRB3-1461

“ESTUDO DO MAGNETISMO DILUÍDO NO MODELO DE HUBBARD REPULSIVO SOBRE UMA REDE DE LIEB “

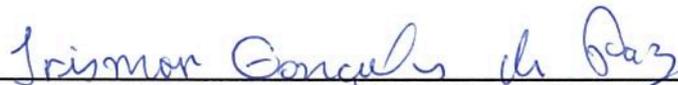
Lucas Oliveira Lima

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Natureza - CCN/UFPI.

Comissão Julgadora:



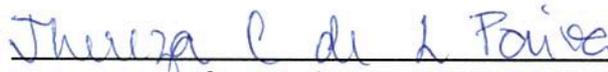
Prof. Dr. José Pimentel de Lima(Orientador)



Prof. Dr. Irismar Gonçalves da Paz/UFPI



Prof. Dr. Eduardo Costa Girão/UFPI



Prof^ª. Dr^ª. Thereza Cristina de Lacerda Paiva/IF-UFRJ

Aprovada em 17/05/2019

Agradecimentos

Agradeço a Deus, como acredito ser eterno e imutável. Agradeço a Ele pelo dom da Vida e pela família que tenho.

Aos meus pais, João Lima e Francisca Maria, por todo apoio, carinho, atenção e amor dedicado a mim desde o início de minha vida. Sou profundamente grato, em especial, a minha mãe, por sempre me confortar com suas palavras maravilhosas nas horas de fraqueza. Agradeço ao meu irmão, João Paulo, pelo apoio e incentivo.

Agradeço a minha fiel companheira, Wellynne Carla. Seu apoio, carinho e conselhos foram muito importantes durante essa etapa.

Um agradecimento especial ao meu orientador José Pimentel de Lima pelos ensinamentos e discussões durante o período da pesquisa e, de modo geral, pelas excelentes e edificantes aulas durante o curso de pós-graduação.

Agradeço também ao meu coorientador Natanael de Carvalho Costa pela proposição do problema abordado nesta dissertação e pela dedicada e excelente orientação neste trabalho. Pela recepção e atenção dada a mim durante o período de estudos no Instituto de Física da UFRJ.

Ao professor Raimundo Rocha dos Santos pela recepção e preciosas sugestões neste trabalho durante o tempo que estive no Instituto de Física da UFRJ.

Aos amigos do curso de mestrado, em especial a Maria Lúcia. Ao amigo Sebastião Júnior (IF-UFRJ) e a todos os colegas que compõem a Sala 01, pelos momentos de descontração.

À UFPI e ao IF-UFRJ, pela estrutura física. À CAPES e FAPERJ pelo suporte financeiro.

Resumo

Hamiltonianas de modelos *tight-binding* descrevem uma variedade de fenômenos físicos complexos, como magnetismo, que só podem ser compreendidos em sistemas fortemente correlacionados através da introdução de uma interação entre elétrons. Nesse contexto, Lieb demonstrou que a Hamiltoniana de Hubbard em geometrias bipartidas (em dimensão qualquer) com um número desigual de sítios nas sub-redes e no regime de banda semipreenchida ($\rho = 1$) possui um estado fundamental com spin total não nulo, na presença de interação eletrônica U homogênea nos sítios. Isto é, o sistema é ferromagnético para qualquer valor de $U > 0$. Em vista disso, investigamos nesta dissertação propriedades fundamentais de sistemas magnéticos para além do escopo do teorema de Lieb. Consideramos o modelo de Hubbard repulsivo em regime de banda semipreenchida na rede de Lieb (uma rede quadrada decorada nas ligações, similar aos planos de CuO_2 em supercondutores de alta temperatura, onde os sítios d ocupam os vértices de um quadrado de lado unitário e os sítios p ficam a meia distância dos sítios d) fazendo-se diluição aleatória no valor local da interação U , com probabilidade f para $U = 0$ e $(1 - f)$ para $U = 4$ nos sítios da rede. Para esta finalidade, usamos o método de Monte Carlo quântico determinantal para resolver exatamente o problema dos elétrons interagentes em redes quadradas de tamanho linear $L \leq 8$ e analisamos os efeitos da diluição no ordenamento magnético através das funções de correlação spin-spin e da magnetização nas duas sub-redes. Observamos que os efeitos da presença de sítios diluídos com $U = 0$ levam ao aumento da probabilidade de dupla ocupação dos sítios, inibindo a formação de momento local e, conseqüentemente, levando à destruição da ordem ferromagnética de longo alcance para um valor crítico de diluição $f_{\text{crit}} \approx 0.55$. Este valor é muito maior que o limiar de percolação clássico da rede. A análise das sub-redes evidencia o papel fundamental dos sítios p na observação e persistência da ordem de longo alcance no sistema.

Palavras-chave: Magnetismo diluído, modelo de Hubbard, teorema de Lieb, Monte Carlo quântico determinantal.

Abstract

Tight-binding hamiltonians describe a variety of complex phenomena, such as magnetism, which is only understood in strongly correlated systems, by introducing a interaction between electrons. In this context, Lieb demonstrated that the Hubbard Hamiltonian in bipartite geometries (in any dimension) with an unequal numbers of sites in the sublattices, and in the half-filled band regime ($\rho = 1$), exhibits a ground state with nonzero total spin, in presence of homogeneous electronic interaction U on the sites. That is, the system is ferromagnetic for any value of $U > 0$. In this dissertation, we investigate fundamental properties of magnetic systems beyond the scope of Lieb's theorem. We consider the repulsive Hubbard model in the half-filled band regime on the Lieb's lattice (a square lattice decorated in the bonds, similar to the CuO_2 planes in high temperature superconductors, where d sites occupy the vertices of an unit side square and p sites are halfway away from d ones) performing random dilution at the local value of the interaction U , with probability f for $U = 0$ and $(1 - f)$ for $U = 4$. To this end, we use the determinant quantum Monte Carlo method to solve exactly the problem of interacting electrons in lattices with linear size $L \leq 8$, and analyzed the effects of dilution in the magnetic order through the spin-spin correlation functions and magnetization in two sublattices. We observed that the presence of diluted sites with $U = 0$ lead to an increase in the probability of double occupancy, inhibiting the formation of local moment and, eventually, leading to the destruction of the long-range ferromagnetic order for a critical dilution $f_{\text{crit}} \approx 0.55$. This value is much higher than the classical percolation threshold for this lattice. The analysis of the sublattice shows the fundamental role of the p -sites in the observation and persistence of the long-range order in the system.

Keywords: Diluted magnetism, Hubbard model, Lieb's theorem, determinant quantum Monte Carlo.

Sumário

Introdução	1
1 Sistemas magnéticos diluídos	5
1.1 Diluição e o fenômeno da percolação	5
1.2 Efeitos da diluição <i>quenched</i> por sítio em sistemas magnéticos	6
2 Magnetismo no modelo de Hubbard	9
2.1 A Hamiltoniana de Hubbard	9
2.1.1 Simetrias	11
2.2 O Teorema de Lieb	14
3 Magnetismo diluído na rede de Lieb	16
3.1 Magnetismo na rede de Lieb	16
3.2 Magnetismo diluído na rede de Lieb	19
4 Conclusões e perspectivas	28
A Monte Carlo quântico determinantal	30
A.1 O Método	30
A.2 Simulação computacional	32
Referências Bibliográficas	39

Lista de Figuras

Figura 1	(Adaptada da Ref. [12]) Relação de dispersão para a geometria de Lieb como função do momento \mathbf{k} . Observe que na banda <i>flat</i> tem-se $E(\mathbf{k}) = 0$.	2
Figura 2	(Adaptada das Ref. [19–21], respectivamente) Ilustração dos resultados experimentais para a geometria de Lieb (a) como uma rede fotônica, onde a região destacada representa a célula unitária da rede produzida experimentalmente, (b) como uma rede óptica, onde as machas em cor azul representam os sítios da rede de Lieb, e em (c) como uma rede eletrônica, onde os pontos em cor vermelha e azul representam os sítios de uma célula unitária da rede.	2
Figura 1.1	Representação esquemática do conceito de percolação pela diluição de uma rede quadrada removendo-se aleatoriamente os sítios A (\bullet). Se existem apenas pequenos <i>clusters</i> finitos desconectados, de modo que $p < p_c$, em que p_c é o limiar de percolação ou concentração crítica, como em (a), temos um sistema sem percolação. Havendo a formação de um <i>cluster</i> de sítios A conectados infinitamente, de modo que $p > p_c$, temos um sistema com percolação, como mostrado em (b).	6
Figura 1.2	(Adaptada da Ref. [30]) Ilustração do diagrama de fases para o modelo de Ising tridimensional com diluição <i>quenched</i> por sítio. O ponto p_c^s é a concentração crítica e a partir deste, há um <i>cluster</i> de sítios ocupados conectados infinitamente na abordagem do limite termodinâmico.	7
Figura 1.3	(Adaptada da Ref. [39]) Comportamento do parâmetro de ordem antiferromagnético m como função da fração f de sítio diluídos com $U = 0$, em densidade eletrônica $\rho = 1$. <i>Inset</i> , o gráfico da análise de escala de tamanho finito do fator de estrutura antiferromagnético como função do inverso do tamanho de rede. As frações $f = 0.0$, $f = 1/8$ e $f = 1/2$ correspondem aos símbolos (\blacktriangle), (\blacksquare) e (\bullet), respectivamente.	8
Figura 2.1	Superfície de Fermi para vários preenchimentos de banda em uma rede quadrada com <i>hopping</i> de primeiros vizinhos. Observe que na banda semipreenchida ($\rho = 1$), a superfície de Fermi é <i>nested</i>	10

Figura 2.2	(Adaptada da Ref. [6]) Resultados para o modelo de Hubbard em duas dimensões usando (a) método de campo médio, exibindo fases em regiões bem definidas e (b) Monte Carlo quântico, que exhibe apenas duas fases. Note em (b) a ausência de ordem ferromagnética. A fase antiferromagnética continua presente em $\rho = 1$, mas em uma região bem restrita.	10
Figura 2.3	Exemplos de geometrias bipartidas: (a) rede quadrada, (b) rede <i>honeycomb</i> e (c) rede de Lieb, sendo esta última a geometria de interesse neste trabalho.	12
Figura 3.1	(a) Ilustração da rede usada na prova original do teorema de Lieb; conhecida como rede de Lieb. Os sítios d ocupam os vértices de um quadrado de lado unitário enquanto os sítios p ficam a meia distância entre os sítios d . A partir da caixa em cor vermelha - (a), temos em (b) a representação de uma célula unitária da rede (três sítios por célula) com a linha contínua indicando as possibilidades de <i>hopping</i> . Entre os sítios $p \leftrightarrow d$ têm-se $t \neq 0$ e $t' = 0$ entre sítios iguais.	17
Figura 3.2	(Adaptada da Ref. [28]) (a) Comportamento do parâmetro de ordem ferromagnético global m_F como função do valor da repulsão Coulombiana U/t_{pd} . A linha horizontal tracejada (em preto) corresponde ao limite de Heisenberg. Em (b) tem-se o comportamento do parâmetro de ordem individual em cada sub-rede como função dos valores da repulsão Coulombiana U/t_{pd}	18
Figura 3.3	(Adaptada da Ref. [28]) (a) Comportamento do parâmetro de ordem ferromagnético global como função do valor da repulsão Coulombiana U_p/t_{pd} obtido para $U_d = 0$ e em (b) o comportamento do parâmetro de ordem individual em cada sub-rede como função dos valores de repulsão Coulombiana U_p/t_{pd} obtido para $U_d = 0$	19
Figura 3.4	Comportamento do momento local como função do inverso da temperatura para os sítios d e p na rede de Lieb de tamanho linear $L = 5$ sob diferentes frações de diluições. Observe que o momento local médio para os sítios d é bem menor que a média para os sítios p	21
Figura 3.5	Comportamento do fator de estrutura magnético para $\mathbf{q} = (0, 0)$ como função do inverso da temperatura para diferentes tamanhos de redes finitas L e diluições f . Observa-se os efeitos da diluição aleatória nas correlações entre os spins. O aumento da fração de diluição aumenta a probabilidade de dupla ocupação inibindo a formação de momento local nos sítios da rede. As linhas sólidas são apenas um guia para os olhos.	21

Figura 3.6	Análise de escala de tamanho finito para $S(0, 0)$ como função do inverso do tamanho linear da rede para diferentes frações de diluição f de acordo com a Eq. (3.9). O coeficiente linear de cada reta representa o valor médio do parâmetro de ordem (magnetização) ao quadrado, m_F^2 . Observe que a ordem ferromagnética é suprimida para $0.50 < f_{\text{crit}} < 0.55$	23
Figura 3.7	Comportamento do parâmetro de ordem (magnetização) como função da fração de diluição feita nos sítios de diferentes tamanhos de rede. Observe que o aumento da fração de diluição diminui a magnitude da magnetização do sistema. A linha sólida é apenas um guia para os olhos.	23
Figura 3.8	Comportamento do fator de estrutura magnético individual para as correlações pp , pd e dd em uma rede de tamanho $L = 8$ e diferentes frações de diluição f . As correlações pp são intensas comparadas as demais, justificado uma maior contribuição à formação de momento local devido ao sítios p	25
Figura 3.9	Análise de escala de tamanho finito para os valores dos fatores de estrutura individuais (a) S_{dd}^F , (b) S_{pd}^{AF} e (c) S_{pp}^F como função do inverso do tamanho linear das redes para diferentes frações de diluição f de acordo com a Eq. (3.9). Observe como o aumento da fração de diluição nos sítios suprime, de forma crescente, as correlações entre os spins. Em (a) a magnetização é rapidamente suprimida para as correlações dd , com $f_{\text{crit}}^{dd} < 0.20$. As correlações pp , em (c), são dominantes no sistema, com supressão da magnetização para $0.50 < f_{\text{crit}}^{pp} < 0.55$	26
Figura 3.10	Comportamento das magnetizações individuais nos sítios como função da fração de diluição. Observe a rápida supressão da magnetização individual m_{dd}^F . As magnetizações m_{pd}^{AF} e m_{pp}^F persistem para diluições mais altas, sendo esta última dominante no sistema. As linhas sólidas são apenas um guia para os olhos.	26
Figura A.1	Representação dos campos $s_i(l)$ em processo de inversão da orientação do spin via método DQMC com o uso do algoritmo de Metropolis.	33

Introdução

Em alguns sólidos, o processo de interação Coulombiana elétron-elétron não pode ser desprezado, pois leva ao surgimento de fenômenos complexos, como magnetismo. Nesse contexto, surgiram algumas tentativas para explicar a origem do ordenamento ferromagnético, como feito por Heisenberg [1]. Ele percebeu que o ferromagnetismo era um fenômeno intrinsecamente quântico, e na sua abordagem partiu da representação de que os elétrons estavam localizados em orbitais atômicos. Por tratamento perturbativo, ele obteve um termo que representava uma “interação de troca” entre os spins, a qual determinava as propriedades magnéticas do sistema. Embora seja um importante modelo na tentativa de compreensão do magnetismo, o modelo de Heisenberg não fornece uma descrição adequada de ferromagnetos elementares, como o ferro e o cobre, pois são metais [2].

Nesse contexto, o modelo de Hubbard [3] surge como uma tentativa de descrever, de forma simplificada, o ferromagnetismo por meio dos efeitos de correlações eletrônicas nos orbitais d em metais de transição, a partir do estudo de Hamiltonianas *tight-binding* com a introdução de uma interação Coulombiana U entre elétrons. Na ausência de interação elétron-elétron, $U = 0$, a Hamiltoniana de Hubbard exibe paramagnetismo, como consequência do princípio de exclusão de Pauli [4,5]. Em princípio, a introdução da interação U não favorece qualquer tipo de ordenamento magnético [2]. De acordo com a teoria de campo médio, o estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard em uma rede quadrada prevê a ocorrência de ambas as ordens de longo alcance ferromagnética e antiferromagnética, com cada vetor de onda ocupando regiões bem definidas e simétricas no diagrama de fases em um plano $U/t \times \rho$ [6,7]. Entretanto quando a análise é feita com métodos mais acurados, como Monte Carlo quântico ou abordagens generalizadas de Hartre-Fock [8,9], essa ordem ferromagnética deixa de ser prevista.

