



Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG

Instituto de Ciências Exatas - ICEX

Departamento de Física

Emaranhamento, dinâmica de não-equilíbrio e supercondutividade em sistemas de elétrons fortemente interagentes

Helena Bragança

Orientadora: Prof. Dra. Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Minas Gerais,
para obtenção do título de Doutora em Física.

Dezembro 2017

“I was taught at school, when I had done a sum, to ‘prove my answer’. The proof or verification of my Christian answer to the cosmic sum is this. When I accept Theology I may find difficulties, at this point or that, in harmonising it with some particular truths which are embedded in the cosmology derived from science. But I can get in, or allow for, science as a whole. Granted that Reason is prior to matter and that the light of the primal Reason illuminates finite minds, I can understand how men should come, by observation and inference, to know a lot about the universe they live in. (...)

If minds are wholly dependent on brains, and brains on biochemistry, and biochemistry (in the long run) on the meaningless flux of the atoms, I cannot understand how the thought of those minds should have any more significance than the sound of the wind in the trees. And this is to me the final test. This is how I distinguish dreaming and waking. The waking world is judged more real because it can contain the dreaming world; the dreaming world is judged less real because it cannot contain the waking one. Christian theology can fit in science, art, morality, and the sub-Christian religions.

I believe in Christianity as I believe that the Sun has risen, not only because I see it, but because by it I see everything else.”

Is Theology Poetry?, C. S. Lewis

Resumo

O estudo de fenômenos que emergem da interação entre os elétrons é o principal tema desta tese. (i) Utilizamos propriedades de informação quântica para a descrição de sistemas de muitos corpos, (ii) analisamos a dinâmica de sistemas quânticos fechados após a alteração de parâmetros externos e (iii) estudamos características do rico diagrama de fase de supercondutores de alta temperatura crítica.

Em um primeiro trabalho relacionado à descrição de sistemas interagentes via propriedades de informação quântica, investigamos a relação entre medidas de emaranhamento e transições de fase de diferentes ordens. Considerando cadeias de spins, resolvidas por Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG, na sigla em inglês), observamos que propriedades operacionais relacionadas a não analiticidades do espectro de emaranhamento são boas indicadoras de simetrias do sistema, mas não necessariamente de transições de fase. Em um segundo trabalho, investigamos a conjunção entre efeitos de interação elétron-elétron e desordem sobre a localização de sistemas físicos. Embora os dois mecanismos, separadamente, tendam a localizar o sistema, nossos resultados numéricos para sistemas pequenos revelam que a conjunção entre os dois efeitos pode levar os sistemas a um regime mais delocalizado.

No estudo da dinâmica de sistemas quânticos fechados, consideramos os chamados *quenches* quânticos, em que os sistemas evoluem segundo um Hamiltoniano diferente do que define o estado inicial. Isso provoca alterações que se propagam ao longo do sistema com uma velocidade bem definida, gerando efeitos de “cones de luz”. Em um primeiro trabalho, observamos a formação de dois cones de luz distintos, relacionados a diferentes excitações do modelo de spin considerado. Em um segundo trabalho, analisamos a evolução do sistema após o acoplamento de uma impureza magnética a um banho não magnético, descrito por um metal interagente. Estudamos, assim, os efeitos da interação elétron-elétron no banho sobre a formação espacial e temporal do efeito Kondo, responsável pelo estado singlete formado entre a impureza e o banho. Nesses dois trabalhos, os modelos foram resolvidos via DMRG dependente do tempo.

Finalmente, consideramos supercondutores de alta temperatura crítica, nos quais a fase supercondutora emerge da dopagem de um isolante de Mott (isolante induzido pela forte repulsão eletrônica). Esses materiais são assunto de pesquisa intensa principalmente pela existência da competição entre diferentes fases da matéria e pela ausência de consenso a respeito do mecanismo responsável pela supercondutividade não convencional. No nosso trabalho, estudamos o modelo de Hubbard bidimensional via extensão *cluster* da Teoria de Campo Médio Dinâmico, a fim de contribuir para o entendimento dos mecanismos físicos envolvidos no rico diagrama de fase desses materiais. Nossos resultados revelam uma coincidência entre a dopagem limite até a qual observa-se uma fase metálica anômala (*pseudo-gap*) nas proximidades da fase supercondutora e a dopagem característica da transição de Lifshitz (isto é, da mudança da superfície de Fermi do tipo buraco para o tipo elétron), indicando que há uma relação entre mecanismos de correlação e a topologia da superfície de Fermi.

Palavras-chave: Interação forte, desordem, supercondutividade, não-equilíbrio, informação quântica.

Abstract

The main goal of this thesis is the study of properties that emerge from the interaction between particles. (i) We describe many-body systems through quantities related to quantum information, (ii) study the non-equilibrium dynamics of closed quantum systems after changes in external parameters and (iii) investigate the rich phase diagram of high-temperature superconductors.

In the first work we investigate the relation between entanglement and quantum phase transitions of different orders. Studying spin chains via density matrix renormalization group (DMRG), we observe that operational properties, related to non-analyticities of the entanglement spectrum, are good detectors of explicit symmetries of the model, but not necessarily of phase transitions. In another work, we investigate how the interplay between electron-electron interaction and disorder affects transport in many-body systems. Our numerical results for small chains show that, although interaction and disorder, separately, lead to the localization of the electronic wave functions, the co-action of both effects can drive the system to a more delocalized regime.

Concerning the non-equilibrium dynamics, we use a protocol called quantum quench, in which the system evolves with an Hamiltonian different from the one that defines the initial state. The quench produces local alterations that propagate throughout the system with a velocity that defines an effective light cone. In one work, we observe the formation of two distinct light-cones after the quench, each one related to a different excitation of the spin chain under consideration. In a second work, we investigate the evolution of a system after the connection of a magnetic impurity to a non-magnetic bath, described by an interacting metal. We study, in this way, the effects of electron-electron interaction on the bath over the spatial and temporal development of the Kondo effect, which leads to the formation of a non-local singlet state comprised by the bath and the impurity spin. In both works the models were solved by time-dependent DMRG.

Finally, we consider high-temperature superconductors, in which the superconducting phase emerges from doped Mott insulators (insulators induced by electronic repulsion). This class of materials has been attracting a lot of theoretical and experimental investigation, because their phase diagram comprises different anomalous phases and also because the mechanism that leads to superconductivity in this case is still unknown. In our work, we study the two-dimensional Hubbard model via a cluster extension of the dynamical mean field theory with expectation of contributing to the understanding of such materials. Our results unveil a coincidence between the limit doping up to which an anomalous (pseudo-gap) metallic phase, which is observed close to the superconducting phase, is stable and the critical doping of the Lifshitz transition (that is, the transition from hole- to electron-like Fermi surface), indicating that there is a relation between correlations and the Fermi surface topology.

Keywords: Strong correlation, disorder, superconductivity, non-equilibrium, quantum information.

Agradecimentos

Agradeço a Carol pela orientação, paciência, dedicação e confiança. Grande exemplo de profissional, mulher, cientista e orientadora, teve papel fundamental na minha formação como física e pessoa, desde a iniciação científica, na graduação.

Agradeço aos professores Rodrigo Pereira, Marcelo França e Raphael Drummond pela oportunidade de colaboração e por toda a discussão de física (e um pouco de matemática) interessante e produtiva.

Aos colegas (doutor) Eduardo Mascarenhas e (futuro doutor) Alberto Luiz de Paula Júnior pela oportunidade de aprendermos e trabalharmos juntos. E ao Walber, Nathan e ao Flávio pela convivência alegre no laboratório, pela paciência na correria da reta final e pelas reuniões produtivas.

A special acknowledgment to Professor Marcello Civelli for the excellent orientation during the sandwich, for the detailed explanations, for the care and patience. And to all the theoretical group of the Solid State Physics Laboratory at Univesrité Paris-Sud for the affectionate receptivity.

Agradeço a todos os professores do Departamento de Física da UFMG, que contribuíram para minha formação por meio de aulas e seminários, e aos queridos amigos da física, que tornaram os anos de trabalho mais alegres.

Agradeço também a minha mãe pelo cuidado e amor, ao meu pai pelo incentivo e exemplo e aos meus irmãos pela companhia e aprendizado ao longo dos anos. Agradeço especialmente ao Patrick, grande companheiro, pela força, compreensão e incentivo, por acreditar nos meus sonhos e sonhar junto (Ao longo desses anos você se tornou um pouco físico. Esse doutorado é seu também).

Finalmente, agradeço ao CENAPAD-SP, onde parte dos resultados numéricos foram obtidos, e a FAPEMIG, CAPES e CNPq pelo apoio financeiro.

Lista de Figuras

1	Elementos de transição organizados de acordo com localização dos orbitais . . .	2
1.1	Representação esquemática da transição de Mott	10
1.2	Resultados experimentais - transição de Mott no V_2O_3	11
1.3	Esboço de funções de onda estendidas e localizadas	12
1.4	Esboço da localização de funções de onda eletrônicas devido à desordem. . . .	12
1.5	Resultados experimentais para a densidade de estados local para diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$	13
1.6	Observação experimental da localização de ondas de matéria.	14
2.1	Esboço de um cadeia de spins separada em subpartes	17
2.2	Diagrama de fase do modelo de Hubbard estendido obtido por propriedades de emaranhamento	19
2.3	Perfil de convertibilidade $\chi_\alpha(g)$ para uma cadeia de Ising com campo transversal.	20
2.4	Diagrama de fases do modelo XXZ com spin-1/2	23
2.5	Diagrama de fases do modelo XXZ com spin-1	24
2.6	Resultados para os perfis de convertibilidade e majoração em cadeias de spin-1/2	25
2.7	Entropia de emaranhamento para cadeias de Heisenberg de spin-1/2	26
2.8	Resultados para o perfil de convertibilidade em cadeias de spin-1	27
2.9	Espectro de emaranhamento de cadeias de Heisenberg com spin-1	28
2.10	Entropias de R�enyi para uma cadeia de spin-1	30
2.11	Entropia de emaranhamento em função do tamanho da partição em cadeias de spin-1 com anisotropia	31
3.1	Diagrama de desordem em função da energia dos auto-estados do Hamiltoniano para a cadeia de Heisenberg desordenada	35
3.2	Taxa de participação de estados maximamente localizados em função da interação ou da desordem	41
3.3	Taxa de participação de estados maximamente localizados em função de interação e desordem	42
3.4	Taxa de participação reescalada para sistemas de diferentes tamanhos	42

3.5	Taxa de participação em função da interação e desordem para estados iniciais específicos	43
3.6	Gap típico em função da interação e da desordem	44
4.1	Exemplo experimental de cone de luz após um <i>quench</i>	49
4.2	Representação esquemática do <i>quench</i> local em que conectamos duas cadeias de spin.	50
4.3	Cones de luz da magnetização e comparação entre velocidades da dinâmica e do equilíbrio	51
5.1	Efeito Kondo - resistência em função da temperatura	53
5.2	Diferentes regimes do modelo de Anderson de uma impureza	54
5.3	Ressonância Kondo no nível de Fermi	56
5.4	Correlações não locais de spin em equilíbrio	57
5.5	Mapa de cores para a densidade de spin local em função do tempo e espaço após um <i>quench</i>	59
5.6	Comportamento de equilíbrio para uma impureza magnética acoplada a cadeias interagentes	61
6.1	Esboço do modelo estudado: duas cadeias de Hubbard acopladas a uma impureza magnética	64
6.2	Evolução temporal da ocupação local no sítio da impureza	66
6.3	Evolução temporal do caráter magnético da impureza	67
6.4	Evolução temporal do spin local no sítio da impureza	68
6.5	Cones de luz de observáveis locais na formação do efeito Kondo	69
6.6	Velocidades de não-equilíbrio após o <i>quench</i> de hibridização	70
6.7	Entropia de emaranhamento em cadeias metálicas acopladas a uma impureza magnética	71
6.8	Cones de luz da variação de entropia em cadeias Hubbard acopladas a impurezas magnéticas	72
6.9	Correlações de spin não locais em equilíbrio	73
6.10	Correlações não locais de spin em equilíbrio, em função das interações	74
6.11	Mapa de cores das correlações em função do tempo e espaço	75
6.12	Correlações não locais de spin, dinâmica e equilíbrio	76
6.13	Evolução da soma das correlações não locais de spin	77
6.14	Observáveis locais no sítio da impureza e soma das correlações não locais de spin para $U = 4.0$, $U_d = [2.0, 4.0, 7.0]$ e diferentes tamanhos e geometrias.	78
7.1	Linha do tempo de supercondutores com respectivas temperaturas críticas	84

7.2	Comparação entre o diagrama de fase de cupratos e de supercondutores baseados em ferro	86
7.3	Estrutura cristalina de cupratos	89
7.4	Plano de cobre e oxigênio em cupratos	90
7.5	Diagrama de fase de cupratos	91
7.6	Espectro de tunelamento de $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ para diferentes temperaturas, obtido por STM	92
7.7	Topografia de $Ca_{1.9}Na_{0.1}CuO_2Cl_2$ obtida por STM	93
7.8	Figura de ARPES para a dependência do <i>gap</i> com relação ao momento	94
7.9	Figura de ARPES da função espectral para diferentes valores de k	95
7.10	Peso espectral em função do momento em torno da energia de Fermi para $Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$	96
7.11	Medida experimental para a dopagens críticas da transição de Lifshitz e da dopagem correspondente ao fim da fase <i>pseudo-gap</i>	97
7.12	Coincidência entre as dopagens críticas da transição de Lifshitz e do fim da fase <i>pseudo-gap</i>	98
7.13	Comparações entre Monte Carlo Quântico e extensão de cluster da DMFT	99
7.14	Mapa de intensidade do peso espectral para diferentes níveis de dopagem, obtido via CDMFT	100
8.1	Mapeamento e evolução temporal da Teoria de Campo Médio Dinâmico.	104
8.2	Mapeamento da Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular.	107
8.3	Esboço do <i>cluster</i> de $N_c = 4$ sítios	109
8.4	Diferentes parametrizações do banho em CDMFT	112
9.1	Diagrama de fase $U \times t'$ para o modelo de Hubbard bidimensional	120
9.2	Função espectral a baixas energias e parte imaginária da auto-energia no ponto anti-nodal. Diferentes soluções em semi-preenchimento	121
9.3	Comparação entre energias de diferentes soluções obtidas em semi-preenchimento	123
9.4	Esboço da topologia da superfície de Fermi e respectivo valor da energia de quase-partícula renormalizada no ponto anti-nodal	124
9.5	Diagrama de fase $U \times p$ do modelo de Hubbard bidimensional	125
9.6	Energia total em função da dopagem, para $t' = -0.1$ e diferentes valores de U	126
9.7	Parte imaginária da auto-energia no ponto anti-nodal e superfície de Fermi para diferentes regiões do diagrama de fase $U \times p$	127
9.8	Função espectral no nível de Fermi em função do momento para diferentes regiões do diagrama de fase do modelo de Hubbard dopado	128
9.9	Correlações e topologia da superfície de Fermi	129

A.1	Interação entre átomos frios: Modelo de dois canais para a ressonância de Feshbach	163
A.2	Representação esquemática da simulação do modelo de Hubbard em redes óticas com átomos frios	164
A.3	Perfil de densidade local para sítios com ocupação simples e dupla no modelo de Hubbard 2D realizado em uma rede ótica	165
A.4	Expansão dos átomos fermiônicos após um <i>quench</i> do potencial de armadilhamento	166
A.5	Medidas da densidade local de átomos fermiônicos em rede ótica após um <i>quench</i>	167
A.6	Simulação do diagrama de fase de cupratos com átomos frios em redes óticas .	168
A.7	Dependência do comprimento de localização com a desordem e a temperatura	169
B.1	Estrutura fundamental do DMRG.	174
B.2	Primeiros passos da parte infinita de DMRG.	175
B.3	Um <i>sweep</i> completo no cálculo DMRG.	177
B.4	Decomposição do Hamiltoniano em sítios pares e ímpares.	179
D.1	Representação esquemática da ligação entre elétrons através de vibrações da rede.	186
F.1	Superfície de Fermi em uma rede quadrada de elétrons não interagentes	195
F.2	Rede quadrada com <i>hopping</i> entre segundos vizinhos	196

Lista de siglas

ARPES Espectroscopia de Fotoemissão Resolvida em Ângulo
(do inglês *angle resolved photoemission spectroscopy*).

BCS (Teoria) Bardeen, Cooper e Schrieffer.

BKT (Transição) Berezinskii-Kosterlitz-Thouless.

DCA Aproximação dinâmica de *cluster*
(do inglês *dynamic cluster approximation*).

CDMFT Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular
(do inglês *cellular dynamical mean field theory*).

DMFT Teoria de Campo Médio Dinâmico
(do inglês *dynamical mean field theory*).

DMRG Grupo de Renormalização da Matriz Densidade
(do inglês *density matrix renormalization group*).

DE Diagonalização exata.

EE Entropia de emaranhamento.

IPR Taxa de participação inversa
(do inglês *inverse participation ratio*).

LF Líquido de Fermi.

LL Líquido de Luttinger.

MBL Localização de muitos corpos
(do inglês *many body localization*).

MFC Metal de Fermi correlacionado.

PG *pseudo-gap*.

PR Taxa de participação

(do inglês *participation ratio*).

SF-b Superfície de Fermi do tipo buraco.

SF-e Superfície de Fermi do tipo elétron.

STM Microscopia de Varredura por Tunelamento

(do inglês *scanning tunneling microscopy*).

Sumário

Introdução	1
1 Transições de fase quânticas	8
1.1 Introdução	8
1.2 Transição Metal-isolante de Mott	9
1.3 Localização de Anderson	11
I Sistemas de muitos corpos unidimensionais descritos por propriedades de informação quântica	15
2 Não universalidade da convertibilidade local	16
2.1 Introdução	16
2.2 Modelo e método	22
2.3 Resultados	25
2.3.1 Spin-1/2	25
2.3.2 Spin-1 - caso $D = 0$	27
2.3.3 Spin-1 - caso $D \neq 0$	30
2.3.4 Determinação da transição BKT através do comportamento crítico da entropia de emaranhamento	30
2.4 Conclusão	32
3 Localização da dinâmica e competição entre interação e desordem	33
3.1 Introdução	33
3.2 Modelo e método	35
3.3 Localização da dinâmica no espaço de estados	36
3.4 Resultados numéricos	40
3.5 Conclusão	45

II	Dinâmica de não-equilíbrio em sistemas de muitos corpos	46
4	<i>Quenches</i> quânticos	47
4.1	Introdução	47
4.2	Trabalho em colaboração	49
5	Efeito Kondo	52
5.1	Introdução	52
5.2	Revisão da literatura no contexto do nosso trabalho	55
6	Resultados: Dinâmica de não-equilíbrio do efeito Kondo	62
6.1	Modelo	62
6.2	<i>Quench</i> e método	64
6.3	Resultados	64
6.3.1	Observáveis locais na impureza	65
6.3.2	Cones de luz de observáveis locais	67
6.3.3	Entropia de emaranhamento	71
6.3.4	Correlações não locais	72
6.3.5	Efeitos de geometria e tamanho finito	77
6.4	Conclusões e próximas etapas do trabalho	78
III	Supercondutividade em sistemas fortemente interagentes	80
7	Supercondutividade	81
7.1	Principais momentos do desenvolvimento histórico	82
7.2	Algumas aplicações	84
7.3	Supercondutores não convencionais	85
7.3.1	Cupratos - supercondutores de alta temperatura crítica	86
7.3.2	Observações experimentais	92
7.3.3	Estudo de modelos para cupratos	97
7.3.4	Transição metal-isolante em sistemas bidimensionais	100
8	Metodologia: Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular	103
8.1	Ponto de partida: DMFT	103
8.2	Extensão não local: CDMFT	106
8.2.1	Processo iterativo da DMFT com a solução do <i>cluster</i> de impurezas via diagonalização exata	108
8.2.2	Parametrização reduzida do banho	111
8.3	Saídas do cálculo CDMFT	113

8.3.1	Quantidades “locais”	113
8.3.2	Reconstrução de quantidades da rede	114
8.3.3	Energia	115
8.4	Incluindo supercondutividade	115
9	Resultados: Estado normal do modelo de Hubbard bidimensional	119
9.1	Transição de Mott no sistema semi-preenchido	120
9.2	Fase <i>pseudo-gap</i> e topologia da superfície de Fermi	123
9.3	Conclusão	130
	Conclusões Gerais e Perspectivas Futuras	131
A	Motivações experimentais	161
A.1	Átomos frios em redes óticas	161
A.1.1	Montagem experimental	162
A.1.2	Exemplos de simulações de sistemas fermiônicos de muitos corpos . . .	165
A.2	Experimentos de <i>pump and probe</i>	169
	Referências	170
B	DMRG	173
B.1	Introdução	173
B.2	Estrutura da cadeia no cálculo DMRG	174
B.3	Cálculo do estado fundamental via DMRG	175
B.3.1	Parte Infinita	175
B.3.2	Parte Finita (<i>sweeps</i>)	176
B.4	Precisão da truncagem DMRG	177
B.5	Evolução temporal via DMRG	178
	Referências	180
C	Líquido de Fermi e líquido de Luttinger	182
D	Supercondutividade convencional - Teoria BCS	184
D.1	Interação atrativa mediada por fônons	184
D.2	Descrição qualitativa da função de onda BCS	186
D.3	Teoria de Campo Médio	188
	Referências	189
E	Método de Lanczos	190

Introdução

A física da matéria condensada é responsável pela descrição de materiais que observamos no dia-a-dia. A combinação da mecânica quântica com um número muito grande de graus de liberdade (da ordem de 10^{23}) gera uma variedade de fenômenos interessantes, como a existência de fases metálicas, isolantes, semicondutoras e supercondutoras, além da possibilidade de diferentes fases magnéticas.

Surpreendentemente, muitos sólidos são bem descritos por uma abordagem de elétrons independentes, como é o caso da descrição de fases metálicas e isolantes via Teoria de Bandas. Há, no entanto, sistemas nos quais é preciso considerar a interação entre as partículas; nesses casos, novas propriedades emergem dessa interação. P. W. Anderson descreveu esses fenômenos em seu famoso artigo, “*More is different*” [1], no qual ele afirma que “*o comportamento de grandes e complexos conjuntos de partículas elementares não deve ser entendido em termos de uma extrapolação simples de propriedades de algumas partículas. Em vez disso, em cada nível de complexidade, propriedades totalmente novas aparecem, e a compreensão dos novos comportamentos requer pesquisas que considero tão fundamentais em sua natureza como qualquer outra*”. Supercondutividade, certas propriedades magnéticas e a transição metal-isolante induzida por interação (transição de Mott) são exemplos de fenômenos emergentes, que não podem ser compreendidos por uma extrapolação trivial do comportamento de um sistema de partículas independentes.

Em geral, sistemas fortemente interagentes são compostos por elementos de transição, actinídeos e terras-raras, que possuem orbitais estreitos (orbitais d ou f) semi-preenchidos, nos quais a repulsão Coulombiana entre elétrons é mais intensa. A Figura 1 apresenta uma tabela periódica rearranjada, conhecida como diagrama de Kmetko-Smith [2], na qual as linhas são organizadas de forma que os elementos mais localizados encontram-se acima, à direita, enquanto os mais estendidos estão posicionados abaixo, à esquerda. Em ordem de aumento da localização, orbitais semi-preenchidos podem ser organizados como $5d < 4d < 3d < 5f < 4f$.

Metais com orbitais d no canto inferior esquerdo do diagrama apresentado na Figura 1 são fortemente itinerantes e apresentam supercondutividade convencional. Por outro lado, terras-raras e metais actinídeos, posicionados no canto superior direito, possuem orbitais

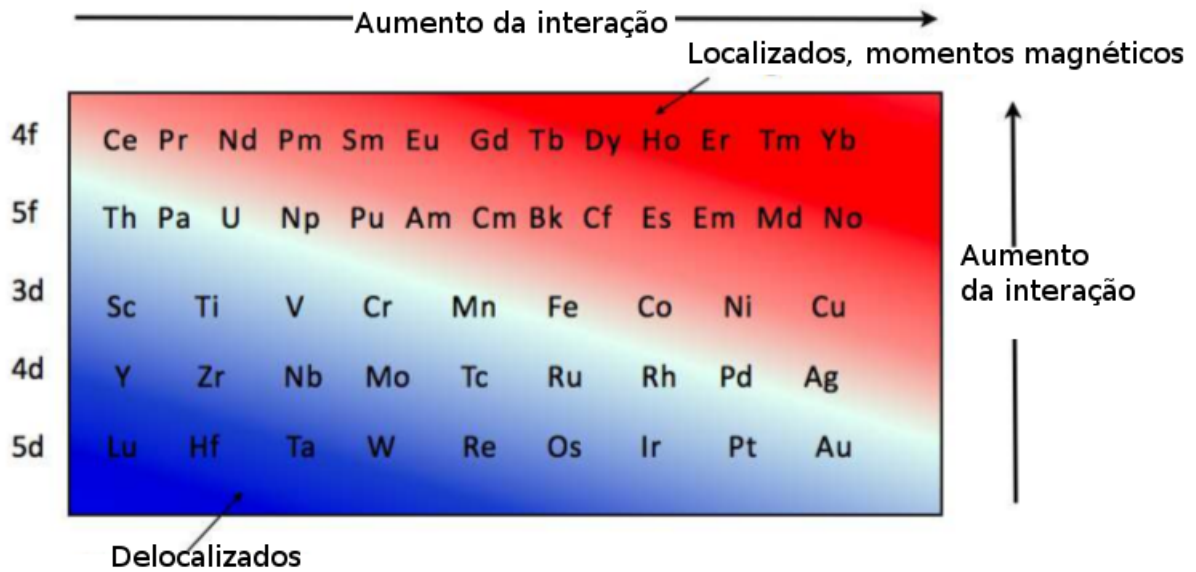


Figura 1: Diagrama de Kmetko-Smith, isto é, tabela periódica rearranjada dos elementos de transição, actinídeos e terras-raras (com orbitais d ou f), organizados dos elementos delocalizados (em azul) para os mais localizados (em vermelho). Figura adaptada de [3].

f fortemente localizados, formando momentos magnéticos locais. Quando átomos desses elementos são imersos em metais convencionais, observa-se comportamentos anômalos na resistividade em função da temperatura. Esse fenômeno, que ocorre devido à interação entre elétrons de condução e momentos magnéticos locais, é denominado efeito Kondo [4].

Materiais compostos por elementos que se encontram em torno da diagonal principal do diagrama de Kmetko-Smith (região em branco) apresentam propriedades físicas interessantes, pois há uma competição entre interação forte e caráter itinerante. É o caso do óxido de vanádio, V_2O_3 [5, 6], por exemplo, que passa por uma transição metal-isolante induzida pela interação elétron-elétron (experimentalmente, diminui-se a pressão, o que leva a uma diminuição da energia cinética dos elétrons ou a um aumento da interação elétron-elétron nos orbitais $3d$ do vanádio), conhecida como transição de Mott. Esse é um exemplo de fenômeno emergente, ou coletivo, resultante da interação entre as partículas.

Outro exemplo de propriedade emergente envolvendo compostos com elementos em torno da diagonal principal do diagrama de Kmetko-Smith é a supercondutividade não convencional, observada em cupratos (materiais constituídos por camadas de óxido de cobre) e em alguns compostos baseados em ferro. Nesses materiais, uma fase supercondutora é observada a partir da dopagem de um isolante de Mott (isolante obtido a partir da transição metal-isolante de Mott) [7]. Esses compostos apresentam grande potencial para aplicações tecnológicas, pois a fase supercondutora sobrevive até temperaturas mais elevadas, quando comparadas às temperaturas críticas de supercondutores convencionais. Há intenso traba-

lho na área, mas o mecanismo responsável pela supercondutividade nesses materiais é ainda desconhecido. A teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer (conhecida como teoria BCS), que descreve a formação de pares de elétrons portadores de super-correntes através do acoplamento com vibrações da rede [8], não se aplica a materiais fortemente interagentes; nesses casos, uma teoria microscópica que descreva a supercondutividade é ainda uma questão em aberto.

Problemas de muitos corpos, nos quais a interação entre partículas é considerada, são muito complicados, pois os graus de liberdade aumentam exponencialmente com o número de partículas. Comumente, descreve-se esses sistemas por meio de Hamiltonianos simplificados, que retêm os ingredientes fundamentais para a descrição de certos fenômenos físicos. Mesmo os modelos simplificados não possuem solução trivial, mas podem ser resolvidos por métodos numéricos [9] como Monte Carlo Quântico, Grupo de Renormalização Numérico, Teoria de Campo Médio Dinâmico e Grupo de Renormalização da Matriz Densidade.

O Grupo de Renormalização da Matriz Densidade, método considerado “estado da arte” para a descrição de sistemas interagentes unidimensionais, tem grande relação com propriedades de informação quântica; a precisão do método é garantida pela lei de área [10], propriedade que descreve um limite superior para o emaranhamento entre subpartes de um sistema quântico. Assim, nas últimas décadas, temos testemunhado maior interação entre as comunidades de informação quântica e sistemas de muitos corpos [11]. Medidas de emaranhamento, por exemplo, têm sido utilizadas para a caracterização de transições de fase em sistemas fortemente correlacionados [11–21].

A Teoria de Campo Médio Dinâmico (DMFT, *dynamical mean field theory*) é outro método numérico que trouxe grande avanço à descrição de sistemas de elétrons fortemente correlacionados; ela é complementar ao Grupo de Renormalização da Matriz Densidade, pois é exata no limite oposto, isto é, no limite em que o número de coordenação da rede (número de primeiros vizinhos) tende a infinito. Esse método permitiu a descrição da transição metal-isolante de Mott [22]. Além disso, extensões de *cluster* da DMFT têm sido usadas para o estudo de supercondutividade em sistemas fortemente interagentes descritos por modelos bidimensionais [23–26].

As consequências da interação dependem da dimensionalidade dos sistemas. Em geral, baixas dimensionalidades potencializam efeitos de muitos corpos. Em uma dimensão, por exemplo, a teoria de líquido de Fermi (na qual excitações de sistemas interagentes são representadas por quase-partículas não interagentes com parâmetros renormalizados devido à interação) é substituída pela teoria de líquido de Luttinger, na qual as excitações de baixas energias são descritas por excitações coletivas, que obedecem a estatísticas bosônicas [27]. Assim, o estudo de efeitos de interação tem ganhado destaque à medida em que aumenta-se a produção de dispositivos em uma e duas dimensões.

Outro fator que contribui para o aumento do interesse da comunidade científica sobre sistemas interagentes é a realização experimental de modelos de muitos corpos em redes óticas [28–32]. Nesses experimentos, feixes de lasers contra-propagantes simulam o potencial periódico de um sólido, enquanto átomos frios (tipicamente ^{40}K ou ^6Li) fazem o papel de elétrons ligados ao potencial.¹ Nesses cristais artificiais, os parâmetros do Hamiltoniano podem ser controlados com grande precisão, o que não ocorre em materiais reais. Esse cenário experimental altamente controlado é ideal para testar teorias e tem motivado diversos trabalhos numéricos.

É nesse contexto que se enquadra a presente tese de doutorado. Realizamos diferentes trabalhos nos quais estudamos fenômenos emergentes em sistemas de muitos corpos a partir de tratamentos numéricos de Hamiltonianos modelos. Analisamos tanto casos de equilíbrio quanto casos nos quais o equilíbrio é perturbado pela alteração de algum parâmetro do Hamiltoniano.

Utilizamos, para a descrição dos sistemas interagentes, principalmente dois métodos numéricos que são novos no grupo

1. o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG, *density matrix renormalization group*);
2. a extensão não local da Teoria de Campo Médio Dinâmico (DMFT, *dynamical mean field theory*), conhecida como DMFT Celular (CDMFT).

DMRG descreve sistemas unidimensionais. O método é baseado em uma truncagem selecionada do espaço de Hilbert, que permite o crescimento da cadeia, sem que haja crescimento da dimensão das matrizes que são efetivamente diagonalizadas. Uma revisão do método é apresentada no Apêndice B deste documento. A DMFT, por outro lado, é apropriada para a descrição de sistemas de dimensões maiores. Nessa teoria, um problema de uma rede de elétrons interagentes é mapeado em um problema de uma impureza embebida em um banho de elétrons de condução. Os elétrons podem pular do banho para a impureza e vice-versa; assim, o método vai além de campo médio clássico, pois inclui flutuações temporais (ou flutuações de energia). O mapeamento de DMFT é exato no limite de coordenação da rede tendendo a infinito. Para descrever apropriadamente sistemas bidimensionais e incluir interações não locais, recorreremos a CDMFT, na qual a rede interagente é mapeada em um *cluster* de problemas de uma impureza. Incluímos, no Capítulo 8, uma breve revisão de DMFT (uma descrição mais completa pode ser encontrada no Capítulo 2 da minha dissertação de mestrado [33]) e uma introdução a CDMFT.

¹Uma revisão do estudo de sistemas de muitos corpos via redes óticas com átomos frios é apresentada no Apêndice A deste documento.