A dificuldade em obter ferromagnetismo na Hamiltoniana de Hubbard levou à necessidade de análises mais cuidadosas e rigorosas. O primeiro resultado rigoroso sobre ferromagnetismo na Hamiltoniana de Hubbard foi fornecido por Nagaoka [10], que lida com a situação limitante na qual a densidade eletrônica é inferior ao da banda semipreenchida ($\rho = 1$) e a interação Coulombiana é muito forte [2]. Outro resultado rigoroso importante e que é um dos focos desta dissertação, foi provado por Lieb [11] em 1989. Ele demonstrou que o estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard em geometrias bipartidas (em dimensão qualquer) com um número desigual de sítios ($\mathcal{N}_A \neq \mathcal{N}_B$) nas duas sub-redes (\mathcal{A} e \mathcal{B}) tem um spin total não nulo, $S = |\mathcal{N}_A - \mathcal{N}_B|/2$ por célula unitária. O teorema de Lieb impõe restrições à geometria usada na prova deste, que são: o valor da interação Coulombiana U é o mesmo em todos os sítios nas duas sub-redes, o *hopping*

só é permitido entre primeiros vizinhos de sub-redes opostas e o termo de potencial químico deve ser nulo, de modo que sob essas condições a Hamiltoniana de Hubbard possui simetria partícula-buraco, que será explicada com mais detalhes na [Subseção 2.1.1](#).

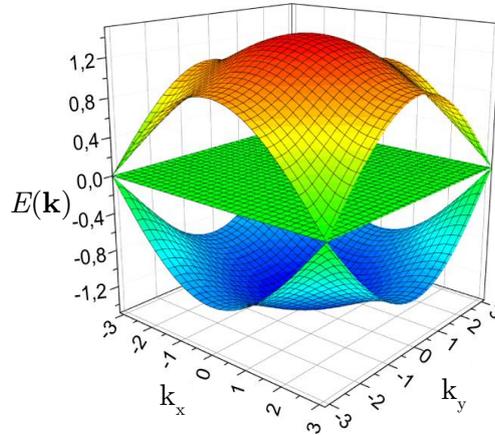


Figura 1: (Adaptada da Ref. [12]) Relação de dispersão para a geometria de Lieb como função do momento \mathbf{k} . Observe que na banda *flat* tem-se $E(\mathbf{k}) = 0$.

Uma outra característica importante (e que é uma das rotas de estudos sobre ferromagnetismo) a respeito da geometria de Lieb é que uma de suas bandas espectrais não possui dispersão, isto é, apresenta uma banda de Bloch com espectro de energia $E(\mathbf{k})$ independente do momento \mathbf{k} e composta de autoestados localizados, formando uma banda *flat* [13]. A [Figura 1](#) ilustra a relação de dispersão para a geometria de Lieb como função do momento \mathbf{k} . Observe que na banda *flat*, a densidade eletrônica pode variar sem custo energético, pois $E(\mathbf{k}) = 0$.

O ferromagnetismo de banda *flat* foi estudado primeiramente por Lieb [11] e subsequentemente por Tasaki e Mielke [2, 13–17]. Considerada originalmente como uma conveniência teórica útil para a obtenção de soluções analíticas exatas sobre ferromagnetismo, as bandas *flats* foram observadas em várias configurações, variando de sistemas eletrônicos a gases atômicos ultrafrios e dispositivos fotônicos. [18]. Sob abordagens teóricas [22, 23], a geometria de Lieb teve seu estudo

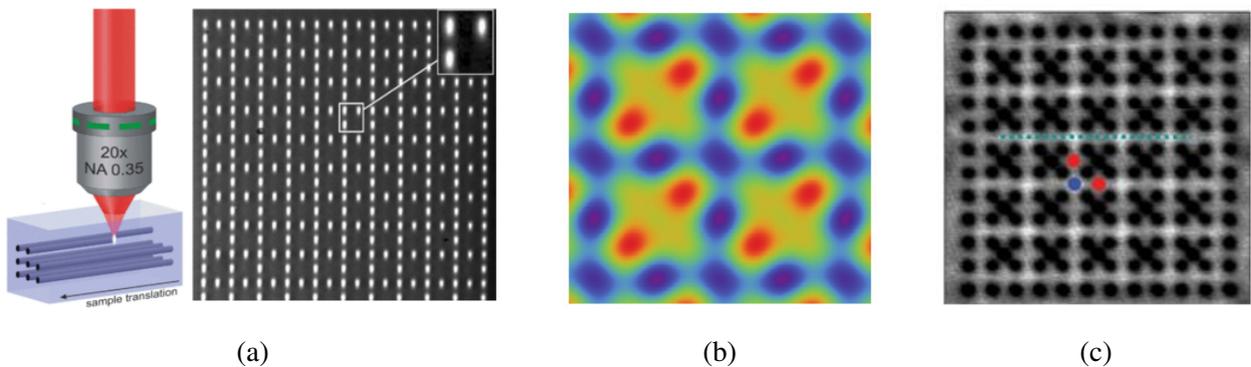


Figura 2: (Adaptada das Ref. [19–21], respectivamente) Ilustração dos resultados experimentais para a geometria de Lieb (a) como uma rede fotônica, onde a região destacada representa a célula unitária da rede produzida experimentalmente, (b) como uma rede óptica, onde as machas em cor azul representam os sítios da rede de Lieb, e em (c) como uma rede eletrônica, onde os pontos em cor vermelha e azul representam os sítios de uma célula unitária da rede.

aprofundado, e com alguns efeitos de repulsão U no sítio foi estudada via abordagens da teoria de campo médio dinâmico (DMFT) [24, 25]. No contexto experimental, a geometria de Lieb tem sido realizada como uma rede fotônica [19, 26], como uma rede óptica [20, 27] e mais recentemente como uma rede eletrônica [21], como podemos ver na **Figura 2 (a)**, **Figura 2 (b)** e **Figura 2 (c)**, respectivamente.

Com o objetivo de estudos e análises mais acuradas, investigações a respeito da existência de ferromagnetismo na rede de Lieb têm sido feitas usando o método de Monte Carlo quântico determinantal (DQMC), que resolve exatamente o problema de elétrons interagentes em redes de tamanho linear finito. Por meio de “alterações” em uma das restrições impostas pelo teorema, por exemplo, permitindo que o valor da interação Coulombiana U nos sítios d (cobre) seja diferente do valor nos sítios p (oxigênio), Costa *et al.* [28] observaram a existência de ferromagnetismo para além das premissas do teorema, concluindo que os sítios p têm um papel fundamental na observação e manutenção da ordem ferromagnética de longo alcance. Em vista disso, a proposta de uma análise dos efeitos de uma diluição aleatória no valor da interação U torna-se pertinente, e é a ideia central abordada nesta dissertação.

A motivação para a investigação do papel da diluição aleatória pode ser entendida e modelada como a presença de impurezas não magnéticas no sistema, o que leva a caracterização de um sistema mais “realista”. Desse ponto de vista, a formação e manutenção do momento local produzido pelos spins nos sítios da rede possibilita a correlação entre eles, o que nos permite a análise dos efeitos da diluição aleatória no ordenamento magnético a partir do decaimento espacial das correlações de spin e análise do parâmetro de ordem nas sub-redes, possibilitando assim, uma melhor compreensão dos aspectos físicos fundamentais sobre sistemas de elétrons fortemente correlacionados. Uma outra observação importante seria a verificação da fração de diluição que afetaria a ordem magnética, com uma estimativa do ponto de transição de fase com base na fração de diluição crítica antes que o sistema deixe de exibir ordem ferromagnética de longo alcance. Do ponto de vista experimental, a realização de uma rede de Lieb sob tais condições de diluição, proporcionaria uma possibilidade de manutenção do ordenamento magnético através do controle da diluição por meio da presença de átomos não magnéticos fazendo o papel das impurezas.

Por meio de simulações do método DQMC em redes quadradas de tamanho linear finito $L \leq 8$, apresentamos nesta dissertação resultados referentes à análise do estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard para o caso repulsivo quando uma diluição no valor da interação Coulombiana U é feita de forma aleatória com probabilidade f para $U = 0$ e $(1 - f)$ para $U = 4$ nos sítios da rede de Lieb em regime de banda semipreenchida ($\rho = 1$ - evitando o problema do sinal negativo em análises a temperaturas muito baixas) através das funções de correlação spin-spin e da magnetização nas duas sub-redes. Com base na presente discussão, esta dissertação tem seus capítulos organizados da seguinte maneira: no **Capítulo 1** são apresentadas as informações básicas, tipos de diluições e a análise dos efeitos provocados pela diluição *quenched* por sítio em sistemas magnéticos clássicos e quânticos. No **Capítulo 2** é apresentada a Hamiltoniana de Hubbard e suas principais características e simetrias de interesse para o problema abordado aqui, e em seguida o texto é encerrado com a discussão sobre o teorema de Lieb. No **Capítulo 3** apresenta-se os resulta-

dos para o estudo do magnetismo diluído na rede de Lieb e no **Capítulo 4** são apresentadas nossas conclusões e perspectivas. Por fim, a dissertação é encerrada com o **Apêndice A**, que apresenta detalhes sobre o método de simulação computacional usado aqui.

Capítulo 1

Sistemas magnéticos diluídos

A inserção de impurezas em um sólido cristalino leva a classificá-lo como uma estrutura diluída (desordenada) de forma substitucional [29]. Nessa classificação, com relação aos sistemas magnéticos, é feita a substituição de átomos magnéticos por átomos não magnéticos (impurezas), de modo que as interações entre eles afetam as propriedades magnéticas do sólido diluído [30]. Nesse contexto, existem dois modelos de diluições: *annealed* e *quenched*. Apresentamos neste capítulo as definições das diluições *annealed* e *quenched* e com foco neste último caso, abordamos as características e efeitos das diluições por sítio em sistemas físicos clássicos e quânticos, com foco no fenômeno da percolação.

1.1 Diluição e o fenômeno da percolação

Quando analisamos modelos de sistemas magnéticos diluídos, precisamos distinguir se tais diluições foram feitas nos estados de spins ou se foram realizadas na localização e interação destes, as quais representam modelos de diluição *annealed* e *quenched*, respectivamente. A diluição *quenched* é caracterizada quando as médias das configurações assumidas pelo sistema são independentes das médias térmicas. Por exemplo, em um ferromagneto diluído os átomos magnéticos e não magnéticos estão posicionados aleatoriamente na rede (independentemente da temperatura assumida pelo sistema) de modo que a probabilidade de um determinado sítio ser ocupado por um spin é independente de outras ocupações e permanece constante ao longo da análise. Por outro lado, quando as variáveis de desordem, bem como os valores das componentes de spin nos sítios magnéticos são governados de acordo com o fator de Gibbs, temos o caso de diluição *annealed* [30]. Neste trabalho, não abordamos os aspectos da diluição *annealed*, e informações mais detalhadas podem ser obtidas na Ref. [30].

Para um caso simples de diluição magnética do tipo substitucional, podemos considerar um composto com fórmula $A_p B_{1-p} C$, onde átomos não magnéticos do tipo B substituem átomos magnéticos do tipo A , em um magneto puro AC , até uma determinada concentração p de átomos magnéticos restantes. Dessa forma, os átomos magnéticos e os não magnéticos são reorganizados de maneira a ocupar posições aleatórias na rede do cristal regular, caracterizando um caso particu-

lar da diluição substitucional: a diluição por sítio [30]. Magnetos com diluição *quenched* por sítio apresentam o fenômeno da percolação [31–36]. Para introduzir esse conceito, considere uma rede quadrada, como mostrada na Figura 1.1, que foi diluída removendo-se aleatoriamente os sítios A (●) e os deixando vacantes ou com átomos B (■), até uma certa concentração p de sítios restantes. O limiar de percolação ou concentração crítica p_c , corresponde à formação de um *cluster* A_∞ de

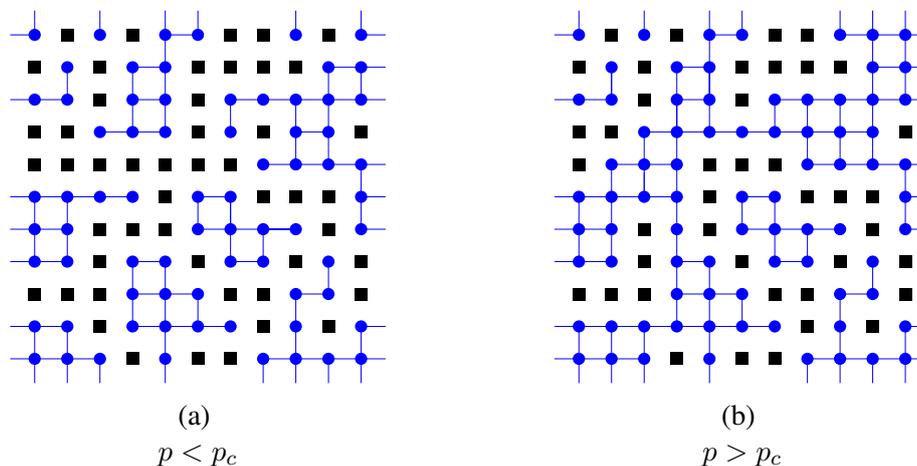


Figura 1.1: Representação esquemática do conceito de percolação pela diluição de uma rede quadrada removendo-se aleatoriamente os sítios A (●). Se existem apenas pequenos *clusters* finitos desconectados, de modo que $p < p_c$, em que p_c é o limiar de percolação ou concentração crítica, como em (a), temos um sistema sem percolação. Havendo a formação de um *cluster* de sítios A conectados infinitamente, de modo que $p > p_c$, temos um sistema com percolação, como mostrado em (b).

sítios A conectados, que ocorre para $p = p_c$. Na Figura 1.1 (a) a concentração p de sítios conectados ainda é insuficiente para a formação de A_∞ , de modo que tem-se apenas pequenos *clusters* isolados, $p < p_c$. Por outro lado, quando $p > p_c$, como mostrado na Figura 1.1 (b), tem-se tanto os pequenos *clusters* quanto A_∞ , de modo que dizemos que o sistema percolou.

Para um dado *cluster* A_∞ , tem-se associado a ele um comprimento de correlação que vai a infinito em $p = p_c$, caracterizando a ocorrência de uma “transição de percolação”. Então, A_∞ define o parâmetro de ordem para tal transição por meio de uma probabilidade de percolação. Portanto, a transição de percolação representa exatamente uma transição de fase geométrica, a qual surge a partir de aspectos configuracionais causados pelo processo de diluição nos sítios da rede [30]. Como veremos a seguir, o conceito dessa transição será fundamental para diferenciar a fase ordenada (que exhibe ordem de longo alcance) e a desordenada (paramagnética).

1.2 Efeitos da diluição *quenched* por sítio em sistemas magnéticos

Como modelo de sistema clássico de magnetismo diluído, podemos citar o modelo de Ising [31–33]. Considere o modelo de Ising tridimensional (a campo magnético nulo) com diluição

quenched por sítio, cuja Hamiltoniana é

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_i \epsilon_j S_i S_j - h \sum_i \epsilon_i S_i, \quad (1.1)$$

em que $S_i = \pm 1$ é o spin no sítio i da rede, h é campo magnético externo e $J > 0$ é a interação de troca. O processo de diluição por sítio é caracterizado pelas variáveis ϵ_i , em que $\epsilon_i = 1$ representa um sítio ocupado com spin ± 1 e $\epsilon_i = 0$ representa um sítio vazio, distribuídos estatisticamente de acordo com a equação

$$P(\epsilon_i) = (1 - p)\delta(\epsilon_i) + p\delta(\epsilon_i - 1), \quad (1.2)$$

com p representando a concentração de sítios ocupados.

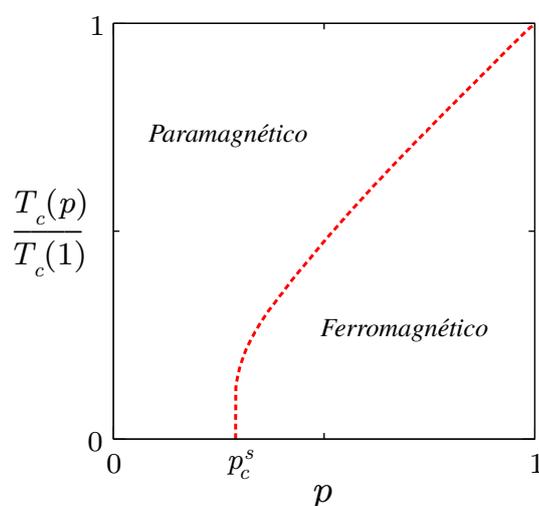


Figura 1.2: (Adaptada da Ref. [30]) Ilustração do diagrama de fases para o modelo de Ising tridimensional com diluição *quenched* por sítio. O ponto p_c^s é a concentração crítica e a partir deste, há um *cluster* de sítios ocupados conectados infinitamente na abordagem do limite termodinâmico.