A presente tese é composta por um conjunto de trabalhos envolvendo efeitos de muitos corpos e está organizada conforme descrito a seguir. No primeiro capítulo, apresentamos uma revisão de transições de fase quânticas, tema que abrange todos os resultados aqui apresentados. Revisamos, por exemplo, as transições metal-isolante de Mott e Anderson, cujos mecanismos de localização são interação eletrônica e desordem, respectivamente. Os capítulos seguintes são dedicados à descrição dos nossos trabalhos, incluindo revisões da literatura para cada tema estudado.

O documento é dividido em três partes.²

1. Na primeira, composta pelos Capítulos 2 e 3, apresentamos trabalhos que relacionam sistemas de muitos corpos a propriedades de informação quântica.³

No Capítulo 2, descrevemos um trabalho no qual investigamos diferentes transições de fase existentes em cadeias de spin. Nos últimos anos, temos observado um aumento do interesse da comunidade científica por quantificadores alternativos de transições de fases, capazes de descrever transições que não possuem parâmetros de ordem bem definidos e portanto não podem ser descritas por um tratamento tradicional de quebra de simetria. Esse é o caso, por exemplo, de transições topológicas e de ordem infinita [34, 35]. Por isso, procuramos observar se propriedades de informação quântica, relacionadas ao emaranhamento entre sub-partes de um sistema, podem ser usadas para descrever transições de fase de diferentes ordens. Observamos que mudanças na convertibilidade local, propriedade que descreve um protocolo de conversão entre estados quânticos bipartidos, estão associadas a simetrias do sistema, e não necessariamente a transições de fase. Utilizamos o Hamiltoniano de Heisenberg XXZ e obtivemos resultados numéricos por DMRG. O trabalho está publicado no Phys. Rev. B [21].

O Capítulo 3 é dedicado à descrição de um trabalho no qual estudamos a competição entre interação e desordem sobre as propriedades de transporte em sistemas quânticos fechados. Sabe-se que tanto a interação quanto a desordem levam à localização das funções de onda eletrônicas, por meio dos mecanismos de Mott [36] e Anderson [37], respectivamente. A conjunção entre os dois efeitos, no entanto, leva a comportamentos não triviais. Utilizamos uma análise baseada na localização da dinâmica no espaço de estados e mostramos que essa abordagem pode ser associada à noção mais tradicional de localização no espaço real. Por meio dessa análise mostramos que, embora interação e desordem individualmente gerem localização, a conjunção entre os mecanismos pode

²As partes foram organizadas em ordem cronológica, seguindo a linha de execução durante o doutorado. Apesar de conectadas entre si, podem ser lidas de forma relativamente independente.

³Os trabalhos apresentados nesta parte foram realizados em colaboração com o Professor Marcelo França e o ex-aluno de doutorado do departamento de física da UFMG Eduardo Mascarenhas; essa colaboração permitiu que começássemos a utilizar propriedades de informação quântica na caracterização de sistemas de muitos corpos.

levar a um regime mais delocalizado. O modelo utilizado foi o de férmions interagentes sem spin, equivalente ao modelo do Capítulo 2 para spin-1/2. Os resultados foram obtidos por diagonalização exata, para cadeias pequenas. O trabalho foi publicado no *Journal of Physics: Condensed Matter* [38].

2. A segunda parte é dedicada à descrição da dinâmica de sistemas de muitos corpos quando o equilíbrio é perturbado por uma variação abrupta do Hamiltoniano. Mais especificamente, utilizamos um protocolo conhecido como *quench* [39], no qual o sistema é preparado em um dado estado inicial (que pode ser, por exemplo, o estado fundamental de certo Hamiltoniano) e em seguida evolui segundo a dinâmica de um Hamiltoniano diferente, dado pela alteração de parâmetros do sistema inicial. Esse protocolo pode ser emulado em redes óticas e permite tanto a investigação de questões fundamentais a respeito de condições de equilíbrio do sistema, quanto pode ser explorado para a construção de novos dispositivos eletrônicos.⁴

No Capítulo 4 apresentamos uma breve revisão da literatura recente relacionada a *quenches* quânticos em sistemas fechados de partículas interagentes. Descrevemos também brevemente um trabalho publicado no *Phys. Rev. B* [40], no qual tive participação, em que observamos a formação de dois cones de luz efetivos distintos, relacionados a diferentes excitações do modelo Heisenberg XXZ de spin-1/2. Os resultados foram obtidos via DMRG.

Os Capítulos 5 e 6 são dedicado à análise da dinâmica de não-equilíbrio do efeito Kondo. Conforme mencionado anteriormente, nesse efeito de muitos corpos, a presença da impureza gera uma dependência anômala da resistência do metal em função da temperatura. Os elétrons do metal interagem com o spin da impureza, gerando a chamada nuvem Kondo, um singlete delocalizado que blinda a magnetização introduzida pela impureza. O Capítulo 5 é dedicado a uma breve revisão da literatura do efeito. No Capítulo 6 descrevemos um trabalho em andamento, no qual investigamos a formação do efeito Kondo após um *quench* que conecta uma impureza magnética a um metal não magnético. O modelo utilizado descreve cadeias de Hubbard acopladas a uma impureza de Anderson e a evolução temporal é estudada via DMRG.

3. Finalmente, na terceira parte nos dedicamos à análise da supercondutividade não convencional observada em cupratos.⁵ Mais especificamente, estudamos o modelo de Hub-

⁴Nosso grupo realizou os trabalhos descritos nesta parte da tese em colaboração com o professor Rodrigo Pereira (*International Institute of Physics*, Universidade Federal do Rio Grande do Norte), especialista em sistemas unidimensionais.

⁵O estudo de supercondutividade em sistemas fortemente interagentes foi possível devido ao estágio sanduíche de duração de 6 meses, que realizei no *Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay, France*, sob supervisão do professor Marcello Civelli.

bard bidimensional, Hamiltoniano capaz de descrever a transição de Mott e a física desses materiais, que apresentam a competição entre diversas fases não triviais.

Uma revisão da literatura a respeito de supercondutividade é apresentada no Capítulo 7. Detalhes da metodologia utilizada para o tratamento do modelo de Hubbard bidimensional, a DMFT Celular, são apresentados no Capítulo 8. Finalizamos a terceira parte com nossos resultados, descritos no Capítulo 9. Observamos que a solução via extensão de *cluster* da Teoria de Campo Médio Dinâmico do modelo de Hubbard bidimensional apresenta a coexistência entre uma fase metálica correlacionada, com propriedades descritas pela teoria de líquido de Fermi, e uma fase *pseudo-gap*, com um *gap* anisotrópico no espaço de momento e comportamento não-líquido de Fermi. Em semi-preenchimento, o metal convencional é a fase de menor energia, enquanto a fase *pseudo-gap* é metaestável; o sistema apresenta uma transição metal-isolante de Mott em função da interação. Incluindo dopagem, no entanto, a fase metaestável torna-se o verdadeiro estado fundamental e observamos uma relação entre a intrigante fase *pseudo-gap* e a topologia da superfície de Fermi, explicando resultados experimentais recentes. Os resultados foram publicados no Physical Review Letters [41].

No fim deste documento, apresentamos breves conclusões gerais, além de apêndices que auxiliam no entendimento de alguns tópicos abordados ao longo do texto.

Capítulo 1

Transições de fase quânticas

1.1 Introdução

Transições de fase térmicas são induzidas por variação de temperatura. Exemplos típicos são as transições entre os estados sólido, líquido e gasoso da matéria e a transição de um metal convencional para uma fase supercondutora. Transições de fase quânticas, por sua vez, se dão a temperatura $T = 0$ (transições entre estados fundamentais) como função de um parâmetro externo, como por exemplo pressão ou campo magnético.

Em geral, podemos representar um sistema físico por um Hamiltoniano $\mathcal{H}(g)$, sendo que g representa um acoplamento adimensional. A energia do estado fundamental é função de g e transições de fase quânticas ocorrem em pontos de não analiticidade dessa função [42]; nesses pontos, dizemos que o parâmetro g atingiu o valor crítico, i.e., $g = g_c$. A transição é usualmente acompanhada por uma mudança qualitativa na natureza das correlações do estado fundamental.

Transições de fase descontínuas e contínuas estão relacionadas a singularidades na primeira e segunda derivada da energia livre, respectivamente. Tais singularidades marcam o limite entre duas fases que, em geral, possuem simetrias distintas. Esses tipos de transições podem ser descritas por parâmetros de ordem locais, que se anulam em uma das fases. Um exemplo simples é o valor da magnetização em sistemas de spin, que é diferente de zero em fases ferromagnéticas, por exemplo, mas igual a zero em fases sem ordenamento magnético, como a fase líquido de Luttinger. Em transições descontínuas (de primeira ordem) o parâmetro adquire abruptamente um valor finito, já em transições contínuas (segunda ordem), ele segue uma lei de potência.

Mais especificamente, transições de fase quânticas contínuas são transições nas quais a escala característica de flutuações de energia acima do estado fundamental, Δ , se anula. No caso de sistemas com *gap*, Δ corresponde à diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. No caso de sistemas sem *gap*, por outro lado, podemos definir Δ

como a escala na qual há uma mudança qualitativa na natureza do espectro de frequências. Em ambos os casos, observamos um comportamento do tipo $\Delta \propto |g - g_c|^{z\nu}$, sendo z e ν dois expoentes críticos universais, que dependem de simetrias e da dimensionalidade do sistema, mas não de detalhes microscópicos do Hamiltoniano. Além de uma escala de energia tendendo a zero, transições contínuas apresentam também a divergência de um comprimento de escala, ξ , que pode caracterizar, por exemplo, o decaimento exponencial de correlações no estado fundamental. Em torno da transição, o comprimento diverge na forma $\xi^{-1} \propto |g - g_c|^\nu$.

Note que a discussão apresentada acima diz respeito ao estado fundamental. Assim, formalmente, transições de fase quânticas ocorrem apenas para $T = 0$, conforme mencionado no início do capítulo. Experimentos, no entanto, ocorrem sempre a temperatura finita, ainda que pequena, por isso é relevante investigar quais as consequências geradas pelas singularidades presentes em $T = 0$ sobre as propriedades físicas de sistemas a $T > 0$.

É importante ressaltar também que há transições de fase que não correspondem a mudanças de simetria. Um exemplo é dado pela transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT), observada em 1972 por John M. Kosterlitz e David J. Thouless em um sistema bidimensional (2D) descrito pelo modelo XY [34,35]. Os autores observaram que, embora não haja fases com ordenamento de longo alcance em sistemas 2D [43], podem ocorrer transições entre fases com diferentes topologias. Thouless e Kosterlitz receberam o prêmio Nobel de Física em 2016, juntamente com D. Haldane, pelo descobrimento teórico de transições de fase topológicas e fases topológicas da matéria [44,45].

Transições do tipo BKT são transições de ordem infinita, pois, embora a energia livre seja não-analítica, todas as suas derivadas são finitas. Hoje sabe-se que transições deste tipo podem ser observadas em vários sistemas bidimensionais a temperatura finita, em gases de átomos frios [46] e também em sistemas unidimensionais, como cadeias de spin [27] e cadeias Bose-Hubbard realizáveis em redes óticas [47]. A existência desse tipo de transição e o crescente interesse por fases topológicas em geral, que não podem ser descritas por parâmetros de ordem locais, têm motivado o estudo de abordagens alternativas para a descrição de transições de fase. Nesse contexto, ferramentas desenvolvidas pela comunidade de informação quântica (tipicamente medidas relacionadas a emaranhamento) têm sido investigadas como possíveis indicadoras de transições de fase em sistemas de muitos corpos.

Estudamos, ao longo dos trabalhos apresentados nesta tese, diferentes transições de fase quânticas. Exemplos relevantes para nossos resultados são descritos nas próximas seções.

1.2 Transição Metal-isolante de Mott

A transição metal-isolante de Mott, é um importante exemplo de transição de fase quântica, induzida pelo aumento da energia de interação elétron-elétron. De maneira geral, a distinção

entre metais e isolantes pode ser descrita pela Teoria de Bandas [48]: em um metal, o nível de Fermi (nível de maior energia dos estados ocupados) encontra-se no interior da banda de condução; já em um isolante, a banda está completamente preenchida e é preciso superar um *gap* de energia para que haja transporte elétrico. Há, no entanto, materiais isolantes, como certos óxidos de metais de transição, que seriam metálicos por uma descrição via Teoria de Bandas. Esses materiais possuem em comum o fato de apresentarem bandas estreitas de energia, do tipo *d* e *f*, nas quais a interação elétron-elétron é relevante quando comparada à energia cinética das partículas.

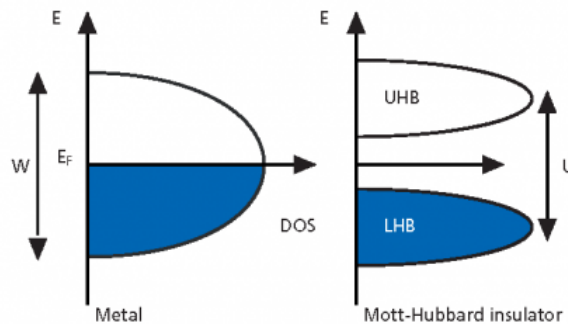


Figura 1.1: Representação esquemática da transição de Mott. A interação elétron-elétron impede dupla ocupação, gerando um *gap* de largura U , e portanto localizando o sistema.

N. F. Mott demonstrou que a repulsão Coulombiana entre elétrons é o fator responsável pela fase isolante mencionada acima [36]. Embora a banda de energia seja semi-preenchida, a forte interação U entre elétrons que ocupam o mesmo sítio dificulta a dupla ocupação e portanto faz com que os elétrons permaneçam localizados. Um esboço desse mecanismo está representado na Figura 1.1, na qual vemos que, embora o nível de Fermi encontre-se no meio da banda de condução, a interação elétron-elétron dificulta que elétrons ocupem o mesmo sítio da banda; a interação gera assim um *gap* de energia de largura U .

Um exemplo de material que passa pela transição metal-isolante de Mott pode ser visto na Figura 1.2, que apresenta o diagrama de fase do V_2O_3 (esquerda) e uma medida de resistividade em função da pressão nesse material (direita). Diminuir a pressão, externa ou química (devido à alterações dos átomos, que altera o raio covalente e portanto o parâmetro de rede do sistema), leva a uma redução da energia cinética, o que equivale a aumentar a energia de interação elétron-elétron U . Quando a pressão torna-se superior a um valor crítico, o sistema vai da fase isolante para a fase metálica, conforme observado por medidas de resistividade.

O Hamiltoniano de Hubbard [49] [apresentado na equação (3.1)] é o modelo mais simples capaz de descrever a competição entre energia de interação elétron-elétron e energia cinética e,

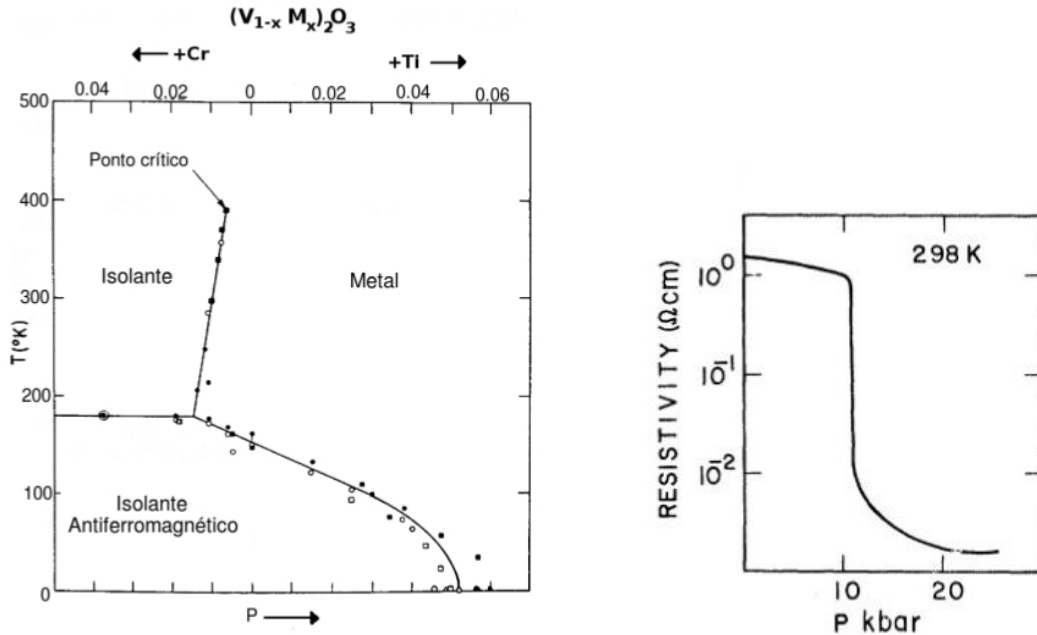


Figura 1.2: (Esquerda) Diagrama de fase para o V_2O_3 em função da pressão e da dopagem com Cr e Ti e (direita) resistividade em função da pressão, para uma temperatura específica, mostrando a transição de um isolante (alta resistividade) para um metal (resistividade ordens de grandeza menor que no caso isolante). Figuras retiradas de [5] (esquerda) e [6] (direita).

portanto, a transição de Mott. Recentemente esse modelo tem sido realizado em redes óticas com átomos frios. Nesses casos, a interação pode ser controlada com grande precisão e a transição pode ser observada com clareza. Uma simulação do modelo de Hubbard fermiônico em redes óticas pode ser vista na referência [50], mais detalhes a respeito da simulação de sistemas de muitos corpos em redes óticas são apresentados no Apêndice A.

1.3 Localização de Anderson

Outro importante exemplo de uma transição de fase entre estados estendidos e estados localizados, induzida por uma variação de parâmetros do sistema, é a transição de localização de Anderson, descrita na presente seção.

Grande avanço na descrição de localização em sistemas eletrônicos foi obtido a partir de 1958, após um importante trabalho de P. W. Anderson [37], no qual ele observou que elétrons podem ter seus movimentos limitados por desordens presentes na rede cristalina. Em seu trabalho, aplicado a sistemas não interagentes, Anderson demonstrou que a interferência entre múltiplos caminhos associados a espalhamentos coerentes em impurezas aleatórias gera funções de onda de partícula única com decaimentos exponenciais, causando redução ou ausência de transporte. Mais especificamente, uma função de onda $\Psi(\vec{r})$ de uma partícula

de massa m e energia E , solução da equação de Shrödinger

$$E\Psi(\vec{r}) = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\vec{r}^2}\Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) \quad (1.1)$$

(utilizamos $\hbar = 1$), tem a forma de onda plana no espaço livre ($V(\vec{r}) = 0$ ou periódico), porém decai exponencialmente na presença de um potencial desordenado, que varia aleatoriamente de um sítio para o outro. Dessa forma, cada partícula só pode ser encontrada, com probabilidade considerável, dentro de um comprimento de localização ξ a partir de um dado sítio, conforme representado na Figura 1.3. A Figura 1.4 apresenta um outro esboço da localização de Anderson, na qual vemos que o desnível entre as energias locais de sítios vizinhos reduz a mobilidade eletrônica; cada elétron fica localizado em torno de determinado sítio da rede, com funções de onda com decaimento exponencial.

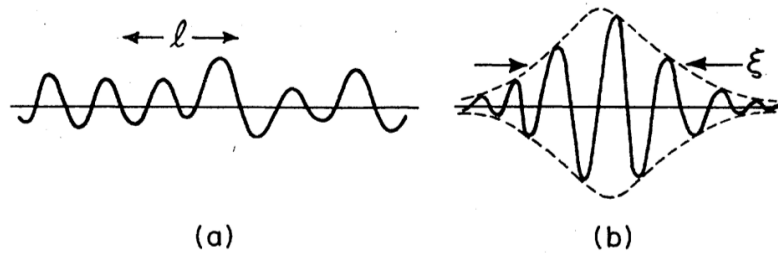


Figura 1.3: Função de onda característica de (a) estados estendidos e (b) estados localizados, com comprimento de localização ξ .

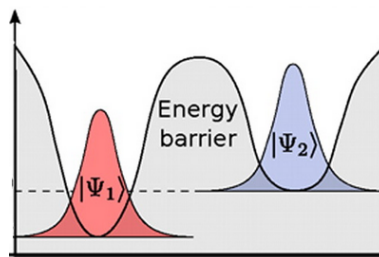


Figura 1.4: Esboço da localização de funções de onda eletrônicas devido à desordem.

Resultados posteriores demonstraram que qualquer desordem arbitrariamente pequena já é suficiente para localizar sistemas não-interagentes em uma [51, 52] e duas dimensões [53]. Isso significa que, nesses casos, ξ é finito para toda energia E , qualquer que seja o valor de desordem. Em três dimensões, por outro lado, define-se uma desordem crítica para cada E , a partir da qual ξ torna-se finito. Quando o sistema atinge a desordem crítica, ocorre a

chamada localização de Anderson (localização devido à desordem) e o sistema passa por uma transição metal-isolante.

A localização de Anderson pode ser observada em diferentes trabalhos experimentais. O comportamento da densidade de estados local na presença de desordem, por exemplo, pode ser visto na Figura 1.5 para diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Para desordem fraca, há estados estendidos no sistema e a densidade local varia pouco de sítio para sítio; à medida em que a concentração de impurezas aumenta, os estados vão se tornando localizados e a densidade de estados local passa a variar muito de um sítio para o outro.

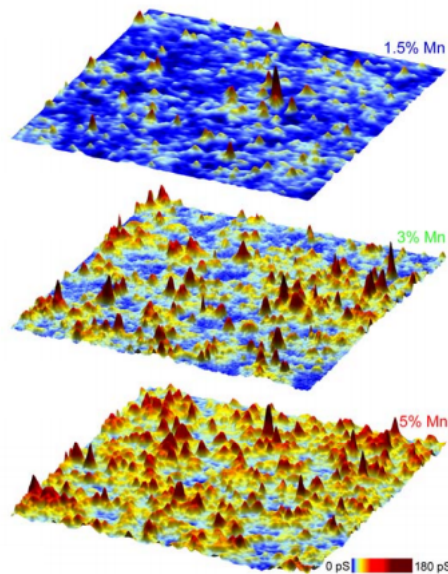


Figura 1.5: Densidade de estados local próximo ao nível de Fermi para diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Medidas realizadas por microscopia de varredura por tunelamento (STM, do inglês *Scanning Tunneling Microscopy*) em amostras de 700 \AA por 700 \AA de área. Figura retirada de [54].

Outro exemplo de observação experimental da localização de Anderson pode ser visto na Figura 1.6, retirada da referência [55]. Nesse trabalho, os autores observaram diretamente o decaimento exponencial das funções de onda de matéria. Mais especificamente, eles observaram a localização de um condensado de Bose-Einstein em um guia de onda unidimensional, na presença de desordem criada por feixes de lasers. O experimento foi realizado em um regime no qual a concentração de partículas é pequena o suficiente para que a interação entre elas seja irrelevante. Por meio de imagens dos perfis de densidade de estados local em função do tempo, os autores observaram que uma desordem fraca já é suficiente para produzir funções de onda localizadas exponencialmente. Ajustando o decaimento exponencial, eles estimaram

o comprimento de localização, que apresentou grande concordância com previsões analíticas (ver painel da direita da Figura 1.6).

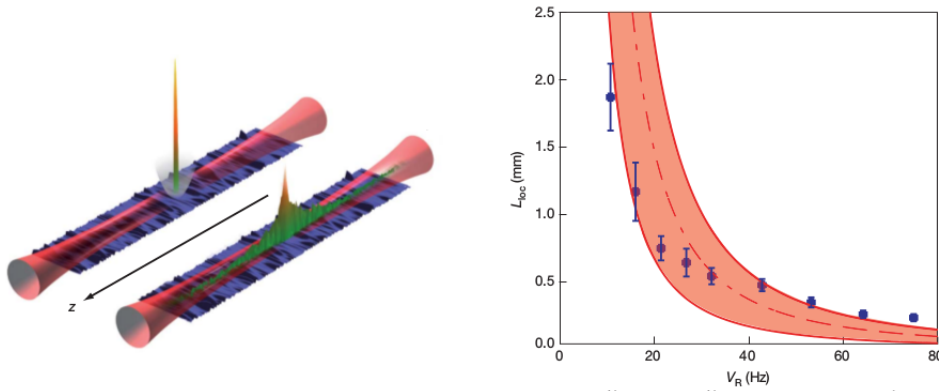


Figura 1.6: Observação experimental da localização de Anderson. Esquerda: esquema experimental de um condensado de Bose-Einstein em um guia de onda. Um potencial desordenado gerado por feixes de lasers faz com que o condensado se localize. Uma observação direta da localização da função de onda de matéria pode ser obtida pela detecção da fluorescência dos átomos. Direita: Comprimento de localização em função da amplitude do potencial desordenado. Os dados experimentais (círculos) concordam bem com previsões teóricas (região em vermelho). Figura retirada de [55].

A localização de Anderson também pode ser simulada por átomos frios armadilhados em redes óticas, conforme descrito no Apêndice A.

Parte I

Sistemas de muitos corpos
unidimensionais descritos por
propriedades de informação quântica

Capítulo 2

Não universalidade da convertibilidade local¹

Recentemente, diversos trabalhos têm sugerido que propriedades relacionadas a computação quântica podem ser usadas como indicadores alternativos de transições de fase. No trabalho descrito neste capítulo, analisamos medidas de emaranhamento entre estados fundamentais bipartidos em sistemas unidimensionais que apresentam transições de fase de diferentes ordens. Nossos resultados sugerem que a convertibilidade local, propriedade relacionada a não analiticidades do espectro de emaranhamento, é um bom indicadores de simetrias explícitas dos modelos, mas não necessariamente de transições de fase.

2.1 Introdução

Conforme discutido no Capítulo 1, há transições de fase de ordens superiores (transições BKT) que não podem ser descritas por um protocolo tradicional de quebra de simetria. Além disso, o interesse por fases topológicas, que não são descritas por um parâmetro de ordem local, tem crescido nos últimos anos. A escolha da entrega do prêmio Nobel de Física de 2016 a Thouless, Kosterlitz e Haldane pelo descobrimento teórico de transições de fase topológicas e fases topológicas da matéria é reflexo da relevância do tema.

A existência desses tipos de transições tem motivado o estudo de abordagens alternativas para a descrição de transições de fase. Ferramentas desenvolvidas pela comunidade de informação quântica (tipicamente medidas relacionadas a emaranhamento) têm sido investigadas como possíveis indicadoras de transições de fase em sistemas de muitos corpos.

A caracterização de emaranhamento de um estado quântico pressupõe a separação do sistema em subpartes. Em especial, em um sistema bipartido (ver Figura 2.1), podemos

¹O trabalho apresentado neste capítulo está publicado como Helena Bragança, Eduardo Mascarenhas, G. I. Luiz, C. Duarte, R. G. Pereira, M. F. Santos, M.C. O. Aguiar, “*Non universality of entanglement convertibility*”, Phys. Rev. B **89**, 235132 (2014).

caracterizar o emaranhamento entre as partes A e B de uma cadeia unidimensional por meio de uma representação específica do estado quântico conhecida como decomposição de Schmidt [56]. Nesse processo, representamos um estado puro² de um sistema de muitos corpos como uma decomposição em duas bases ortonormais nas regiões A e B .

Mais especificamente, consideramos $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ um estado puro de um sistema bipartido. É possível mostrar [57] que existem bases $\{|\Phi_{A,i}\rangle\}$ e $\{|\Phi_{B,i}\rangle\}$ para \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B , respectivamente, tais que

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n \sqrt{\xi_i} |\phi_{A,i}\rangle \otimes |\phi_{B,i}\rangle, \quad (2.1)$$

sendo $n \leq \min\{\dim\mathcal{H}_A, \dim\mathcal{H}_B\}$. $\{\xi_i\}$ corresponde ao espectro de emaranhamento (também conhecido como espectro de Schmidt) e representa o conjunto de autovalores da matriz densidade reduzida, obtida pelo traço parcial de uma das subpartes.

A matriz densidade reduzida da sub-partes A (B) é obtida pelo traço parcial dos graus de liberdade do sub-espço B (A):

$$\rho_{A(B)} = \text{Tr}_{B(A)} |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_i \xi_i |\phi_{A(B),i}\rangle\langle\phi_{A(B),i}|. \quad (2.2)$$

Quando não há emaranhamento, o estado é dado por um produto simples de estados das duas subpartes: $|\Psi\rangle = |\phi_{A,1}\rangle \otimes |\phi_{B,1}\rangle$. Nesse caso temos $\xi_1 = 1$ e $\xi_i = 0 \forall i \neq 1$. Caso contrário, temos diferentes autovalores não nulos no espectro de Schmidt, mas que obedecem à relação $\sum_i \xi_i = 1$.

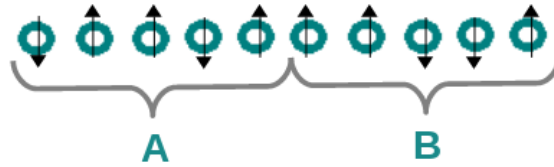


Figura 2.1: Esboço representando uma cadeia finita de spins, separada nas subpartes A e B .

As entropias de R enyi representam a classe mais geral de medidas de informa o. Elas s o definidas a partir da matriz densidade reduzida na forma

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log \text{Tr} (\rho_{A(B)}^\alpha) = \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\sum_i \xi_i^\alpha \right). \quad (2.3)$$

²Em mec nica qu ntica, a descri o mais geral de um estado   dada pela matriz densidade, $\hat{\rho}$. Esta matriz   hermitiana e positiva e pode ser, portanto, diagonalizada, apresentando um conjunto de auto-valores $\{\lambda_i\}$ com $0 \leq \lambda_i \leq 1$ e $\sum_i \lambda_i = 1$. Esses n meros podem ser interpretados como probabilidades associadas a estados puros (os auto-vetores). Se apenas um dos auto-valores   diferente de zero, o estado   dito puro. Assim, um estado puro pode ser representado por um vetor, enquanto estados mistos s o misturas estat sticas de estados puros.

Algumas das entropias de R enyi t em uma interpreta  o expl ıcita. S_0 , por exemplo, corresponde ao logaritmo do *rank* do estado, isto  , do n mero de autovalores de Schmidt n os; $S_{\alpha \rightarrow \infty}$ fornece o logaritmo do maior autovalor da matriz densidade reduzida. Finalmente, o limite $\alpha \rightarrow 1$ equivale   entropia de von Neumann, tamb m conhecida como entropia de emaranhamento: $S_{A/B} = -\sum_i \xi_i \log \xi_i$. Ela corresponde   entropia de Shannon [58] do estado reduzido, isto  ,   entropia de configura  es, sendo que o conjunto de auto-valores da matriz densidade reduzida representam uma distribui  o de probabilidades de estados puros das subpartes do sistema. H , na literatura, intenso debate a respeito das semelhan as e diferen as entre a entropia de von Neumann, desenvolvida no contexto de mec nica qu ntica, e a entropia termodin mica. Sugerimos a refer ncia [59] para uma discuss o detalhada.

Muitos trabalhos recentes estudaram correla  es intr secas (entropia de emaranhamento e espectro de emaranhamento) de estados qu nticos [11–19] para descrever transi  es de fase de sistemas de muitos corpos.

Na refer ncia [13], por exemplo, Mund, Legeza e Noack utilizaram a entropia de emaranhamento para definir as fronteiras entre diferentes fases do Hamiltoniano de Hubbard estendido em uma dimens o, que descreve a competi  o entre energia cin tica (proporcional ao *hopping* t dos el trons de um s tio para outro) e energia de intera  o entre el trons que ocupam o mesmo s tio da rede e s tios primeiros vizinhos; a intensidade das intera  es   dada por U e V , respectivamente. Diferentes fases s o acessadas   medida em que varia-se a intensidade das intera  es. Para $U > 0$ e V pequeno, o sistema encontra-se em uma fase de onda de densidade de spin (SDW, *spin density wave*); no limite em que $V \gg U$, por outro lado, h  uma fase de onda de densidade de carga (CDW, *charge density wave*), com s tios vazios e ocupados alternados. Para valores intermedi rios de U e V , h  ainda uma fase conhecida como onda de ordenamento de liga  o (BOW, *bond-order-wave*), caracterizada por uma quebra espont nea de simetria na qual acoplamentos fortes e fracos se alternam.

Os autores compararam, para o modelo, as fronteiras entre as fases determinadas por uma abordagem termodin mica tradicional, calculada via Monte Carlo Qu ntico (QMC, *Quantum Monte Carlo*), e aquelas obtidas por meio de uma an lise de emaranhamento. Mais especificamente, eles identificaram as transi  es pelos picos da entropia de von Neumann do sistema bipartido (entropia de blocos, B) e da entropia entre dois s tios (2s). O diagrama de fase apresentado na refer ncia [13] est  reproduzido na Figura 2.2. Fica claro que os autores encontraram boa concord ncia entre os diferentes m todos utilizados.