A Figura 1.2 apresenta o diagrama de fases para o modelo de Ising tridimensional com diluição *quenched* por sítio de acordo com a Eq. (1.2). Observe que a temperatura de transição $T_c(p)$ decai com a diminuição da concentração p de sítios magnéticos ocupados a partir de um valor puro de concentração, $T_c(p = 1)$, até o valor zero em uma concentração crítica $p = p_c^s$. Para $p < p_c^s$, o sistema apresenta apenas pequenos *clusters* finitos, conectados pela interação de troca, de modo que o parâmetro de ordem (magnetização) é nulo. Neste caso, o sistema apresenta apenas ordem de curto alcance mesmo a temperatura nula. Por outro lado, a partir de $p = p_c^s$, tem-se pelo menos um *cluster* de sítios magnéticos conectados infinitamente na rede, de modo que o sistema pode suportar correlações de longo alcance a temperaturas suficientemente baixas. Como podemos perceber, o fenômeno da percolação clássica é puramente geométrico e dependente da dimensionalidade do sistema. Para exemplificar, podemos citar os valores clássicos do limiar de percolação por sítio para as redes quadrada, que é $p_c^s \simeq 0.59$ [37] e $p_c^s \simeq 0.31$ [38] para a rede cúbica simples.

O correspondente problema da percolação em sistemas quânticos é mais complexo, pois além dos graus de liberdade de spin tem-se que levar em conta os graus de liberdade de carga. Além disso, outros fatores devem ser levados em consideração, por exemplo, a interação Coulombiana

entre elétrons. Isto é, em um problema quântico com diluição *quenched* por sítio, além do elétron ter de encontrar um caminho de sítios “acessíveis” para percolar (ou seja, uma probabilidade de ter um estado estendido), tem-se que levar em conta efeitos adicionais de repulsão elétron-elétron. Como modelo para esses sistemas, podemos citar a Hamiltoniana do tipo

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H. c.} \right) + \sum_i U_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (1.3)$$

que é a Hamiltoniana de Hubbard, cujas características são discutidas no **Capítulo 2**. O processo de diluição pode ser feito nos valores da interação U_i de acordo com a equação

$$P(U_i) = (1 - f)\delta(U_i - U) + f\delta(U_i), \quad (1.4)$$

tal que, por exemplo, $U_i \in \{0, U = 8t\}$ com probabilidade f e $(1 - f)$, respectivamente [39]. A partir de argumentos de escala, que são detalhados no **Capítulo 3**, a **Figura 1.3** mostra os efeitos da diluição devido ao aumento da fração f de sítios com $U = 0$ em uma rede quadrada. Note

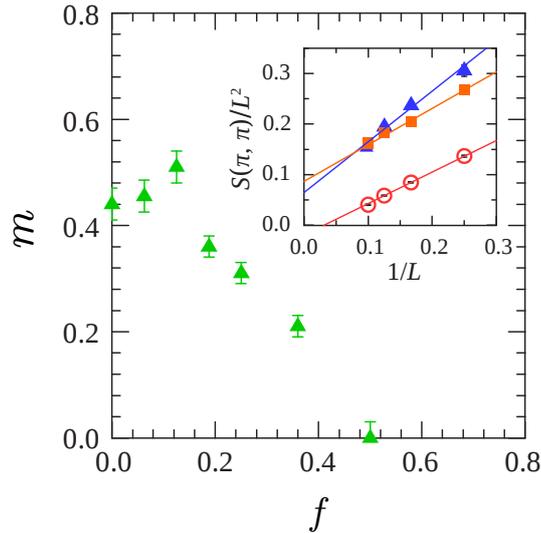


Figura 1.3: (Adaptada da Ref. [39]) Comportamento do parâmetro de ordem antiferromagnético m como função da fração f de sítios diluídos com $U = 0$, em densidade eletrônica $\rho = 1$. *Inset*, o gráfico da análise de escala de tamanho finito do fator de estrutura antiferromagnético como função do inverso do tamanho de rede. As frações $f = 0.0$, $f = 1/8$ e $f = 1/2$ correspondem aos símbolos (\blacktriangle), (\blacksquare) e (\circ), respectivamente.

que os efeitos da diluição provocam uma redução no valor do parâmetro de ordem m do sistema, levando à destruição da ordem antiferromagnética em $f_{\text{crit}} = 0.43 \pm 0.07$, que é consistente com limiar de percolação clássica na mesma rede: $f_{\text{crit}}^{\text{clássico, quad}} = 0.41$ [40]. Elétrons que antes estavam localizados na rede passam a estar estendidos por conta da presença de sítios com $U = 0$. Para valores abaixo de f_{crit} , a presença de estados localizados é garantida. Embora, os dois valores anteriores comparados sejam consistentes, o caráter não local dos elétrons tem papel fundamental, isto é, o limiar de percolação quântico é determinado pela interação entre a geometria e a dinâmica da partícula que se move na rede. Como veremos no **Capítulo 3**, essas características estão presentes na análise dos efeitos da diluição *quenched* por sítio na ordem ferromagnética da rede de Lieb.

Capítulo 2

Magnetismo no modelo de Hubbard

O magnetismo é uma propriedade física importante dos materiais, o qual advém de processos da interação elétron-elétron. Nesse contexto, o modelo de Hubbard apresenta-se como uma extensão do modelo *tight-binding* que, embora simplificado, contém os principais ingredientes para descrever partículas interagentes, originalmente férmions, movendo-se em um sólido. O modelo foi desenvolvido por Hubbard [3] para descrever o comportamento de elétrons nos orbitais d em metais de transição. Embora simplificado, o modelo é capaz de descrever com boa aproximação vários fenômenos de sólidos, por exemplo, ordenamento magnético, transição metal-isolante e a supercondutividade em alguns materiais [41]. Este capítulo é dedicado à descrição do modelo de Hubbard. Apresentamos a Hamiltoniana que descreve o modelo e suas propriedades, as simetrias de interesse e por fim, enunciamos o teorema de Lieb, o qual é de extrema importância na aplicação do problema que é abordado no [Capítulo 3](#).

2.1 A Hamiltoniana de Hubbard

A Hamiltoniana que descreve o modelo de Hubbard é dada por

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} -t \left(a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},\uparrow} n_{\mathbf{i},\downarrow} - \mu \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},\sigma}, \quad (2.1)$$

com t correspondendo ao *hopping* dos elétrons entre sítios, $a_{i,\sigma}^{(\dagger)}$ representando o operador aniquilação (criação) de elétrons (escrito no formalismo de segunda quantização) no sítio \mathbf{i} com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e μ o potencial químico, que controla a densidade eletrônica no sistema. O segundo termo do lado direito, U , representa a intensidade da interação Coulombiana e $n_{\mathbf{i},\sigma} = a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{i},\sigma}$ é o operador número de ocupação de elétrons. Note que a Hamiltoniana contém poucos parâmetros independentes: U/t e μ/t , com t definindo a escala de energia do sistema.

A Hamiltoniana dada na Eq. (2.1) apresenta características interessantes quando analisada em casos limites. Por exemplo, para $U = 0$, em uma rede quadrada, a superfície de Fermi para a banda

2.1. A HAMILTONIANA DE HUBBARD

semipreenchida apresenta um *nesting*, ou seja, a energia nessa banda,

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu, \quad (2.2)$$

possui a propriedade $\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = \epsilon(\mathbf{k})$ com $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$, mapeando todo ponto da superfície de Fermi em outro ponto pertencente a mesma superfície, como pode ser visto na [Figura 2.1](#). Note

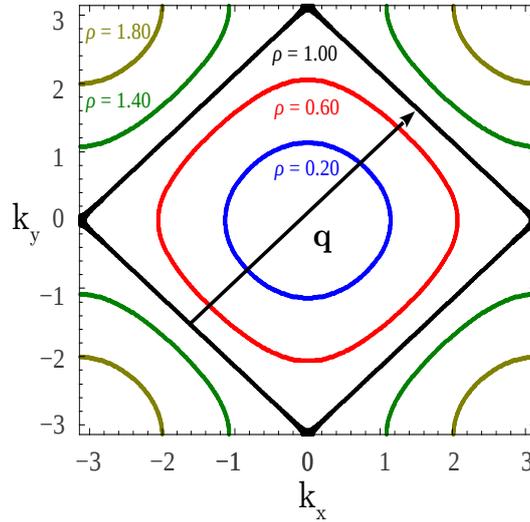


Figura 2.1: Superfície de Fermi para vários preenchimentos de banda em uma rede quadrada com *hopping* de primeiros vizinhos. Observe que na banda semipreenchida ($\rho = 1$), a superfície de Fermi é *nested*.

que para $U = 0$ não há ordem magnética, mas a presença de um *nesting* na superfície de Fermi na banda semipreenchida cria instabilidades na susceptibilidade magnética, e um pequeno valor finito da interação colombiana U pode levar a uma transição magnética [6].

Para o caso $0 < U < \infty$ na abordagem de campo médio, o diagrama de fases para o modelo de Hubbard em duas dimensões apresenta as fases antiferromagnética (A), ferromagnética (F) e paramagnética (P) para diferentes valores de U/t e ρ , como pode ser visto na [Figura 2.2](#) (a). As três

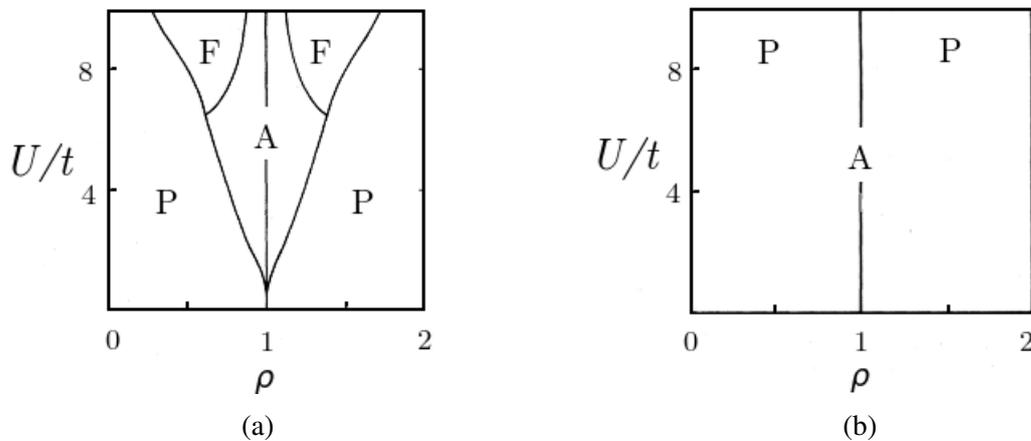


Figura 2.2: (Adaptada da Ref. [6]) Resultados para o modelo de Hubbard em duas dimensões usando (a) método de campo médio, exibindo fases em regiões bem definidas e (b) Monte Carlo quântico, que exhibe apenas duas fases. Note em (b) a ausência de ordem ferromagnética. A fase antiferromagnética continua presente em $\rho = 1$, mas em uma região bem restrita.

fases apresentam regiões bem definidas e, para $\rho = 1$, temos a fase A para qualquer valor de U/t . Por outro lado, a mesma análise via simulações de Monte Carlo quântico, que é um método exato, evidencia apenas duas fases: antiferromagnética e paramagnética, como mostra a [Figura 2.2 \(b\)](#).

Para o limite de acoplamento forte, $U \gg t$, na banda semipreenchida, os graus de liberdade de carga são congelados, restando apenas graus de liberdade de spin, ou seja, efetivamente temos um modelo tipo Heisenberg. Note que podemos escrever a Eq. (2.1), sem o potencial químico, na forma

$$\mathcal{H} = U \left(\mathcal{H}_0 + \frac{t}{U} \mathcal{H}_1 \right), \quad (2.3)$$

em que $\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},\uparrow} n_{\mathbf{i},\downarrow}$ e $\mathcal{H}_1 = \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle, \sigma} a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{j},\sigma}$. Com o uso da teoria de perturbação aplicada ao segundo termo, t/U , a correção de segunda ordem na energia do estado fundamental (EF) é dada por

$$\Delta E^{(2)} = - \sum_{s \neq \text{EF}} \frac{|\langle \Psi_{\text{EF}} | \mathcal{H}_1 | \psi_s \rangle|^2}{E_s - E_{\text{EF}}} = - \frac{4t^2}{U}, \quad (2.4)$$

com a soma sendo feita sobre todos os estados excitados s , exceto o EF [42]. Essa variação de energia, que advém de um *hopping* virtual de elétrons, corresponde ao termo de troca $J = -4t^2/U$ do modelo de Heisenberg [43].

2.1.1 Simetrias

Nesta seção vamos discutir, em particular, duas simetrias: (i) a de invariância rotacional e (ii) partícula-buraco, ambas necessárias para o entendimento do problema que será abordado no [Capítulo 3](#). Observe que os dois principais termos da Hamiltoniana de Hubbard descrevem a energia cinética e a parte de interação entre elétrons, sendo que este último depende apenas da distância entre eles. Nenhuma referência ao spin do elétron é feita, mas o termo de interação contém os termos $n_{\mathbf{i},\uparrow}$ e $n_{\mathbf{i},\downarrow}$, o que pode gerar dúvidas quanto à dependência do eixo de quantização. Para verificar a invariância rotacional, vamos escrever o termo $n_{\mathbf{i},\uparrow} n_{\mathbf{i},\downarrow}$ na forma

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{i},\uparrow} n_{\mathbf{i},\downarrow} &= \left(a_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{i},\uparrow} \right) \left(a_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{i},\downarrow} \right) \\ &= a_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{i},\uparrow} \left(1 - a_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{i},\downarrow} \right) \\ &= n_{\mathbf{i},\uparrow} - a_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{i},\downarrow} a_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{i},\uparrow} \\ n_{\mathbf{i},\uparrow} n_{\mathbf{i},\downarrow} &= n_{\mathbf{i},\uparrow} - S_{\mathbf{i}}^+ S_{\mathbf{i}}^-, \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde aplicamos a regra $\{a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{j},\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{i},\sigma} \delta_{\mathbf{j},\sigma'}$, com

$$S_{\mathbf{i}}^+ = S_{\mathbf{i}}^x + iS_{\mathbf{i}}^y, \quad (2.6a)$$

$$S_{\mathbf{i}}^- = S_{\mathbf{i}}^x - iS_{\mathbf{i}}^y. \quad (2.6b)$$

Similarmente, $n_{\mathbf{i},\uparrow} n_{\mathbf{i},\downarrow} = n_{\mathbf{i},\downarrow} - S_{\mathbf{i}}^- S_{\mathbf{i}}^+$.

Sabendo que

$$\mathbf{S}_i^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2, \quad (2.7)$$

com

$$S_i^z = \frac{1}{2}(n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow}), \quad (2.8)$$

tem-se, a partir da Eq. (2.8),

$$n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} = \frac{1}{2}n_i - 2(S_i^z)^2, \quad (2.9)$$

onde usamos o fato de que $n_{i,\sigma}^2 = n_{i,\sigma}$ para $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$. Sendo assim, combinando adequadamente as equações anteriores, tem-se

$$n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} = \frac{1}{2}n_i - \frac{2}{3}\mathbf{S}_i^2, \quad (2.10)$$

ou seja, o termo $n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow}$ escrito nessa forma evidencia sua invariância rotacional, uma vez que nenhuma direção é privilegiada por \mathbf{S}^2 ; $(S_i^x)^2 = (S_i^y)^2 = (S_i^z)^2 = \frac{1}{3}\mathbf{S}_i^2$ [7]. Como consequência, devido ao teorema de Mermin-Wagner [44], a Hamiltoniana de Hubbard em sistemas bidimensionais não exibirá ordem de longo alcance a temperatura finita.

Vamos agora abordar a simetria partícula-buraco. Mas, para enunciá-la, é necessário apresentar a definição de redes bipartidas.