Mais recentemente, alguns estudos t m analisado tamb m a chamada convertibilidade local de estados qu nticos [60–63], que introduz uma vis o operacional relacionada   computa  o qu ntica. A *convertibilidade local* pode ser definida atrav s do protocolo descrito abaixo: consideremos um sistema qu ntico descrito por um Hamiltoniano H_λ , tal que λ representa algum par metro vari vel. O sistema   dividido em duas subpartes, A e B ,

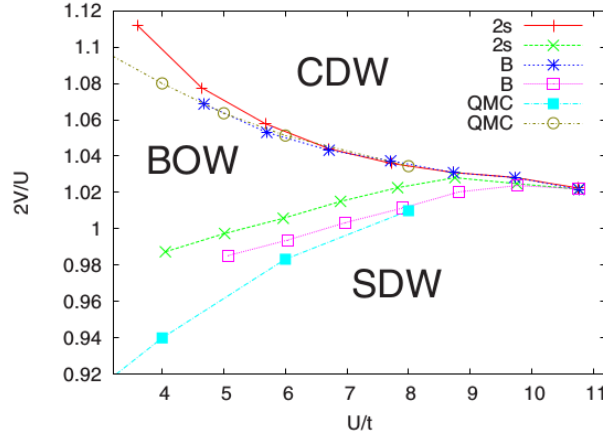


Figura 2.2: Diagrama de fase do modelo de Hubbard estendido, com as fronteiras entre as fases determinadas por propriedades de emaranhamento, entropia entre dois sítios (2s) e entropia de blocos (B). U , V e t correspondem, respectivamente, à intensidade da interação eletrônica local, à intensidade da interação entre elétrons que ocupam sítios primeiros vizinhos, e à amplitude de *hopping* na cadeia. Figura retirada de [13].

e procuramos converter o estado fundamental $|\Psi_0^{(\lambda)}\rangle_{AB}$ do Hamiltoniano inicial no estado $|\Psi_0^{(\lambda+\epsilon)}\rangle_{AB}$, estado fundamental do Hamiltoniano $H_{\lambda+\epsilon}$, realizando apenas operações locais em cada uma das partes. O protocolo geral permite ainda o uso de um catalisador, isto é, um estado auxiliar emaranhado, com o qual cada subparte pode interagir livremente, desde que o estado saia intacto no final do processo, i.e., $|\Psi_0^{(\lambda)}\rangle|C\rangle \rightarrow |\Psi_0^{(\lambda+\epsilon)}\rangle|C\rangle$. Esse procedimento é conhecido como conversão catalítica local, ou simplesmente conversão local [64–66].

A condição necessária e suficiente para a conversão local é que nenhuma das entropias de Rényi pode aumentar após o processo, isto é, a conversão é possível apenas se $S_\alpha(\lambda) \geq S_\alpha(\lambda + \epsilon)$ para todo α [65, 66]. No limite de conversão adiabática, $\epsilon \rightarrow 0$, essa condição pode ser analisada por meio do sinal da susceptibilidade catalítica,

$$\chi(\alpha, \lambda) = \frac{\partial S_\alpha(\lambda)}{\partial \lambda}. \quad (2.4)$$

Ou seja, se $\chi < 0$ para todo α , a conversão é possível de λ para $\lambda + \epsilon$; se $\chi > 0 \forall \alpha$, a conversão é possível apenas na direção contrária. Para $\chi = 0$ conversão é possível nos dois sentidos; finalmente, se o sinal de χ variar com α , a conversão é impossível em ambas as direções.

Esse critério foi usado na referência [60] para analisar a fronteira entre diferentes fases no modelo de Ising, dado por $H_I(g) = -\sum_{i=1}^{N-1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sigma_i^z)$, sendo σ^k , $k = x, y, z$, as matrizes de Pauli. O Hamiltoniano de Ising com campo transversal é um dos modelos mais simples que apresentam transições de fase, por isso, é comumente usado para testar novas ideias referentes a transições de fase quânticas. O modelo possui duas fases, apresenta ordenamento ferromagnético para $g < 1$ e encontra-se em uma fase paramagnética ($\langle \sigma^x \rangle = 0$) quando $g > 1$.

Os autores de [60] demonstraram que há uma clara diferença entre a possibilidade ou não de convertibilidade entre ambas as fases. Na fase paramagnética, $\chi_\alpha(g)$ é negativo para todo α , indicando que a variação do campo magnético transversal pode ser simulada por operações locais e comunicação clássica em cada subparte do sistema. Na fase ferromagnética, por outro lado, $\chi_\alpha(g)$ muda de sinal para certos valores de α , então o estado fundamental não apresenta convertibilidade local e variações no campo magnético produzem efeitos quânticos fundamentalmente não locais sobre o estado fundamental. Os resultados indicaram ainda que as conclusões independem da forma como a partição do sistema é realizada para o cálculo das entropias de Rènyi, conforme representado na Figura 2.3, que apresenta o sinal de χ em função de α e g para a cadeia particionada em diferentes posições.

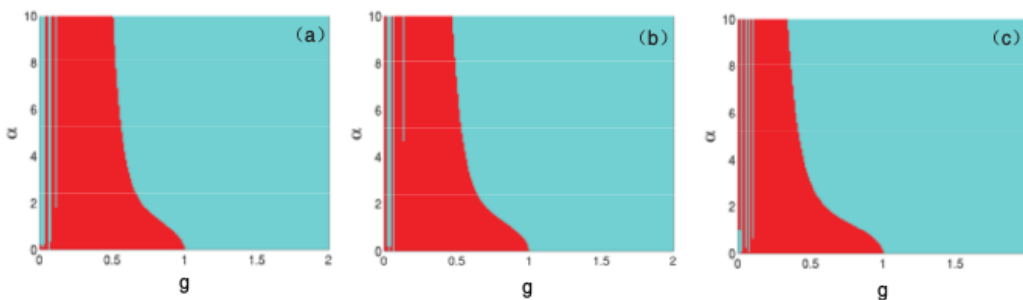


Figura 2.3: Sinal da susceptibilidade catalítica para o modelo de Ising com campo transversal em função da ordem da entropia de Rènyi, α , e do campo, g , para diferentes bipartições. As figuras (a), (b) e (c) correspondem a uma cadeia de $N = 12$ sítios com a partição da esquerda contendo 6, 5 e 4 sítios, respectivamente. A região vermelha (cinza escuro) indica $\chi_\alpha(g) > 0$, enquanto a região azul (cinza claro) corresponde a $\chi_\alpha(g) < 0$. A mudança na convertibilidade ocorre sempre no ponto de transição $g = 1$, independentemente da partição. Figura retirada de [60].

Outro exemplo de trabalho no qual a convertibilidade foi associada a transições de fase, encontra-se na referência [62]. Nesse caso, os autores observaram que estados fundamentais dentro de uma fase topológica não podem ser conectados entre si através de operações locais e comunicação clássica entre subpartes de um sistema bipartido. Eles sugeriram, assim, que a possibilidade ou não de convertibilidade local pode determinar a fronteira entre uma fase topológica e uma fase convencional.

A possibilidade de conversão entre estados também pode ser analisada na ausência de um catalisador. Nesse caso, a possibilidade de conversão é dada por meio da majoração de estados quânticos, definida como [67]

$$M(j) = \frac{\partial}{\partial \lambda} \sum_{i=1}^j \xi_i(\lambda), \quad (2.5)$$

sendo que o espectro de emaranhamento $\{\xi_i\}$ é organizado em ordem decrescente. Convertibilidade de $|\Psi_0^{(\lambda)}\rangle$ para $|\Psi_0^{(\lambda+\epsilon)}\rangle$ na ausência de catalisador é possível se $M(j) \leq 0$ para todo j .

Em geral, ao longo do trabalho, usamos o termo convertibilidade para nos referirmos ao caso com catalisador, a não ser que o contrário seja especificado.

Além de ser, na literatura, associado a transições de fase em sistemas interagentes, o conceito de convertibilidade está diretamente relacionado à análise da relevância da computação quântica para a descrição de diferentes sistemas físicos [60]. Mais especificamente, computação clássica é suficiente para a descrição de sistemas nos quais os efeitos da variação de um parâmetro externo podem ser simulados por operações locais, isto é, em casos nos quais há convertibilidade local. Computação quântica, por outro lado, tem potencial de utilidade em casos nos quais variações de parâmetros externos geram efeitos quânticos não-locais, ou seja, quando há aumento da entropia de emaranhamento. Em resumo, a computação quântica tem potencial para superar a computação clássica apenas em regiões nas quais não há convertibilidade local.

No trabalho descrito na presente seção, analisamos aspectos operacionais de estados quânticos utilizando o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG, *density matrix renormalization group*). Investigamos o comportamento da convertibilidade local ao longo das transições de fase presentes no Hamiltoniano de spin XXZ, em uma dimensão, para os casos de spin-1/2 e spin-1. Nossa análise vai além de outras presentes na literatura, porque estudamos cadeias maiores e incluímos uma análise da dependência dos resultados com o tamanho dos sistemas, o que é essencial para a descrição de transições de fase, definidas formalmente no limite termodinâmico. Além disso, analisamos transições de fase de diferentes ordens, incluindo transições contínuas, descontínuas e transições BKT.

Nossos resultados mostram que mudanças na convertibilidade local tipicamente correspondem a pontos de simetria do Hamiltoniano, o que pode ou não coincidir com transições de fase quânticas. Nós também fornecemos um exemplo de uma transição BKT que é desassociada de qualquer simetria preexistente e por isso não produz nenhuma alteração no perfil de convertibilidade do sistema. Assim, de acordo com nossos resultados, a abordagem operacional baseada na convertibilidade local fornece um bom indicador de simetrias explícitas do Hamiltoniano, mas não necessariamente de criticalidade.

Os modelos e método utilizados são apresentados na próxima seção, em seguida, descrevemos nossos resultados numéricos e finalizamos o capítulo com as conclusões.

2.2 Modelo e método

Neste trabalho, consideramos o modelo de Heisenberg anisotrópico (também conhecido como Hamiltoniano XXZ) para spin-1/2 e spin-1 em uma dimensão. A escolha do modelo deve-se ao fato de ser simples e ainda apresentar transições de fase de diferentes ordens. Em geral, o Hamiltoniano de Heisenberg pode ser usado para descrever materiais magnéticos reais, desde que estes apresentem spin bem localizados. EuO, EuS e RbMnF₃ são exemplos desses materiais [68].

O Hamiltoniano XXZ é dado por

$$H = \sum_{l=1}^L [S_l^x S_{l+1}^x + S_l^y S_{l+1}^y + \Delta S_l^z S_{l+1}^z + D(S_l^z)^2], \quad (2.6)$$

sendo que $\mathbf{S}_l^{(x,y,z)}$ são os operadores de spin no sítio l , Δ é a intensidade do acoplamento de troca longitudinal entre primeiros vizinhos e D representa uma anisotropia uniaxial. Na equação (2.6) e ao longo do trabalho usamos a intensidade do acoplamento de troca transversal como unidade de energia. Note que o parâmetro λ , introduzido na seção anterior, pode ser identificado com Δ ou D , dependendo da transição considerada.

Simetrias, fases e transições

Para todos os valores de Δ e D , o Hamiltoniano tem uma simetria de rotação no plano xy e uma simetria de inversão de spin ao longo do eixo z . Além disso, o modelo tem uma simetria explícita em $\Delta = 1$ e $D = 0$: em ambos os casos, spin-1/2 e spin-1, há um conjunto de quatro operadores - $Z = \sum_l S_l^z$ (o spin total na direção z), S^2 (spin total), $Q_L^- = \sum_l S_l^- = \sum_l (S_l^x - iS_l^y)$ (operador destruição) e $Q_L^+ = \sum_l S_l^+ = \sum_l (S_l^x + iS_l^y)$ (operador criação) - que comutam com o Hamiltoniano em $\Delta = 1$ e que são construídos a partir da soma de operadores locais. Essa simetria pertence ao grupo SU(2), em notação de teoria de grupos.³

No caso de spin-1/2, o termo de anisotropia (proporcional a D) é simplesmente uma constante, já que $(S^z)^2 = \mathbb{1}/4$. O modelo é mapeável em um modelo de férmions sem spin via transformação de Jordan-Wigner [69] e, em uma dimensão, tem solução exata via ansatz de Bethe [27]. O sistema tem duas fases com *gap*: uma fase ferromagnética para $\Delta \leq -1$ e uma fase antiferromagnética (fase de Néel) para $\Delta > 1$, separadas por uma fase líquido de Luttinger (LL),⁴ sem *gap*, para $-1 < \Delta \leq 1$. A transição entre as fases ferromagnética e LL é de primeira ordem, enquanto a transição entre o LL e a fase de Néel é do tipo BKT. Na transição de ordem infinita, o *gap* decresce exponencialmente à medida

³O grupo U(N) consiste em um conjunto de matrizes unitárias de ordem N. O caso especial em que as matrizes tem determinante 1 é conhecido como grupo unitário especial, SU(N). Em particular, o grupo SU(2) corresponde ao grupo das rotações que podemos efetuar sem alterar o ângulo entre dois vectores.

⁴Uma breve apresentação da teoria de líquido de Luttinger pode ser encontrada no Apêndice C.

em que Δ se aproxima de 1, vindo de valores superiores, o que dificulta a detecção do ponto crítico [16, 70]. Um esboço das fases presentes no modelo, incluindo os pontos de transição, pode ser visto na Figura 2.4. É importante ressaltar que transições de fases são bem definidas no limite termodinâmico. Assim, os valores dos parâmetros para os quais ocorre a transição, apresentados ao longo do trabalho, correspondem a pontos de fronteira entre duas fases distintas quando o número de sítios na cadeia tende a infinito. Em trabalhos numéricos, é comum a utilização de uma análise de escala a partir de cadeias finitas de diferentes tamanhos para a extrapolação e determinação do ponto de transição no limite termodinâmico.

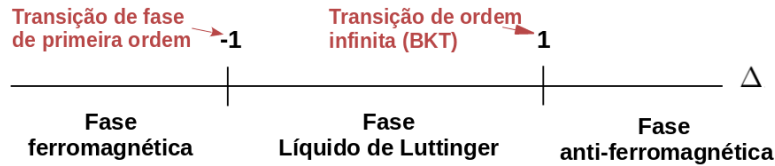


Figura 2.4: Esboço das fases e pontos de transição do modelo XXZ com spin 1/2.

O modelo de spin-1 não é integrável, mas o diagrama de fase do estado fundamental é conhecido [71, 72] e pode ser visto na Figura 2.5. Vamos primeiramente focar na linha $D = 0$. Nesse caso, há uma fase ferromagnética para $\Delta \leq -1$, uma fase LL para $-1 < \Delta \leq 0$, uma fase de Haldane⁵ para $0 < \Delta \lesssim 1.18$ e uma fase de Néel para $\Delta \gtrsim 1.18$ [74, 75]. A transição entre as fases LL e Haldane é do tipo BKT e sabe-se que a transição ocorre exatamente em $\Delta = 0$ devido a uma simetria $SU(2)$ escondida gerada por operadores não locais [76]. Mais especificamente, nesse caso os operadores Q_{NL} que definem a álgebra satisfazem $Q_{NL}^+ = \sum_j (S_j^+)^2 e^{i\pi \sum_{l < j} S_l^z}$, $Q_{NL}^- = \sum_j (S_j^-)^2 e^{i\pi \sum_{l < j} S_l^z}$ e $Q_{NL}^z = \frac{1}{2}[Q_{NL}^+, Q_{NL}^-]$. Note que, nesse caso, Q_{NL} envolve o produto sobre operadores que atuam em sítios diferentes, em contraste com a simetria $SU(2)$ explícita que existe em $\Delta = 1$.

Ligar a anisotropia D no modelo de spin-1 dá origem a mais uma linha de transição BKT no diagrama de fase [74]. Enquanto a transição entre LL e Haldane continua ocorrendo para $\Delta = 0$ devido à simetria escondida, surge ainda uma transição BKT entre as fases LL e uma fase conhecida como *large-D*. Essa segunda fase, que surge quando a anisotropia D é grande, como o próprio nome sugere, é uma fase com *gap* na qual $\langle S^z \rangle = 0$ para todo sítio. A transição entre as fases LL e *large-D* é completamente desassociada de qualquer ponto de alta simetria do modelo.

⁵Em 1983 F. Haldane observou que, enquanto cadeias de Heisenberg isotrópicas (que correspondem ao caso $\Delta = 1$ e $D = 0$ do modelo XXZ) de spin semi-inteiro não apresentam *gap* entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, cadeias de spin inteiro apresentam *gap* [73]. Por isso a fase com *gap* entre LL e antiferromagnética no caso de spin-1 é chamada fase de Haldane.

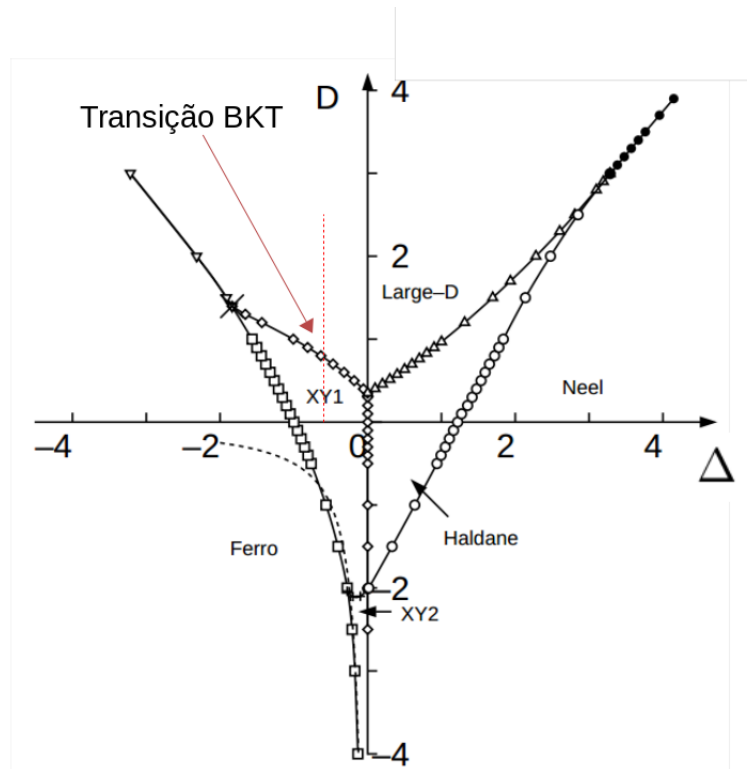


Figura 2.5: Diagrama de fase do modelo XXZ no caso de spin-1. A linha pontilhada indica a região de parâmetros analisada na subseção 2.3.3. Figura retirada de [72].

DMRG

Os resultados numéricos foram obtidos por meio do grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG, *density matrix renormalization group*), método desenvolvido em 1992 por Steven R. White [77, 78] para a descrição de propriedades do estado fundamental de sistemas interagentes unidimensionais. DMRG é baseada em um processo de truncagem selecionada do espaço de Hilbert. Inicialmente, uma cadeia pequena é resolvida exatamente, isto é, por diagonalização exata. Em seguida, crescemos o sistema sem crescer o espaço de Hilbert. Essa é a ideia por trás do Grupo de Renormalização, introduzido em 1975 por K. Wilson [79]. Nesse caso, o Hamiltoniano do sistema maior é truncado na base dos auto-estados de menor energia do sistema anterior. Essa abordagem fornece uma boa descrição para o modelo Kondo e para o modelo de Anderson de uma impureza, porém não é apropriada para alguns outros sistemas fortemente correlacionados. Steven R. White percebeu que, para resolver modelos não descritos por Grupo de Renormalização, é conveniente substituir a truncagem baseada em energia por uma truncagem baseada nos auto-estados da matriz densidade reduzida correspondentes aos maiores auto-valores. Uma discussão detalhada a respeito do método é apresentada no Apêndice B deste documento.

O código utilizado para a obtenção dos resultados foi desenvolvido em uma colaboração

entre o ex-aluno Eduardo Mascarenhas e nosso grupo.

2.3 Resultados

Nesta seção apresentamos os resultados obtidos para o comportamento da convertibilidade local para os casos de spin-1/2 e spin-1. Investigamos as alterações nessa propriedade nas diferentes fases dos modelos, procurando identificar uma relação entre mudanças no perfil de convertibilidade e transições de fase.

2.3.1 Spin-1/2

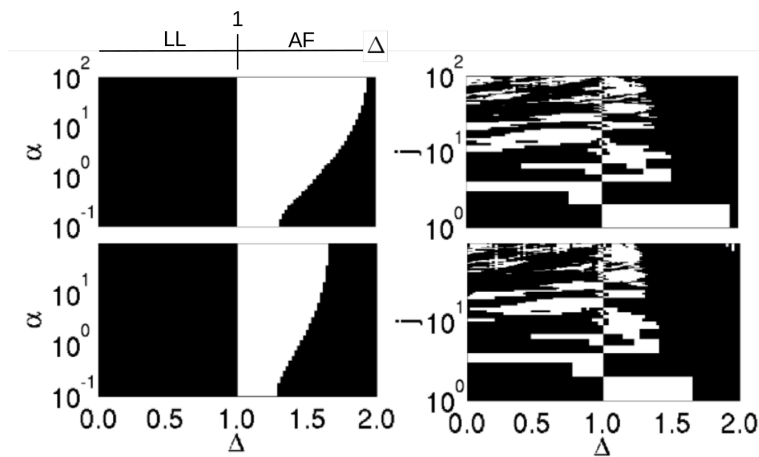


Figura 2.6: Sinal da susceptibilidade catalítica χ para diferentes entropias de R enyi (esquerda) e majora  o M (direita) em fun  o de Δ para as fases l ıquido de Luttinger (LL) e antiferromagn tica (AF). Resultados obtidos para cadeias de spin-1/2 de $L = 112$ s ıtios (acima) e $L = 212$ s ıtios (abaixo). Regi es pretas indicam $\chi < 0$ (ou $M < 0$) e regi es brancas correspondem a $\chi > 0$ (ou $M > 0$). Os dados foram gerados para uma parti  o sim trica da cadeia, $A = B = L/2$, retendo 100 estados no c lculo DMRG, o que mant m o erro de truncagem abaixo de 10^{-9} .

Para $\Delta \leq -1$, o sistema com spin-1/2 est  na fase ferromagn tica e o estado fundamental, duplamente degenerado, corresponde a um estado completamente polarizado. Nesse caso a susceptibilidade catal tica χ [equa  o (2.4)]   sempre igual a zero para qualquer valor de Δ e de α . Assim, a convertibilidade   poss vel entre quaisquer dois pontos, em ambas as dire  es.

As outras fases t m perfis de convertibilidade n o triviais, que est o representados na Figura 2.6, na qual apresentamos o sinal da susceptibilidade para diferentes valores de α em fun  o de Δ , para uma cadeia de spin-1/2 com $L = 112$ s ıtios (painel superior) e $L = 212$ (painel inferior). Ao contr rio da fase ferromagn tica, para $-1 < \Delta \leq 1$ (que corresponde  

fase LL no limite termodinâmico), $\chi < 0$ para todo α , o que indica convertibilidade unidirecional. Além disso, a direção na qual a convertibilidade é possível muda no ponto isotrópico $\Delta = 1$. A convertibilidade é então perdida (i.e., o sinal de χ depende de α) à medida em que Δ aumenta. Finalmente, a convertibilidade unidirecional é recuperada para Δ grande, quando o estado fundamental se aproxima do estado de Néel. O perfil de convertibilidade é sensível ao tamanho da cadeia: quanto maior o número de sítios, menor o valor de Δ para o qual o sistema apresenta convertibilidade característica do comportamento fortemente anti-ferromagnético.

Os painéis da direita da Figura 2.6 mostram os resultados para a análise de majoração (convertibilidade na ausência de catalisador). Podemos ver que o uso de catalisador para a convertibilidade é dispensável apenas no regime antiferromagnético forte, quando o sinal de M deixa de depender de j .

Ressaltamos que a convertibilidade catalítica muda de direção exatamente no ponto de Heisenberg, $\Delta = 1$, independentemente do tamanho do sistema. Esse ponto coincide com um ponto de simetria SU(2) do modelo. Notamos que a ausência de efeitos de tamanho finito ocorre mesmo para sistemas pequenos, com $N \sim 10$ sítios, o que sugere que a convertibilidade está detectando a simetria SU(2) (presente em sistemas de qualquer tamanho), ao invés da transição de fase, cujos precursores só devem estar presentes em sistemas maiores. É interessante ressaltar também que a majoração apresenta uma tendência à mudança de sinal da susceptibilidade exatamente em $\Delta = 1$, o que reforça que essa quantidade detecta o ponto de simetria do sistema.

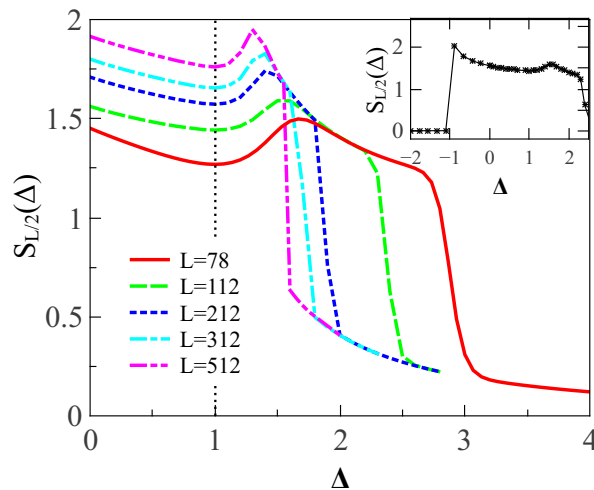


Figura 2.7: Entropia de emaranhamento no centro de cadeias de Heisenberg com spin-1/2, para sistemas de diferentes tamanhos L . Um mínimo local da entropia coincide com o ponto de simetria SU(2), $\Delta = 1$. O *inset* apresenta a entropia para uma escala maior de Δ , para uma cadeia de $L = 100$ sítios.

Neste trabalho, focamos na análise de convertibilidade porque esta propriedade tem um importante significado operacional, conforme discutido na introdução, além de carregar informações de todo o conjunto de entropias de R enyi. Para completar a an alise, apresentamos, na Figura 2.7, a entropia de emaranhamento (entropia de R enyi com $\alpha = 1$) do sistema em fun c ao de Δ , pois essa quantidade  e mais comumente analisada na literatura. A mudan ca do sinal da susceptibilidade se manifesta, nesse caso, como um m nimo na entropia, que acontece no ponto de simetria $\Delta = 1$ para qualquer tamanho de sistema.

2.3.2 Spin-1 - caso $D = 0$

Vamos discutir agora o caso de spin-1 na aus encia de anisotropia. Nossos resultados para o perfil de convertibilidade nesse caso est ao representados na Figura 2.8(a). A fase LL ($-1 < \Delta < 0$) n ao apresenta convertibilidade local, pois o sinal de χ depende de α , ao contr ario da fase LL para o modelo de spin-1/2. Observamos ent ao que, apesar das fases LL nos modelos de spin-1/2 e spin-1 apresentarem a mesma f isica de baixas energias, elas apresentam diferentes comportamentos operacionais.

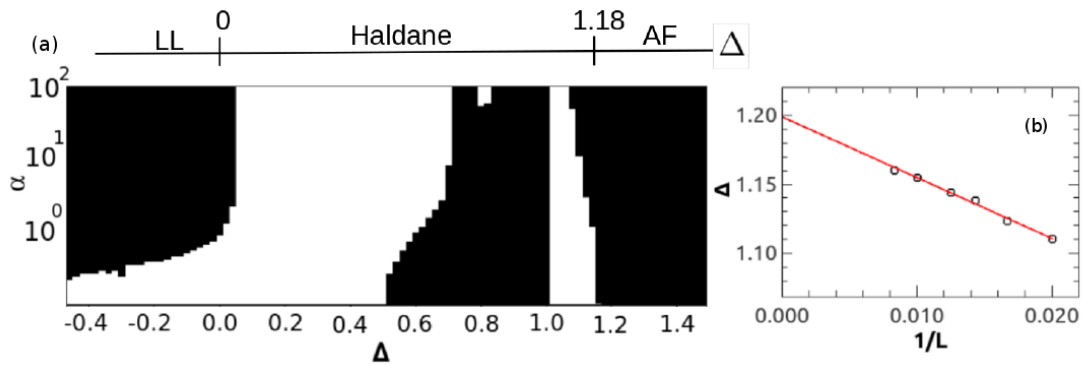


Figura 2.8: (a) Sinal da susceptibilidade catal tica para diferentes entropias de R enyi para um sistema bipartido $A = B = L/2$ de spin-1 em fun c ao de Δ , para $D = 0$ e $L = 106$. (b) An lise de tamanho finito para o ponto de transi c ao entre as fases de Haldane e N eel, definido pela extrapola c ao de ponto de mudan ca de convertibilidade no limite termodin mico.

Na Figura 2.8(a) vemos tamb em que a transi c ao de LL para a fase de Haldane (que ocorre para $\Delta = 0$ no limite termodin mico) n ao corresponde a mudan cas na convertibilidade. Nesse ponto o Hamiltoniano apresenta uma simetria $SU(2)$ escondida (relacionada a operadores *n ao locais*), mencionada na se c ao 2.2 deste trabalho. Essa simetria *escondida* n ao  e detectada pela convertibilidade *local*. No entanto,  e importante ressaltar que a derivada da entropia de emaranhamento ($S_{\alpha \rightarrow 1}$) muda de sinal exatamente nesse ponto de simetria; para $\alpha < 1$, a susceptibilidade muda de sinal para $\Delta < 0$, enquanto que para $\alpha > 1$ a mudan ca de sinal acontece para $\Delta > 0$. A mudan ca de sinal de $\chi(\alpha = 1)$ em $\Delta = 0$ coincide com um

cruzamento de níveis no espectro de emaranhamento, para qualquer tamanho de sistema, conforme observado na Figura 2.9(a). Assim, apesar da convertibilidade não detectar a simetria escondida, ela ainda pode ser identificada pelo espectro de emaranhamento.

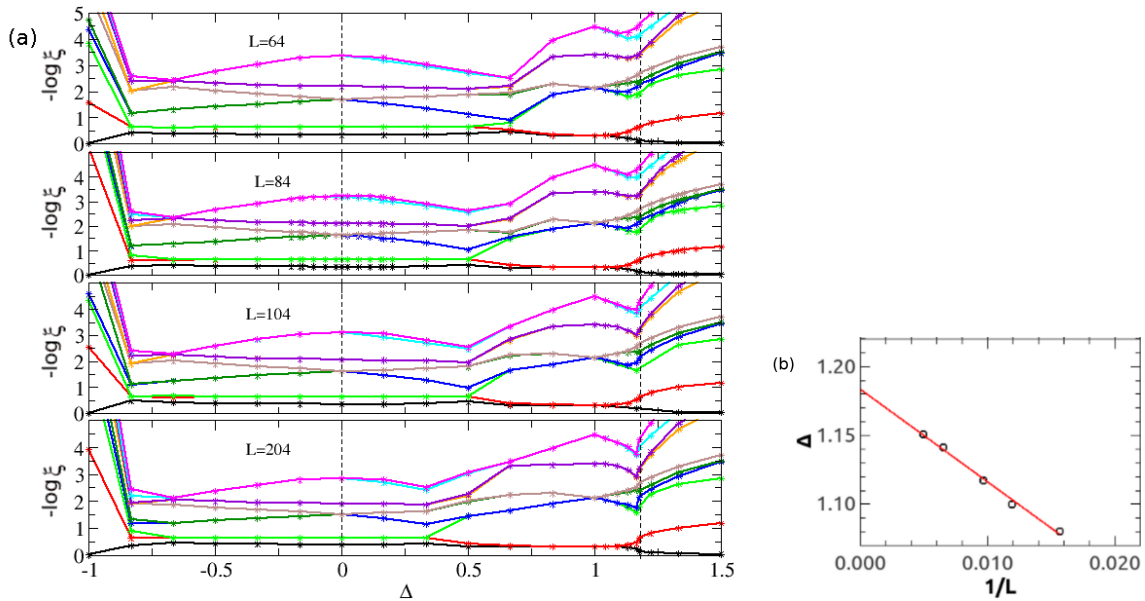


Figura 2.9: (a) Espectro de emaranhamento de cadeias de Heisenberg com spin-1 de diferentes tamanhos L . Para cada tamanho, apresentamos os dez maiores autovalores ξ da matriz densidade reduzida. Mudanças no perfil de convertibilidade (Figura 2.8) correspondem a pontos de não analiticidade do espectro (cruzamentos de níveis e quebras de degenerescência), indicados por linhas pontilhadas. (b) Análise de tamanho finito para o ponto de transição entre as fases de Haldane e Néel, definido pela extrapolação do ponto de quebra de degenerescência do espectro no limite termodinâmico.

A Figura 2.8(a) também mostra mudanças no perfil de convertibilidade que ocorrem dentro da fase de Haldane. Convertibilidade unidirecional é estabelecida aproximadamente quando a fase é atingida ($0 \lesssim \Delta \lesssim 0.5$), mas ela é perdida para $0.5 \lesssim \Delta \lesssim 0.7$. À medida que Δ aumenta, ainda na fase de Haldane, a convertibilidade unidirecional é recuperada na direção oposta. É interessante notar que χ muda de sinal, para todo α , exatamente no ponto de simetria explícita $SU(2)$, $\Delta = 1$. Todas essas mudanças acontecem dentro de uma mesma fase, o que revela que mudanças na convertibilidade local não necessariamente correspondem a transições de fase.

De fato, trabalhos anteriores mostraram que não analiticidades na entropia de emaranhamento não necessariamente correspondem a transições de fase, mas podem, por exemplo, separar uma fase comensurável de uma fase incomensurável [80]. No presente trabalho mostramos que há uma relação direta entre mudanças na convertibilidade e simetrias geradas por operadores locais.

A transição entre as fases de Haldane e Néel acontece para $\Delta \approx 1.18$ (no limite ter-

modinâmico) [74, 75] e é de segunda ordem. Nessa transição, ao contrário dos outros casos analisados, o perfil de convertibilidade é sensível a efeitos de tamanho finito. Dessa forma, mudanças na convertibilidade local podem estar relacionadas à transição. Note que essa transição pode ser descrita pelo paradigma tradicional de quebra de simetria.

Resultados anteriores presentes na literatura [60, 61] relacionaram mudanças no perfil de convertibilidade com transições de fase de segunda ordem, como a que ocorre entre as fases de Haldane e Néel, mas apenas sistemas pequenos foram analisados (até 18 sítios). Neste trabalho, consideramos sistemas maiores e realizamos uma extrapolação do ponto de mudança de convertibilidade (ponto de mudança de sinal da susceptibilidade para α pequeno) em função do tamanho, representada no painel (b) da Figura 2.8. Estimamos, por esse processo, uma transição no limite termodinâmico em $\Delta \approx 1.20$; esse valor apresenta um pequeno desvio com relação ao valor conhecido, $\Delta \approx 1.18$. A determinação do valor crítico de Δ a partir da convertibilidade não é tão precisa porque, nesse caso, as mudanças no sinal da susceptibilidade correspondem a entropias de Rènyi com α pequeno, que dependem fortemente dos menores auto-valores da matriz densidade reduzida, intrinsecamente menos precisos no cálculo numérico via DMRG (o método é baseado em uma truncagem selecionada do espaço de Hilbert baseada nos auto-vetores da matriz densidade reduzida correspondentes ao maiores auto-valores, conforme detalhado no Apêndice B).

A convertibilidade local é função do espectro de emaranhamento. Os 10 maiores auto-valores da matriz densidade reduzida estão apresentados na Figura 2.9(a), para cadeias de diferentes tamanhos L . Como podemos ver, as mudanças mais abruptas nas propriedades de convertibilidade acontecem na vizinhança de cruzamento de níveis ($\Delta = 1$) ou quebras de degenerescências ($\Delta \approx 1.18$), isto é, estão relacionadas a não analiticidades no espectro de emaranhamento.

O ponto de transição de segunda ordem entre as fases de Haldane e Néel pode ser estimado por meio de espectro de emaranhamento. A mudança na convertibilidade analisada acima corresponde a um ponto de divisão de níveis no espectro de emaranhamento [linha tracejada na Figura 2.9(a)]. Essa quebra de degenerescência pode ser associada à transição Haldane-Néel. O valor de Δ no qual a degenerescência é levantada também translada com o tamanho do sistema e uma extrapolação do valor para o limite termodinâmico nos permite encontrar o valor crítico $\Delta \approx 1.18$ [Figura 2.9(b)].

É possível, portanto, detectar o ponto de transição de segunda ordem por uma análise do espectro de emaranhamento, que é diretamente relacionado à convertibilidade local. Esse resultado está de acordo com a literatura anterior, que sugere uma correspondência entre convertibilidade e criticalidade em transições descritas por quebra de simetria; mostramos que em outros casos, no entanto, a convertibilidade pode ser associada a simetrias explícitas do Hamiltoniano, mas não a transições de fase.

2.3.3 Spin-1 - caso $D \neq 0$

Para fortalecer a ideia de que mudanças no perfil de convertibilidade estão relacionadas a pontos de simetria, ao invés de transições de fase, estudamos o modelo XXZ para spin-1 na presença de anisotropia ($D \neq 0$). O diagrama de fase para $\Delta < 0$ e $D > 0$ contém uma transição BKT entre as fases LL e *large-D* [72], conforme apresentado na Figura 2.5. Essa transição não coincide com nenhum ponto de simetria do Hamiltoniano para cadeias finitas. A Figura 2.10 mostra resultados para algumas das entropias de R enyi em fun ao de D , para $\Delta = -0.5$. Observamos que todas as entropias decrescem monotonicamente com D , o que gera um perfil de convertibilidade uniforme ($\chi < 0$ para todo α e todo D). Sabe-se que a transi ao BKT ocorre para $D \approx 0.8$ quando $\Delta = -0.5$ (ver linha pontilhada na Figura 2.5), mas, pela Figura 2.10, vemos que tal transi ao n o   acompanhada por mudan as na convertibilidade local.

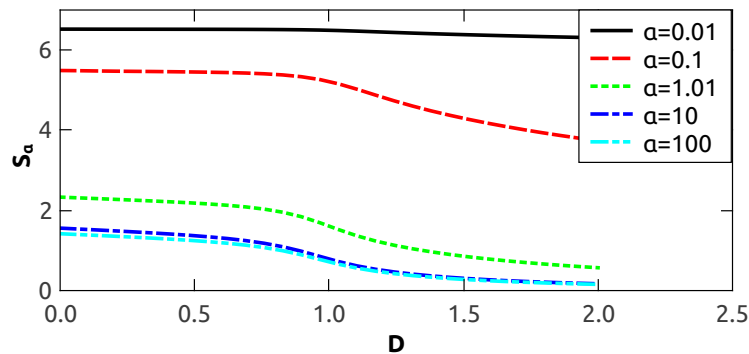


Figura 2.10: Entropias de R enyi S_α ($\alpha = 0.01; 0.1; 1.01; 10$ e 100) para uma cadeia de spin-1 de $L = 206$ s itos. $\Delta = -0.5$ e $A = B = L/2$. As entropias s o sempre monot nicas, o que significa que n o h  mudan a na dire ao da convertibilidade.

2.3.4 Determina ao da transi ao BKT atravs do comportamento cr tico da entropia de emaranhamento

A transi ao de fase analisada na  ltima se ao corresponde a um importante exemplo no contexto do nosso trabalho, j  que n o   acompanhada por uma mudan a no perfil de convertibilidade local. Trata-se de uma transi ao de ordem infinita que n o apresenta nenhuma simetria $SU(2)$ pre-existente. N o h , na literatura, muitos trabalhos dedicados   descri ao dessa transi ao, por isso, na presente se ao, procuramos caracteriz -la utilizando a entropia de emaranhamento (entropia de R enyi com $\alpha = 1$).

Na Figura 2.11 apresentamos a entropia de emaranhamento, $S(x)$, em fun ao do tamanho da parti ao, isto  , a subparte A   composta pelos x primeiros s itos,   esquerda, enquanto a

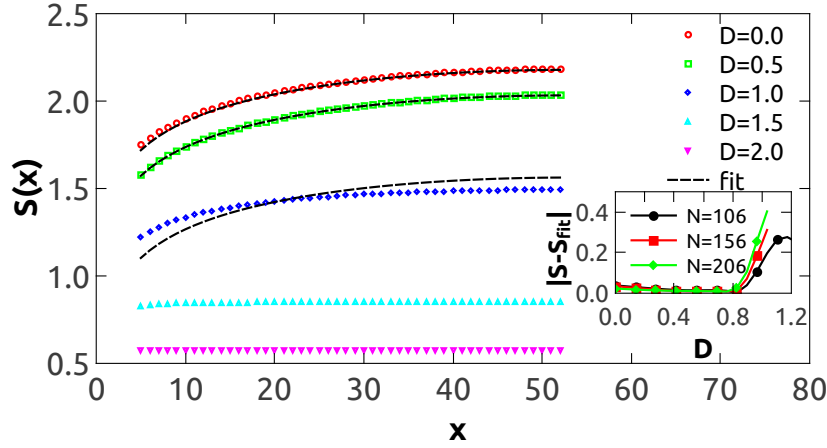


Figura 2.11: Entropia de emaranhamento em função do tamanho da partição x para $N = 106$, $\Delta = -0.5$ e diferentes valores de D . Ajustes dos dados numéricos à equação (2.7) são representados pela linha tracejada. O *inset* apresenta a qualidade do ajuste para sistemas de três tamanhos diferentes ($N = 106, 156, 206$). Pela qualidade do ajuste em função de D , estimamos o ponto de transição BKT em $D \approx 0.8$.

partição B é composta pelos $N - x$ sítios restantes da cadeia. No painel principal apresentamos resultados para $N = 106$, $\Delta = -0.5$ e diferentes valores de anisotropia D . Fica claro que o comportamento de $S(x)$ muda qualitativamente com D : a entropia aumenta logicamente com x para D pequeno, mas satura para valores de D grandes, o que sugere a presença de uma transição de fase.

A entropia de emaranhamento é especialmente útil nesse caso, pois sabe-se que ela apresenta um comportamento universal na fase líquido de Luttinger, descrito por Teoria Conforme de Campos [81]. Usando essa teoria, Calabrese e Cardy [82] demonstraram que a entropia de emaranhamento de um sistema finito, com condições abertas de contorno, no regime $x, N \gg 1$ e em uma fase sem *gap* (como é o caso da fase líquido de Luttinger) é dada por

$$S(x, N) = \frac{c}{6} \log \left[\frac{2N}{\pi} \sin \left(\frac{\pi x}{N} \right) \right] + s', \quad (2.7)$$

sendo s' uma contante não universal e c a carga central, que, nesse caso, é igual a 1.

Podemos encontrar o ponto de transição BKT ajustando os dados numéricos obtidos para $S(x)$ à equação (2.7), deixando c e s' como parâmetros livres, conforme visto na Figura 2.11. Para D pequeno, os dados numéricos se ajustam bem à equação (2.7), indicando que o sistema está na fase crítica. À medida que aumentamos D , no entanto, o comportamento de $S(x)$ começa a desviar da previsão de Teoria Conforme de Campos. Uma análise da qualidade do ajuste em função de D (*inset* da Figura 2.11) revela que a equação (2.7) descreve corretamente a entropia de emaranhamento para $D \lesssim 0.8$, o que nos leva a estimar o ponto de transição

como $D = 0.82 \pm 0.07$, em concordância com resultados anteriores [72]. Dentro da fase crítica, os parâmetros livres apresentam o comportamento previsto pela Teoria Conforme de Campos para a fase líquido de Luttinger, isto é, s' é independente do tamanho da cadeia e $c \approx 1$.

2.4 Conclusão

A convertibilidade local entre estados, um conceito importante em teoria de informação e computação, fornece uma comparação entre o potencial computacional de processos adiabáticos quânticos versus processos clássicos. Os resultados apresentados neste trabalho sugerem fortemente que essa propriedade operacional não está necessariamente relacionada a transições de fase, mas reflete propriedades do espectro de emaranhamento conectadas a simetrias do modelo. De fato, mostramos explicitamente exemplos de mudanças no perfil de convertibilidade que não correspondem a transições de fase e transições de fase que não geram alterações na convertibilidade local. Além disso, modelos diferentes que correspondem à mesma classe de universalidade, como líquidos de Luttinger, podem exibir perfis de convertibilidade distintos. Concluimos, assim, que a convertibilidade local não é uma propriedade universal.

Capítulo 3

Localização da dinâmica e competição entre interação e desordem¹

Neste capítulo, apresentamos um trabalho no qual estudamos a combinação entre interação e desordem sobre a localização de um sistema fechado fora de equilíbrio. Nossa análise é baseada na noção de localização da dinâmica no espaço de estados, calculada via *Loschmidt echo*, que mede a sobreposição entre o estado evoluído e o estado inicial. Embora localização no espaço de estados e localização no espaço real sejam, em geral, conceitos independentes, demonstramos que essas perspectivas podem ser associadas entre si por meio de uma escolha específica de estados iniciais. Mais especificamente, selecionamos estados iniciais maximamente localizados (no espaço real) e analisamos a evolução temporal ditada por um Hamiltoniano contendo interação e desordem. Nossos resultados numéricos revelam que, no caso não interagente, o *Loschmidt echo* médio cresce monotonicamente com o aumento da desordem. Esse resultado concorda com a previsão analítica de que, no caso de partículas independentes, o *echo* é inversamente proporcional ao comprimento de localização. Observamos, no entanto, que, quando interação e desordem estão presentes simultaneamente, o *Loschmidt echo* apresenta um comportamento não monotônico, o que revela uma combinação não trivial entre esses dois mecanismos de localização.

3.1 Introdução

Embora a física de transporte elétrico esteja presente em grande parte das tecnologias atuais, sua descrição em sistemas fora de equilíbrio ainda possui diversas questões em aberto. Em geral, sistemas reais apresentam interação entre as partículas, além de certo grau de desordem. Isoladamente, tanto interação como desordem podem levar o sistema a passar

¹O trabalho apresentado aqui está publicado como Eduardo Mascarenhas, Helena Bragança, R. Drumond, M. C. O. Aguiar, M. Franca Santos, “Nonequilibrium localization and the interplay between disorder and interactions”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 195602 (2016).

por transições metal-isolante, por meio dos mecanismos de Mott e Anderson, descritos no Capítulo 1. Quando combinados, esses ingredientes podem gerar consequências não triviais sobre as propriedades de transporte do sistema.

A combinação entre os dois efeitos de localização tem sido estudada há décadas² [84–87], mas é ainda um assunto desafiador. Há pouco mais de 10 anos, Basko, Aleiner e Altshuler [88] demonstraram que, embora o isolante de Anderson sobreviva à inclusão de pequena quantidade de interação, delocalização pode ser induzida pelo aumento da temperatura em sistemas desordenados e interagentes. Esse trabalho deu origem à investigação da chamada localização de muitos corpos (MBL, de inglês *many-body localization*), que é considerada uma transição dinâmica: ao contrário de uma transição de fase convencional, em MBL, as propriedades de todo o espectro se alteram na transição. Assim, para descrevê-la, não é possível restringir a análise da transição ao estado fundamental. A transição MBL tem também importantes consequências sobre a evolução temporal, mais especificamente sobre a capacidade do sistema de termalizar, isto é, de agir como reservatório para suas subpartes. Em geral, sistemas localizados não termalizam, pois perturbações locais não se difundem ao longo da rede; esses sistemas são chamados não-ergódicos [89,90].

A competição entre interação e desordem em sistemas unidimensionais fora de equilíbrio tem sido extensivamente estudada na última década, no contexto de MBL [91–98]. Estudos numéricos demonstraram que a estatística do espectro de um sistema unidimensional apresenta uma forma gaussiana no regime difusivo, com desordem pequena, e uma estatística de Poisson no regime localizado, com desordem grande [91]. Além disso, observou-se que a combinação entre interação e desordem tem forte influência sobre correlações em sistemas multipartidos [92] e sobre a entropia de emaranhamento [92–98].

Recentemente, D. J. Luitz *et al.* estudaram uma cadeia de Heisenberg com spin 1/2 na presença de um campo magnético desordenado [98]. Esse sistema é mapeável em um modelo de férmions sem spin com interação entre primeiros vizinhos fixa e níveis de energia locais aleatórios. Resolvendo um sistema finito (22 sítios) por diagonalização exata, os autores utilizaram diferentes medidas de emaranhamento para definir a fronteira entre um estado delocalizado (ergótico) e um estado localizado (MBL) em função do nível de desordem do campo externo. A Figura 3.1 apresenta um diagrama de fase em função da largura da desordem e da energia dos auto-estados do Hamiltoniano.

Apesar do intenso trabalho experimental e teórico realizado na última década ter nos fornecido novas informações a respeito da influência simultânea de interação e desordem sobre sistemas físicos [84–88,91–98], a descrição da transição entre estados localizados e estados estendidos nesse contexto permanece em aberto devido a dificuldades técnicas, como por exemplo limitações de tamanho em cálculos numéricos.

²A conjunção entre interação e desordem foi o tema do meu trabalho de mestrado [33,83], porém em um contexto diferente do trabalho apresentado neste capítulo.

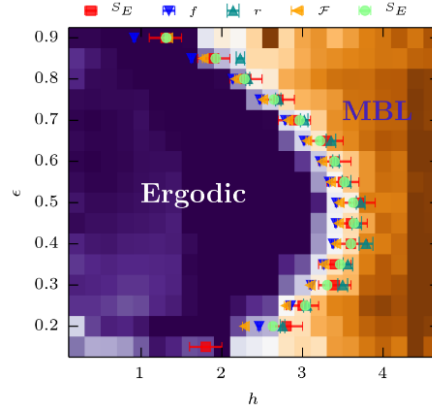


Figura 3.1: Diagrama de desordem (h) em função da energia dos auto-estados do Hamiltoniano (ϵ) para a cadeia de Heisenberg desordenada. A fronteira entre estados delocalizados (ergóticos) e localizados (MBL) foi definida por diferentes medidas de emaranhamento. Figura retirada de [98].

No trabalho descrito neste capítulo, estudamos a competição entre interação e desordem em sistemas quânticos fechados em uma dimensão, a partir da perspectiva da localização da dinâmica no espaço de estados. Descrevemos a conjunção dos dois efeitos de forma bem definida e acessível em sistemas pequenos. Além disso, mostramos que, dada a escolha de um Hamiltoniano e de estados iniciais específicos, localização da dinâmica no espaço de estados pode ser diretamente associada à noção mais tradicional de localização no espaço real.

3.2 Modelo e método

O modelo de Hubbard desordenado é o Hamiltoniano mais simples capaz de descrever ambos os isolantes de Mott e Anderson. O modelo representa uma rede periódica com orbitais posicionados em \vec{R}_i , que se sobrepõem, permitindo a troca de férmions livres. Além disso, partículas que ocupam o mesmo sítio interagem entre si e a energia local varia de um sítio da rede para outro:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_i (\epsilon_i - \mu) n_i. \quad (3.1)$$

O primeiro termo representa o *hopping* das partículas ao longo da rede: J é a amplitude do *hopping*, $\langle \rangle$ indica que a soma está restrita a sítios primeiros vizinhos e $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de uma partícula com spin σ no sítio i . Já o termo proporcional a U representa a interação entre dois férmions que ocupam o mesmo sítio e, por isso, têm spins opostos. $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número, que conta os férmions com spin σ no sítio i , e U é a energia de interação. Finalmente, o último termo representa a desordem,

sendo ε_i a energia local no sítio i e $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$. μ é o potencial químico, que controla a ocupação da rede.

Por simplicidade, estudamos o caso no qual o modelo é completamente polarizado e, portanto, perde o grau de liberdade de spin. Assim, reduzimos pela metade a dimensão efetiva de cada sítio, facilitando a diagonalização exata de cadeias finitas. Nesse caso, consideramos a interação V entre primeiros vizinhos, já que um sítio da rede não pode ser duplamente ocupado;³ o Hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-J(c_i^\dagger c_j - c_i c_j^\dagger) + V(n_i - 1/2)(n_j - 1/2) + \varepsilon_i n_i \right], \quad (3.2)$$

Na equação acima usamos $\mu = V/2$ para garantir que a cadeia possua simetria partícula-buraco, isto é, $\sum_i n_i = N/2$, sendo N o número de sítios da rede. Além disso, as energias locais ε_i são sorteadas aleatoriamente a partir de uma distribuição uniforme de largura $2W$, centrada em zero. Ao longo do trabalho adotamos $J = 1/2$ como unidade de energia. Como mencionado no capítulo anterior, o Hamiltoniano acima, de férmions sem spin, pode ser mapeado em um modelo XXZ de spin 1/2 via transformação de Jordan-Wigner [27, 99].

Metodologia

Neste trabalho, resolvemos o Hamiltoniano da equação (3.2) por diagonalização exata e estudamos apenas sistemas de $N = 10, 12, 14$ e 16 sítios. Assim, não nos propomos a descrever transições de fase (definidas no limite termodinâmico), mas apenas tendências de localização/delocalização, que observamos já estarem bem definidas em sistemas pequenos. Além disso, recentemente cadeias pequenas têm sido reproduzidas experimentalmente em redes óticas [28] e sistemas de íons armadilhados [100], o que tem atraído a atenção para a investigação teórica de sistemas finitos. Com o desenvolvimento de nanodispositivos tecnológicos, o estudo de sistemas pequenos torna-se cada vez mais relevante.

3.3 Localização da dinâmica no espaço de estados

Para estudarmos a conjunção entre interação e desordem, analisamos primeiramente a *localização da dinâmica no espaço de estados*. Mais especificamente, calculamos a taxa de participação (PR, *participation ratio*), que fornece uma estimativa da área efetiva do espaço de Hilbert visitada ao longo da dinâmica [101].

Para introduzirmos essa grandeza, é conveniente revisarmos primeiro alguns conceitos

³Note que o modelo de férmions sem spin não descreve o isolante de Mott. Porém, o estado fundamental para interação V entre primeiros vizinhos grande também é isolante, mais especificamente um estado de onda de densidade de carga (CDW, *charge density wave*), composto de sítios vazios e ocupados intercalados.

relacionados a informação quântica. De acordo com o teorema espectral [102], podemos representar o operador densidade ρ , que descreve um estado arbitrário, como

$$\rho = \sum_{i=1}^D \lambda_i |i\rangle \langle i|, \quad (3.3)$$

onde D é a dimensão do espaço de Hilbert do sistema e $\{\lambda_i\}$ e $\{|i\rangle\}$ são os auto-valores e auto-vetores de ρ . Além disso, o conjunto $\{\lambda_i\}$ satisfaz às condições

$$0 \leq \lambda_i \leq 1 \quad (3.4)$$

e

$$\sum_{i=1}^D \lambda_i = 1. \quad (3.5)$$

Dessas condições, segue que

$$\frac{1}{D} \leq \text{Tr}(\rho^2) \leq 1. \quad (3.6)$$

O limite superior é atingido quando ρ representa um estado puro (nesse caso temos $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_i = 0 \forall i \neq 1$, logo $\rho^2 = \rho$). Além disso, $\text{Tr}(\rho^2) = 1/D$ quando

$$\rho = \frac{1}{D} \mathbb{1}, \quad (3.7)$$

isto é, quando o estado é maximamente misto. A quantidade $\text{Tr}(\rho^2)$ é portanto chamada *pureza* do estado quântico ρ .

O inverso da taxa de participação (IPR, *inverse participation ratio*) é dado pela pureza do estado médio. Assim, inicialmente calcula-se a média temporal do estado ao longo da dinâmica

$$\bar{\rho} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\Psi_t\rangle \langle \Psi_t| dt, \quad (3.8)$$

sendo $|\Psi_t\rangle$ o estado evoluído após um tempo t , a partir de um estado inicial $|\Psi_0\rangle$. Em seguida, calcula-se o traço do quadrado da matriz densidade que representa este estado

$$IPR = \text{tr}\{\bar{\rho}^2\}. \quad (3.9)$$

A IPR pode assumir valores entre 1 e $1/d^N$, onde d é a dimensão de um sítio e d^N a dimensão total do espaço de estados ($d^N = D$).

- Se $IPR = 1$ ($PR = 1$) a dinâmica é maximamente localizada, isto é, o estado inicial permanece inalterado ao longo da dinâmica;
- se $IPR = 1/d^N$ ($PR = d^N$) a dinâmica é maximamente delocalizada, indicando que o

estado percorre todo o espaço de estados ao longo da dinâmica. Nesse caso, o estado médio é a identidade, na qual todos os estados contribuem com a mesma probabilidade.

A pureza do estado médio pode ser calculada por meio da média temporal do *Loschmidt echo*⁴

$$IPR = \bar{L} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt L(t), \quad (3.10)$$

sendo que o *Loschmidt echo* $L(t) = |\langle \Psi_0 | e^{-iHt} | \Psi_0 \rangle|^2$ fornece a fidelidade⁵ entre o estado evoluído e o estado inicial.

No caso de evoluções temporais via Hamiltonianos não-degenerados, temos

$$\begin{aligned} \bar{L} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \Psi_0 | e^{-iHt} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | e^{iHt} | \Psi_0 \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \sum_{E, E'} \langle \Psi_0 | e^{-iHt} | E \rangle \langle E | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | e^{iHt} | E' \rangle \langle E' | \Psi_0 \rangle \\ &= \sum_{E, E'} \langle \Psi_0 | E \rangle \langle E | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | E' \rangle \langle E' | \Psi_0 \rangle \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-i(E-E')t} \\ &= \sum_{E, E'} \langle \Psi_0 | E \rangle \langle E | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | E' \rangle \langle E' | \Psi_0 \rangle \delta_{E, E'} \\ &= \sum_E |\langle E | \Psi_0 \rangle|^4, \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde $|E\rangle$ representa os auto-estados do Hamiltoniano. Dessa forma, o *Loschmidt echo* médio fornece a fidelidade entre o estado inicial e os auto-estados do Hamiltoniano.

Neste trabalho, analisamos a localização da dinâmica no espaço de estados por meio da equação (3.11). Em resumo, a dinâmica de um estado inicial evoluindo no tempo com um dado Hamiltoniano é localizada no espaço de estados quando $PR = 1/\bar{L} \approx 1$ e é delocalizada quando $PR = 1/\bar{L} \approx d^N$.

Conexão entre localização no espaço de estados e localização no espaço real

A localização de equilíbrio no espaço real, da forma introduzida por Anderson [37], é um efeito de partículas independentes. A definição de localização no espaço real em sistemas de muitos corpos é mais sutil; em geral analisamos comprimentos de correlação, ξ , ao invés de comprimentos de localização.

No nosso trabalho, propomos uma relação entre localização da dinâmica no espaço de estados com a noção mais tradicional de localização no espaço real. Para isso, utilizamos uma classe especial de estados iniciais: estados produto em uma cadeia semi-preenchida, i.e.,

⁴Para uma introdução sobre *Loschmidt echo*, sugerimos a referência [103].

⁵A fidelidade corresponde a sobreposição de estados, calculada pelo produto interno. A fidelidade é máxima para estados iguais e nula para estados ortogonais.

$|\Psi_0\rangle = \prod_{i=1}^N |n_i\rangle$ e $\sum_i n_i = N/2$, onde $|n_i\rangle = \{|0\rangle, |1\rangle\}$ representa o auto-vetor do operador número no sítio i . Note que esses estados correspondem a elétrons maximamente localizados no espaço real, com comprimento de localização ξ tendendo a zero. Essa classe de estados corresponde a auto-estados do Hamiltoniano da equação (3.2) para $V \rightarrow 0$ e W grande, $|\Psi_0\rangle = |E_{\xi \rightarrow 0}\rangle$.

A análise do *echo* médio com essa escolha de estados iniciais leva a uma comparação direta entre estados maximamente localizados e os auto-estados do Hamiltoniano, através de seu produto interno (eq. 3.11). Realizamos uma média de \bar{L} sobre M estados iniciais e diferentes distribuições de desordem

$$\langle\langle \bar{L} \rangle\rangle = \frac{1}{M} \int \prod_i d\epsilon_i p(\epsilon_i) \sum_{E'} \sum_E |\langle E(\{\epsilon\}) | E'_{\xi \rightarrow 0} \rangle|^4 \leq 1, \quad (3.12)$$

onde $\langle\langle \rangle\rangle$ denota a média total. $\int \prod_i d\epsilon_i p(\epsilon_i)$ corresponde à média sobre diferentes realizações de desordem, $\{\epsilon\}$ representa o conjunto de energias locais e $\prod_i p(\epsilon_i) = P(\{\epsilon\})$ é a probabilidade de uma configuração de desordem. $\sum_{E'}$ indica a soma sobre diferentes estados iniciais $|E'_{\xi \rightarrow 0}\rangle$.

Em um caso extremo, no qual um dado estado inicial produto $|E'_{\xi \rightarrow 0}\rangle$ evolui no tempo com um Hamiltoniano cujos auto-estados são localizados no espaço real, $|E_{\xi \approx 0}\rangle$, o estado inicial tem uma alta projeção em um dos auto-estados do Hamiltoniano $|\langle E'_{\xi \rightarrow 0} | E_{\xi \approx 0} \rangle|^2 \approx \delta_{EE'}$. Dessa forma, o estado quase não muda ao longo da dinâmica (localização no espaço de estados), resultando em $PR = 1/\langle\langle \bar{L} \rangle\rangle \approx 1$. Por outro lado, evoluindo no tempo com um Hamiltoniano cujos auto-estados são delocalizados no espaço real, $|E_{\xi \gg 1}\rangle$, o estado inicial produto tem projeção pequena em quase todos os auto-estados do Hamiltoniano, $|\langle E'_{\xi \rightarrow 0} | E_{\xi \gg 1} \rangle|^2 \ll 1$. Nesse caso, o estado visita grande parte do espaço de estados durante a dinâmica, o que resulta em alta taxa de participação (regime delocalizado no espaço de estados).

Assim, usando estados iniciais maximamente localizados, relacionamos localização da dinâmica no espaço de estados com localização dos auto-estados do Hamiltoniano no espaço real. Em resumo, com essa escolha de estados iniciais, $PR = \frac{1}{L} \approx 1$ [localização da dinâmica no espaço de estados, equação (3.10)] quando $\frac{1}{M} \int \prod_i d\epsilon_i p(\epsilon_i) \sum_{E'} \sum_E |\langle E(\{\epsilon\}) | E'_{\xi \rightarrow 0} \rangle|^4 \approx 1$, ou seja, quando há localização dos auto-estados no espaço real (auto-estados têm alta projeção em estados maximamente localizados). Por outro lado, $PR = \frac{1}{L} \gg 1$ (delocalização da dinâmica no espaço de estados) quando $\frac{1}{M} \int \prod_i d\epsilon_i p(\epsilon_i) \sum_{E'} \sum_E |\langle E(\{\epsilon\}) | E'_{\xi \rightarrow 0} \rangle|^4 \ll 1$, ou seja, quando os auto-estados do Hamiltoniano são delocalizados no espaço real (auto-estados têm baixa projeção em estados maximamente localizados).

Na nossa análise, esperamos que $\langle\langle \bar{L} \rangle\rangle$ apresente uma dependência funcional com o comprimento de correlação, $\langle\langle \bar{L} \rangle\rangle \propto f(\xi)$, com $f(\xi)$ uma função decrescente de ξ . Um exemplo no qual $f(\xi)$ pode ser obtida explicitamente é o caso de partículas não interagentes em um

potencial desordenado. Nesse regime, o problema pode ser descrito por meio da análise de partículas únicas e os estados quânticos podem ser descritos analiticamente. Conforme discutido na seção 1.3, a presença de centros espalhadores no potencial gera estados com decaimento exponencial das funções de onda em torno de posições centrais, representadas por X , da forma $|E_\xi(X)\rangle = \int dx \frac{1}{\sqrt{\xi}} e^{-|x-X|/\xi} |x\rangle$. Além disso, os estados iniciais maximamente localizados, na representação de partículas independentes, são dados por $|x'\rangle = \lim_{\xi \rightarrow 0} |E_\xi(x')\rangle$. Assim, nesse caso particular, a dependência do *echo* médio com o comprimento de localização é dada por

$$\langle\langle \bar{L} \rangle\rangle \propto \frac{1}{V} \int dx' \int dX \left| \langle E_\xi(X) | x' \rangle \right|^4 = \frac{1}{2\xi}, \quad (3.13)$$

o que significa que o *echo* médio é inversamente proporcional ao comprimento de localização e $f(\xi) = \frac{1}{\xi}$, conforme esperado.

Em casos mais gerais, nos quais consideramos Hamiltonianos interagentes, a relação entre IPR e comprimento de correlação pode ser analisada por meio da perspectiva de termalização. Quando a dinâmica a partir de estados iniciais localizados no espaço real é localizada também no espaço de estados, há uma violação da hipótese ergódica, isto é, os estados acessíveis não são igualmente prováveis ao longo de um período de tempo prolongado; a média temporal do valor esperado de um observável depende do estado inicial e o sistema não termaliza.⁶ A ausência de termalização é usada como indicador de MBL tanto em trabalhos experimentais [29], quanto em trabalhos teóricos [104].

3.4 Resultados numéricos

Casos mais simples, apenas desordem ou apenas interação

Começamos avaliando a taxa de participação $PR = 1/\langle\langle \bar{L} \rangle\rangle$ por meio da equação 3.12 nos dois casos mais simples, isto é, usando um Hamiltoniano desordenado na ausência de interação e também um Hamiltoniano interagente não-desordenado.

No caso não interagente, o aumento de desordem localiza o sistema. Mais especificamente, em uma dimensão, qualquer desordem infinitesimal é suficiente para localizar o sistema, no limite termodinâmico. Na cadeia finita, o aumento da desordem diminuindo progressivamente o comprimento de localização. Esse resultado é representado na Figura 3.2 pelo decaimento monotônico da PR à medida em que aumentamos a largura W da distribuição da desordem. Nesse caso, a redução da PR acompanha a redução de transporte devido à localização de Anderson.

⁶Uma demonstração matemática formal da relação entre taxa de participação e termalização é apresentada em um apêndice do artigo no qual publicamos nosso trabalho (referência [38]). Ela foi desenvolvida em colaboração com o professor Raphael Drummond, do departamento de matemática, e não é representada aqui por ser extremamente técnica.