Definição 1. *Redes bipartidas são geometrias que podem ser divididas em duas sub-redes \mathcal{A} e \mathcal{B} , tais que, quando superpostas, os sítios da sub-rede \mathcal{A} têm como primeiros vizinhos os sítios da sub-rede \mathcal{B} e vice-versa.*

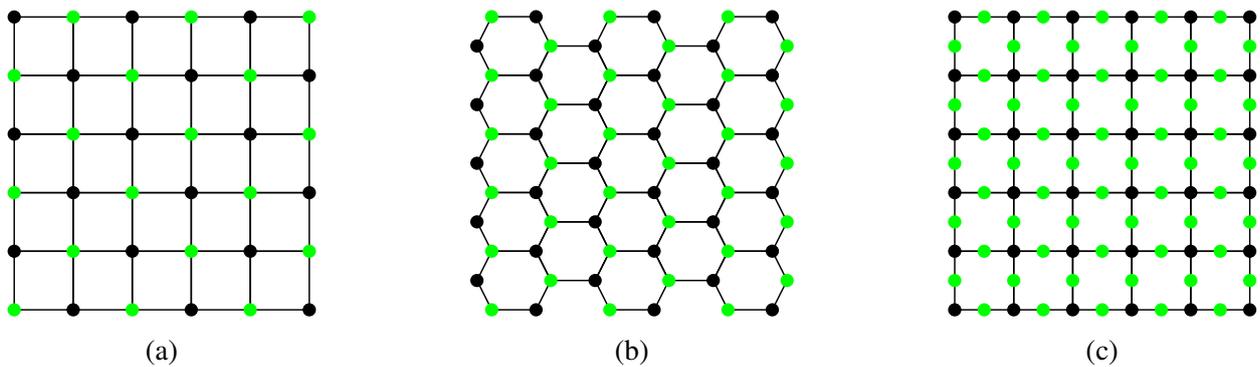


Figura 2.3: Exemplos de geometrias bipartidas: (a) rede quadrada, (b) rede *honeycomb* e (c) rede de Lieb, sendo esta última a geometria de interesse neste trabalho.

A **Figura 2.3** ilustra exemplos de tais geometrias, nas quais o termo de *hopping* $t_{ij} \neq 0$ se $i \in \mathcal{A}$ e $j \in \mathcal{B}$ e $t_{ij} = 0$ se $i \in \mathcal{A}$ e $j \in \mathcal{A}$.

A transformação partícula-buraco (PB) pode ser feita de duas maneiras: parcial e total [45]. Na transformação PB total, elétrons com certa orientação de spin são transformados em buracos com

a mesma orientação, então

$$a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \rightarrow c_{\mathbf{i},\sigma} = (-1)^{\mathbf{i}} a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger, \quad (2.11a)$$

$$a_{\mathbf{i},\sigma} \rightarrow c_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = (-1)^{\mathbf{i}} a_{\mathbf{i},\sigma}, \quad (2.11b)$$

com o fator $(-1)^{\mathbf{i}}$ igual a -1 se $\mathbf{i} \in \mathcal{A}$ e $+1$ se $\mathbf{i} \in \mathcal{B}$. Na transformação, o operador $n_{\mathbf{i},\sigma}$ e o termo de energia cinética assumem, respectivamente, a forma

$$n_{\mathbf{i},\sigma} = a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{i},\sigma} \rightarrow c_{\mathbf{i},\sigma} c_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = 1 - c_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{i},\sigma} = 1 - \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}, \quad (2.12)$$

e

$$a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{j},\sigma} = -a_{\mathbf{i},\sigma} a_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger = (-1)^{\mathbf{i}+\mathbf{j}} a_{\mathbf{i},\sigma} a_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger = c_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j},\sigma}, \quad (2.13)$$

com este último permanecendo inalterado. Os termos de interação Coulombiana e potencial químico, sob a transformação PB total, são escritos na forma

$$U \sum_{\mathbf{i}} \left(n_{\mathbf{i},\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\mathbf{i},\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \rightarrow U \sum_{\mathbf{i}} \left(\hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (2.14a)$$

$$-\mu \sum_{\mathbf{i}} (n_{\mathbf{i},\uparrow} + n_{\mathbf{i},\downarrow}) \rightarrow \mu \sum_{\mathbf{i}} (\hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}) - 2\mu N_s. \quad (2.14b)$$

Então, a Hamiltoniana de Hubbard na sua forma simétrica é escrita como

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle, \sigma} -t \left(a_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{j},\sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_{\mathbf{i}} \left(n_{\mathbf{i},\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\mathbf{i},\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},\sigma}, \quad (2.15)$$

com a simetria PB total sendo satisfeita para $\mu = 0$. Observe que nessa simetria, o modelo de Hubbard dopado com elétrons e um dado μ é então mapeado no mesmo modelo dopado com buracos e com $-\mu$, o que implica que o diagrama de fases do modelo de Hubbard repulsivo em uma rede bipartida é simétrico na banda semipreenchida. Um outro ponto a se mencionar é que essa simetria é de extrema importância na análise de sistemas de elétrons fortemente correlacionados via método de Monte Carlo quântico determinantal, pois sua ausência, causa o problema do sinal negativo quando o sistema é analisado a baixas temperaturas; como é discutido no [Apêndice A](#).

Na transformação PB parcial, faz-se elétrons com spin- \uparrow inalterados enquanto elétrons com spin- \downarrow são transformados em buracos,

$$a_{\mathbf{i},\uparrow} \rightarrow c_{\mathbf{i},\uparrow} \quad (2.16a)$$

$$a_{\mathbf{i},\downarrow} \rightarrow c_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger = (-1)^{\mathbf{i}} a_{\mathbf{i},\downarrow}, \quad (2.16b)$$

de modo que

$$n_{i,\uparrow} \rightarrow \hat{n}_{i,\uparrow} \quad (2.17a)$$

$$n_{i,\downarrow} \rightarrow \hat{n}_{i,\downarrow} = 1 - n_{i,\downarrow}, \quad (2.17b)$$

e a Eq. (2.15) sob a transformação PB parcial assume a forma

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} -t \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{H.c.} \right) - U \sum_{\mathbf{i}} \left(\hat{n}_{i,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) + \\ &- \mu \sum_{\mathbf{i}} (\hat{n}_{i,\uparrow} - \hat{n}_{i,\downarrow}) - \mu N_s, \end{aligned} \quad (2.18)$$

ou seja, o modelo de Hubbard repulsivo pode ser mapeado no modelo de Hubbard atrativo e vice-versa ($U \leftrightarrow -U$), sob uma transformação PB parcial em um rede bipartida em regime de banda semipreenchida. Essa possibilidade de mapeamento é de fundamental importância para o teorema de Lieb, como é visto a seguir.

2.2 O Teorema de Lieb

Em 1989, Lieb [11] provou dois teoremas a respeito do autovalor do spin total S do estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard. Lieb apresentou o primeiro teorema para o caso atrativo do modelo de Hubbard em uma geometria Λ , contendo um número $|\Lambda|$ total de sítios nas duas sub-redes (\mathcal{A} e \mathcal{B}), isto é, $|\Lambda| = |\mathcal{A}| + |\mathcal{B}|$, com número total de elétrons $\mathcal{N} \leq 2|\Lambda|$ e termo de *hopping* t_{ij} entre os sítios \mathbf{i} e \mathbf{j} . Em seguida, Lieb estende seus resultados para o caso repulsivo. Apresentamos os dois teoremas e suas implicações, sem nos preocuparmos com as demonstrações formais. Para maiores informações veja o trabalho original na referência [11]. O primeiro teorema afirma que:

Teorema 1. (Caso Atrativo) *Assuma $U_{\mathbf{i}} \leq 0$ para todo \mathbf{i} (com $U_{\mathbf{i}}$ não necessariamente constante) e que \mathcal{N} seja par. Nenhuma outra afirmação sobre Λ e t_{ij} é feita. Então (a) dentre os estados fundamentais da Hamiltoniana de Hubbard existe um com $S = 0$; (b) se $U_{\mathbf{i}} < 0$ para todo \mathbf{i} , o estado fundamental é único e tem $S = 0$.*

De acordo com o teorema acima, se $U_{\mathbf{i}}$ assumir um valor menor ou igual a zero (não necessariamente constante) para todo \mathbf{i} pertencente à rede Λ , com número par no total de elétrons, haverá pelo menos um, dentre os estados fundamentais da Hamiltoniana de Hubbard, com spin total nulo. Observe que o teorema não faz nenhuma afirmação sobre a rede Λ , e o *hopping* dos elétrons é arbitrário. Isto é, os sítios das duas sub-redes precisam apenas estar conectados para que o *hopping* aconteça. Por outro lado, na restrição de que $U_{\mathbf{i}} < 0$ para todo \mathbf{i} , o estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard é único e tem um spin total nulo, $S = 0$. De fato, se $U_{\mathbf{i}}$ for muito grande, teremos elétrons emparelhados em cada sítio da rede, de modo que o spin total é nulo.

Se Λ for uma rede bipartida, tal que o número de sítios nas duas sub-redes sejam $|\mathcal{B}| \geq |\mathcal{A}|$ e em regime de banda semipreenchida com termo de *hopping* $t_{ij} \neq 0$ para $i \in \mathcal{A}$ e $j \in \mathcal{B}$ e $t_{ij} = 0$ para $i \in \mathcal{A}$ e $j \in \mathcal{A}$, então, como vimos na [Subseção 2.1.1](#), a simetria PB parcial nos permite fazer o mapeamento do modelo de Hubbard repulsivo no modelo de Hubbard atrativo. Assim, o teorema de Lieb para o caso repulsivo afirma que:

Teorema 2. (Caso Repulsivo) *Assuma $U_i = U$ positivo constante, independente de i . Assuma que $|\Lambda|$ seja par, Λ é bipartida (tal que t_{ij} conecta apenas \mathcal{A} e \mathcal{B}) e $|\mathcal{B}| \geq |\mathcal{A}|$. Nenhuma outra afirmação sobre Λ e t_{ij} é feita. Seja $\mathcal{N} = |\Lambda|$ (banda semipreenchida), então o estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard é único e tem spin total $S = \frac{1}{2}(|\mathcal{B}| - |\mathcal{A}|)$.*

Observe que as afirmações do teorema para o caso repulsivo são mais restritas, comparadas as do caso atrativo. O valor de U_i é homogêneo e o mesmo em todos os sítios da rede Λ . Para o caso em que $|\mathcal{B}| = |\mathcal{A}|$, temos duas sub-redes com número de sítios iguais (ver [Figura 2.3](#) (a)) em regime de banda semipreenchida, logo o estado fundamental nesse caso tem spin total nulo, $S = 0$. No limite de $U = 0$, o sistema comporta-se como não interagente (caso da Hamiltoniana *tight-binding*) e logo conclui-se que $S = 0$ nesse limite. Por outro lado, no limite de U muito grande, a solução é conhecida a partir da teoria de perturbação até segunda ordem com a Hamiltoniana de Hubbard mapeada no modelo de Heisenberg antiferromagnético, tendo este último um estado fundamental único com $S = \frac{1}{2}(|\mathcal{B}| - |\mathcal{A}|)$ [46], logo o spin total do estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard no caso repulsivo deve ser único e idêntico a $S = \frac{1}{2}(|\mathcal{B}| - |\mathcal{A}|)$, como é no caso do modelo de Heisenberg.

Capítulo 3

Magnetismo diluído na rede de Lieb

Neste capítulo apresentamos resultados para o magnetismo na rede de Lieb via o método de Monte Carlo quântico determinantal (DQMC), que resolve exatamente o problema de elétrons interagentes em redes de tamanho finito – veja o [Apêndice A](#) para informações detalhadas sobre o método. Em particular, apresentamos o comportamento do parâmetro de ordem (magnetização) através da análise das funções de correlação spin-spin e as magnetizações das sub-redes, fazendo-se diluição aleatória no valor da interação Coulombiana U nos sítios da rede. O capítulo está dividido em duas partes: na primeira revisamos os principais resultados de Costa *et al.* [28], que são referentes ao magnetismo não diluído (caso homogêneo) e magnetismo com diluição ordenada (caso não homogêneo), enquanto na segunda parte, discutimos os resultados para o magnetismo com diluição aleatória, que constitui o tema central desta dissertação.

3.1 Magnetismo na rede de Lieb

De acordo com o [Teorema 2](#), Lieb estabeleceu que para geometrias bipartidas em dimensão qualquer, tendo esta um número diferente na quantidade de sítios nas duas sub-redes ($N_A \neq N_B$), o estado fundamental da Hamiltoniana de Hubbard tem um spin total $2S = (|N_B| - |N_A|)$. O [Teorema 2](#) restringe $U > 0$ e homogêneo em todos os sítios da rede, permite *hopping* apenas entre sítios de sub-redes opostas e o termo de potencial químico deve ser nulo, de modo que estas condições levam a Hamiltoniana a possuir simetria partícula-buraco em regime de banda semipreenchida. Em vista disso, vamos analisar aqui o magnetismo na geometria mostrada na [Figura 3.1](#) (a), conhecida como rede de Lieb. Devido à semelhança com a rede dos cupratos, assumimos que os sítios da sub-rede \mathcal{A} são representados por d e os sítios da sub-rede \mathcal{B} por p , porém, ressaltamos que essa nomenclatura não corresponde necessariamente aos orbitais d e p na rede dos cupratos. Desta maneira, a célula unitária da rede possui dois sítios p ligados a um sítio d , com um total de $N_s = 3L^2$ sítios, sendo L o tamanho linear da rede. Note que, nesse caso particular, a sub-rede dos sítios p tem o dobro de sítios em relação à sub-rede dos sítios d . Assim, de acordo com o teorema de Lieb, o estado fundamental desse sistema deve exibir um spin total $S = \frac{1}{2}L^2$.

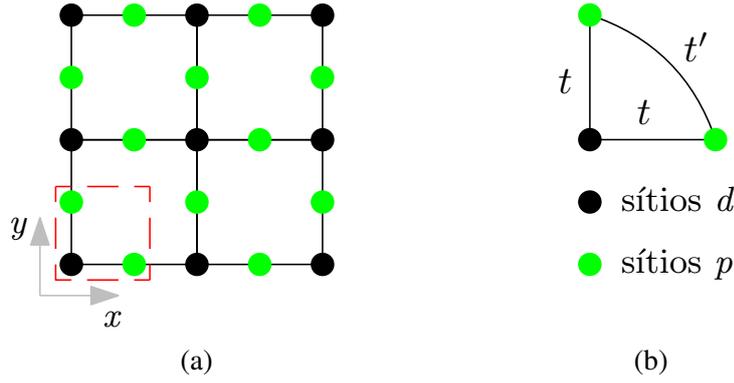


Figura 3.1: (a) Ilustração da rede usada na prova original do teorema de Lieb; conhecida como rede de Lieb. Os sítios d ocupam os vértices de um quadrado de lado unitário enquanto os sítios p ficam a meia distância entre os sítios d . A partir da caixa em cor vermelha - (a), temos em (b) a representação de uma célula unitária da rede (três sítios por célula) com a linha contínua indicando as possibilidades de hopping. Entre os sítios $p \leftrightarrow d$ têm-se $t \neq 0$ e $t' = 0$ entre sítios iguais.

O estudo do magnetismo na rede de Lieb é abordado de duas maneiras: o caso homogêneo, em que o valor da interação Coulombiana é o mesmo em qualquer sítio da rede, $U_p = U_d$, sendo este considerado originalmente por Lieb no Teorema 2, e o caso não homogêneo, em que o valor de U é tal que $U_p \neq U_d$. A Hamiltoniana de Hubbard (com simetria partícula-buraco) na rede de Lieb é dada por

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & -t_{pd} \sum_{\mathbf{r}\sigma} \left(d_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{r}\sigma}^x + d_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{r}\sigma}^y + \text{H.c.} \right) - t_{pd} \sum_{\mathbf{r}\sigma} \left(d_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{r}-\hat{x}\sigma}^x + d_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{r}-\hat{y}\sigma}^y + \text{H.c.} \right) + \\ & + \sum_{\mathbf{r}\alpha} U_\alpha \left(n_{\mathbf{r}\uparrow}^\alpha - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\mathbf{r}\downarrow}^\alpha - \frac{1}{2} \right) + \sum_{\mathbf{r}\alpha\sigma} (\varepsilon_\alpha - \mu) n_{\mathbf{r}\sigma}^\alpha, \end{aligned} \quad (3.1)$$

contendo o hopping t_{pd} intra e intercelular, respectivamente, entre o orbital d (cobre) e orbitais p^x e p^y (oxigênio). Nos dois casos revisados aqui, definiu-se a energia do orbital local $\varepsilon_p = \varepsilon_d = 0$ e o potencial químico $\mu = 0$ de modo a satisfazer a condição de banda semipreenchida.

O comportamento magnético do sistema é caracterizado pelo momento local

$$\langle \mathbf{m}_\alpha^2 \rangle = \langle (n_{i\uparrow}^\alpha - n_{i\downarrow}^\alpha)^2 \rangle, \quad (3.2)$$

que constitui uma média do grau de itinerância dos elétrons, e também pelas funções de correlação spin-spin no espaço real,

$$c_{\alpha\gamma}(\mathbf{i} - \mathbf{j}) = \frac{1}{3} \langle \mathbf{S}_i^\alpha \cdot \mathbf{S}_j^\gamma \rangle, \quad (3.3)$$

representando o valor médio do resultado da correlação entre um spin de elétrons no orbital α em uma célula unitária na posição \mathbf{i} com o spin de elétrons no orbital γ de uma célula unitária na posição \mathbf{j} . As correlações entre os spins levam a um grau de organização magnética dominante no sistema, o qual é medido através do fator de estrutura magnético, que é dado pela transformada de

Fourier das funções de correlação spin-spin $c_{\alpha\gamma}(\mathbf{i} - \mathbf{j})$,

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{\alpha, \gamma} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} c_{\alpha\gamma}(\mathbf{i} - \mathbf{j}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})}. \quad (3.4)$$

Independente se o sistema é homogêneo ou não, observa-se que $c_{\alpha\gamma}(\mathbf{i} - \mathbf{j}) > 0$ quando α e γ são iguais (ambos d ou p), porém $c_{\alpha\gamma}(\mathbf{i} - \mathbf{j}) < 0$ quando são diferentes (para $\rho = 1$). Estes resultados sugerem que a organização magnética dominante no sistema deve ser ferromagnética (F) entre sítios da mesma sub-rede, e antiferromagnética (AF) entre sítios de sub-redes diferentes. Devido ao número diferente de sítios nas sub-redes \mathcal{A} e \mathcal{B} , esse ordenamento leva a uma organização ferromagnética (em *bulk*), isto é, $\mathbf{q} = (0, 0)$.

Para o caso homogêneo, $U_d = U_p = U$, pode-se mostrar, através de argumentos de escala de tamanho finito (os quais são apresentados na seção seguinte), o comportamento do parâmetro de ordem ferromagnético global m_F como função de U/t_{pd} , como mostrado na Figura 3.2, confirmando a existência de ordem ferromagnética para todo $U/t_{pd} > 0$. Observe que m_F cresce rapidamente para $U/t_{pd} \lesssim 1$ e então segue uma estabilização em direção ao valor limite de U/t_{pd} grande, dado pelo modelo de Heisenberg. Na Figura 3.2 (b), tem-se o comportamento do parâme-

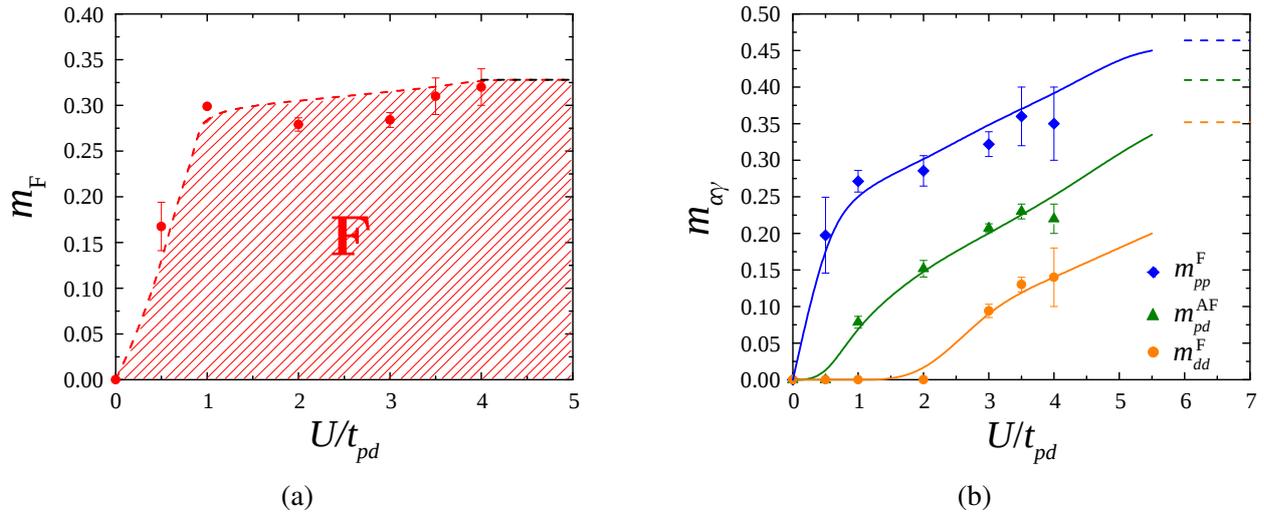


Figura 3.2: (Adaptada da Ref. [28]) (a) Comportamento do parâmetro de ordem ferromagnético global m_F como função do valor da repulsão Coulombiana U/t_{pd} . A linha horizontal tracejada (em preto) corresponde ao limite de Heisenberg. Em (b) tem-se o comportamento do parâmetro de ordem individual em cada sub-rede como função dos valores da repulsão Coulombiana U/t_{pd} .

tro de ordem individual em cada sub-rede como função de U/t_{pd} indicando forte contribuição dos sítios p para o ferromagnetismo, com m_{pp}^F crescendo rapidamente com o valor U/t_{pd} , em contraste com a contribuição dos sítios d (m_{dd}^F). A análise no limite de acoplamento forte no modelo de Heisenberg revela a formação de tripletos nos dois sítios p de cada célula unitária, o que justifica a maior contribuição advinda desses sítios.

O segundo caso é analisado com relação a não homogeneidade do valor de U . Para $U_d \neq U_p$, $U_d, U_p \gg 0$, ainda é possível fazer um mapeamento no modelo de Heisenberg na análise do limite de acoplamento forte [47]. Uma vez que esse é um dos passos para a demonstração do teorema

de Lieb no modelo de Hubbard [11, 48], a ordem ferromagnética também é mantida nesse caso. Entretanto, se é feito $U_d = U$ e $U_p = 0$ ou $U_d = 0$ e $U_p = U$, que corresponde a uma diluição homogênea em U , esta correspondência com o modelo de Heisenberg é quebrada. O fato de U_d ou U_p serem nulos leva a efeitos diferentes, por exemplo, o sistema se comporta como um isolante quando $U_d = 0$ e $U_p \neq 0$, e apresenta um caráter metálico quando $U_p = 0$ e $U_d \neq 0$.

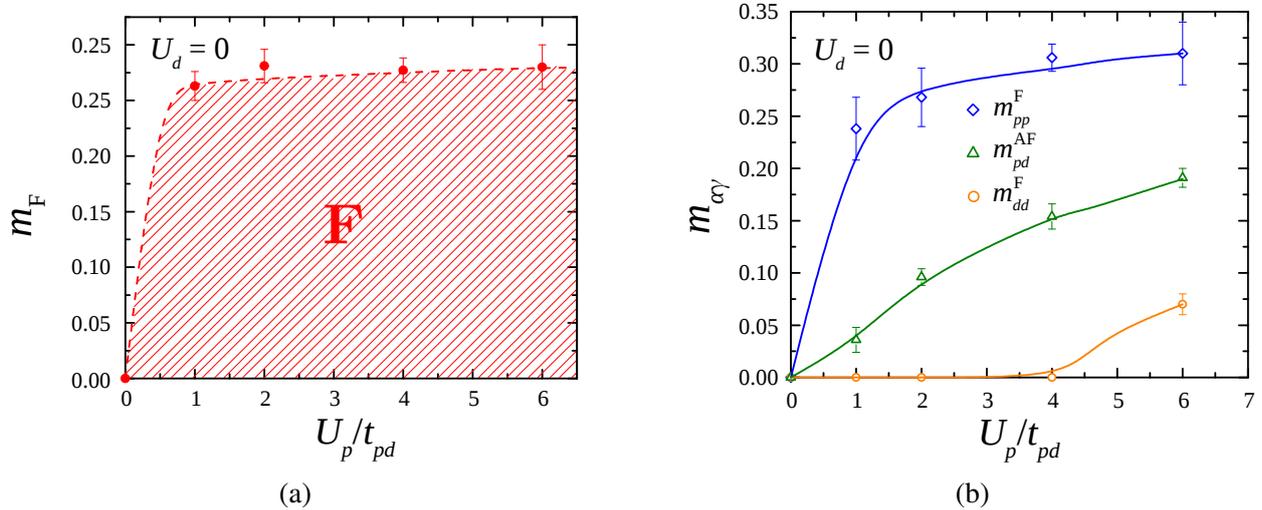


Figura 3.3: (Adaptada da Ref. [28]) (a) Comportamento do parâmetro de ordem ferromagnético global como função do valor da repulsão Coulombiana U_p/t_{pd} obtido para $U_d = 0$ e em (b) o comportamento do parâmetro de ordem individual em cada sub-rede como função dos valores de repulsão Coulombiana U_p/t_{pd} obtido para $U_d = 0$.

A **Figura 3.3** (a) mostra o comportamento do parâmetro de ordem ferromagnético global m_F como função de U_p/t_{pd} quando $U_d = 0$. Observe que m_F cresce rapidamente até $U/t_{pd} \lesssim 1$ e segue uma estabilização para valores de U/t_{pd} maiores, confirmando a existência de ordem ferromagnética para qualquer $U_p > 0$. Quando $U_p = 0$, a probabilidade de dupla ocupação aumenta nos sítios p , levando à destruição do ordenamento magnético. A análise das contribuições individuais, apresentada na **Figura 3.3** (b), revela um acentuado crescimento do parâmetro de ordem ferromagnético individual, m_{pp}^F . Com $U_d = 0$ a supressão das correlações entre os spins dos sítios d é mais intensa, comparada as do caso homogêneo.

3.2 Magnetismo diluído na rede de Lieb

Diferentemente da seção anterior, que abordou as principais características que o sistema apresentava sob a ótica do **Teorema 2**, quando analisado para o caso homogêneo e para o caso não homogêneo, o interesse agora é analisar a ordem magnética no sistema para o caso em que uma diluição aleatória no valor da repulsão Coulombiana U é feita nas duas sub-redes. Buscamos também comparar os efeitos dessa diluição com análogos clássicos. O papel da diluição aleatória pode ser entendido como a presença de impurezas não magnéticas no sistema, caracterizando assim um sistema mais “realista”. Desse ponto de vista, espera-se que os efeitos da diluição no ordenamento magnético leve a uma fração de diluição crítica na qual o sistema deixa de exibir ferromagnetismo.

Assim, buscamos este ponto de transição de fase, análogo ao problema da percolação em sistemas clássicos.

A Hamiltoniana que modela o estudo do magnetismo com diluição aleatória na rede de Lieb é dada pela Eq. (3.1), porém com termo de repulsão

$$\sum_{\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \left(n_{\mathbf{r}\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\mathbf{r}\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (3.5)$$

O processo de diluição é feito tomando-se o valor da repulsão local $U(\mathbf{r})$ tal que

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \text{com probabilidade } f \\ 4, & \text{com probabilidade } 1 - f, \end{cases} \quad (3.6)$$

com f representando a fração de sítios diluídos, escolhidos de forma aleatória em redes finitas de tamanho linear $L = 5$ a $L = 8$. Para fins de análise das propriedades magnéticas no estado fundamental, redes acima desse tamanho tornam as simulações mais longas, pois o esforço computacional escala com o produto do inverso da temperatura e o número de sítios ao cubo, βN_s^3 . O valor $U(\mathbf{r}) = 4$ foi escolhido de forma arbitrária e ótima de acordo com o método DQMC, desde que para todo valor não nulo da repulsão Coulombiana tem-se ordem ferromagnética, como mostrado para o caso homogêneo.

Nas simulações computacionais adotou-se $t_{pd} = 1$, definindo a escala de energia. A relação do inverso da temperatura com o número de fatias temporais (de largura $\Delta\tau$) é dada por $\beta = \Delta\tau M$, onde definimos $\Delta\tau = 0.125$ e $M \leq 384$. Com relação à diluição, preparou-se um conjunto amostral contendo entre 20 a 40 configurações de desordem. Dentre essas configurações, as que não representavam um número inteiro com relação a quantidades de sítios diluídos, tomou-se a média sobre dois valores adjacentes associando a eles pesos apropriados.

A partir da Eq. (3.2), calculou-se o momento local com a finalidade de observar a formação e manutenção desde. A Figura 3.4 mostra o comportamento do momento local como função do inverso da temperatura para os sítios d e p na rede de Lieb de tamanho linear $L = 5$ sob diferentes frações de diluições. Observe que o momento local médio para os sítios d é bem menor que a média para os sítios p , indicando que estes últimos possuem uma maior contribuição na formação e manutenção do momento local. Os feitos da diluição provocam uma diminuição na formação do momento.

Para medir as correlações entre os spins, calculou-se o fator de estrutura magnético de acordo com a Eq. (3.4), com

$$\mathbf{S}_i^\alpha = \mathbf{S}_i^d + \mathbf{S}_i^{p^x} + \mathbf{S}_i^{p^y}, \quad (3.7a)$$

$$\mathbf{S}_j^\gamma = \mathbf{S}_j^d + \mathbf{S}_j^{p^x} + \mathbf{S}_j^{p^y}. \quad (3.7b)$$

A Figura 3.5 mostra o comportamento do fator de estrutura para $\mathbf{q} = (0, 0)$ como função do inverso

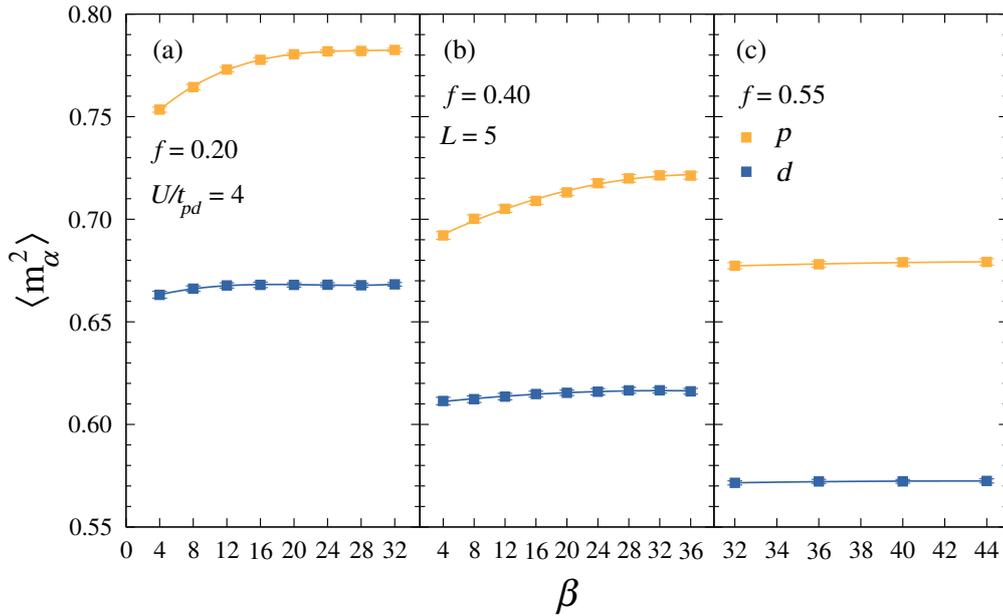


Figura 3.4: Comportamento do momento local como função do inverso da temperatura para os sítios d e p na rede de Lieb de tamanho linear $L = 5$ sob diferentes frações de diluições. Observe que o momento local médio para os sítios d é bem menor que a média para os sítios p .