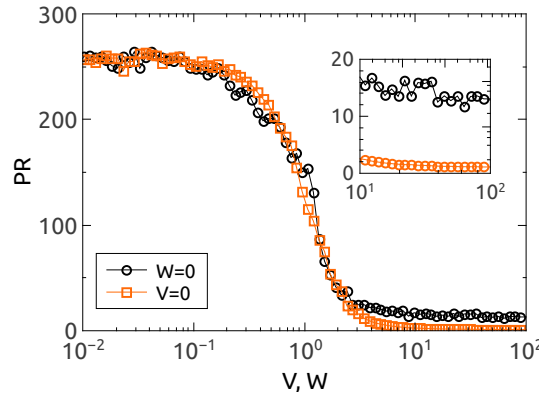


Figura 3.2: Taxa de participação $PR = 1/\langle\langle\bar{L}\rangle\rangle$ de estados maximamente localizados evoluindo no tempo (círculos pretos) com um Hamiltoniano não desordenado, em função da interação V , e (quadrados laranjas) com um Hamiltoniano não interagente, em função da desordem W . O *inset* apresenta um *zoom* para grandes desordens/interações. Resultados obtidos para uma cadeia de $N = 12$ sítios a partir de uma média sobre $M = 10^3$ estados iniciais e realizações de desordem.

De forma semelhante, em um Hamiltoniano não desordenado, interação localiza o sistema progressivamente, conforme também observado na Figura 3.2.

Conjunção entre interação e desordem

A competição entre desordem e interação constitui um cenário mais desafiador, mas os efeitos ainda podem ser estudados pela taxa de participação, conforme apresentado na Figura 3.3. Apesar de desordem e interação, independentemente, localizarem o sistema, a conjunção dos dois efeitos gera consequências não triviais. A introdução de interação em um sistema desordenado [painel (a)] ou de desordem em um sistema interagente [painel (b)] leva o sistema para um regime mais delocalizado; a conjunção continua até que um dos dois efeitos passa a dominar. Mais especificamente, para V e W intermediários, da ordem da amplitude de *hopping*, J , a combinação de interação e desordem produz uma tendência de delocalização. Esse resultado gera um comportamento não monotônico na taxa de participação.

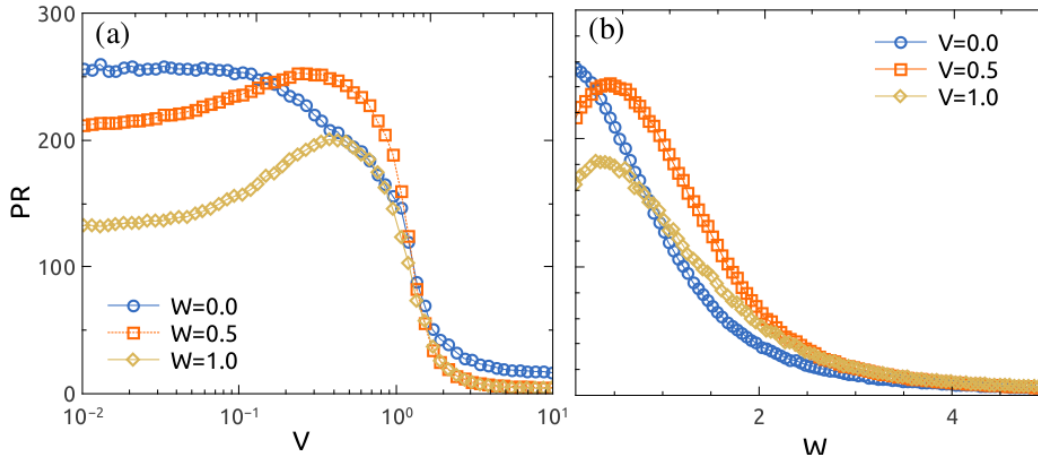


Figura 3.3: Taxa de participação $PR = 1/\langle\langle\bar{L}\rangle\rangle$ para (a) diferentes valores de desordem W em função da interação V e (b) diferentes valores de interação em função da desordem. Resultados obtidos para sistemas de $N = 12$ sítios a partir de uma média sobre $M = 10^4$ estados iniciais e realizações de desordem.

Efeito de tamanho do sistema

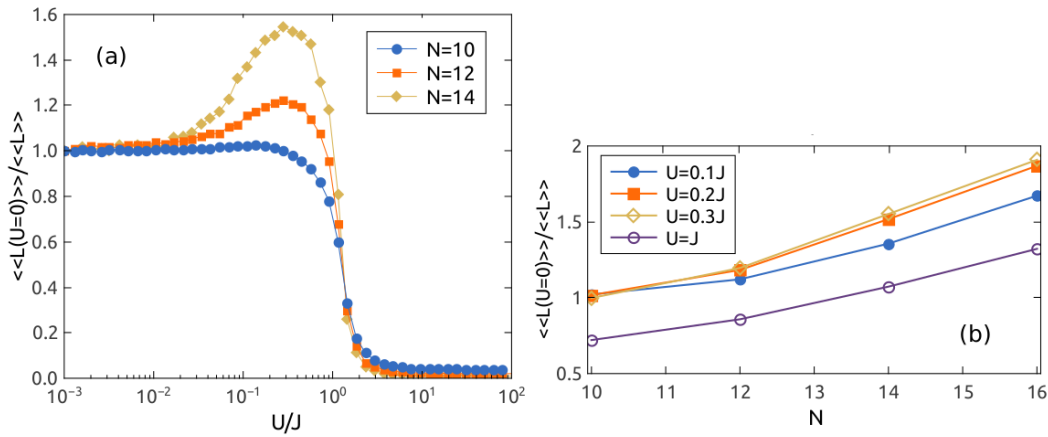


Figura 3.4: Taxa de participação reescalada, $\langle\langle\bar{L}(V = 0)\rangle\rangle/\langle\langle\bar{L}\rangle\rangle$, para $W = 0.5$ (a) em função da interação e (b) em função do tamanho do sistema. Resultados obtidos com 5000 ($N = 10$), 2000 ($N = 12$ e $N = 16$) e 1000 ($N = 14$) realizações.

Observamos ainda que a conjunção entre interação e desordem torna-se mais pronunciada à medida em que aumentamos o tamanho da cadeia. Esse resultado pode ser visto na Figura 3.4. Em 3.4(a) representamos a PR renormalizada, $\langle\langle\bar{L}(V = 0)\rangle\rangle/\langle\langle\bar{L}\rangle\rangle$, para $W = 0.5$ em função da interação para cadeias de diferentes tamanhos. O comportamento não monotônico

da taxa de participação é mais pronunciado para cadeias maiores. O crescimento da taxa de participação renormalizada em função do tamanho N da cadeia pode ser visto claramente no painel (b) da figura.

Dependência com relação ao estado inicial

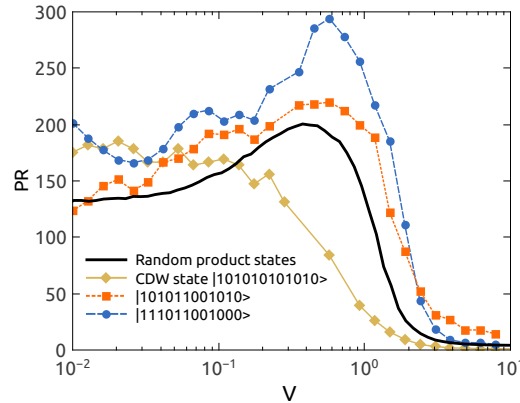


Figura 3.5: PR em função de V para $W = 1$ obtida a partir de estados iniciais específicos. A linha preta corresponde aos dados da Figura 3.3, na qual realizamos uma média sobre $M = 10^4$ estados iniciais. Nas demais curvas, começamos o cálculo a partir de um estado inicial específico e realizamos 10^3 realizações de desordem.

Conforme descrito na seção 3.3, realizamos uma média sobre estados iniciais produto com sítios vazios e ocupados, resultando em uma cadeia semi-preenchida. A média fornece um bom representativo de estados maximamente localizados em geral. Essa escolha de estados iniciais é essencial para a obtenção de nossos resultados e garantia de nossas interpretações, conforme observado na Figura 3.5. Repetindo o mesmo procedimento realizado anteriormente, porém substituindo a média sobre estados iniciais por um estado específico, podemos encontrar resultados diferentes. Usando um estado do tipo onda de densidade de carga (CDW, $|101010\dots\rangle$) como estado inicial, por exemplo, obtemos um comportamento monotônico para a PR à medida em que aumentamos a interação em um sistema desordenado. Isso acontece porque o estado CDW, estado fundamental do sistema fortemente interagente, não representa um estado maximamente localizado típico. Ele está contido no subespaço $V_{m=0}$ e corresponde a apenas 2 dos 924 estados produtos possíveis em uma cadeia semi-preenchida de $N = 12$ sítios. A Figura 3.5 mostra ainda que iniciando a análise com um estado que é apenas uma permutação simples do estado CDW, já recuperamos o comportamento não monotônico.

Distribuição de *gaps* do Hamiltoniano

Para completar a análise, mostramos que a conjugação entre interação e desordem também se manifesta na distribuição de *gaps* do Hamiltoniano, $P(\Delta)$, onde $\Delta = E_{i+1} - E_i$ e $\{E_i\}$ representa o conjunto de auto-valores do Hamiltoniano em ordem crescente. A estatística de *gap* pode ser usada como um indicador de integrabilidade ou caos. Tipicamente, sistemas integráveis apresentam uma estatística de *gap* Poissoniana, enquanto sistemas caóticos exibem estatística de Wigner-Dyson [105]. Além disso, espera-se que sistemas localizados reproduzam sistemas integráveis e suas estatísticas (pois esses sistemas possuem constantes de movimento locais), enquanto regimes delocalizados devem corresponder a sistemas não integráveis [106]. Uma diferença importante entre as duas distribuições de *gap* é que o valor mais provável se aproxima de zero em distribuições Poissonianas, enquanto se move para valores positivos em distribuições Wigner-Dyson.

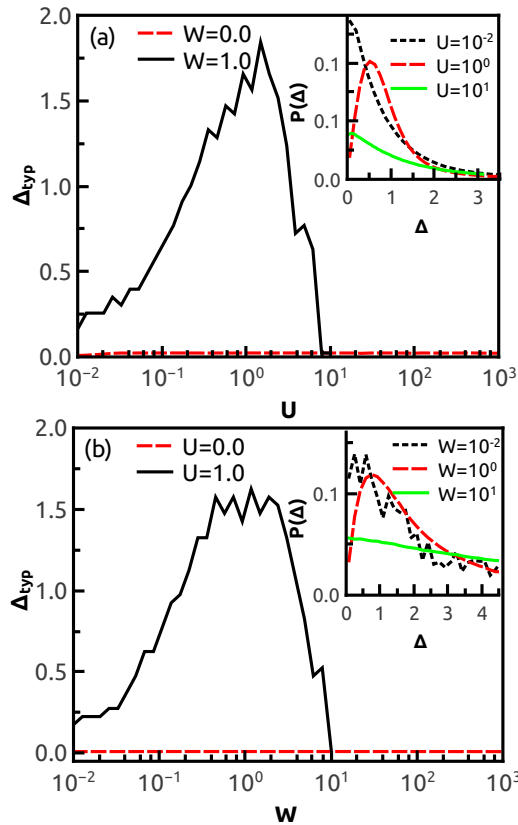


Figura 3.6: *Gap* típico, dado pela posição do máximo da distribuição $P(\Delta)$, em função de V (a) e W (b). O *inset* de (a) mostra distribuições de *gap* para um sistema com $W = 1$ e diferentes valores de V , enquanto o *inset* de (b) mostra distribuições de *gap* para $V = 1$ e diferentes valores de desordem. Resultados obtidos para $N = 12$ com 10^3 realizações de desordem.

Na Figura 3.6 acompanhamos o *gap* típico, Δ_{typ} , correspondente ao valor máximo da

distribuição $P(\Delta)$, em função da interação e da desordem (exemplos de $P(\Delta)$ para sistemas interagentes e desordenados são dados nos *insets*). Por meio da figura, vemos que a distribuição de *gap* de Hamiltonianos interagentes não desordenados e desordenados não interagentes é sempre Poissoniana, pois nesses casos o sistema é integrável. Por outro lado, a inclusão de desordem em sistemas interagentes ou a inclusão de interação em sistemas desordenados leva a um comportamento não-monotônico do *gap* típico, indicando que a conjugação entre interação e desordem leva o sistema para um regime mais delocalizado quando $W \approx V \approx J$. Δ_{typ} move-se para perto de zero quando interação ou desordem aumentam ainda mais, restaurando o regime localizado. Essa análise concorda com os resultados obtidos para a taxa de participação a partir do *echo* médio, isto é, nas duas análises observamos o comportamento não monotônico da taxa de participação e do *gap* típico em função de V e W para a mesma região de parâmetros.

3.5 Conclusão

No presente trabalho, utilizamos a média temporal do *Loschmidt echo* de estados maximamente localizados para caracterizar a localização da dinâmica no espaço de estados. Além disso, relacionamos essa análise à localização, no espaço real, dos auto-estados do Hamiltoniano que rege a dinâmica. Usando essa abordagem observamos que, em um sistema contendo desordem e interação repulsiva, ambos mecanismos de localização, a conjugação dos dois efeitos pode levar a um regime mais delocalizado. Esse comportamento não trivial é observado também na distribuição de *gaps* do Hamiltoniano, indicando que o comportamento também afeta o grau de integrabilidade do sistema. Finalmente, mostramos que os efeitos se tornam mais pronunciados à medida em que aumentamos o tamanho das cadeias estudadas.

Parte II

Dinâmica de não-equilíbrio em sistemas de muitos corpos

Capítulo 4

Quenches quânticos

4.1 Introdução

Conforme discutido no Apêndice A, sistemas quânticos de muitos corpos têm sido construídos experimentalmente em redes óticas. Avanços recentes em física atômica, ótica quântica e nanociência têm permitido a construção de diferentes sistemas artificiais [107–111]; além de redes óticas, outros exemplos são pontos quânticos e nanofios. A realização experimental de sistemas de muitos corpos altamente controlados tem permitido a exploração de novas fronteiras em sistemas fortemente correlacionados, dentre as quais destaca-se o estudo da dinâmica de não-equilíbrio em sistemas quânticos fechados.

Um protocolo simples para estudar um sistema fora de equilíbrio é preparar o estado fundamental de certo Hamiltoniano ($H_0|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$) e deixa-lo evoluir após a alteração de algum parâmetro do sistema ($H_0 \rightarrow H_f$), isto é, seguindo a dinâmica de um Hamiltoniano diferente ($|\Psi(t)\rangle = e^{-iH_f t}|\Psi_0\rangle$). Se o estado inicial não é auto-estado do Hamiltoniano final, ele seguirá uma dinâmica não trivial. Tal processo é denominado *quench* quântico [112,113] e pode ser realizado de forma abrupta ou por variação adiabática de certo parâmetro. Além disso, *quenches* podem ser globais, quando alteramos parâmetros de todo o sistema, ou locais, no caso em que alteramos o parâmetro de um ou poucos sítios da rede. Recentemente, diversos trabalhos têm estudado a dinâmica pós-*quench* em sistemas fermiônicos interagentes, utilizando redes óticas com átomos frios [114–117] e métodos numéricos [118–120].

O estudo da dinâmica de não-equilíbrio em sistemas quânticos fechados permite a análise de diversas perguntas fundamentais. Investiga-se, por exemplo, se o sistema é capaz de equilibrar após um *quench*. Observa-se que, em geral, sistemas de muitos corpos *equilibram*, isto é, valores esperados de observáveis locais (que envolvem poucos sítios da cadeia) atingem *valores estacionários*. Isso ocorre porque, apesar do sistema seguir uma evolução unitária, na maior parte do tempo ele se comporta como se estivesse em um estado de entropia máxima,

dado por [39]

$$\bar{\rho} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-itH_f} \rho_0 e^{itH_f}, \quad (4.1)$$

sendo ρ_0 o estado inicial. Assim, é possível mostrar que, em certos casos, a distância $|\langle A(t) \rangle - \text{tr}(\bar{\rho}A)|$, sendo A um operador local, permanece pequena na maior parte do tempo. Nesse contexto, é interessante estudar as escalas de tempo após as quais é possível observar equilíbrio.

É interessante também comparar os valores de $\langle A(t) \rangle$ com valores térmicos (i.e., valores obtidos por meio do ensemble canônico) [39]. O termo *termalização* é usado para descrever situações nas quais valores esperados de observáveis locais assumem valores próximos àqueles que seriam obtidos se avaliados segundo uma função de partição $Z = \sum_j e^{-\beta E_j}$, para alguma temperatura $T = 1/\beta k_B$, sendo $\{E_j\}$ o conjunto de auto-valores do sistema. Em geral, sistemas quânticos integráveis (que possuem constantes de movimento locais) e sistemas localizados não termalizam.

Outras questões abordadas no contexto da dinâmica de não-equilíbrio em sistemas quânticos fechados envolvem a velocidade com que informações se propagam ao longo do sistema após perturbações locais [121–129]. O trabalho de Lieb e Robinson [130] é de grande relevância nesse contexto. Os autores mostraram que há uma velocidade limite para a propagação de informações em sistemas de muitos corpos com interações de curto alcance. Assim, apesar de descritos por equações de Schrödinger não-relativísticas, esses sistemas apresentam *cones de luz efetivos*. Mais especificamente, Lieb e Robinson demonstraram formalmente que, se A e B são operadores locais (atuam em poucos sítios) tais que A atua na “região” $x = 0$ no tempo $t = 0$ e B atua em $x = x'$ no tempo $t = t'$, então o comutador entre A e B é igual a zero para todo $x' > vt'$, isto é, para B atuando fora do cone de luz de A , sendo v a velocidade limite do sistema. Isso significa que as medidas de A e B são completamente independentes. Esse efeito foi confirmado em estudos numéricos [124, 131–139] e em experimentos com átomos frios [140] e íons armadilhados [141].

Um exemplo experimental pode ser visto na Figura 4.1. Nesse caso, descrito na referência [140], os autores prepararam um sistema de átomos frios bosônicos em uma rede ótica com forte interação entre partículas que ocupam o mesmo sítio. Assim, inicialmente, cada sítio da rede encontra-se com ocupação simples [Figura 4.1(a)]. Em seguida, eles reduziram a interação e observaram a formação de quase-partículas, *holons* e *doublons*, correspondentes a sítios vazios e sítios duplamente ocupados, respectivamente, conforme apresentado na Figura 4.1(b). O painel (c) apresenta a evolução da correlação de dois sítios em função do tempo e espaço. O código de cores representa a magnitude de $C_d(t) = \langle \hat{s}_j(t) \hat{s}_{j+d}(t) \rangle - \langle \hat{s}_j(t) \rangle \langle \hat{s}_{j+d}(t) \rangle$, sendo $\hat{s}_j(t) = e^{i\pi[\hat{n}_j(t) - \bar{n}]}$ um operador que mede a paridade do número de ocupação $\hat{n}_j(t)$ no sítio j e tempo t . Os autores observaram que, após o *quench*, há a propagação de quase-partículas de pares com velocidade relativa v , o que resulta em uma correlação positiva entre

quaisquer dois pares de sítios separados por uma distância $d = vt$.

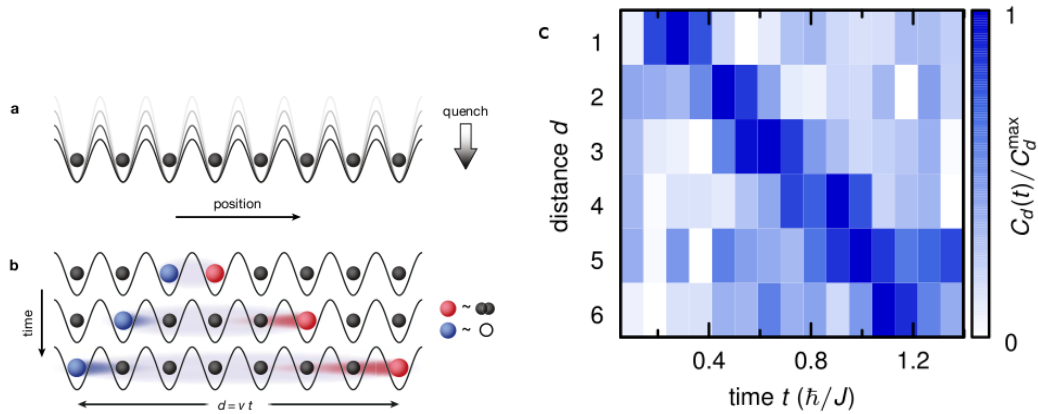


Figura 4.1: Exemplo experimental de cone de luz após um *quench*. (a)-(b): representação esquemática de um *quench* no qual alterou-se a interação local, resultando na formação de sítios vazios e sítios duplamente ocupados. (c): mapa de cores para a correlação de dois sítios em função do tempo e espaço. Figura retirada de [140].

4.2 Trabalho em colaboração¹

Participei, durante o doutorado, do trabalho publicado na referência [40], que tem como primeiro autor outro estudante do grupo, Alberto Luiz de Paula Jr. Investigamos a dinâmica de não-equilíbrio após um *quench* local no qual conectamos duas cadeias de spin-1/2 inicialmente desacopladas e preparadas no estado fundamental do Hamiltoniano XXZ [Hamiltoniano apresentado na equação (2.6) e descrito na seção 2.2] em duas fases diferentes, uma com ordenamento ferromagnético, outra na fase crítica (líquido de Luttinger). Uma representação esquemática do *quench* pode ser vista na Figura 4.2.

Analisamos a evolução temporal da magnetização local e da entropia de emaranhamento via Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (método descrito no Apêndice B) e observamos que essas quantidades propagam-se, a partir da junção entre as cadeias, formando cones de luz.

Trabalhos envolvendo o sistema em equilíbrio via ansatz de Bethe indicam que a fase crítica apresenta excitações elementares de baixa energia, conhecidas como spinons [142, 143], que possuem dispersão $\epsilon_s(k) = v_s \sin(k)$ e velocidade máxima v_s . Além disso, no subespaço de magnetização nula, há a formação de excitações coletivas (estados ligados) quando $-1 <$

¹O trabalho apresentado brevemente nesta seção está publicado como A. L. de Paula Jr, H. Bragança, R. G. Pereira, R. C. Drumond, M. C. O. Aguiar, *Spinon and bound state excitation light cones in Heisenberg XXZ Chains*, Phys. Rev. B **95**, 045125 (2017).

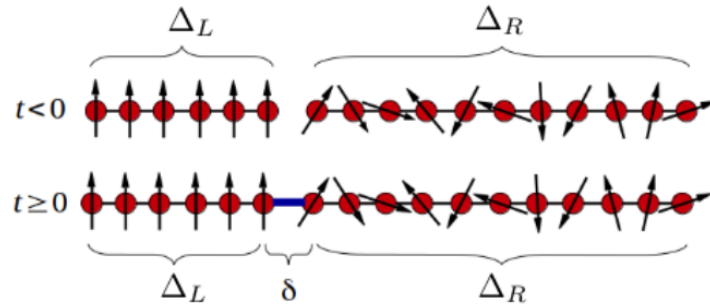


Figura 4.2: Representação esquemática do *quench* local. Inicialmente preparamos uma cadeia na fase ferromagnética, outra na fase crítica. No tempo $t = 0$ conectamos as duas cadeias e deixamos o sistema evoluir. Δ e δ representam os acoplamentos de troca no eixo z e no plano xy , respectivamente.

$\Delta < 0$, sendo Δ o termo de troca longitudinal do Hamiltoniano. A velocidade máxima v_b do segundo tipo de excitação excede a velocidade dos spinons quando $\Delta < \Delta^* = -0.309$.

No nosso trabalho, observamos que o acoplamento da cadeia na fase crítica à outra, preparada na fase ferromagnética, produz tanto um pulso de magnetização local, $\langle S_z \rangle$, quanto uma variação na entropia de emaranhamento (introduzida na seção 2.1) na primeira cadeia, que se propagam com velocidades bem definidas. Nossos principais resultados revelam que as velocidades que limitam os cones de luz são definidas pelas excitações de equilíbrio da fase crítica, spinons e estados ligados, conforme apresentado na Figura 4.3.

Na Figura 4.3(a), o código de cores indica a intensidade da magnetização local, $\langle S_z \rangle$, em função do tempo t e sítio x da cadeia na fase crítica com $\Delta = 0.5$. No tempo $t = 0$, a cadeia é não magnética, porém há variação da magnetização após o acoplamento com a cadeia ferromagnética (não apresentada na figura). A velocidade limite de propagação da magnetização é dada pelo inverso da inclinação do cone de luz; observamos que essa velocidade coincide com a velocidade v_s dos spinons. Nesse caso, $\Delta > \Delta^*$ e há apenas excitações elementares (spinons), por isso observamos apenas um cone de luz. Na Figura 4.3(b), por outro lado, observamos a evolução da magnetização para $\Delta = -0.75$. Nesse caso $\Delta < \Delta^*$ e o sistema apresenta os dois tipos de excitações, spinons e estados ligados. Por isso, observamos dois cones de luz, um externo, cuja borda é definida pela velocidade v_b , e um interno, com velocidade v_s . Observamos também que velocidades aproximadamente iguais podem ser obtidas pelos cones de luz da entropia, conforme apresentado no painel (c), que compara as velocidades obtidas a partir dos cones de luz de magnetização (círculos vermelhos) e entropia (quadrados azuis) com as velocidades de equilíbrio (a linha tracejada indica a velocidade dos spinons e a linha sólida corresponde à velocidade dos estados ligados).

No trabalho, comparamos também a dinâmica de tempos longos com o estado de equilíbrio

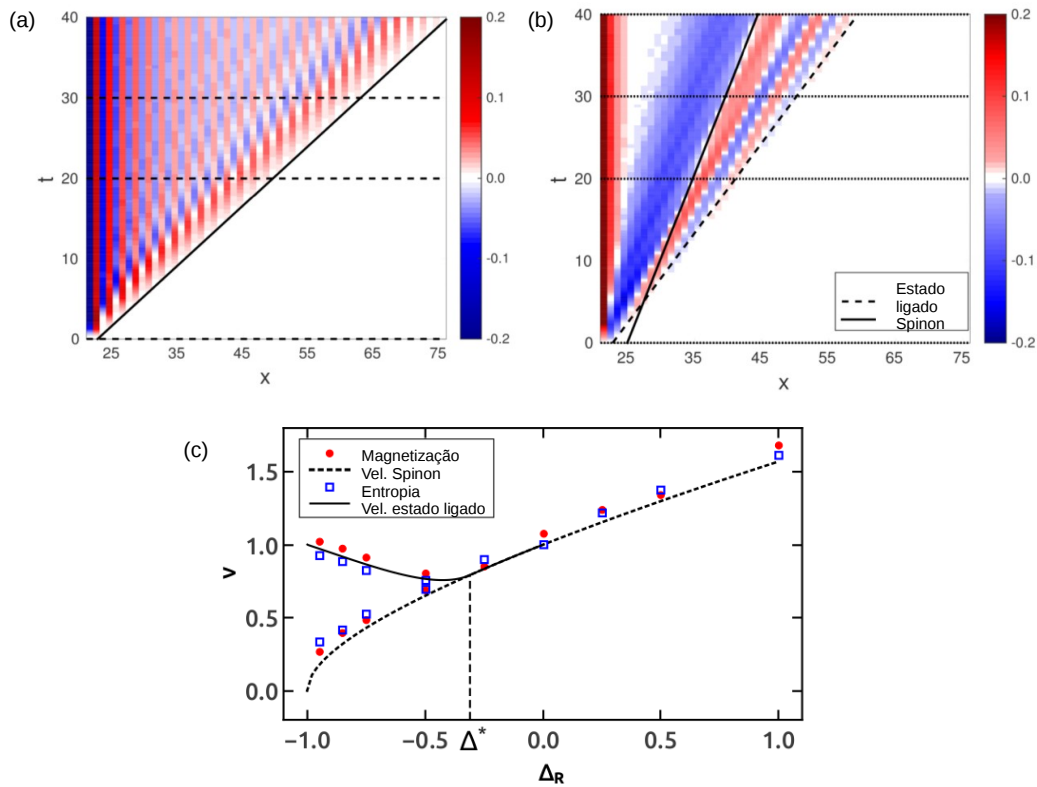


Figura 4.3: Magnetização em função do tempo t e sítio x após um quench local em uma cadeia na fase crítica, com (a) $\Delta = 0.5$ e (b) $\Delta = -0.75$. (c) Comparação entre as velocidades de equilíbrio dos spinons (linha tracejada) e estados ligados (linha sólida) com as velocidades obtidas a partir dos cones de luz de magnetização (círculos vermelhos) e entropia (quadrados azuis), para diferentes valores de Δ .

(estado fundamental das cadeias acopladas) e observamos que efeitos de tamanho finito têm consequências relevantes sobre os tempos de equilíbrio.

Concluindo, observamos que as velocidades das excitações governam a dinâmica após o *quench* local, ou seja, propriedades de equilíbrio se manifestam também na dinâmica de não-equilíbrio do sistema. Mais interessante, observamos que não apenas observáveis locais (como a magnetização), mas também medidas de emaranhamento, como a entropia de von Neumann, definem cones de luz e podem ser usadas para detectar as velocidades de propagação de informações ao longo da dinâmica de não-equilíbrio. Além disso, detectamos, em nosso trabalho, não apenas a influência de excitações elementares (spinons), mas também cones de luz relacionados a estados ligados, cuja detecção, por outros métodos, não é trivial. Os resultados serão apresentados detalhadamente na tese do colega de doutorado Alberto L. de Paula Jr.

Capítulo 5

Efeito Kondo

Um exemplo importante de problema de muitos corpos é dado por um sistema no qual impurezas magnéticas são acopladas a metais não magnéticos. Em geral, momentos magnéticos locais se formam em sistemas com orbitais localizados semi-preenchidos (principalmente orbitais f , conforme discutido na introdução desta tese). Em particular, quando há baixa concentração de átomos magnéticos, podemos considerar que as impurezas não interagem entre si. Nesse caso, podemos descrever o sistema por um modelo de uma impureza acoplada a um banho de elétrons de condução. Os elétrons de condução interagem com o spin da impureza, dando origem a propriedades anômalas no metal, como a presença de um mínimo na resistência em função da temperatura. Esse efeito é conhecido como efeito Kondo e será revisado no presente capítulo, que trata principalmente de sistemas em equilíbrio. No nosso trabalho, cujos resultados serão apresentados no próximo capítulo, investigamos a dinâmica de não-equilíbrio do efeito Kondo. Mais especificamente, estudamos a formação do efeito a partir de um *quench* local que “liga” a hibridização entre uma impureza magnética e elétrons de condução interagentes.

5.1 Introdução

Observou-se, desde a década de 30, que o acoplamento de átomos magnéticos (ferro, cromo, manganês, etc) a metais não magnéticos (cobre, ouro, zinco, dentre outros) altera o comportamento da resistência em função da temperatura nos metais [144]. Em metais tradicionais, a resistência diminui monotonicamente com a temperatura. A inclusão de impurezas magnéticas, no entanto, faz com que a resistência apresente um mínimo a baixas temperaturas; diminuindo a temperatura ainda mais, a resistência aumenta e finalmente satura, conforme representado na Figura 5.1.

Em metais não magnéticos a baixas temperaturas, espalhamentos elétron-fônon geram uma dependência da resistividade ρ com a temperatura T na forma $\rho \sim T^5$ [145] (representada

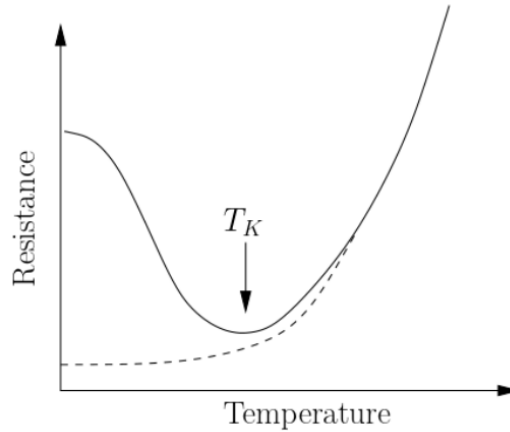


Figura 5.1: Comportamento da resistência em função da temperatura em metais tradicionais (curva pontilhada) e em metais na presença de impurezas magnéticas (curva contínua).

pela linha pontilhada da Figura 5.1). Além disso, sabe-se que espalhamentos elétron-elétron geram um comportamento do tipo T^2 , e espalhamentos em impurezas não magnéticas geram um termo contante, em função da temperatura. Nenhum desses fatores explica o aumento logarítmico da resistividade observado quando há a presença de impurezas magnéticas (linha contínua da Figura 5.1). O fenômeno começou a ser compreendido em 1964, quando Jun Kondo [146] observou que o mínimo na resistência podia ser descrito por teoria de perturbação até segunda ordem. A presença de impurezas magnéticas provoca espalhamentos inelásticos dos elétrons de condução, o que faz com que o termo de segunda ordem no espalhamento ($\sim \ln T$) seja mais relevante do que o primeiro (termo de Bloch, $\sim T^5$). Segundo a descrição de Kondo, no entanto, a resistência passaria por um mínimo e aumentaria indefinidamente. Assim, a teoria de perturbação não é suficiente para descrever a saturação da resistência a temperaturas muito baixas. De fato, a explicação de Kondo falha abaixo de uma dada temperatura, conhecida como temperatura Kondo, T_K .

Mais informações a respeito do efeito Kondo foram obtidas pela análise do modelo proposto por Anderson para a descrição de momentos magnéticos locais acoplados a metais não magnéticos¹ [148]

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d,\sigma} + U_d n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V_{\mathbf{k}} d_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}). \quad (5.1)$$

O Hamiltoniano de Anderson de uma impureza descreve um nível de energia da impureza

¹As contribuições de Anderson para o entendimento de sistemas magnéticos e também de sistemas desordenados foram reconhecidas no prêmio Nobel em Física de 1977, entregue a P. W. Anderson, N. F. Mott e J. Hasbrouck van Vleck pela investigação fundamental da estrutura eletrônica de sistemas magnéticos e desordenados [147].

hibridizando com elétrons de condução, além de um termo de interação local na impureza. $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ e d_σ^\dagger são operadores de criação de elétrons delocalizados com momento \mathbf{k} e localizados no sítio da impureza, respectivamente, com spin σ . ϵ_k e ϵ_d correspondem à dispersão dos elétrons de condução e à energia local na impureza. $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ e $n_{d\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$ são os operadores número no sítio i e na impureza e $n = \sum_\sigma n_\sigma$. $V_{\mathbf{k}}$ corresponde ao potencial de hibridização entre os elétrons de condução e os elétrons da impureza e U_d é a intensidade da interação local entre elétrons localizados, do tipo d .

Para entender o modelo e sua relação com o efeito Kondo, consideramos o caso mais simples: orbitais d não degenerados, que podem ter, no máximo, ocupação dupla com elétrons de spins opostos. Se desligarmos a hibridização $V_{\mathbf{k}}$, isto é, desacoplarmos a impureza dos demais elétrons, o problema apresenta solução trivial e há três opções de configuração para a impureza: (i) ela pode estar vazia, com energia $E_0 = 0$, (ii) pode estar ocupada com um único elétron de spin σ e energia ϵ_d ou (iii) pode estar ocupada com dois elétrons de spins opostos, apresentando uma energia total $2\epsilon_d + U$. O estado de ocupação simples é duplamente degenerado, devido ao spin, e possui momento magnético não nulo; as demais configurações não apresentam momento magnético local. Devemos então analisar como o limite atômico é modificado pela hibridização $V_{\mathbf{k}} \neq 0$, entendendo, assim, as condições para a formação de momentos magnéticos locais.

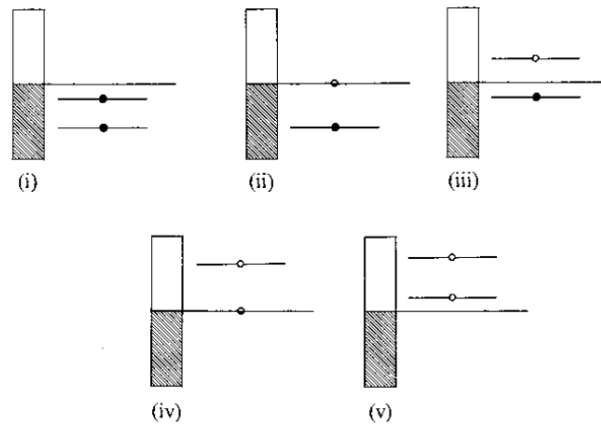


Figura 5.2: Diferentes regimes do modelo de Anderson de uma impureza. Os casos (i) e (v) são não-magnéticos, a impureza está duplamente ocupada e vazia, respectivamente; os casos (ii) e (iv) representam o regime de valência mista; finalmente, (iii) representa o regime magnético.

Friedel e Blandin [149, 150] observaram que a presença de um potencial atrativo² gerado

²Em 1958 Friedel introduziu um modelo fenomenológico para descrever momentos magnéticos locais [149], no qual o efeito da impureza sobre os elétrons do metal é descrito como um núcleo com interação coulombiana somado a uma barreira de potencial dependente do momento angular l , proporcional a $l(l+1)/r^2$, sendo r a

pela impureza faz com que elétrons de condução tenham uma tendência um pouco maior de permanecerem localizados em torno da impureza. Há a formação de um espalhamento ressonante no sítio da impureza, que gera um pico estreito na densidade de estados em torno do nível de Fermi, conhecido como ressonância de estados virtualmente ligados. Nesses estados, os elétrons passam um tempo relativamente maior na região da impureza, mas não formam estados ligados, pois a função de onda se torna uma função de Bloch em regiões mais distantes. Dentro da abordagem de Anderson, a largura da ressonância é dada por $\Delta(\epsilon) = \pi|V_{\mathbf{k}}|^2\delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})$. Considerando a largura da ressonância próxima o nível de Fermi, $\Delta(\epsilon_F) = \Delta$, podemos definir um regime de parâmetros

$$\epsilon_d + U \gg \epsilon_F \text{ e } \epsilon_d \ll \epsilon_F, \text{ com } |\epsilon_d + U - \epsilon_F|, |\epsilon_F - \epsilon_d| \gg \Delta, \quad (5.2)$$

onde ϵ_F é a energia de Fermi, no qual a impureza tem um momento magnético local e uma interação de troca antiferromagnética com os elétrons de condução.

Diferentes regimes podem ser vistos na Figura 5.2. Os casos (i) e (v) são não magnéticos, pois $\epsilon_d + U < \epsilon_F$ ou $\epsilon_d > \epsilon_F$, e a impureza encontra-se duplamente ocupada ou vazia. Quando um dos níveis ϵ_d ou $\epsilon_d + U$ se aproxima do nível de Fermi, de forma que $\epsilon_d - \epsilon_F$ ou $\epsilon_d + U - \epsilon_F$ se tornam comparáveis à largura da ressonância Δ , flutuações de carga no sítio da impureza tornam-se importantes e o sistema encontra-se em um regime conhecido como estado de valência mista (*mixed valence state*) [casos (ii) e (iv) da Figura 5.2]. Finalmente, o regime magnético, representado na Figura 5.2(iii), corresponde ao descrito pela equação (5.2).

Utilizando o modelo descrito acima, P. W. Anderson [148] observou que abaixo de T_K os elétrons de condução interagem com o spin localizado (da impureza) formando um singlete, o que provoca uma blindagem da magnetização da impureza (nuvem Kondo). A interação entre os elétrons de condução e o spin da impureza introduz uma Lorentziana na densidade de estados dos elétrons da impureza exatamente no nível de Fermi (ressonância Kondo), conforme representado esquematicamente na Figura 5.3. A presença do pico Kondo justifica as alterações observadas na resistência a baixas temperaturas.

5.2 Revisão da literatura no contexto do nosso trabalho

O efeito Kondo, no caso de equilíbrio, é bem entendido e formalmente bem descrito há décadas. Em 1974 P. Nozieres utilizou o então recém proposto Grupo de Renormalização de Wilson [79] para descrever propriedades termodinâmicas relacionadas ao efeito Kondo [152]. Na década de 80, o efeito foi descrito exatamente via ansatz de Bethe [153], que forneceu informações sobre o calor específico e a magnetização do sistema. É possível também tratar

distância com relação ao centro da impureza. Esse potencial suporta estados ligados.

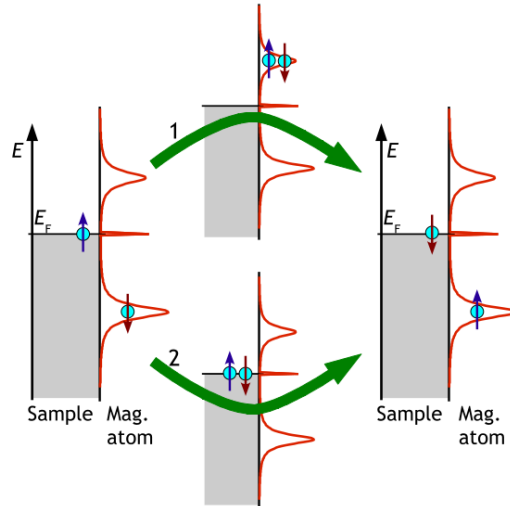


Figura 5.3: Representação esquemática do pico Kondo, um pico na densidade de estados no nível de Fermi que surge devido à interação da impureza com os elétrons de condução. O spin da impureza pode ser alterado por uma interação com os spins dos elétrons de condução pelo processos virtuais 1 ou 2, que geram uma ressonância em torno do nível de Fermi, E_f . Figura retirada de [151].

o modelo por técnicas de Teoria Conforme de Campos [154].

Técnicas de Monte Carlo Quântico [155] e extensões do Grupo de Renormalização Numérico [156] permitiram a análise de correlações não locais no modelo de Anderson, abrindo portas para a investigação da nuvem de blindagem Kondo, que se forma devido à presença do “singleto” de muitos corpos composto pela impureza e os elétrons de condução [157, 158].

Correlações não locais de spin entre a impureza e os elétrons de condução podem ser definidas como

$$S(r_i) = \langle \sigma_d^z \sigma^z(r_i) \rangle = \langle (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}) (c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}) \rangle \quad (5.3)$$

(sendo σ_d^z e $\sigma^z(r_i)$ matrizes de Pauli de spin-1/2 dos elétrons na impureza e no sítio r_i do banho, respectivamente) e fornecem informações importantes sobre a nuvem Kondo. Correlações de spin em função da temperatura no modelo de Anderson de uma impureza foram analisadas na referência [155]. Os autores observaram que, mesmo para uma impureza não interagente ($U_d = 0$), há correlações antiferromagnéticas induzidas pela presença de buracos fermiônicos em $n_{i\uparrow}$, criados em torno da impureza quando $n_{d\uparrow}$ é ocupado, devido a contribuições do termo de troca e do princípio de exclusão de Pauli. As correlações de spin apresentam um comportamento oscilatório $\propto \sin^2(k_F r)$, sendo k_F o módulo do momento no nível de Fermi, e diminuem, em módulo, à medida em que aumenta-se a distância r a partir da impureza. Esses resultados podem ser observados na Figura 5.4.

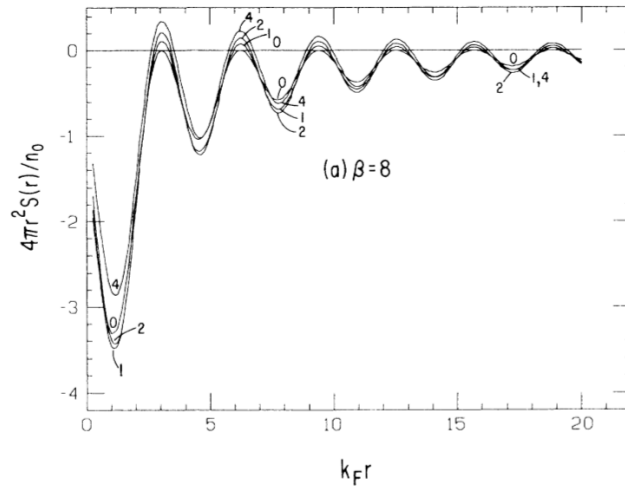


Figura 5.4: Correlações não locais entre o spin da impureza e os elétrons de condução, em função da distância, r , para $U_d = 0, 1, 2$ e 4 e temperatura $T = \frac{1}{k_B\beta}$, sendo k_B a constante de Boltzmann. Figura retirada de [155].

Os autores da referência [155] também mostraram que a inclusão de interação local no sítio da impureza, U_d , não altera o período e a fase das oscilações. Para pequenas distâncias, pequenos valores de U_d fortalecem correlações antiferromagnéticas, mas valores maiores de U_d reduzem essas correlações (esse comportamento também pode ser observado na Figura 5.4). O aumento das correlações antiferromagnéticas é um indicador da formação da nuvem Kondo, e ocorre apenas para baixas temperaturas. Além disso, observa-se que a inclusão de interação U_d na impureza produz correlações ferromagnéticas em algumas regiões.

Em geral, problemas de uma impureza apresentam uma escala de comprimento ξ relacionada a uma escala de energia emergente; os elétrons de condução que rodeiam a impureza se comportam de forma diferente para distâncias maiores e menores do que ξ . No contexto do efeito Kondo, a escala de energia é caracterizada pela temperatura Kondo, T_K , e $\xi_K = \frac{\hbar v_F}{k_B T_K}$ corresponde ao comprimento da nuvem de blindagem Kondo [158], sendo v_F a velocidade de Fermi das excitações, k_B a constante de Boltzmann e \hbar a constante de Planck dividida por 2π . O envelope das correlações não locais de spin apresenta um comportamento do tipo $1/r$ para distâncias $r < \xi_K$ e um decaimento mais rápido $1/r^2$ para $r > \xi_K$, sendo r a distância com relação à impureza [156]. Quase todas as correlações de spin relevantes estão contidas dentro da nuvem Kondo [155].

Para valores típicos da velocidade de Fermi, $v_F \sim 10^5 m/s$, e da temperatura Kondo, $T_K \sim 1K$, temos $\xi_K \sim 1\mu m$, o que pode ser maior do que dispositivos mesoscópicos reais. Sistemas de comprimento L menor do que ξ_K ainda apresentam correlações antiferromagnéticas não-locais similares às aquelas observadas no limite termodinâmico, no entanto a impureza é apenas

parcialmente blindada e o sistema pode apresentar alguns efeitos de tamanho finito, isto é, o comprimento do acoplamento Kondo escala com ξ_K/L [158].

Dinâmica de não-equilíbrio

Enquanto os fundamentos do efeito Kondo em equilíbrio são bem estabelecidos, a dinâmica após uma perturbação do equilíbrio nesses sistemas é atualmente tema de ativo debate na literatura. A realização da física de Kondo em pontos quânticos [159, 160] e em sistemas com átomos frios [161] permite grande controle dos parâmetros do sistema. Esse controle experimental abre portas para a observação direta de respostas dependentes do tempo em sistemas de uma impureza, o que tem motivado, por exemplo, a realização experimental de *quenches* nos quais pontos quânticos são abruptamente acoplados a metais ou semicondutores [162, 163]. Esse cenário tem motivado trabalhos teóricos relacionados à física de não-equilíbrio do efeito Kondo [164–168].

Nesse contexto, a formação da nuvem de blindagem, a partir de um sistema inicialmente sem a física de Kondo, foi estudada recentemente usando o Hamiltoniano Kondo³ [170, 171], o modelo de nível ressonante (um limite especial do modelo Kondo) [172] e o modelo de Anderson de uma impureza [173]. Nesses trabalhos, observou-se que, após um *quench* local, correlações locais se propagam balisticamente da impureza ao longo do sistema, com uma velocidade bem definida, produzindo cones de luz efetivos.

Na referência [173], M. Nuss *et al.* estudaram a evolução tanto de observáveis locais quanto de correlações não locais. Mais especificamente, eles preparam um sistema no qual uma impureza no estado $|\uparrow\rangle$ encontra-se inicialmente desacoplada do estado fundamental de uma cadeia de elétrons não interagentes. No tempo $t = 0$, eles ligam a hibridização (via *hopping*) entre a impureza e o primeiro sítio da cadeia e deixam o sistema evoluir. Eles observam que, após o *quench* de hibridização, um pulso de spin- \uparrow se propaga ao longo da cadeia com a velocidade de Fermi, v_F . Esse efeito pode ser visto na Figura 5.5, que apresenta um mapa de cores para a magnitude da densidade de spin local em função do tempo e espaço.

Em geral, trabalhos relacionados à dinâmica pós-*quench* em modelos de uma impureza indicam que correlações não locais evoluem para os valores correspondentes de equilíbrio após tempos longos. Em [172], os autores observaram que, para sistemas suficientemente grandes, a nuvem Kondo evolui para a estrutura de equilíbrio com uma dependência temporal exponencial.

³O Hamiltoniano Kondo é dado por $H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - J \vec{S}(0) \cdot \vec{s}$, sendo \vec{s} o operador de spin-1/2 no sítio da impureza, J a intensidade do termo de troca e $\vec{S}(0) = \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} c_{k,\sigma}^\dagger \vec{\sigma} c_{k'\sigma'}$ a densidade local de spin do banho não interagente no sítio da impureza ($\vec{\sigma}$ representa as matrizes de Pauli). Os Hamiltonianos de Kondo e Anderson são relacionados por meio de uma transformação de Schrieffer-Wolff [169]. Mais especificamente, o modelo Kondo é obtido a partir do setor de baixas energias do modelo de Anderson por meio de uma expansão até segunda ordem na hibridização. O termo de troca, J , do modelo Kondo relaciona-se com os parâmetros do modelo de Anderson pela relação $J = \frac{4V_k^2}{U_d}$.

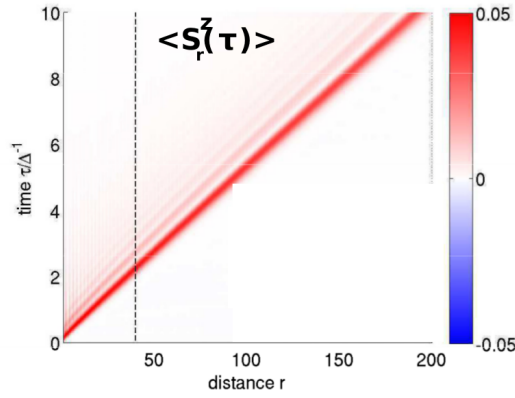


Figura 5.5: Mapa de cores para a densidade de spin local, $\langle S_r^z(\tau) \rangle$, em função do tempo, τ , e espaço, r , após um *quench*. Figura retirada de [173].

Metal interagente

O efeito Kondo é usualmente descrito por meio do modelo Kondo ou do modelo de Anderson de uma impureza, que consideram interações na impureza, mas não no banho de elétrons de condução. Para dimensões superiores, essa escolha pode ser justificada pela teoria de líquido de Fermi de Landau, na qual excitações de um sistema interagente são descritas por quase-partículas não interagentes com parâmetros renormalizados. Em sistemas unidimensionais, essa teoria é substituída pela teoria de líquido de Luttinger [27]; os efeitos de interações tornam-se mais relevantes e excitações são, em geral, coletivas. Assim, quando impurezas magnéticas são acopladas a sistemas unidimensionais, é interessante considerar cadeias metálicas interagentes. Sabe-se que, em líquidos de Luttinger, a temperatura Kondo escala algebricamente com o potencial de troca ($T_K \propto J_{eff}^{2/\eta}$, sendo η um expoente não universal e $J_{eff} = \frac{4V_k^2}{U_d}$ o termo de troca efetivo, definido a partir do mapeamento entre o modelo de Anderson e o modelo Kondo) [174], ao invés do comportamento exponencial ($T_K \sim \exp(-\frac{1}{\rho_0 J_{eff}})$, sendo $\rho_0 = \rho(\mu)$ a densidade de estados no nível de Fermi, que depende o valor da densidade eletrônica n [175]) observado em líquidos de Fermi. Além disso, observou-se que interações na cadeia aumentam as correlações antiferromagnéticas não locais de spin, mas preservam suas oscilações [176].

Um sistema unidimensional no qual cadeias Hubbard [descritas pelo Hamiltoniano da equação (3.1)] são acopladas a uma impureza magnética foi estudado, no caso de equilíbrio, na referência [177]. Os autores utilizaram DMRG para a descrição do modelo e analisaram cadeias de até $L = 96$ sítios, com a impureza em um dos sítios centrais. Nessa referência, U denota a interação nas cadeias Hubbard e U_d corresponde à interação no sítio da impureza. Além disso, a hibridização entre a impureza e os lados esquerdo e direito da cadeia ocorre via

hopping t' entre o sítio da impureza e os sítios primeiros vizinhos, como descrito nas equações (6.1)-(6.4).

Primeiramente, os autores estudaram a dependência das correlações Kondo [definidas na equação (5.3)] com a densidade eletrônica, n ($n = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \langle n_i \rangle = \frac{N}{L}$, sendo N o número de elétrons e L o número de sítios na cadeia), das cadeias no caso em que $U = 0$, isto é, no modelo de Anderson de uma impureza. Eles variaram a densidade no intervalo $n = [1.0, 0.5]$ (entre semi-preenchimento e preenchimento 1/4) e concluíram que os efeitos de densidade eletrônica sobre observáveis locais e correlações dependem da interação U_d . Para $U_d = 8$, por exemplo, a ocupação $\langle n_0 \rangle$ e $\langle (S_0^z)^2 \rangle$ (observável local que descreve o caráter magnético da impureza) no sítio da impureza praticamente não variam com a densidade e permanecem próximos de $\langle n_0 \rangle = 1$ e $\langle (S_0^z)^2 \rangle = 1/4$. Esses valores de observáveis indicam que o sistema permanece em um regime Kondo bem definido e que a impureza corresponde a um spin 1/2 perfeito. Para $U_d = 2$, por outro lado, o sistema não está em um regime Kondo bem definido em semi-preenchimento ($\langle n_0 \rangle \approx 1$, porém $\langle (S_0^z)^2 \rangle \approx 0.18$) e os observáveis apresentam forte dependência com a densidade. A ocupação da impureza decresce muito e se torna menor do que n ($\langle n_0 \rangle \approx 0.4$ para $n = 0.5$), com isso o sistema entra em um regime de valência mista,⁴ com $\langle (S_0^z)^2 \rangle \approx 1/12$. Eles observam, no entanto, que em ambos os regimes o comprimento da nuvem Kondo, ξ , praticamente não depende de n .

O comprimento ξ é definido pela condição

$$\sum_{j=-\xi/2, j \neq 0}^{j=\xi/2} S(j) = 0.9S(0), \quad (5.4)$$

sendo $S(j) = \langle S_0^z S_j^z \rangle - \langle S_0^z \rangle \langle S_j^z \rangle$ a correlação não local entre o spin da impureza e o spin no sítio j , e depende principalmente de dois fatores: (i) é inversamente proporcional ao acoplamento de troca efetivo $J_{eff} = 4t'^2/U_d$ entre a impureza magnética e os spins de condução e (ii) é tão maior quanto mais bem definido for o caráter magnético da impureza ($\langle (S_0^z)^2 \rangle \approx 1/4$).

Observou-se, no entanto, que enquanto os observáveis locais na impureza praticamente não dependem do tamanho da cadeia, a extensão da nuvem Kondo apresenta grandes efeitos de tamanho finito, principalmente para valores menores de J_{eff} , e aumenta com o aumento da cadeia.

Os resultados mais relevantes apresentados na referência [177], no entanto, foram obtidos a densidade fixa $n = 0.5$. Nesse caso, os autores investigaram a dependência do efeito Kondo com a interação U nas cadeias. Mais especificamente, eles analisaram casos em que $U = [1, 2, 4, 8]$. Resultados para os observáveis locais no sítio da impureza em função de U

⁴Os diferentes regimes de impurezas magnéticas acopladas a banhos de elétrons de condução foram apresentados a Figura 5.2. Os painéis (ii) e (iv) indicam o regime de valência mista, enquanto o caso (iii) corresponde a uma impureza com momento magnético local bem definido, característica do regime Kondo.

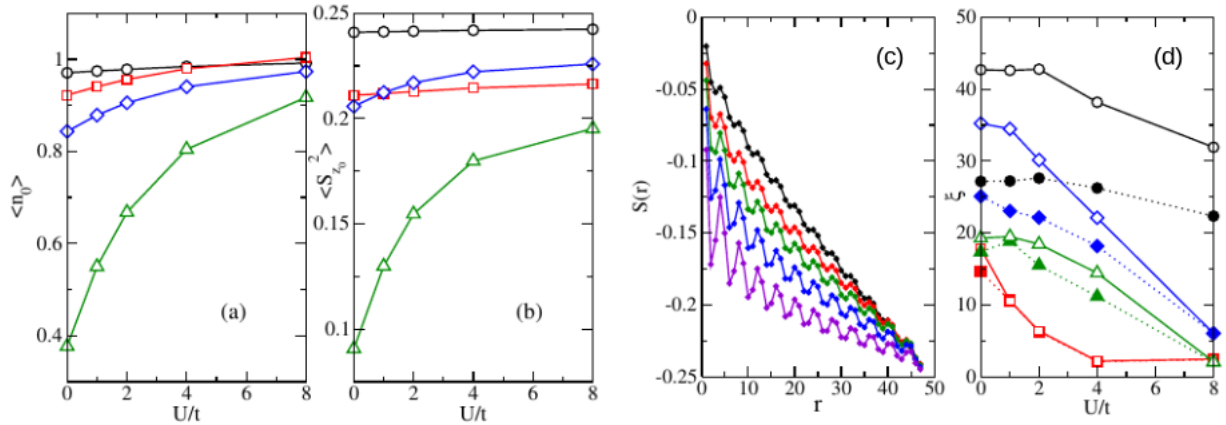


Figura 5.6: Resultados de equilíbrio para uma impureza acoplada a cadeias de Hubbard, com preenchimento $1/4$ ($n = 0.5$). (a) Ocupação e (b) $\langle (S_0^z)^2 \rangle$ no sítio da impureza em função da interação U nas cadeias. Círculos pretos correspondem a $U_d = 8$, $t' = 0.5$, quadrados vermelhos representam $U_d = 8$, $t' = 1.0$, losangos azuis indicam resultados para $U_d = 4$, $t' = 0.5$, finalmente, triângulos verdes representam o caso em que $U_d = 2$ e $t' = 0.5$. (c) Integral das correlações de spin, $S(r) = \sum_{i=1}^r S(r_i)$, em função da distância com relação à impureza, para $U_d = 8$, $t' = 0.5$ e $U=0, 1, 2, 4$ e 8 , de cima para baixo. (d) Comprimento da nuvem Kondo em função da interação. Os símbolos correspondem aos mesmos parâmetros utilizados nos painéis (a) e (b). De (a) a (c) os resultados foram obtidos para $L = 96$; em (d) os símbolos abertos correspondem a $L = 96$, enquanto símbolos fechados indicam resultados obtidos com uma cadeia de $L = 64$ sítios no total. Figuras retiradas de [177].

para diferentes valores de U_d e t' podem ser observados na Figura 5.6(a) e (b). Tanto $\langle n_0 \rangle$ quanto $\langle (S_0^z)^2 \rangle$ aumentam com o aumento de U e a dependência com a interação é mais forte no caso de $U_d = 2$. Isso significa que a interação na cadeia leva o sistema para um regime Kondo mais bem definido. No painel (c), observa-se que as correlações não locais de spin tornam-se mais relevantes à medida em que aumentamos U . Finalmente, observamos que o comprimento ξ diminui com a interação. Nos casos em que $\xi > L/2$, o sistema apresenta maior efeito de tamanho finito; quando toda a nuvem Kondo é contida no sistema finito (casos $U_d = 8$, $t' = 1.0$ e $U_d = 2$, $t' = 0.5$, por exemplo), a dependência de ξ com L é um pouco menor.

No próximo capítulo, descreveremos nosso trabalho, no qual estudamos a dinâmica de não-equilíbrio de um sistema semelhante ao descrito na referência [177]. Mais especificamente, estudamos os efeitos da inclusão de interação local no banho de elétrons de condução sobre a formação da nuvem de blindagem Kondo após um *quench* de hibridização no qual conectamos uma impureza magnética a uma cadeia interagente.

Capítulo 6

Resultados: Dinâmica de não-equilíbrio do efeito Kondo

No capítulo anterior, apresentamos uma introdução ao efeito Kondo, incluindo uma breve revisão da literatura relacionada ao nosso trabalho. O presente capítulo, por sua vez, é dedicado à descrição de nossos resultados, relacionados à dinâmica de não-equilíbrio do efeito Kondo. A fim de estudar a formação da nuvem Kondo, partimos de um sistema no qual uma impureza magnética está inicialmente desacoplada de cadeias metálicas interagentes e realizamos um *quench* local que conecta a impureza aos sistemas metálicos.¹

6.1 Modelo

Estudamos a dinâmica resultante do acoplamento de duas cadeias a uma impureza, segundo o Hamiltoniano representado abaixo

$$H = H_{CE} + H_I + H_{CD} + H_{I-C}, \quad (6.1)$$

sendo H_{CE} e H_{CD} os Hamiltonianos das cadeias da esquerda e da direita, respectivamente; H_I representa o Hamiltoniano no sítio da impureza e H_{I-C} descreve o acoplamento entre a impureza e as cadeias.

Neste trabalho, as cadeias da esquerda e da direita são descritas pelo modelo de Hubbard, que captura a competição entre energia cinética e energia de interação entre elétrons que ocupam o mesmo sítio (conforme descrito na seção 3.2),

¹O trabalho apresentado neste capítulo está sendo realizado em colaboração com o Prof. Rodrigo Pereira do *International Institute of Physics* e Departamento de Física Teórica e Experimental da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, e ainda encontra-se em andamento; discutimos aqui os resultados que temos até o momento.

$$H_{CD/CE} = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{h.c.}) + U_{E/D} \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i n_i. \quad (6.2)$$

Acima usamos uma notação semelhante à utilizada na seção 3.2 deste documento. t é a amplitude do *hopping* entre primeiros vizinhos e o termo proporcional a $U_{E/D}$ representa a interação entre dois férmions que ocupam o mesmo sítio na cadeia da esquerda/direita. $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de uma partícula com spin σ no sítio i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número e $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$. Finalmente, μ é o potencial químico, que controla a ocupação da rede. Na cadeia da esquerda, o índice de sítio i varia de $-L_E$ a -1 , enquanto na cadeia da direita temos $i = [1, L_D]$, sendo $L_{E/D}$ o número de sítios nas cadeias da esquerda/direita; a impureza corresponde ao sítio $i = 0$.

Em semi-preenchimento, o estado fundamental do modelo de Hubbard unidimensional é um isolante de Mott para qualquer valor de $U \neq 0$ [178]. A fim de considerar cadeias metálicas, alteramos o preenchimento da cadeia por meio do potencial químico. Mais especificamente, ao longo deste trabalho utilizamos $n_{E/D} = \frac{1}{L_{E/D}} \sum_i^{L_{E/D}} \langle n_i \rangle = \frac{N_{E/D}}{L_{E/D}} = 0.5$ (preenchimento 1/4), sendo $N_{E/D}$ o número de partículas na cadeia da esquerda/direita (note que cada cadeia comporta até $2L_{E/D}$ partículas). A fase metálica obedece à classe de universalidade líquido de Luttinger, descrita no Apêndice C.

No nosso trabalho, as cadeias descritas pelo modelo de Hubbard são acopladas a uma impureza interagente, cujo Hamiltoniano é dado por

$$H_I = U_d n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} - \mu n_0 + \epsilon_d n_0, \quad (6.3)$$

sendo que o operador $n_0 = n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow}$ representa a ocupação no sítio da impureza e U_d corresponde à interação local neste sítio. O último termo do Hamiltoniano acima corresponde à energia local na impureza. Ao longo do trabalho assumimos $\epsilon_d = -U_d/2$, de forma que o sítio da impureza é deslocado com relação ao nível de Fermi dos elétrons de condução, em preenchimento 1/4.

O acoplamento entre a impureza e as cadeias da direita e da esquerda é dado por

$$H_{I-C} = -t'_E (c_{-1\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{-1\sigma}) - t'_D (c_{1\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma}), \quad (6.4)$$

sendo t'_E (t'_D) o *hopping* entre a cadeia da esquerda (direita) e a impureza. O sistema completo é representado esquematicamente na Figura 6.1.

O comportamento de equilíbrio deste sistema foi estudado na referência [177]. Os resultados foram discutidos no Capítulo 5 e reproduzidos na Figura 5.6.

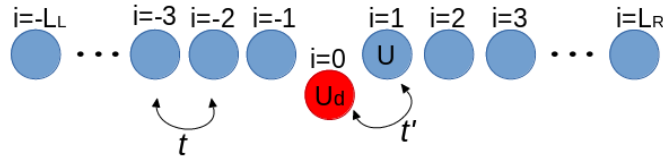


Figura 6.1: Cadeias descritas pelo modelo de Hubbard acopladas a uma impureza. U_j corresponde à repulsão entre elétrons que ocupam o mesmo sítio, nas cadeias da esquerda ($j = E$) e da direita ($j = D$), enquanto U_d corresponde à interação no sítio da impureza. Os parâmetros t e $t'_{E(D)}$ representam a amplitude do *hopping* nas cadeias e no acoplamento entre elas e a impureza. Finalmente, o índice i indica o sítio no sistema.

6.2 Quench e método

Para o estudo da dinâmica de não-equilíbrio, preparamos o estado inicial na forma

$$|\Psi_0\rangle = |GS_E\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes |GS_D\rangle, \quad (6.5)$$

(sendo $|GS_{E/D}\rangle$ o estado fundamental do Hamiltoniano $H_{CE/CD}$) e em seguida deixamos o estado evoluir segundo o Hamiltoniano da equação (6.1). Esse processo corresponde a preparar o estado da impureza com um único elétron com spin no sentido $+z$ e ligar os acoplamentos t'_E e t'_D no tempo $\tau = 0$. Investigamos, assim, os efeitos de interações nas cadeias metálicas sobre a formação espacial e temporal da nuvem Kondo.

Nossos resultados referentes à dinâmica pós-*quench* nesse sistema foram obtidos por DMRG dependente do tempo. Nessa metodologia, após a preparação do estado inicial via DMRG estático, o operador de evolução temporal é aplicado à cadeia com o auxílio de uma decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem. Os detalhes da metodologia estão descritos no Apêndice B.