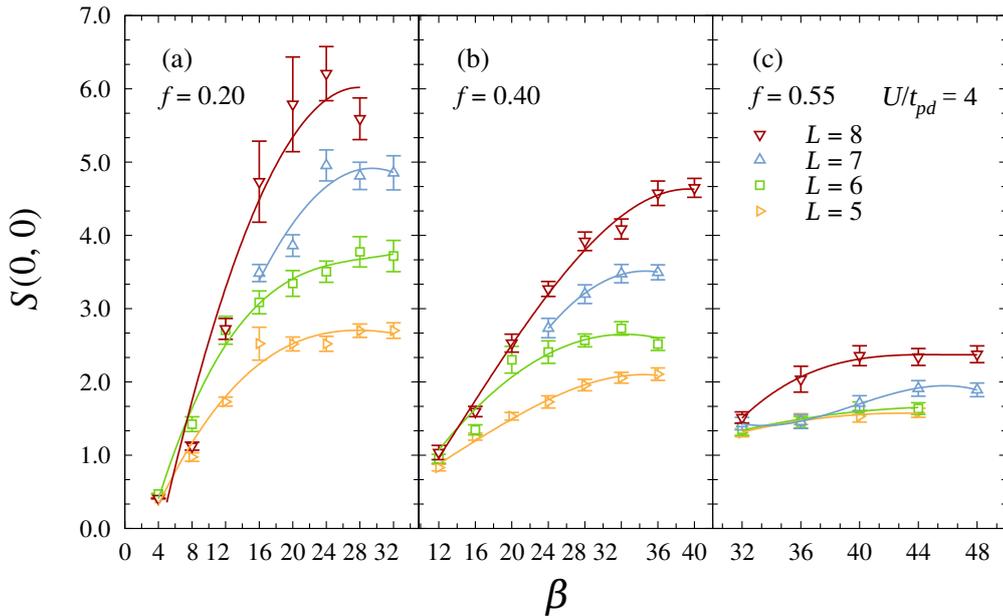


Figura 3.5: Comportamento do fator de estrutura magnético para $\mathbf{q} = (0, 0)$ como função do inverso da temperatura para diferentes tamanhos de redes finitas L e diluições f . Observa-se os efeitos da diluição aleatória nas correlações entre os spins. O aumento da fração de diluição aumenta a probabilidade de dupla ocupação inibindo a formação de momento local nos sítios da rede. As linhas sólidas são apenas um guia para os olhos.

da temperatura para diferentes tamanhos de redes finitas L e diluições f , evidenciando os efeitos da diluição aleatória nas correlações entre os spins. Em sistemas que exibem ordem de longo alcance, o fator de estrutura deve crescer de acordo com o aumento do tamanho linear da rede, como pode ser percebido na Figura 3.5 (a). A estabilização no valor do fator de estrutura, respeitadas as barras de erros, está associada ao fato das redes serem finitas, de modo que o comprimento de correlação

atinge seu valor máximo associado àquela rede. Então, quanto maior for o tamanho linear da rede, maior será o valor de estabilização de $S(0, 0)$.

Como discutido na **Subseção 2.1.1**, a Hamiltoniana de Hubbard possui simetria contínua, e de acordo o teorema de Mermin-Wagner não exibirá ordem de longo alcance a temperatura finita, devendo nossa análise limitar-se ao estado fundamental, cuja escala de energia ($T \rightarrow 0$, ou seja, β suficientemente grande) se reflete na estabilização de $S(0, 0)$. Como pode-se perceber, o aumento da fração de diluição f provoca uma diminuição no máximo de $S(0, 0)$, isto é, o efeito da diluição nos sítios causa a supressão das correlações, por permitir a dupla ocupação do sítios e inibir a formação de momento local. Desta forma, isto reduz a escala de energia associada ao magnetismo no estado fundamental havendo a necessidade de aumentar o valor de β a fim de estabilizar $S(0, 0)$, como pode-se perceber na **Figura 3.5** (b) e (c).

Para sistemas que exibem ordem de longo alcance, $S(0, 0)$ deverá crescer linearmente com o número de sítios da rede, ou seja, $S(0, 0)/N_s$ será diferente de zero quando $N_s \rightarrow \infty$. Ao analisar o comportamento do modelo de Heisenberg antiferromagnético no limite termodinâmico via teoria de onda de spin, Huse [49] estima que as correlações entre os spins decaiam com

$$|\langle \mathbf{S}_i^\alpha \cdot \mathbf{S}_j^\gamma \rangle| - (m^z)^2 \sim \frac{1}{r_{i,j}}, \quad (3.8)$$

com m^z representando a magnetização por spin na direção z . Como a simetria de rotação é preservada, pode-se escrever m^z em termos da magnetização total, $(m^z)^2 = m_F^2/3$, e então as correções no fator de estrutura ao abordar o limite termodinâmico serão dadas por

$$\begin{aligned} S(0, 0) &= \frac{m_F^2}{3} N_s + a\sqrt{N_s} \\ \frac{S(0, 0)}{L^2} &= m_F^2 + \frac{a'}{L}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

em que a' é um coeficiente de correção linear.

A Eq. (3.9) é uma escala de tamanho finito para análise do modelo de Hubbard e é usada para realizar a extrapolação ao limite termodinâmico a partir das simulações de redes de tamanho finito, permitindo investigar a presença ou ausência de ordem magnética de longo alcance, como pode ser visto na **Figura 3.6**. As linhas tracejadas representam as extrapolações de $S(0, 0)$ como função do inverso do tamanho linear da rede para diferentes frações de diluição f , de acordo com a Eq. (3.9). Cada ponto no gráfico da **Figura 3.6** representa o valor médio de $S(0, 0)$ estabilizado, respeitadas as barras de erros, referente a cada tamanho de rede e fração de diluição (ver **Figura 3.5**).

Com base na **Figura 3.6**, pode-se traçar uma curva que representa o comportamento do parâmetro de ordem global m_F como função da fração de diluição feita nos sítios dos diferentes tamanhos de rede; a **Figura 3.7** mostra esse comportamento. Os pontos (★) no gráfico correspondem ao valor da raiz quadrada do coeficiente linear de cada reta da **Figura 3.6**, de acordo com a referida fração de diluição. Observa-se que, os efeitos da diluição na magnitude do parâmetro de ordem ferromagnético m_F , por provocarem o aumento da probabilidade de dupla ocupação dos sítios,

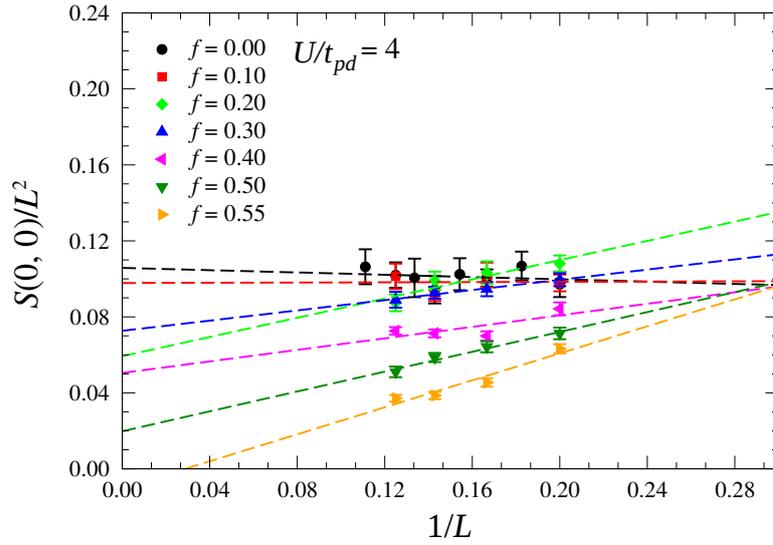


Figura 3.6: Análise de escala de tamanho finito para $S(0, 0)$ como função do inverso do tamanho linear da rede para diferentes frações de diluição f de acordo com a Eq. (3.9). O coeficiente linear de cada reta representa o valor médio do parâmetro de ordem (magnetização) ao quadrado, m_F^2 . Observe que a ordem ferromagnética é suprimida para $0.50 < f_{\text{crit}} < 0.55$.

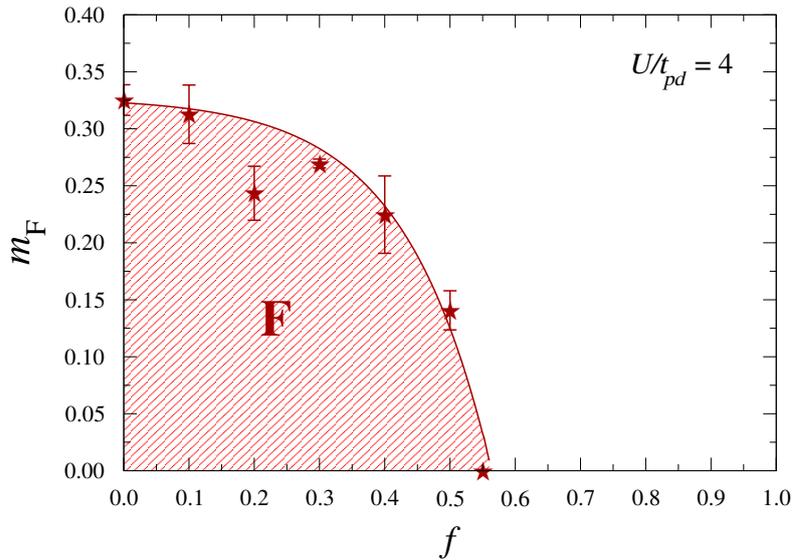


Figura 3.7: Comportamento do parâmetro de ordem (magnetização) como função da fração de diluição feita nos sítios de diferentes tamanhos de rede. Observe que o aumento da fração de diluição diminui a magnitude da magnetização do sistema. A linha sólida é apenas um guia para os olhos.

inibem a formação de momento local, levando à destruição da ordem ferromagnética de longo alcance em torno de $f_{\text{crit}} \approx 0.55$, caracterizando uma transição de fase neste ponto. Para valores abaixo de f_{crit} , tem-se uma região onde a ordem ferromagnética é observada e persiste até o ponto crítico. Acima de f_{crit} , já não se observa mais a persistência da ordem.

Observe que o limiar crítico de percolação no caso clássico na rede de Lieb é $f_{\text{crit}}^{\text{clássico, Lieb}} \approx 0.26$ [50, 51], um valor muito menor que $f_{\text{crit}} \approx 0.55$ (caso quântico), observando-se claramente que a transição de fase induzida pela diluição não é puramente geométrica. De fato, enquanto que, a transição de fase geométrica surge a partir de aspectos configuracionais causados exclusivamente pelo processo de diluição, o análogo quântico, onde a magnetização é destruída devido a uma certa

fração crítica de sítios com $U = 0$, tem-se que levar em conta os efeitos de repulsão Coulombiana e aspectos da não localidade dos elétrons; como foi discutido na [Seção 1.2](#) ao revisarmos os resultados de Ulmke *et al.* [39]

Vamos agora analisar o comportamento das correlações individuais nos sítios, substituindo as Eq. (3.7a) e (3.7b) na Eq. (3.4) com $\mathbf{q} = (0, 0)$;

$$\begin{aligned} S(0, 0) &= \frac{1}{3L^2} \left\langle \left(\mathbf{S}_i^d \mathbf{S}_j^d \right) + \left(\mathbf{S}_i^d \mathbf{S}_j^{p^x} + \mathbf{S}_i^d \mathbf{S}_j^{p^y} + \mathbf{S}_i^{p^x} \mathbf{S}_j^d + \mathbf{S}_i^{p^y} \mathbf{S}_j^d \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\mathbf{S}_i^{p^x} \mathbf{S}_j^{p^x} + \mathbf{S}_i^{p^x} \mathbf{S}_j^{p^y} + \mathbf{S}_i^{p^y} \mathbf{S}_j^{p^x} + \mathbf{S}_i^{p^y} \mathbf{S}_j^{p^y} \right) \right\rangle \\ S(0, 0) &= \frac{1}{3} \left(S_{dd} + 2S_{p^x d} + 2S_{p^y d} + S_{p^x p^x} + S_{p^y p^y} + 2S_{p^x p^y} \right), \end{aligned} \quad (3.10)$$

de modo que

$$S_{\alpha\gamma} = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} c_{\alpha\gamma}(\mathbf{i} - \mathbf{j}), \quad (3.11)$$

onde usamos o fato de que $S_{\alpha\gamma} = S_{\gamma\alpha}$. Uma vez feito o cálculo da média com as configurações de desordem (diluição), a invariância rotacional é recuperada, logo deve-se encontrar (na análise no limite termodinâmico) $S_{p^x p^x} = S_{p^y p^y} = S_{p^x p^y}$. Sendo assim, podemos definir

$$S_{pp} = \frac{1}{4} \left(S_{p^x p^x} + S_{p^y p^y} + 2S_{p^x p^y} \right) \quad (3.12)$$

e

$$S_{pd} = \frac{1}{2} \left(S_{p^x d} + S_{d p^y} \right), \quad (3.13)$$

de modo que podemos escrever

$$S(0, 0) = \frac{1}{3} \left(S_{dd}^F + 4S_{pp}^F - 4|S_{pd}^{AF}| \right), \quad (3.14)$$

em que S_{dd}^F e S_{pp}^F representam, respectivamente, os fatores de estrutura individuais para correlações dd e pp , sendo estas F, e S_{pd}^{AF} representa o fator de estrutura individual para correlações pd , sendo estas (em regime de banda semipreenchida) correlações AF e, por tal motivo, estão explícitas em valor absoluto, pois $S_{pd} < 0$ em concordância com resultados rigorosos de acordo com a Ref. [52].

A [Figura 3.8](#) mostra o comportamento do fator de estrutura individual para as correlações pp , pd e dd em uma rede de tamanho $L = 8$ e diferentes frações de diluição f . Observa-se que as correlações pp apresentam-se de forma mais intensa comparadas às correlações pd e dd . A presença dos sítios p é de extrema importância para a observação da ordem de longo alcance, pois as contribuições maiores à formação de momento local advém desses sítios. A variação crescente no valor da diluição suprime de forma rápida as correlações dd , seguida das correlações pd e de forma menos intensa, nas correlações pp , como pode ser visto na [Figura 3.8](#). As correções nos fatores de estrutura individuais analisados no limite termodinâmico serão dadas de acordo com a Eq. (3.9), portanto, $S_{\alpha\gamma}^{F(AF)}/L^2 \rightarrow (m_{\alpha\gamma}^{F(AF)})^2$ quando $1/L \rightarrow 0$ e assim a magnetização total pode

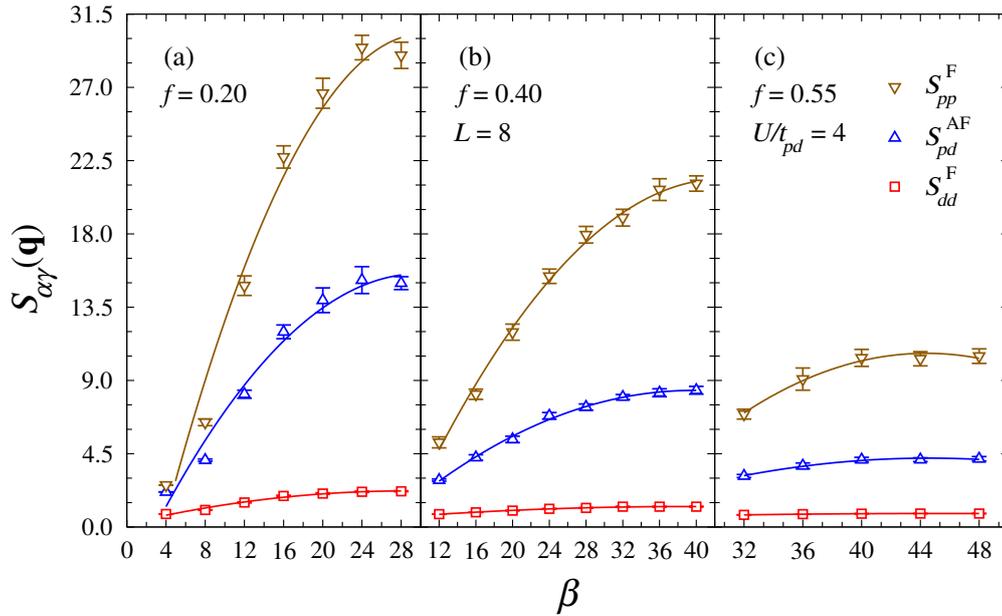


Figura 3.8: Comportamento do fator de estrutura magnético individual para as correlações pp , pd e dd em uma rede de tamanho $L = 8$ e diferentes frações de diluição f . As correlações pp são intensas comparadas as demais, justificado uma maior contribuição à formação de momento local devido ao sítios p .

ser escrita como

$$m_F^2 = \frac{1}{3} \left[(m_{dd}^F)^2 + 4(m_{pp}^F)^2 - 4(m_{pd}^{AF})^2 \right], \quad (3.15)$$

em que m_{dd}^F e m_{pp}^F , correspondem às magnetizações individuais com relação às correlações dd e pp , respectivamente, sendo estas de caráter F, e m_{pd}^{AF} a magnetização individual com relação às correlações pd , de caráter AF. A Figura 3.9 mostra a extrapolação ao limite termodinâmico dos valores dos fatores de estrutura individuais S_{dd}^F , S_{pd}^{AF} e S_{pp}^F , respectivamente, como função do inverso do comprimento linear das redes para diferentes frações de diluição f . Os resultados nos gráficos foram calculados com base nos dados obtidos de acordo com a estabilização dos fatores de estrutura individuais.

Na Figura 3.9 (a), nota-se que a diluição afeta fortemente as correlações individuais dd , com estas sendo suprimidas por volta de $f = 0.20$. De fato, a Figura 3.8 mostra indícios de que as correlações entre os sítios d não persistem em longo alcance. A fração de diluição crítica para a qual as correlações pd são suprimidas fica pouco acima de $f = 0.50$; um valor pouco maior que o dobro comparado a fração de supressão das correlações dd . A Figura 3.9 (c) mostra as correlações pp , as quais são dominantes no sistema com fração crítica de diluição no intervalo $0.50 < f_{crit}^{pp} < 0.55$; o mesmo intervalo observado na análise da Figura 3.6.