6.3 Resultados

Conforme discutido na seção anterior, a fim de estudar a formação do efeito Kondo, partimos de um sistema no qual a impureza e as cadeias estão inicialmente desacopladas e observamos como o sistema evolui quando ligamos o acoplamento.

O trabalho ainda encontra-se em andamento, mas a presente seção é dedicada à discussão dos resultados que temos até o momento. Por enquanto, investigamos o comportamento do sistema com $L = 48$ sítios no total, sendo que a cadeia da esquerda contém $L_E = 23$ sítios, a cadeia da direita possui $L_D = 24$ sítios e a impureza ocupa um dos sítios centrais. O fato de a cadeia da esquerda possuir um número ímpar de sítios, e a cadeia da direita possuir L par,

permite que observemos a dependência da dinâmica pós-*quench* com a paridade da cadeia. Observamos que a evolução de observáveis locais e correlações é assimétrica, com relação às cadeias da direita e da esquerda. Em todos os casos usamos $t'_E = t'_D = 0.5$ e ocupação $1/4$ nas cadeias, i.e., $n = 0.5$, e analisamos a dinâmica para diferentes valores de interação na impureza, U_d , e diferentes valores de interação $U_D = U_E = U$ nas cadeias. Ao longo de todo o trabalho o *hopping* nas cadeias de Hubbard é mantido fixo, $t = 1$, definindo a unidade de energia.

Conforme discutido no capítulo anterior, para $U = 0$ o sistema em equilíbrio encontra-se no regime Kondo ($\langle n_0 \rangle \approx 1$ e $\langle S_{z_0}^2 \rangle \approx 1/4$) quando $U_d = 8$. Nesse caso, a impureza é ocupada com um spin-1/2. À medida em que U_d diminui, no entanto, o sistema aproxima-se de um regime de valência mista. A inclusão de U sempre leva o sistema para um regime Kondo mais bem definido. Variando os parâmetros, procuramos investigar o efeito do aumento das interações U_d e U sobre a dinâmica do sistema.

6.3.1 Observáveis locais na impureza

Inicialmente, analisamos a evolução temporal de observáveis locais no sítio da impureza. As Figuras 6.2 e 6.3 apresentam a ocupação $n_0 = \langle \Psi(\tau) | \hat{n}_0 | \Psi(\tau) \rangle$ na impureza e também a quantidade $(S_0^z)^2 = \langle \Psi(\tau) | (\hat{S}_0^z)^2 | \Psi(\tau) \rangle$, que define o caráter magnético da impureza, para diferentes valores de interação na cadeia, U , e na impureza, U_d . Para ambos os observáveis, plotamos também os valores de equilíbrio correspondentes [Figures 6.2(d) and 6.3(d)], isto é, os valores obtidos a partir do estado fundamental das cadeias conectadas [Equação (6.1)]. Nossos resultados mostram que, para todos os valores de U e U_d , os observáveis se aproximam rapidamente do equilíbrio e oscilam em torno desse valor, com uma frequência que aumenta à medida em que aumentamos U_d . Como ambos os observáveis se aproximam do equilíbrio, confirmamos, em nosso sistema, as conclusões observadas no sistema em equilíbrio [177], isto é, vemos que o aumento de ambos U e U_d levam o sistema para um regime Kondo mais bem definido, no qual a impureza é caracterizada por $n_0 \sim 1$ e $(S_0^z)^2 \sim \frac{1}{4}$.

O comportamento do spin local, $S_0^z = \langle \Psi(\tau) | \hat{S}_0^z | \Psi(\tau) \rangle$, por outro lado, é consideravelmente mais complicado, conforme apresentado na Figura 6.4 para (a) $U_d = 2.0$, (b) $U_d = 4.0$ e (c) $U_d = 7.0$ e diferentes valores de U e também em (d) para $U = 4.0$ e diferentes valores de U_d . Em equilíbrio, S_0^z é sempre igual a zero devido à simetria de inversão temporal. Em nosso estudo de não-equilíbrio, S_0^z é inicialmente igual a $\frac{1}{2}$, devido ao estado inicial escolhido, e o valor diminui após o *quench*, se aproximando do valor de equilíbrio. A equilibração, no entanto, ocorre de forma muito mais lenta do que os observáveis apresentados nas Figuras 6.2 e 6.3. Além disso, observamos diferentes regimes ao longo da dinâmica de não equilíbrio, com dependências não triviais de U e U_d . Mais especificamente, identificamos três regimes diferentes no comportamento de S_0^z em função do tempo: (i) o decaimento é independente

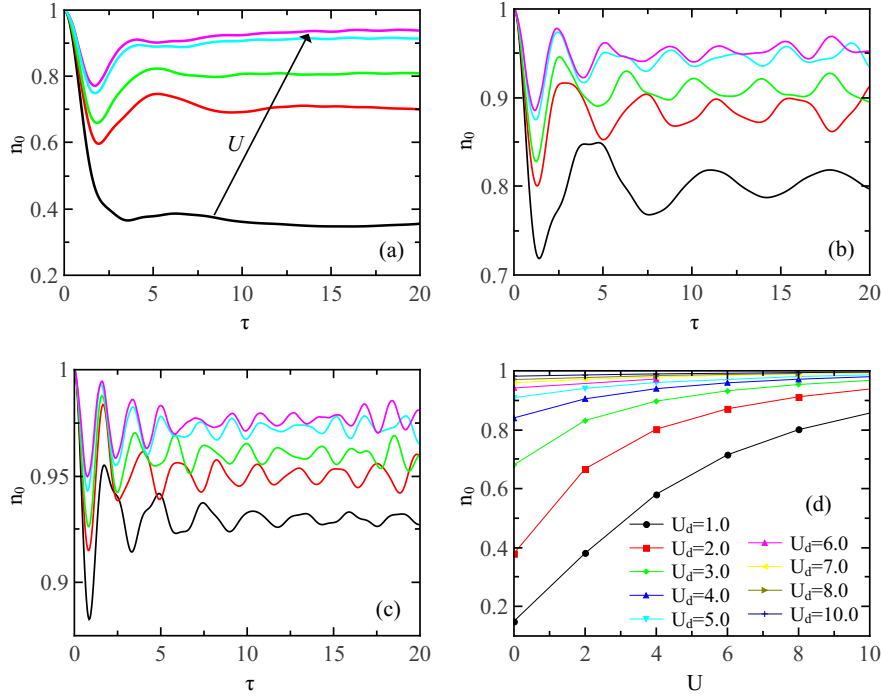


Figura 6.2: (a)-(c) Ocupação local no sítio da impureza em função do tempo τ , para (a) $U_d = 2.0$, (b) $U_d = 4.0$ e (c) $U_d = 7.0$ e diferentes valores de U : $U = [0.0, 2.0, 4.0, 8.0, 10.0]$ de baixo para cima. Em todos os casos $n_0(\tau = 0) = 1$, pois iniciamos o *quench* com a impureza no estado $|\uparrow\rangle$, e esse valor decresce rapidamente e satura, oscilando em torno do valor de equilíbrio. A frequência de oscilação aumenta com U_d . Para comparação com os resultados da dinâmica, o painel (d) mostra os valores de equilíbrio em função de U para diferentes valores de U_d .

de U para tempos curtos, o que é mais evidente na Figura 6.4(a), obtida para $U_d = 2.0$ e diferentes valores de U , mas que também pode ser observado em (b) e (c), para $U_d = 4.0$ e $U_d = 7.0$, respectivamente; (ii) há um regime de tempo intermediário no qual o decaimento de S_0^z , para U_d fixo, é mais rápido para U menor [conforme indicado pelas setas mais à esquerda em (a) e (b)]; (iii) finalmente, para tempos longos, S_0^z decresce mais rapidamente para valores maiores de U [conforme indicado pelas setas mais à direita nos painéis (b) e (c)].

Além disso, em resultados anteriores, presentes na literatura, observou-se que, para $U = 0$, o relaxamento do spin local é governado pela física de Kondo e exibe um comportamento para tempo longo que escala com $1/T_K$, sendo T_K a temperatura Kondo [166, 173, 179, 180], o que implica em um decaimento mais lento à medida em que aumenta-se U_d (um aumento de U_d gera uma redução do potencial efetivo, J_{eff} , e consequente aumento da temperatura Kondo). Nossos resultados parecem estar de acordo com a previsão da literatura. Além disso, observamos que o decaimento do spin local é mais lento para valores maiores de U_d

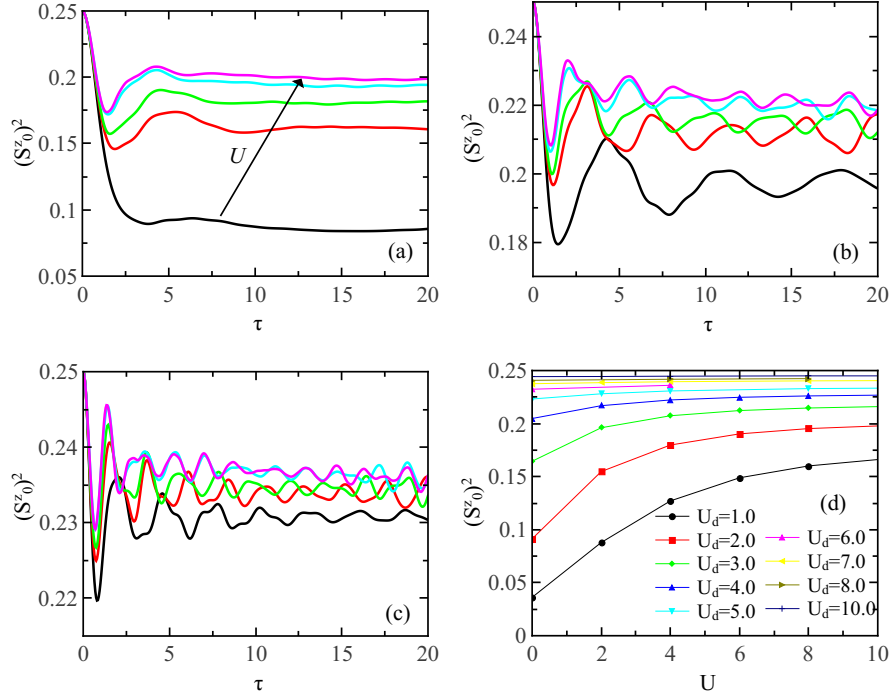


Figura 6.3: (a)-(c) $\langle (S_0^z)^2 \rangle$ em função do tempo τ , para (a) $U_d = 2.0$, (b) $U_d = 4.0$ e (c) $U_d = 7.0$ e diferentes valores de U : $U = [0.0, 2.0, 4.0, 8.0, 10.0]$ de baixo para cima. Em todos os casos $\langle (S_0^z)^2 \rangle(\tau = 0) = \frac{1}{4}$, pois iniciamos o *quench* com a impureza no estado $|\uparrow\rangle$, e esse valor decresce rapidamente e satura, oscilando em torno do valor de equilíbrio. Para comparação com os resultados da dinâmica, o painel (d) mostra os valores de equilíbrio em função de U para diferentes valores de U_d .

também no caso de cadeias interagentes ($U \neq 0$). Em análises futuras, planejamos investigar se o decaimento, nesses casos, também escala com a temperatura Kondo.

6.3.2 Cones de luz de observáveis locais

A variação da ocupação e da magnetização na impureza, em função do tempo, gera uma variação desses parâmetros também nas cadeias. Mais especificamente, após o *quench*, surgem pulsos de ocupação e de spin local que se propagam ao longo das cadeias com velocidades bem definidas, formando os chamados cones de luz, introduzidos no Capítulo 4.

Esse comportamento pode ser visto na Figura 6.5, na qual o código de cores representa a variação de ocupação, $\Delta n_i(\tau) = |n_i(\tau) - n_i(0)|$ [Fig. 6.5(a), para $U = 0.0$, $U_d = 2.0$, e Fig. 6.5(c), para $U = 8.0$, $U_d = 2.0$], e spin local, $\Delta S_i^z(\tau) = |S_i^z(\tau) - S_i^z(0)|$ [Fig. 6.5(b), para $U = 0.0$, $U_d = 2.0$, e Fig. 6.5(d), para $U = 8.0$, $U_d = 2.0$], em função do sítio, i , e tempo, τ . Nos gráficos, fica evidente que as perturbações geradas pelo *quench* local produzem variações nos observáveis que se propagam ao longo das cadeias à esquerda e à direita da impureza, gerando cones de luz efetivos. Em todos os casos é possível definir velocidades de propagação

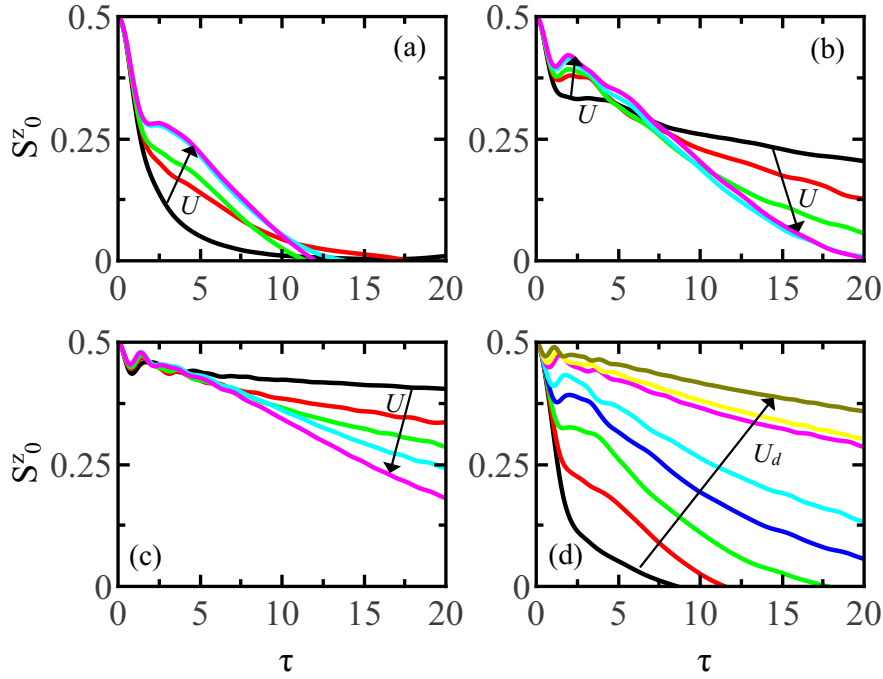


Figura 6.4: Spin local na impureza, calculado na direção z , em função do tempo, τ , para (a) $U_d = 2.0$, (b) $U_d = 4.0$ e (c) $U_d = 7.0$, para diferentes valores de interação na cadeia $U = [0.0, 2.0, 4.0, 8.0, 10.0]$, e também para (d) $U = 4.0$ e diferentes valores de interação na impureza $U_d = [1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 7.0, 8.0, 10.0]$. O decaimento do spin local apresenta um comportamento não trivial em função das interações; as setas indicam as direções crescentes de U e U_d .

dos observáveis a partir do inverso da inclinação da borda dos cones de luz.

No Capítulo 4, descrevemos um trabalho [40] no qual concluímos que as velocidades, na dinâmica de não equilíbrio, são governadas pelas excitações de equilíbrio do modelo envolvido no quench. Por isso, é conveniente introduzirmos as excitações de baixas energias presentes no modelo de Hubbard e compararmos com o comportamento observado em nossos cones de luz. Soluções exatas do modelo de Hubbard em uma dimensão via ansatz de Bethe [181] indicam que, quando $U = 0$, elétrons são a única excitação e eles carregam carga e spin simultaneamente. No caso interagente com simetria partícula-buraco, elétrons desaparecem do espectro e surgem, no lugar, spinons, que carregam spins, e holons e anti-holons, que carregam carga [182]. Para $U > 0$, a curva de dispersão de energia de spinons é linear, indicando excitações sem *gap*, enquanto holons e antiholons têm dispersão quadrática e apresentam *gap*. Para preenchimentos inferiores, isto é, fora de simetria partícula-buraco, a situação é mais complicada, pois há a presença de várias excitações. Ainda assim, há a separação entre as velocidades de propagação de excitações de spin e carga. No limite $U \rightarrow \infty$, a função de onda do estado fundamental pode ser expressa como um produto de determinantes de Slater de férmions sem spin e funções de onda de spin do modelo de Heisenberg de spin-1/2 unidi-

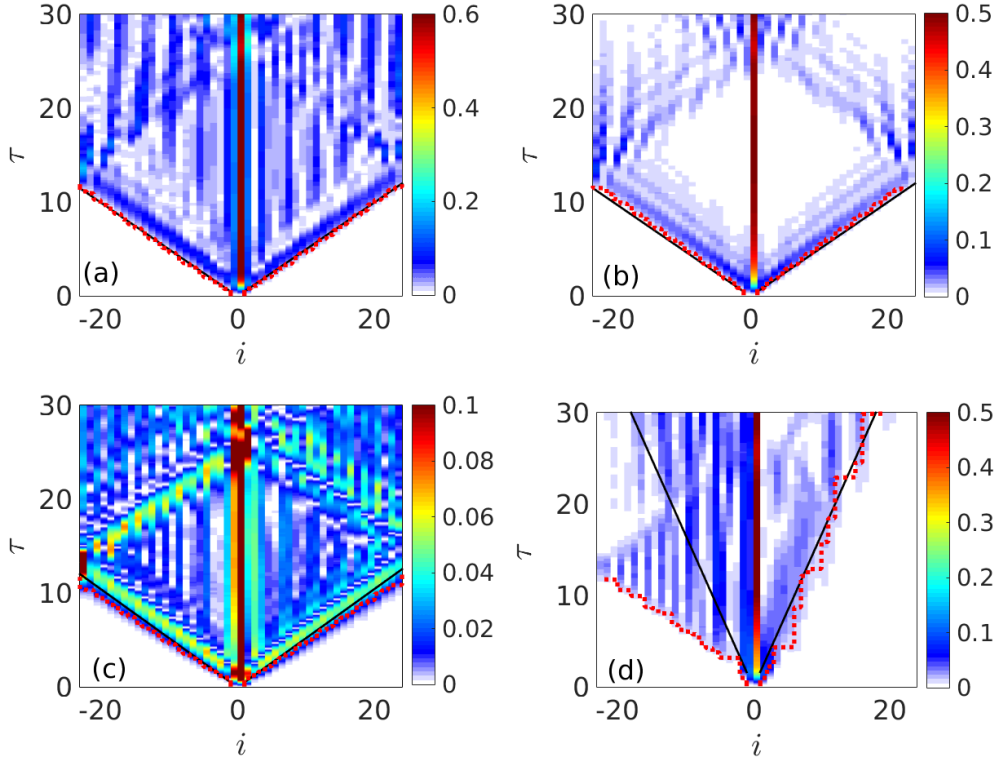


Figura 6.5: Variação de observáveis locais em função do sítio, i , e tempo, τ , após o *quench* de hibridização. Os códigos de cores representam as variações na (a) e (c) ocupação local, $\Delta n_i(\tau)$, e (b) e (d) spin local, $\Delta S_i^z(\tau)$. Todos os resultados foram obtidos para $U_d = 2.0$, painéis (a)-(b) correspondem a $U = 0.0$, enquanto (c)-(d) foram obtidos para $U = 8.0$. O significado das linhas pontilhadas e contínuas estão discutidos no texto.

dimensional [183]. Nesse limite, acontece uma separação spin-carga exata no nível da função de onda; podemos definir uma dispersão de holons como $\varepsilon(k) = -2t\cos(k)$, que fornece uma velocidade máxima de excitações de carga $v_c = \frac{\partial\varepsilon(k)}{\partial k} = 2t\sin(k)$, enquanto velocidades máximas das excitações de spin são proporcionais à intensidade de *superexchange*, isto é, $v_s \propto t^2/U$ [184]. Finalmente, para interações intermediárias e preenchimento arbitrário, as velocidades de carga e spin das excitações de equilíbrio podem ser estimadas pela descrição de líquido de Luttinger do modelo de Hubbard [27, 185]. Os valores dos parâmetros de Luttinger $v_s^{Lutt.}$ e $v_c^{Lutt.}$ obtidos para $U = 8.0$ e $n = 0.5$ foram usados para definir as linhas pretas contínuas apresentadas na Figura 6.5(c) e (d), para comparação com nossos resultados de não-equilíbrio [as linhas pretas em Fig.6.5(a) e (b) correspondem à velocidade máxima de equilíbrio do sistema não interagente $v_c = v_s = 2.0$].

Conforme mencionado, as velocidades, no caso de não equilíbrio, podem ser obtidas pelas análises dos cones de luz. Mais especificamente, para cada tempo τ , identificamos o sítio no qual a variação do observável local torna-se consideravelmente não nula (consideramos os pontos nos quais Δn_i e $\Delta S_i^z > 0.005$ e confirmamos que os resultados praticamente não

dependem da escolha da variação de corte, desde que esta seja suficientemente pequena); esses pontos são indicados pelas linhas vermelhas tracejadas na Figura 6.5. Dessa forma, construímos funções $i(\tau)$ que seguem as bordas dos pulsos de variação de ocupação local e magnetização criados pelo *quench*.

As velocidades estimadas pela variação de ocupação local nas cadeias da esquerda e da direita podem ser vistas na Figura 6.6(b) em função de U , para diferentes valores de U_d . As linhas sólidas indicam os parâmetros de Luttinger $v_c^{Lutt.}$, para comparação. Nossos resultados indicam que a ocupação local se propaga nas cadeias da direita e da esquerda com a mesma velocidade $v \sim 2.0$, que corresponde a velocidade máxima das excitações de carga, holons. Essa velocidade excede a velocidade de Fermi, que, para $n = 0.5$, corresponde a $v_F = \sqrt{2}$ ($k_F = \frac{\pi}{4}$). Os resultados praticamente não dependem das interações U e U_d .

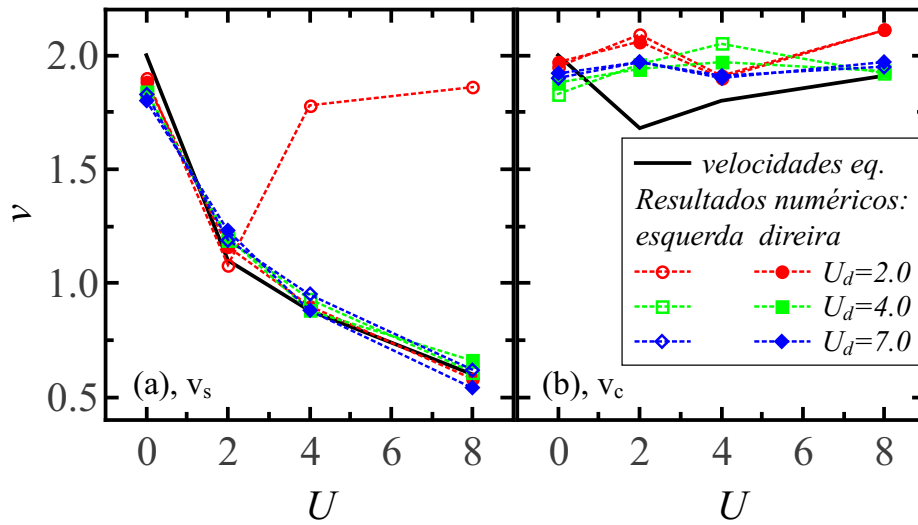


Figura 6.6: Velocidades de propagação de observáveis locais (a) $\Delta S_i^z(\tau)$ e (b) $\Delta n_i(\tau)$ em função de U e diferentes valores de U_d , nas cadeias da direita (símbolos fechados) e da esquerda (símbolos abertos). Linhas contínuas pretas indicam as velocidades de Luttinger de equilíbrio $v_c^{Lutt.}$ e $v_s^{Lutt.}$.

Resultados para a velocidade de propagação de spin local podem ser vistos na Figura 6.6(a). Nesse caso, observamos que na cadeia da direita a dinâmica de não equilíbrio é governada pelas velocidades de excitações de equilíbrio, $v_s^{Lutt.}$, indicadas pela linha sólida. As velocidades não dependem da interação na impureza U_d , mas apenas dos parâmetros das cadeias nas quais os observáveis se propagam. Na cadeia da esquerda, por outro lado, a velocidade de spin é próxima da velocidade de carga nos casos $U = 4.0$, $U_d = 2$ e $U = 8.0$, $U_d = 2.0$, o que sugere que a separação spin-carga pode depender da paridade da cadeia (lembramos que a cadeia da esquerda tem $L_E = 23$ sítios, enquanto a cadeia da direita tem $L_D = 24$ sítios). Entender essa dependência é uma questão ainda em aberto em nosso trabalho.

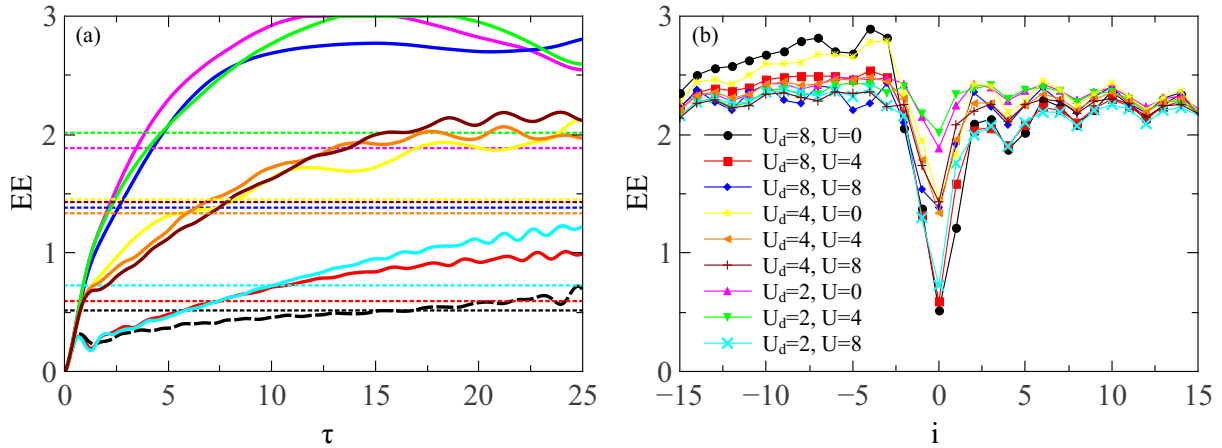


Figura 6.7: (a) Entropia de emaranhamento para uma partição que separa a cadeia completa ao meio, isto é, o lado A é composto pela cadeia da esquerda e a impureza, e o lado B é composto pela cadeia da direita. Linhas sólidas correspondem à evolução temporal, enquanto linhas pontilhadas indicam valores de equilíbrio. (b) Entropia de emaranhamento em função da posição da partição para o caso de equilíbrio (estado fundamental do sistema completo, isto é, cadeias acopladas à impureza). São apresentados resultados para diferentes valores de U e U_d . Usamos os mesmos códigos de cores, definidos na legenda de (b), em ambos os painéis.

6.3.3 Entropia de emaranhamento

É interessante observar também como a entropia de von Neumann, ou entropia de emaranhamento (EE), introduzida na seção 2.1, evolui após o *quench*. A EE fornece uma medida do emaranhamento entre duas subpartes, A e B , de um sistema físico: $EE = -\sum_i \xi_i \log \xi_i$, sendo $\{\xi_i\}$ o conjunto de autovalores da matriz densidade reduzida, $\hat{\rho}_{A/B}(\tau) = \text{Tr}_{B/A}|\Psi(\tau)\rangle\langle\Psi(\tau)|$. Na Figura 6.7(a), apresentamos a evolução da EE em função do tempo para o sistema particionado entre a impureza e a cadeia da direita, de forma que ambas as subpartes, A e B , contêm 24 sítios. Esses valores são comparados com os valores de equilíbrio (linhas pontilhadas). Ao contrário do caso de observáveis locais, a entropia não tende, ao longo da dinâmica, para o valor de equilíbrio, mas evolui para valores maiores. O crescimento da entropia depende mais de U_d do que de U e é maior para maiores interações U_d na impureza. A Figura 6.7(b) apresenta, para comparação, os valores da entropia do sistema em equilíbrio (estado fundamental do Hamiltoniano 6.1) em função da posição da partição; a partição $i = 0$ corresponde à apresentada em (a).

A aparente contradição entre a equilibração das quantidades da impureza e o crescimento da entropia se deve ao fato de que as primeiras são quantidades locais, enquanto o emaranhamento entre as subpartes é função do sistema como um todo. Acreditamos que a presença

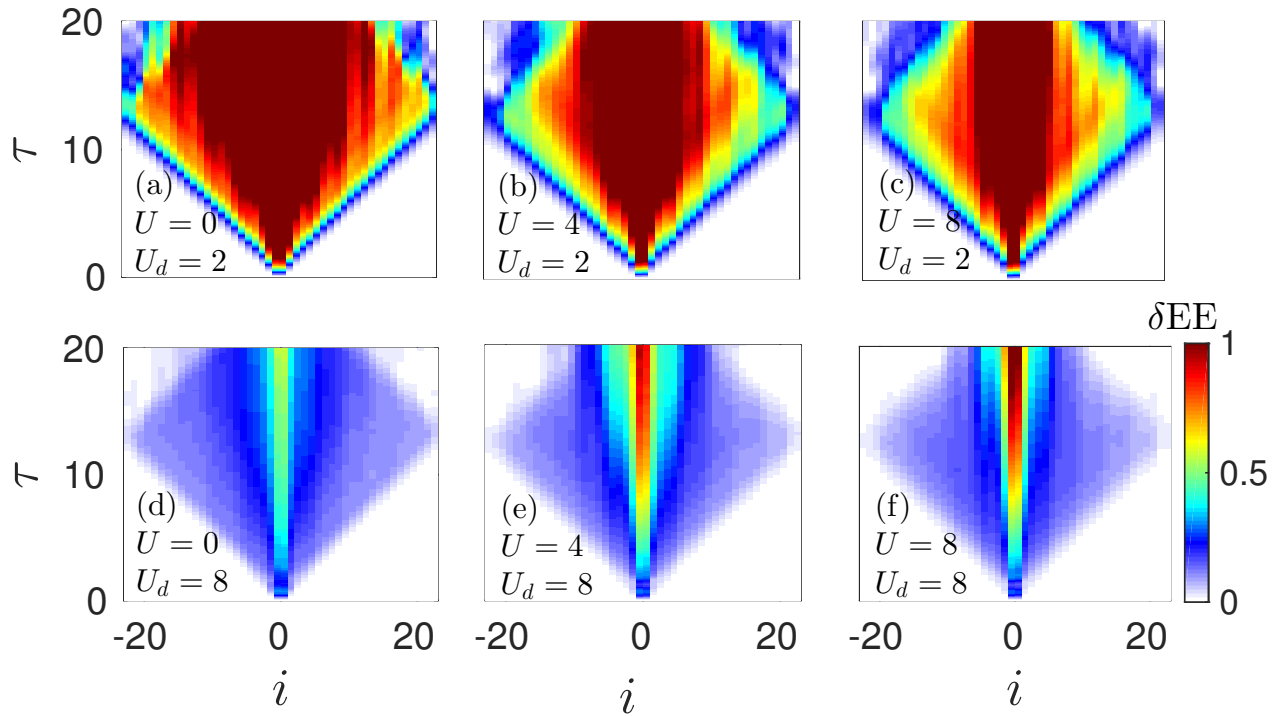


Figura 6.8: Variação da entropia de amaranhamento, $\Delta EE_i = |EE_i(\tau) - EE_i(\tau = 0)|$, em função da partição, i , e tempo, τ , para diferentes conjuntos de parâmetros.

dos pulsos de spins e de partículas que se propagam ao longo do sistema (Figura 6.5) justifica o crescimento da entropia.

Finalmente, a Figura 6.8 apresenta um mapa de cores para a variação da entropia, $\Delta EE_i = |EE_i(\tau) - EE_i(\tau = 0)|$, em função da partição, i e do tempo, τ . Observamos claramente a formação de cones de luz com velocidades que não dependem fortemente da interação U na cadeia ou da interação U_d na impureza. Fica evidente também que o crescimento da entropia é mais intenso para $U_d = 2$ [painéis (a) a (c)] do que para $U_d = 8$ [painéis (d) a (f)].