A partir dos dados da Figura 3.9, pode-se mostrar o comportamento das magnetizações individuais nos sítios como função da fração de diluição; como pode ser visto na Figura 3.10. Como observado, as correlações dd não persistem em longo alcance. Observe que, para $f = 0.50$, m_{pd}^{AF} está próxima de seu valor crítico de supressão. Para essa mesma fração de diluição, m_{pp}^F ainda persiste e se mostra suportar uma fração de diluição um pouco maior que $f = 0.50$. Apesar dos efeitos da diluição serem compreendidos por argumentos da percolação, cada um dos três pontos

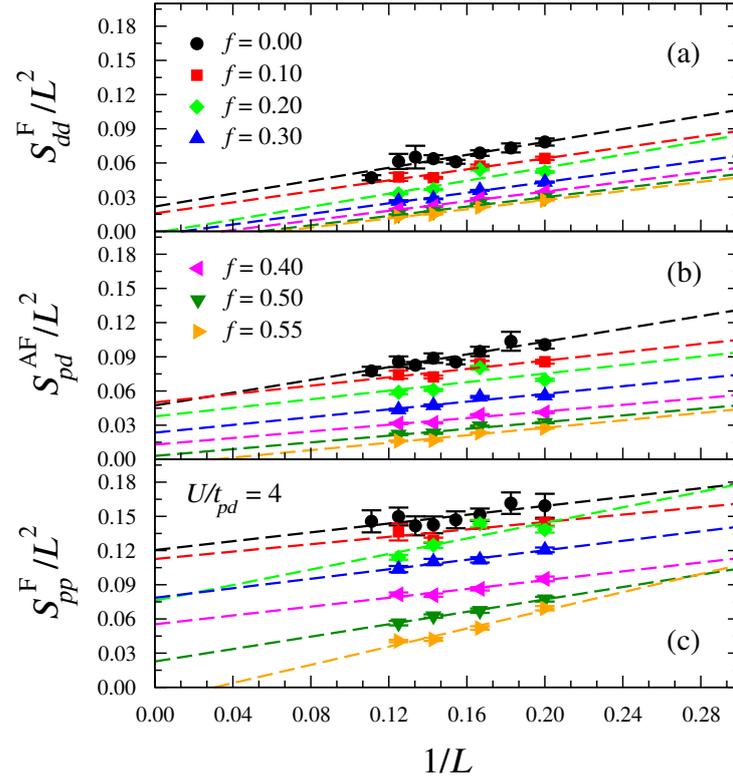


Figura 3.9: Análise de escala de tamanho finito para os valores dos fatores de estrutura individuais (a) S_{dd}^F , (b) S_{pd}^{AF} e (c) S_{pp}^F como função do inverso do tamanho linear das redes para diferentes frações de diluição f de acordo com a Eq. (3.9). Observe como o aumento da fração de diluição nos sítios suprime, de forma crescente, as correlações entre os spins. Em (a) a magnetização é rapidamente suprimida para as correlações dd , com $f_{crit}^{dd} < 0.20$. As correlações pp , em (c), são dominantes no sistema, com supressão da magnetização para $0.50 < f_{crit}^{pp} < 0.55$.

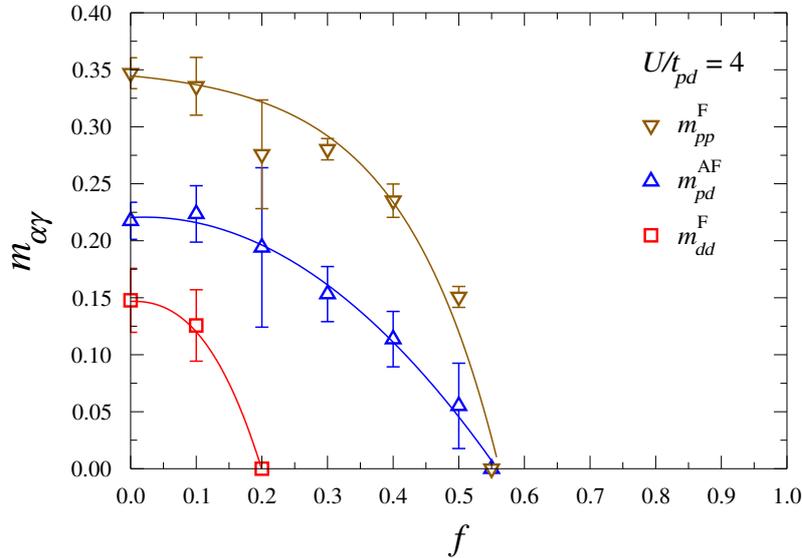


Figura 3.10: Comportamento das magnetizações individuais nos sítios como função da fração de diluição. Observe a rápida supressão da magnetização individual m_{dd}^F . As magnetizações m_{pd}^{AF} e m_{pp}^F persistem para diluições mais altas, sendo esta última dominante no sistema. As linhas sólidas são apenas um guia para os olhos.

de supressão da ordem ferromagnética na **Figura 3.10**, não caracteriza uma transição de fase em

3.2. MAGNETISMO DILUÍDO NA REDE DE LIEB

si. O apelo experimental sugere a medida do parâmetro de ordem total do sistema, a magnetização total.

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

Nesta dissertação, investigamos as propriedades fundamentais de sistemas magnéticos para além da validade do teorema de Lieb, considerando o modelo de Hubbard repulsivo em regime de banda semipreenchida fazendo diluição aleatória no valor local da interação U , com probabilidade f para $U = 0$ e $(1 - f)$ para $U = 4$ nos sítios da rede. Para esta finalidade, usamos o método de Monte Carlo quântico determinantal para resolver exatamente o problema dos elétrons interagentes em redes quadradas de tamanho linear $L \leq 8$. Buscamos analisar os efeitos da diluição no ordenamento magnético a partir da análise da média do momento local, das funções de correlação spin-spin e da magnetização nas duas sub-redes.

A partir da análise da média do momento local, observou-se que a maior contribuição era referentes aos sítios p . Para medir as correlações espaciais, calculamos o fator de estrutura magnético global $S(\mathbf{q})$ e analisamos seu comportamento como função do inverso da temperatura para diferentes tamanhos de redes L e frações de diluição f . O caso homogêneo exhibe ordem de longo alcance com os valores de $S(0, 0)$ crescendo com o aumento de L até a estabilização. A presença de sítios diluídos com $U = 0$ provoca um decréscimo nos valores de $S(0, 0)$, ocasionando a supressão das correlações espaciais entre os spins.

A análise de escala de tamanho finito para o modelo de Hubbard revela os efeitos da diluição no parâmetro de ordem global do sistema, sugerindo a ocorrência de uma transição de fase em torno de $f_{\text{crit}} \approx 0.55$. Para valores abaixo de f_{crit} , observa-se uma região onde a ordem ferromagnética é persistente até o ponto de supressão total. Acima de f_{crit} , a ordem é totalmente suprimida. O limiar crítico de percolação no caso clássico na rede de Lieb é $f_{\text{crit}}^{\text{clássico, Lieb}} \approx 0.26$, um valor muito menor que f_{crit} para o caso quântico, observando-se claramente que a transição de fase induzida pela diluição não é puramente geométrica, isto é, a dinâmica dos elétrons na rede de Lieb é fator decisivo para que o comportamento magnético seja mais robusto.

A análise dos fatores de estrutura individuais revela que as correlações ferromagnéticas pp são mais intensas, e menos intensas para as correlações ferromagnéticas dd , de modo que os efeitos da diluição são mais drásticos sobre estas últimas. A saber, uma pequena fração de diluição ($f = 0.20$) é suficiente para a suprimir as correlações dd , evidenciando que estas não persistem a longo alcance. As correlações ferromagnéticas pp são dominantes, e o intervalo para sua supressão

é equivalente ao intervalo observado no caso da supressão do parâmetro de ordem global do sistema, $0.50 < f_{\text{crit}} < 0.55$, isto é, as correlações pd e pp são realmente as que ajudam a caracterizar a transição de fase. Apesar dos efeitos da diluição serem compreendidos por argumentos da percolação, esses pontos críticos individuais não caracterizam uma transições de fase, visto que o apelo experimental sugere a medida física do parâmetro de ordem global do sistema, a magnetização total.

A análise dos efeitos da diluição na ordem magnética, a partir de outros valores de repulsão Coulombiana é pertinente. O caso $U = 0$ em todos os sítios da rede de Lieb, caracteriza um problema de percolação quântica, onde a probabilidade de ter um estado estendido representa o limiar de percolação nessa rede. A análise dos efeitos da diluição na magnitude do parâmetro de ordem, de acordo com valores finitos de repulsão U , poderia revelar intervalos de transição de fase diferentes do observado para $U = 4$. No limite de U grande, a análise seria feita via mapeamento no modelo de Heisenberg. Do ponto de vista experimental, a realização de uma rede de Lieb sob tais condições de diluição, proporcionaria uma possibilidade de manutenção do ordenamento magnético através do controle da diluição por meio da presença de átomos não magnéticos fazendo o papel das impurezas.

Apêndice A

Monte Carlo quântico determinantal

O método DQMC - Monte Carlo Quântico Determinantal [53], desenvolvido por Blankenbeller, Scalapino e Sugar, usa uma transformação de Hubbard-Stratonovich [54] (HS) para converter um problema de férmions interagentes em um problema não interagente ao custo da introdução de um campo auxiliar (grau de liberdade dependente do tempo imaginário) acoplado aos graus de liberdades dos férmions, então, o problema quântico de dimensão d passa a ser mapeado em um problema “clássico” de dimensão $d + 1$. Nessa formulação a função de partição do problema mapeado apresenta-se como um produto de determinantes fermiônicos; daí a expressão *determinantal* para o método. Neste apêndice apresentaremos uma breve discussão sobre os principais detalhes do método e da simulação tendo como exemplo de aplicação o modelo de Hubbard. Para informações mais detalhadas conferir as referências [53, 55–57].

A.1 O Método

Diferentemente de sistemas clássicos, características quânticas são exibidas quando os termos que compõem a Hamiltoniana não comutam entre si, por exemplo, os termos presentes na Hamiltoniana dada na Eq. (2.1). Os termos de *hopping* e potencial químico são quadráticos em operadores fermiônicos, mas o termo de interação Coulombiana não; é quártico, o que dificulta sua escrita em uma forma diagonal. Isso dificulta o cálculo da função de partição

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (\text{A.1})$$

pois o “traço” Tr deve ser feito sobre todos os estados do sistema com estes escritos na forma diagonal.

Para essa finalidade, faremos a separação dos termos de \mathcal{H} na exponencial com o esquema da decomposição de Suzuki-Trotter [58] (ST) que baseia-se no fato de que

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

sendo A e B operadores que não comutam entre si. Rotulando os termos quadrático e quártico por

\mathcal{K} e \mathcal{V} , respectivamente, temos $\mathcal{H} = \mathcal{K} + \mathcal{V}$ e definindo $\beta = M\Delta\tau$, a exponencial na Eq. (A.1) assume a forma

$$\begin{aligned} e^{-\beta(\mathcal{K}+\mathcal{V})} &= (e^{-\Delta\tau\mathcal{K}}e^{-\Delta\tau\mathcal{V}})^M + O[(\Delta\tau)^2][\mathcal{K}, \mathcal{V}] \\ &= \left(\prod_{i=1}^M e^{-\Delta\tau\mathcal{K}} e^{-\Delta\tau\mathcal{V}} \right) + O[(\Delta\tau)^2][\mathcal{K}, \mathcal{V}]. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

A analogia com a formulação das integrais de caminho na mecânica quântica, introduzida por Feynman e Hibbs [59], sugere uma interpretação para o parâmetro $\Delta\tau$; um intervalo de tempo imaginário $(0, \beta)$ discretizado em M fatias de largura $\Delta\tau = \beta/M$. A decomposição dada na Eq. (A.3) apresenta erros da ordem de $(\Delta\tau)^2$ e estes são eliminados no limite de $\Delta\tau \rightarrow 0$.

Com a separação do termo quártico \mathcal{V} , podemos aplicar a transformação (HS)

$$e^{\frac{1}{2}\mathcal{V}^2} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 - x\mathcal{V}} dx, \quad (\text{A.4})$$

onde substituímos a exponencial do quadrado do operador \mathcal{V} pela exponencial do próprio operador ao custo da introdução de um grau de liberdade auxiliar, o campo x , o qual acopla-se linearmente ao operador original \mathcal{V} . Como o tratamento do problema é computacional, é conveniente manipularmos variáveis que sejam discretas, pois de acordo com Hirsch [60, 61] os resultados para o caso discreto não diferem significativamente do caso contínuo. Sendo assim, substituiremos o campo auxiliar x pela variável s , que definirá um campo de Ising.

Para a Hamiltoniana de Hubbard no caso repulsivo ($U > 0$), o termo interagente $e^{-\Delta\tau\mathcal{V}}$, sob a transformação HS discreta tem a forma

$$\begin{aligned} e^{-U\Delta\tau n_{\uparrow}n_{\downarrow}} &= \frac{1}{2} e^{-\frac{U\Delta\tau}{2}n} \sum_{s=\pm 1} e^{-s\lambda m} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} e^{-(\sigma s\lambda + \frac{U\Delta\tau}{2})n_{\sigma}}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

em que $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$ e $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ são, respectivamente, a densidade eletrônica e a magnetização local e $\lambda = \cosh^{-1}(e^{U\Delta\tau/2})$ [56]. Como podemos ver na Eq. (A.5), a separação dos termos de interação fermiônica intra-sítio leva à introdução do campo s acoplando-se à magnetização local. Os graus de liberdade fermiônicos são agora associados à direção espacial i e à direção de tempo imaginário l , então cada campo HS será representado por um campo $s_i(l)$.

Agora todos os termos que compõem a Hamiltoniana \mathcal{H} encontram-se na forma quadrática e então podemos escrever a função de partição para o caso repulsivo no modelo de Hubbard usando a Eq. (A.1);

$$\mathcal{Z} \simeq \text{Tr}_{\{\mathbf{s}\}} \text{Tr} \prod_{l=M}^1 \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} e^{-\Delta\tau \sum_{i,j} a_{i,\sigma}^{\dagger} K_{ij} a_{j,\sigma}} e^{-\Delta\tau \sum_i a_{i,\sigma}^{\dagger} V_i^{\sigma}(l) a_{i,\sigma}}, \quad (\text{A.6})$$

com os traços são feitos sobre todos os campos de Ising e sítios da rede. A variável l da porção

tempo imaginário aparece fixada nos campos $\mathbf{s}_i(l)$ dos $N_s \times N_s$ elementos

$$V_i^\sigma(l) = \frac{1}{\Delta\tau} \lambda \sigma \mathbf{s}_i(l) + (\mu - U/2) \quad (\text{A.7})$$

da matriz diagonal $V^\sigma(l)$ e os $N_s \times N_s$ elementos da matriz de *hopping* K são

$$K_{ij} = \begin{cases} -t & \text{se } \mathbf{i} \text{ e } \mathbf{j} \text{ são primeiros vizinhos,} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Reescrevendo a Eq. (A.6) de acordo com a definição $B_l^\sigma \equiv e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(l)}$, temos

$$\mathcal{Z} \simeq \text{Tr}_{\{\mathbf{s}\}} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \det [\mathbb{1} + B_M^\sigma + B_{M-1}^\sigma \cdots B_1^\sigma] \quad (\text{A.9})$$

e introduzindo

$$\mathcal{M}^\sigma(\{\mathbf{s}\}) \equiv \mathbb{1} + B_M^\sigma + B_{M-1}^\sigma \cdots B_1^\sigma, \quad (\text{A.10})$$

a Eq. (A.9) assume a forma

$$\mathcal{Z} \simeq \text{Tr}_{\{\mathbf{s}\}} \det [\mathcal{M}^\uparrow(\{\mathbf{s}\})] \cdot \det [\mathcal{M}^\downarrow(\{\mathbf{s}\})] \quad (\text{A.11})$$

e com isso, expressamos a função de partição para o problema de férmions não mais interagentes como uma soma sobre os campos de Ising de um produto de determinantes. Essa expressão não é positiva definida, de modo que o produto dos determinantes pode resultar em uma quantidade negativa gerando o problema do sinal negativo, que será discutido a seguir.

A.2 Simulação computacional

A passo a seguir é entender como funciona a simulação computacional do problema quântico que foi mapeado em um problema “clássico” através das amostras das variáveis HS - campos $\mathbf{s}_i(l)$. Devido a esse mapeamento podemos usar, por exemplo, o algoritmo de Metropolis na abordagem do método de Monte Carlo clássico para encontrar configurações de spin que sejam viáveis por meio de uma “pesquisa local” nos campos $\mathbf{s}_i(l)$.

Inicialmente, uma configuração para um dado campo $\mathbf{s}_i(l)$ é fornecida e durante as simulações, cada campo é visitado e uma nova configuração $\mathbf{s}'_i(l)$, com nova orientação para o spin ($\uparrow \rightleftharpoons \downarrow$), é proposta de acordo com a razão

$$r_{\mathbf{s}_i(l)} = \frac{\det [\mathcal{M}^\uparrow(\{\mathbf{s}'\})] \cdot \det [\mathcal{M}^\downarrow(\{\mathbf{s}'\})]}{\det [\mathcal{M}^\uparrow(\{\mathbf{s}\})] \cdot \det [\mathcal{M}^\downarrow(\{\mathbf{s}\})]}, \quad (\text{A.12})$$

a qual pode ser interpretada como a razão entre os pesos de Boltzmann. A [Figura A.1](#) ilustra o processo de inversão da orientação do spin dos campos $\mathbf{s}_i(l)$. A aceitação da nova configuração é prevista pela razão $r_{\mathbf{s}_i(l)}$ entre a nova e a antiga orientação do spin. A Eq. (A.12) calcula a proposta

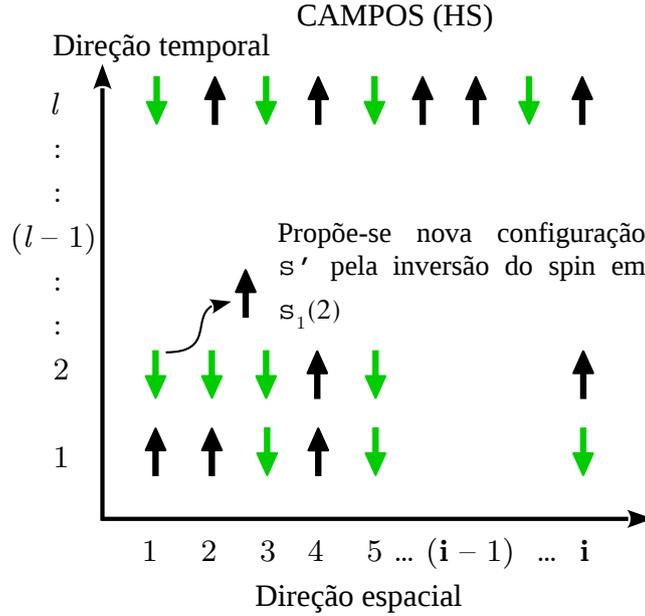


Figura A.1: Representação dos campos $s_i(l)$ em processo de inversão da orientação do spin via método DQMC com o uso do algoritmo de Metropolis. Observe que o campo $s_1(2)$ é o campo visitado e a ele será proposto uma configuração com nova orientação do spin prevista pela Eq. (A.12).

de aceitação-rejeição da nova configuração s' tal que $r \leq \min \{1, r_{s_i(l)}\}$, em que r é um número aleatório $\in [0, 1]$;

O processo de simulação do método DQMC consiste em duas etapas. A primeira delas é referente à termalização das configurações de spin a fim de equilibrar o sistema. A segunda, é referente às etapas de análises das amostras com o intuito de “pesquisar” configurações de spin que possuam certos valores de acordo com razão entre os pesos de Boltzmann que irão contribuir no cálculo da função de partição. As grandezas físicas são então medidas sobre as amostras de configurações de spin escolhidas de acordo com a segunda etapa da simulação.

Pode-se montar uma espécie de algoritmo que caracteriza as etapas da simulação. Após estabelecidos os parâmetros U/t , μ/t e $T = 1/\beta$ (em unidades do termo de *hopping* t):

1. Iniciar, aleatoriamente, todas as configurações HS: $s_i(l) = \pm 1$.
2. *Loop* de Monte Carlo: número de passos = passos com cálculo das grandezas.
 - (a) Escolhe-se o primeiro sítio da rede espaço-tempo com configuração $s_1(1)$.
 - (b) *Loop* na rede espaço-tempo.
 - i. Propõe-se uma nova configuração $s'_i(l)$ ao inverter a orientação do spin no sítio (i, l) : $s'_i(l) = -s_i(l)$, (ver **Figura A.1**).
 - ii. Calcula-se a razão entre os pesos de Boltzmann usando a Eq. (A.12).
 - iii. Proposta de aceitação-rejeição da nova configuração $s'_i(l)$:

$$s_i(l) = \begin{cases} s'_i(l) & \text{se } r \leq \min \{1, r_{s_i(l)}\}, \\ s_i(l) & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

para $r \in [0, 1]$, um número aleatório.

iv. Passe para a próxima configuração $s_i(l)$, de modo que

- se $i < N_s$, faça $i = i + 1, l = l$,
- se $i = N_s$ e $l < M$, faça $i = 1, l = l + 1$,
- se $i = N_s$ e $l = M$, faça $i = l = 1$,

em que N_s é o número de sítios da rede e M , o número de fatias temporais.

3. Após os passos de termalização, calcula-se as grandezas físicas.

Embora o método DQMC seja exato, ele apresenta o problema do sinal negativo nas simulações quando aplicado a baixas temperaturas. Com a simetria partícula-buraco temos a garantia de que os pesos de Boltzmann serão sempre positivos e então não haverá o problema de sinal; como é o caso do problema abordado na [Seção 3.2](#). Em geral, o problema do sinal negativo introduz fortes flutuações nas medições das grandezas, tornando as simulações mais complicadas e muitas vezes irrealizáveis. Até o momento, o problema não foi solucionado e continua sendo um obstáculo no uso do método DQMC de forma geral.

Referências Bibliográficas

- [1] Heisenberg, W. Zur theorie des ferromagnetismus. In *Original Scientific Papers Wissenschaftliche Originalarbeiten*. Springer, 1985. 1
- [2] Tasaki, H. From Nagaoka's ferromagnetism to flat-band ferromagnetism and beyond. *Progress of Theoretical Physics*, 99, 1998. 1, 2
- [3] Hubbard, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 276(1365), 1963. 1, 9
- [4] Rasetti, M. *The Hubbard model: recent results*, volume 7. World Scientific, 1991. 1
- [5] Montorsi, A. *The Hubbard Model: a collection of reprints*, chapter 1. World Scientific, 1992. 1
- [6] Hirsch, J. E. Two-dimensional Hubbard model: numerical simulation study. *Physical Review B*, 31, 1985. v, 1, 10
- [7] Fazekas, P. *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. Series in modern condensed matter physics. World Scientific, 1999. 1, 12
- [8] Bach, V. and Lieb, E. H. and Solovej, J. P. Generalized Hartree-Fock theory and the Hubbard model. *Journal of Statistical Physics*, 76(1), 1994. 1
- [9] Bach, V. and Poelchau, J. Accuracy of the Hartree-Fock approximation for the Hubbard model. *Journal of Mathematical Physics*, 38(4), 1997. 1
- [10] Nagaoka, Y. Ferromagnetism in a narrow, almost half-filled s band. *Physical Review*, 147(1), 1966. 1
- [11] Lieb, E. H. Two theorems on the Hubbard model. *Physical Review Letters*, 62, 1989. 1, 2, 14, 19
- [12] Guzman-Silva, D. and Cortes, C. and Bandres, M. and Rechtsman, M. C. and Weimann, S. and Nolte, S. and Segev, M. and Szameit, A. and Vicencio, R. Experimental observation of bulk and edge transport in photonic Lieb lattices. *New Journal of Physics*, 16, 2014. iv, 2
- [13] Julku, A. and Peotta, S. and Vanhala, T. I. and Kim, Dong-Hee and Törmä, P. Geometric origin of superfluidity in the Lieb-lattice flat band. *Physical Review Letters*, 117, 2016. 2

- [14] Mielke, A. Ferromagnetic ground states for the Hubbard model on line graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24(2), 1991. 2
- [15] Mielke, A. Ferromagnetism in the Hubbard model on line graphs and further considerations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24(14), 1991. 2
- [16] Tasaki, H. Ferromagnetism in the Hubbard models with degenerate single-electron ground states. *Physical Review Letters*, 69, Sep 1992. 2
- [17] Mielke, A. and Tasaki, H. Ferromagnetism in the Hubbard model. *Communications in mathematical physics*, 158(2), 1993. 2
- [18] Daniel L. and Alexei A. and Sergej F. Artificial flat band systems: from lattice models to experiments. *Advances in Physics: X*, 3(1), 2018. 2
- [19] Vicencio, R. A. and Cantillano, C. and Morales-Inostroza, L. and Real, B. and Mejía-Cortés, C. and Weimann, S. and Szameit, A. and Molina, M. I. Observation of localized states in Lieb photonic lattices. *Physical Review Letters*, 114, Jun 2015. iv, 2, 3
- [20] Taie, S. and Ozawa, H. and Ichinose, T. and Nishio, T. and Nakajima, S. and Takahashi, Y. Coherent driving and freezing of bosonic matter wave in an optical Lieb lattice. *Science Advances*, 1(10), 2015. iv, 2, 3
- [21] Slot, M. R. and Gardenier, T. S. and Jacobse, P. H. and van Miert, G. C. P. and Kempkes, S. N. and Zevenhuizen, S. J. M. and Smith, C. M. and Vanmaekelbergh, D. and Swart, I. Experimental realization and characterization of an electronic Lieb lattice. *Nature physics*, 13(7), 2017. iv, 2, 3
- [22] Weeks, C. and Franz, M. Topological insulators on the Lieb and perovskite lattices. *Physical Review B*, 82, Aug 2010. 2
- [23] Niță, M. and Ostahie, B. and Aldea, A. Spectral and transport properties of the two-dimensional Lieb lattice. *Physical Review B*, 87, Mar 2013. 2
- [24] Noda, K. and Koga, A. and Kawakami, N. and Pruschke, T. Ferromagnetism of cold fermions loaded into a decorated square lattice. *Physical Review A*, 80, Dec 2009. 3
- [25] Noda, K. and Inaba, K. and Yamashita, M. Flat-band ferromagnetism in the multilayer Lieb optical lattice. *Physical Review A*, 90, Oct 2014. 3
- [26] Mukherjee, S. and Spracklen, A. and Choudhury, D. and Goldman, N. and Öhberg, P. and Andersson, E. and Thomson, R. R. Observation of a localized flat-band state in a photonic Lieb lattice. *Physical Review Letters*, 114, Jun 2015. 3
- [27] Ozawa, H. and Taie, S. and Ichinose, T. and Takahashi, Y. Interaction-driven shift and distortion of a flat band in an optical Lieb lattice. *Physical Review Letters*, 118(17), 2017. 3

- [28] Costa, N. C. and Mendes-Santos, T. and Paiva, T. and dos Santos, R. R. and Scalettar, R. T. Ferromagnetism beyond Lieb's theorem. *Physical Review B*, 94(15), 2016. v, 3, 16, 18, 19
- [29] Ziman, J. M. *Models of disorder: the theoretical physics of homogeneously disordered systems*. Cambridge University Press, 1979. 5
- [30] Stinchcombe, R. B. in: Domb, C. and Lebowitz, J. L. (Eds.) Phase Transitions and Critical Phenomena. *Academic Press, London*, vol. 7, 1983. iv, 5, 6, 7
- [31] Sato, H. and Arrott, A. and Kikuchi, R. Remarks on magnetically dilute systems. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 10(1), 1959. 6
- [32] Elliott, R. J. and Heap, B. R. and Morgan, D. J. and Rushbrooke, G. S. Equivalence of the critical concentrations in the Ising and Heisenberg models of ferromagnetism. *Physical Review Letters*, 5(8), 1960. 6
- [33] Essam, J. W. in: Domb, C. and Green, M. S. (Eds.) Phase Transitions and Critical Phenomena. *Academic Press, London*, vol. 2, 1972. 6
- [34] Yeomans, J. M. and Stinchcombe, R. B. Critical properties of the site-diluted Ising ferromagnet. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 11(13), 1978. 6
- [35] Yeomans, J. M. and Stinchcombe, R. B. Critical properties of site- and bond-diluted Ising ferromagnets. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 12(2), 1979. 6
- [36] Yeomans, J. M. and Stinchcombe, R. B. Critical properties of the mixed Ising ferromagnet. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 13(1), 1980. 6
- [37] Gebele, T. Site percolation threshold for square lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 17(2), 1984. 7
- [38] Sur, A. and Lebowitz, J. L. and Marro, J. and Kalos, M. H. and Kirkpatrick, S. Monte Carlo studies of percolation phenomena for a simple cubic lattice. *Journal of Statistical Physics*, 15(5), 1976. 7
- [39] Ulmke, M. and Denteneer, P. J. H. and Scalettar, R. T. and Zimanyi, G. T. Enhancement of long-range antiferromagnetic order by nonmagnetic impurities in the Hubbard model. *Europhysics Letters*, 42(6), 1998. iv, 8, 24
- [40] Stauffer, D. and Aharony, A. *Introduction to percolation theory*. Taylor & Francis, 2014. 8
- [41] Mielke, A. *Many-Body Physics: From Kondo to Hubbard*, volume 5, chapter 11. Forschungszentrum Jülich GmbH Institute for Advanced Simulation, <https://www.cond-mat.de/events/correl15/>, 2015. 9
- [42] Powell, B. J. An introduction to effective low-energy Hamiltonians in condensed matter physics and chemistry. Technical Report arXiv:0906.1640, Jun 2009. 11

- [43] Emery, V. J. Theory of the quasi-one-dimensional electron gas with strong "on-site" interactions. *Physical Review B*, 14, 1976. 11
- [44] Mermin, N. D. and Wagner, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22), 1966. 12
- [45] dos Santos, R. R. Attractive Hubbard model on a triangular lattice. *Physical Review B*, 48(6), 1993. 12
- [46] Lieb, E. and Mattis, D. Ordering energy levels of interacting spin systems. *Journal of Mathematical Physics*, 3(4), 1962. 15
- [47] França, V. V. and Capelle, K. Effect of spatial inhomogeneity on the mapping between strongly interacting fermions and weakly interacting spins. *Physical Review B*, 82, 2010. 18
- [48] Lieb, E. and Mattis, D. Theory of ferromagnetism and the ordering of electronic energy levels. *Physical Review*, 125, 1962. 19
- [49] Huse, D. A. Ground-state staggered magnetization of two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets. *Physical Review B*, 37, 1988. 22
- [50] Tarasevich, Y. Y. and Van Der Marck, S. C. An investigation of site-bond percolation on many lattices. *International Journal of Modern Physics C*, 10(07), 1999. 23
- [51] Oliveira, W. S and Costa, N. C. and Lima, J. P. and dos Santos, R. R. Classical and quantum percolation on the Lieb lattice. *unpublished*, 2019. 23
- [52] Shen, Shun-Qing and Qiu, Zhao-Ming and Tian, Guang-Shan. Ferrimagnetic long-range order of the Hubbard model. *Physical Review Letters*, 72, Feb 1994. 24
- [53] Blankenbecler, R. and Scalapino, D. J. and Sugar, R. L. Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I. *Physical Review D*, 24, 1981. 30
- [54] Hubbard, J. Calculation of partition functions. *Physical Review Letters*, 3(2), 1959. 30
- [55] White, S. R. and Scalapino, D. J. and Sugar, R. L. and Loh, E. Y. and Gubernatis, J. E. and Scalettar, R. T. Numerical study of the two-dimensional Hubbard model. *Physical Review B*, 40, 1989. 30
- [56] dos Santos, R. R. Introduction to quantum Monte Carlo simulations for fermionic systems. *Brazilian Journal of Physics*, 33(1), 2003. 30, 31
- [57] Varney, C. N. and Lee, C. R. and Bai, Z. J. and Chiesa, S. and Jarrell, M. and Scalettar, R. T. Quantum Monte Carlo study of the two-dimensional fermion Hubbard model. *Physical Review B*, 80, 2009. 30
- [58] Suzuki, M. Quantum Monte Carlo Methods. *Solid State Sciences*, 74, 1986. 30

- [59] Feynman, R. P. and Hibbs, A. R. and Styer, D. F. *Quantum mechanics and path integrals*. Courier Corporation, 2010. 31
- [60] Hirsch, J. E. Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models. *Physical Review B*, B28, 1983. 31
- [61] Hirsch, J. E. Erratum: Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models. *Physical Review B*, 28, 10 1983. 31