6.3.4 Correlações não locais

Conforme discutido anteriormente, no efeito Kondo, o spin da impureza interage com os spins dos elétrons de condução, formando um singlete delocalizado que blinda a magnetização da impureza. Com isso, há a intensificação de correlações não locais de spin, predominantemente antiferromagnéticas. As correlações entre a impureza e os elétrons de condução podem ser

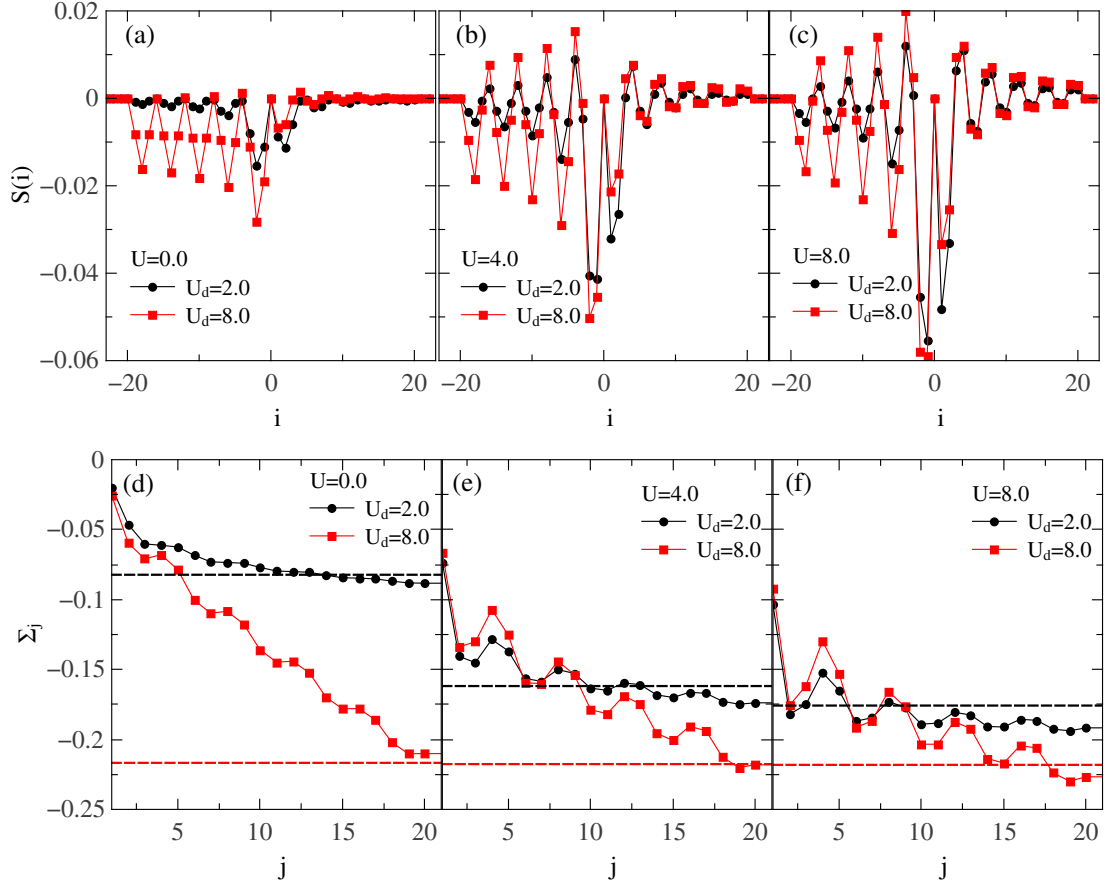


Figura 6.9: (a)-(c) Correlações não locais entre o spin da impureza e os spins dos elétrons de condução, $S(i) = \langle S_0^z S_i^z \rangle - \langle S_0^z \rangle \langle S_i^z \rangle$, em função do sítio i , para diferentes valores de interação nas cadeias, U e na impureza, U_d . (d)-(f) Soma parcial das correlações $\Sigma_j = \sum_{i=1}^j S(-i) + \sum_{i=1}^j S(i)$. As linhas horizontais indicam os valores de $0.9S(0)$ para cada conjunto de parâmetros. Todos os resultados foram obtidos no caso de equilíbrio, isto é, para o estado fundamental das cadeias acopladas à impureza.

caracterizadas pela grandeza

$$S(i) = \langle S_0^z S_i^z \rangle - \langle S_0^z \rangle \langle S_i^z \rangle, \quad (6.6)$$

sendo que o índice i indica o sítio da cadeia e $i = 0$ corresponde à impureza, conforme definido na seção 6.1.

Nas Figuras 6.9(a)-(c) apresentamos as correlações, em função de i , para o caso de equilíbrio. Em concordância com resultados anteriores [155] (apresentados na Figura 5.4, por exemplo), observamos a presença de correlações antiferromagnéticas com um comportamento oscilatório proporcional a $\sin^2(k_F i)$, sendo k_F o momento no nível de Fermi, que, no caso de preenchimento $1/4$, é igual a $\pi/4$. Observamos também que as correlações anti-

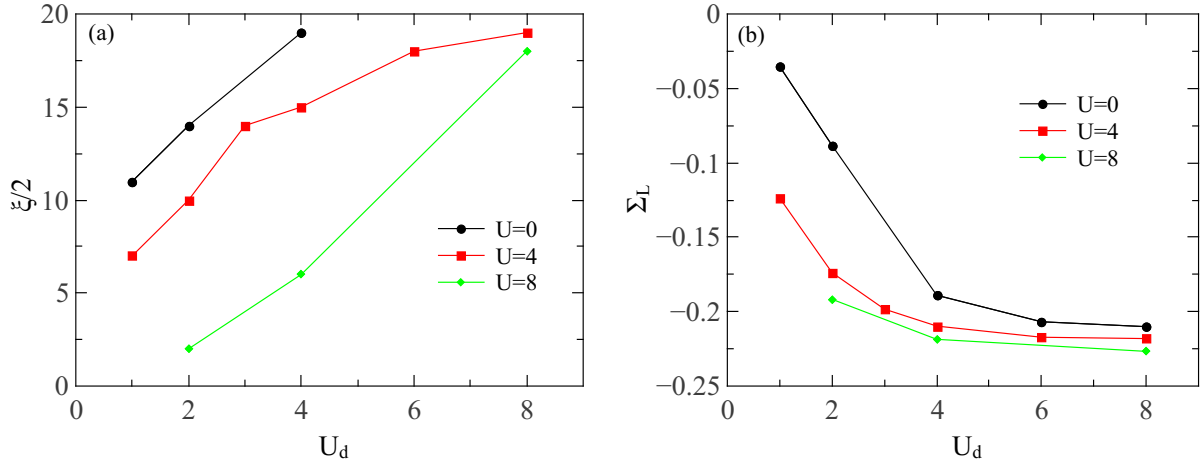


Figura 6.10: Correlações não locais de spin em equilíbrio. (a) Soma total das correlações e (b) comprimento da nuvem Kondo em função de U_d , para diferentes valores de U .

ferromagnéticas ficam mais intensas com o aumento da interação U nas cadeias; correlações ferromagnéticas para alguns valores de i também surgem e se intensificam com o aumento de U .

Na equação (5.4), retirada da referência [177], o comprimento ξ da nuvem Kondo, caracterizada pelo singlete delocalizado, é definido como a extensão das correlações suficientes para uma blindagem considerável da magnetização gerada pela impureza. Esse comprimento pode ser estimado por meio dos gráficos apresentados nos painéis (d) a (f) da Figura 6.9. Os símbolos indicam

$$\Sigma_j = \sum_{i=1}^j S(-i) + \sum_{i=1}^j S(i), \quad (6.7)$$

isto é, uma soma parcial das correlações entre a impureza e os j primeiros sítios das cadeias à esquerda e à direita.² As linhas horizontais pontilhadas na Figura 6.9, nos painéis (d) a (f), indicam o valor de $0.9S(0) = 0.9(\langle (S_0^z)^2 \rangle - \langle S_0^z \rangle^2)$. Assim, o ponto $j = j^*$ no qual ocorre o cruzamento entre a linha pontilhada e os símbolos da cor correspondente fornece uma estimativa do comprimento da nuvem Kondo, isto é, $j^* = \xi/2$. Nossos resultados indicam que ξ diminui com o aumento de U . Isso significa que o aumento das interações na cadeia intensifica as correlações antiferromagnéticas em torno da impureza, reduzindo a extensão da nuvem Kondo. Esses resultados, obtidos em equilíbrio, concordam com aqueles apresentados na Figura 5.6, retirados da referência [177].

A Figura 6.10(a) apresenta o comprimento da nuvem Kondo, ξ , em função de U_d para

²Lembramos que, conforme definido na seção 6.1, índices negativos correspondem à cadeia da esquerda, enquanto sítios positivos correspondem à cadeia da direita.

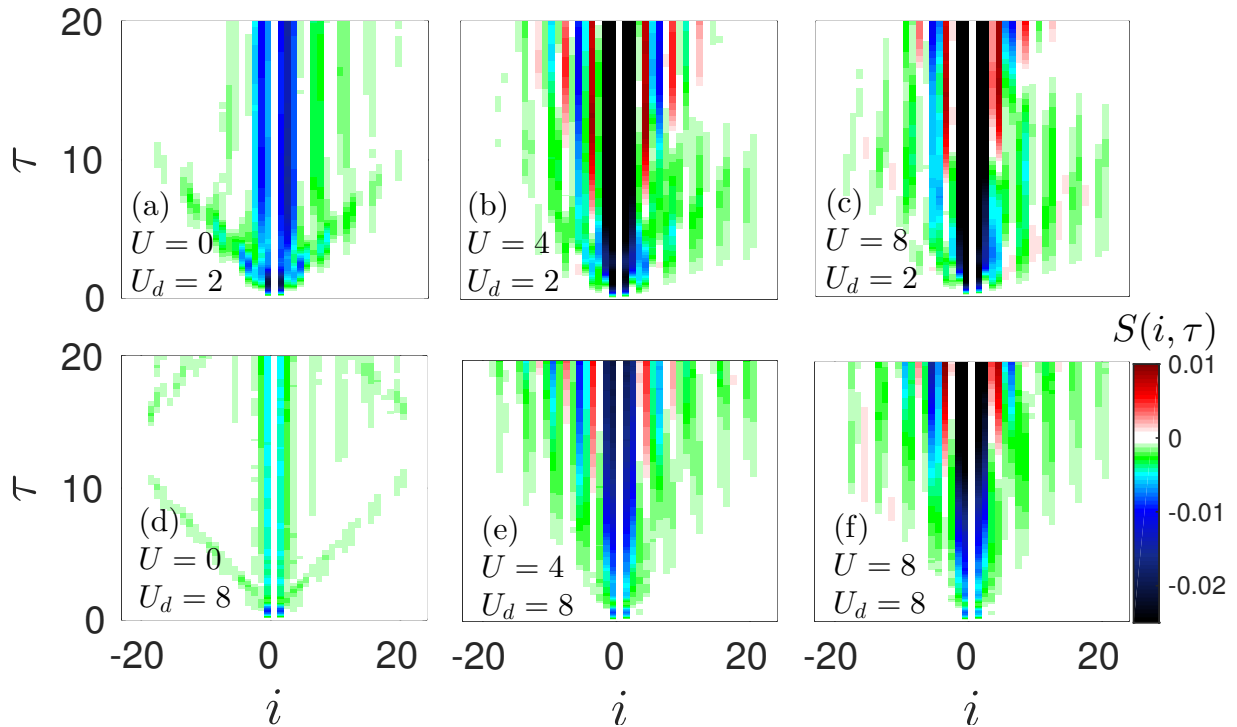


Figura 6.11: Mapa de cores para as correlações não locais de spin $S(i)$ em função dos sítios, i , e tempo, τ , para diferentes conjuntos de parâmetros.

diferentes valores de U , também para o sistema em equilíbrio. Observamos que, embora para um valor fixo de interação na impureza, o aumento da interação na cadeia gere uma redução de ξ , o aumento de U_d , para U fixo, leva a um aumento de ξ . Esse resultado indica que um aumento de U_d faz com elétrons mais distantes da impureza sejam envolvidos na blindagem do spin da impureza. Esse efeito ocorre porque aumentar U_d equivale a reduzir a interação de troca $J_{eff} \propto t^2/U_d$; isso diminui a temperatura Kondo, T_K , e aumenta ξ .

Finalmente, no painel (b) da Figura 6.10, apresentamos a soma total das correlações ao longo das cadeias em função de U_d , para diferentes valores de U . Observamos que a intensidade das correlações antiferromagnéticas aumenta monotonicamente com U_d para todo U . Além disso, para um valor fixo de interação na impureza, a soma das correlações aumenta, em módulo, à medida em que aumentamos a interação U nas cadeias. Esse efeito é uma consequência do fato de que o aumento de ambas as interações U_d e U privilegia o regime Kondo, no qual a impureza tem momento magnético local bem definido e a soma das correlações tende a formação de um single completo.

Até o momento, analisamos apenas o comportamento de equilíbrio das correlações. Resultados para a evolução das correlações na dinâmica, isto é, para a formação da nuvem

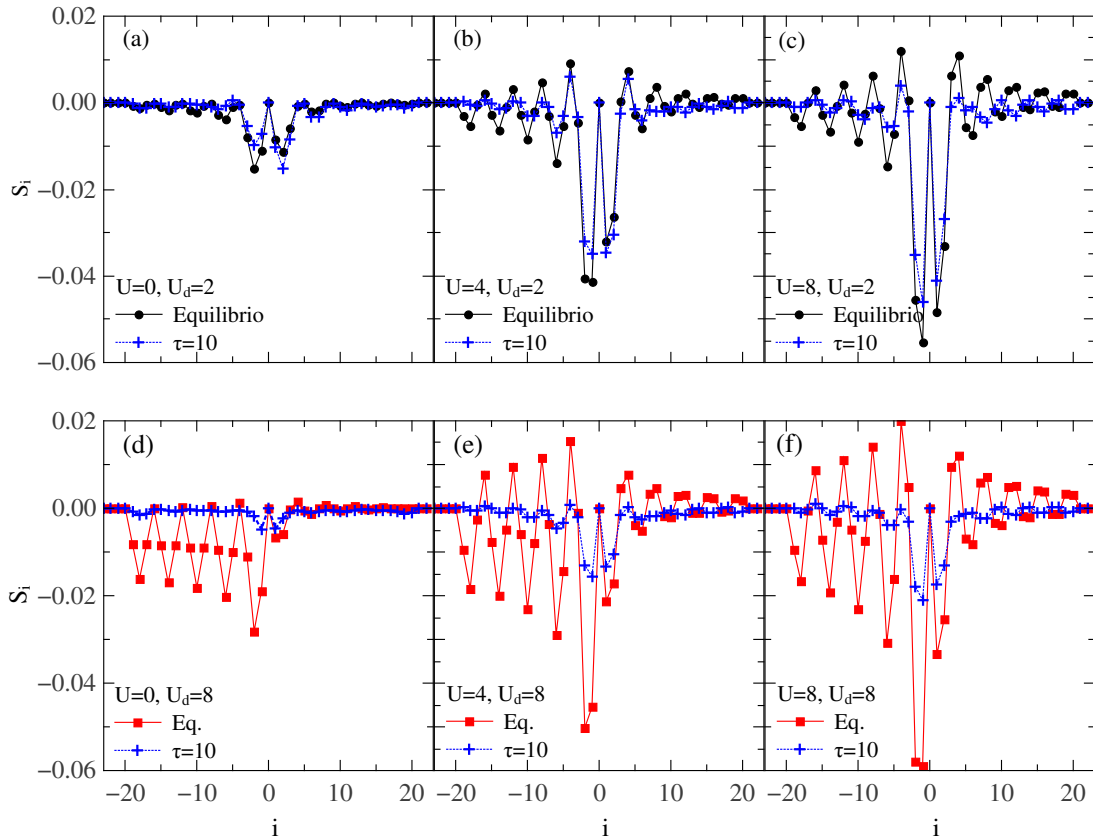


Figura 6.12: Correlações não locais entre o spin da impureza e os spins dos elétrons de condução, $S(i, \tau)$. Comparação entre os valores de equilíbrio e os valores obtidos na dinâmica, após um tempo $\tau = 10$.

Kondo após o *quench* de hibridização entre a impureza e as cadeias, estão apresentados na Figura 6.11, na qual apresentamos mapas de cores para $S(i, \tau)$ em função do sítio, i , e tempo, τ . As correlações são nulas em $\tau = 0$, porque a impureza está inicialmente desacoplada das cadeias. Após o acoplamento, correlações se desenvolvem ao longo das cadeias, a partir do sítio de interseção com a impureza. Na figura, fica claro que a inclusão de interação U nas cadeias intensifica as correlações antiferromagnéticas e também gera correlações ferromagnéticas em algumas regiões. Além disso, observamos efeitos de cones de luz também para as correlações não locais, similares aos cones de luz de entropia e observáveis locais.

Na Figura 6.12, apresentamos as correlações ao longo da cadeia para um tempo fixo, $\tau = 10$, para diferentes conjuntos de parâmetros. Em todos os casos, apresentamos também os valores das correlações em equilíbrio, para comparação. Observamos que, no tempo considerado, $S(i, \tau = 10)$ é mais próximo do equilíbrio para os casos de $U_d = 2$ do que para $U_d = 8$, para todos os valores de U .

O fato de as correlações serem mais próximas do equilíbrio para o caso de U_d menor pode

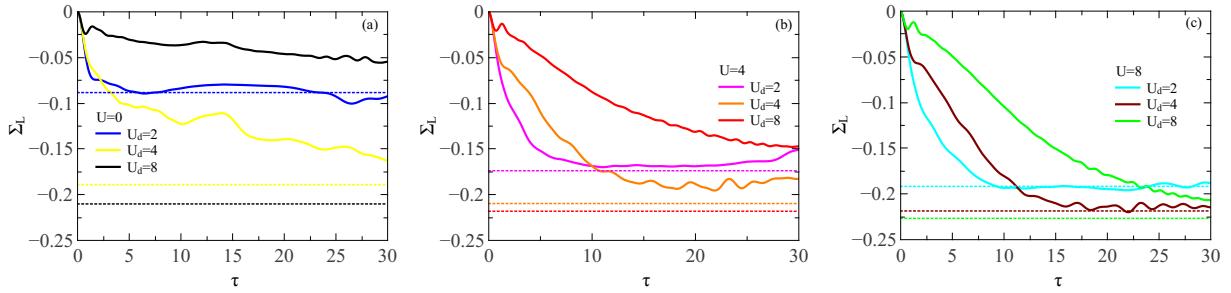


Figura 6.13: Soma das correlações não locais em função do tempo, $\Sigma_L(\tau) = \sum_{i=1}^{L_E} S(-i, \tau) + \sum_{i=1}^{L_D} S(i, \tau)$. As linhas pontilhadas correspondem ao valor de Σ_L no equilíbrio.

ser melhor compreendido por meio da análise dos dados da Figura 6.13, que apresenta a evolução temporal da soma de todas as correlações não locais entre o spin da impureza e os spins dos elétrons de condução das cadeias da direita e da esquerda. Fica claro que, embora as correlações em equilíbrio sejam mais intensas para maiores valores de interação U_d na impureza, na dinâmica, elas se formam mais lentamente à medida em que aumentamos U_d . Nos tempos considerados e em sistemas de $L = 48$ sítios no total, observamos a equilibração das correlações para $U_d = 2$, e, em alguns casos (maiores valores de U) para $U_d = 4$, mas não para $U_d = 8$.

6.3.5 Efeitos de geometria e tamanho finito

Todos os resultados apresentados até o momento foram obtidos com $L = 48$ sítios no total, com a impureza no meio, entre as cadeias da direita e da esquerda. Confirmamos que para a mesma configuração (isto é, impureza no meio do sistema) os resultados praticamente não dependem do tamanho do sistema. Esse comportamento pode ser visto por meio da comparação entre as linhas tracejadas e os símbolos na Figura 6.14, que apresenta resultados para a evolução temporal de observáveis locais na impureza [painéis (a) a (c)] e também para a soma de correlações não locais de spin [painel (d)] para os casos nos quais $L = 48$ ($L_E = 23$ e $L_D = 24$) e $L = 80$ ($L_E = 39$ e $L_D = 40$). Todos os resultados foram obtidos para $U = 4.0$, mas checamos que as mesmas conclusões se aplicam a outros valores de U .

Os resultados são diferentes, no entanto, quando comparamos sistemas organizados em configurações diferentes. A Figure 6.14 também apresenta resultados para o caso em que o sistema completo possui $L = 48$, mas a impureza encontra-se na borda esquerda (isto é, $L_E = 0$, $L_D = 47$). Nesse caso, observamos a mesma dependência qualitativa dos resultados em função de U e U_d , mas os valores quantitativos são diferentes.

Observamos, portanto, que a dependência da evolução de observáveis locais e correlações

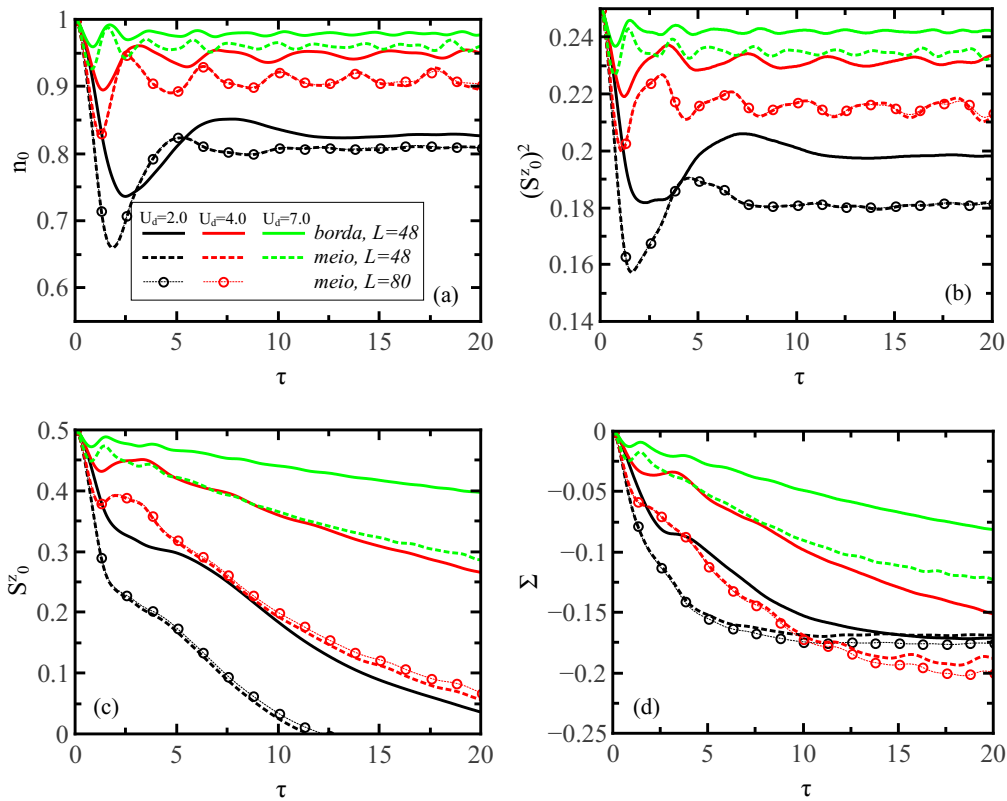


Figura 6.14: Observáveis locais no sítio da impureza e soma das correlações não locais de spin para $U = 4.0$, $U_d = [2.0, 4.0, 7.0]$ e diferentes tamanhos e geometrias.

com as interações do sistema não depende significativamente de efeitos de tamanho ou geometria. De fato, não observamos efeitos de tamanho finito relevantes para os parâmetros e tamanhos considerados. Além disso, a posição da impureza no sistema produz apenas alterações quantitativas, mas não qualitativas.

6.4 Conclusões e próximas etapas do trabalho

Estudamos a dinâmica de não equilíbrio resultante de um *quench* de hibridização no qual conectamos cadeias metálicas interagentes a uma impureza magnética. Analisamos tanto a evolução temporal de observáveis locais no sítio da impureza quanto a evolução de correlações não locais de spin entre a impureza e os elétrons de condução. Enquanto estudos envolvendo cadeias não-interagentes concentram-se em sistemas semi-preenchidos, em nossos resultados, variamos o potencial químico a fim de analisar cadeias metálicas interagentes em preenchimento $1/4$.

Observamos que o sistema tende a evoluir para o estado de equilíbrio (estado fundamental das cadeias conectadas) após o *quench*. Assim, o aumento da interação U nas cadeias

metálicas leva o sistema para um regime Kondo mais bem definido, conforme esperado pelos resultados de equilíbrio. Nossos resultados indicam que, para interação U nas cadeias fixa, valores menores de U_d aceleram a formação de correlações antiferromagnéticas, o que indica que quanto maior é a interação de troca efetiva, $J_{eff} \propto t^2/U_d$, mais rápida é a formação da nuvem Kondo. Mais importante, também observamos que para interação U_d na impureza fixa, a nuvem de blindagem Kondo desenvolve-se mais rapidamente para maiores valores da interação U .

Nossos resultados indicam também que a entropia de emaranhamento do sistema bipartido aumenta ao longo da dinâmica, superando a entropia de equilíbrio. Além disso, observamos a formação de cones de luz após o quench e variações locais de carga e spin se propagam com velocidades diferentes, devido à separação spin-carga das excitações no modelo de Hubbard.

Conforme mencionado na seção anterior, o presente trabalho encontra-se em andamento. Para finalizá-lo, planejamos entender melhor os efeitos de assimetria entre cadeias pares e ímpares. Além disso, planejamos avaliar a evolução das correlações e dos observáveis locais de forma mais quantitativa, a fim de investigar se elas apresentam algum tipo de comportamento universal, no qual escalas de tempo de decaimento dependem da temperatura Kondo, por exemplo.

Parte III

Supercondutividade em sistemas fortemente interagentes

Capítulo 7

Supercondutividade

O fenômeno de supercondutividade é um exemplo de propriedade emergente em sistemas de muitos corpos, isto é, não pode ser descrito por uma aproximação de elétrons independentes. Além da presença de correntes sem nenhuma resistência mensurável, propriedade que dá nome a essa fase da matéria, outra característica importante de supercondutores é a possibilidade de se comportarem como diamagnéticos perfeitos. Isso ocorre porque a aplicação de um campo magnético externo sobre uma amostra de material supercondutor induz correntes de superfície capazes de produzir um campo que anula o campo externo, contanto que este não seja muito intenso [48]. Isso significa que um campo magnético não consegue penetrar no interior de um supercondutor. É justamente essa propriedade, conhecida como efeito Meissner, a responsável pelo fenômeno de levitação magnética, observado nesses materiais.

Dependendo do comportamento do campo magnético no interior dos supercondutores, podemos separá-los em dois tipos, chamados de I e II. No primeiro, não há nenhuma penetração de campo; no segundo, pode haver um estado misto, com penetração parcial para campos intermediários.

Outra característica de supercondutores, com importantes implicações em suas propriedades termodinâmicas, é a presença de um *gap* de energia em torno do nível de Fermi. As primeiras confirmações experimentais da presença do *gap* ocorreram por meio de medidas de calor específico em amostras de vanádio, nióbio e estanho, abaixo de suas temperaturas críticas [186]. Os autores observaram que o calor específico apresenta um comportamento proporcional a $\exp(-\epsilon/kT)$, sendo ϵ a magnitude do *gap*, k a constante de Boltzmann e T a temperatura do sistema. Mais tarde, essa propriedade foi prevista pela teoria que descreve supercondutores metálicos convencionais, proposta por Bardeen, Cooper e Schrieffer e conhecida como teoria BCS [8].

A supercondutividade não é observada apenas em alguns materiais. Mais de 20 metais possuem essa propriedade quando resfriados abaixo de uma dada temperatura crítica; ainda

mais elementos podem apresentar tal propriedade se, além de resfriados, forem submetidos a altas pressões. Se incluirmos ligas, a lista de materiais que podem apresentar essa fase da matéria chega aos milhares. Hoje sabe-se também que a supercondutividade não é uma fase exclusiva de sistemas metálicos convencionais. Já se observou supercondutividade em sistemas puramente orgânicos [187,188]; há também cupratos (compostos de óxidos de cobre) supercondutores de alta temperatura crítica [189,190]; além de compostos com base em ferro (pnictídeos e calcogênios) [191,192]. Embora apresentem propriedades em comum em diferentes tipos de materiais, a supercondutividade tem origens distintas, conforme discutido mais adiante.

No presente capítulo, faremos uma breve revisão da literatura relacionada a supercondutores. Apresentaremos concisamente o desenvolvimento histórico desse campo de pesquisa, além de algumas aplicações tecnológicas dos materiais que apresentam essa fase da matéria. Além disso, enumeraremos as características comuns de um importante tipo de supercondutor, os cupratos, que apresentam alta temperatura crítica.

7.1 Principais momentos do desenvolvimento histórico

A primeira observação experimental do fenômeno de supercondutividade ocorreu em 1911, quando H. K. Onnes [193] (prêmio Nobel em física de 1913 por suas investigações sobre as propriedades da matéria a baixas temperaturas que levaram, entre outras coisas, à produção de hélio líquido) observou que a resistividade elétrica do mercúrio vai abruptamente a zero quando este é resfriado abaixo de 4K. O resfriamento só foi possível com o auxílio de hélio líquido, obtido a partir de 1908. Em 1933, Meissner e Ochsenfeld observaram que supercondutores possuem a propriedade de “expulsar” campos magnéticos aplicados. A observação de tal propriedade contribuiu para a classificação de supercondutividade como um novo estado da matéria.

Os materiais supercondutores ganharam descrições teóricas nos anos seguintes. Em 1934, F. e H. London [194] propuseram uma teoria baseada na combinação de dois fluidos (normal e supercondutor); com generalizações das equações de Maxwell, eles foram capazes de descrever diversas propriedades desses materiais, incluindo o efeito Meissner. O estudo de supercondutividade ganhou novos elementos com a teoria de Ginzburg e Landau, apresentada em 1950, que descreve a transição entre a fase normal e a fase supercondutora [195]. Ambas as contribuições acrescentaram muito para a descrição de supercondutores, mas consistem em teorias fenomenológicas, portanto não explicam os mecanismos responsáveis pelo fenômeno. Tal explicação foi fornecida por Bardeen, Cooper e Schrieffer em 1957 (prêmio Nobel em física de 1972 “pelo desenvolvimento, realizado em conjunto, da teoria de supercondutividade, usualmente conhecida como teoria BCS”) [8]. Eles demonstraram que a condução de corrente

sem dissipação é realizada por pares de elétrons, denominados pares de Cooper. Tais pares têm spins e momentos opostos e permanecem ligados devido a interações com as vibrações da rede (fônons). Uma introdução à teoria BCS é apresentada no Apêndice D.

Em 1962, Josephson observou que pares de Cooper poderiam atravessar uma fina camada isolante na junção entre dois supercondutores [196,197] (prêmio Nobel em física de 1973 pela previsão teórica das propriedades de uma supercorrente através de uma barreira de tunelamento, em particular pelos fenômenos conhecidos como efeito Josephson). Essa propriedade, conhecida como tunelamento Josephson, é utilizada em diferentes dispositivos tecnológicos.

Uma nova “revolução” no estudo de supercondutores ocorreu em 1986, quando K. A. Muller e J.G. Bednorz [189] observaram que um material constituído por La-Ba-Cu-O pode se tornar supercondutor a temperaturas em torno de 30K (Bednorz e Muller receberam o prêmio Nobel de física em 1987 pelo importante avanço produzido pela descoberta de supercondutividade em materiais cerâmicos). Em geral, os supercondutores conhecidos até aquele momento eram bem descritos pela teoria BCS, o que não ocorre no caso do composto no qual Muller e Bednorz observaram supercondutividade. Trata-se de uma material cerâmico, isolante a temperatura ambiente e com temperatura crítica superior à observada nos supercondutores convencionais conhecidos à época. A partir de então, diversos pesquisadores observaram supercondutividade em materiais constituídos por óxidos de cobre, conhecidos como cupratos, com recordes de temperatura crítica em torno de 160 K.

Após a descoberta dos cupratos, intensificou-se a busca por compostos supercondutores de alta temperatura crítica, pois quanto maior a temperatura abaixo da qual a resistividade do material cessa, mais barata e fácil é a obtenção de supercondutividade em larga escala, para aplicação em dispositivos tecnológicos. Em 2008, Kamihara *et al.* observaram supercondutividade em um composto baseado em ferro, com temperatura crítica de 26 K [191]. Essa família de novos supercondutores tem recorde de temperatura crítica em torno de 60 K [192]. A Figura 7.1 apresenta a temperatura crítica de alguns compostos em função do ano de descobrimento. Diferentes cores e símbolos representam diferentes famílias de supercondutores. Losangos azuis representam cupratos, estrelas verdes correspondem a compostos de férmions pesados,¹ quadrados laranjas indicam compostos baseados em ferro,² triângulos

¹Férmions pesados são materiais compostos por terras raras ou actínídeos, com orbitais f semi-preenchidos (tipicamente $4f$ e $5f$). A forte interação elétron-elétron nesses orbitais faz com que os elétrons de condução se comportem como se tivessem massa até 1000 vezes maior do que a massa de elétrons livres (isto é, possuem grande massa efetiva, definida na teoria de líquido de Fermi). Esse comportamento foi primeiramente observado em 1975 por Andres, Graebner e Ott em $CeAl_3$ [198]. Outros exemplos de férmions pesados são $CeCu_6$, $CeCu_2Si_2$, $YbAl_3$, UBe_{13} e UPt_3 . Como tais materiais são caracterizados pela presença de momentos magnéticos locais, acreditava-se que seriam incompatíveis com supercondutividade, no entanto, Steglich *et al.* observaram, em 1979, que $CeCu_2Si_2$ torna-se supercondutor abaixo de $T_c = 0.5$ K [199]. A supercondutividade nesses compostos é não convencional, provavelmente relacionada a propriedades magnéticas [200].

²Supercondutividade em compostos baseados em ferro foi observada pela primeira vez por Kamihara *et al.*, em 2008, em $La[O_{1-x}F_x]FeAs$ ($x = 0.05 - 0.12$) com $T_c = 26$ K [191]. Esses supercondutores também são não convencionais e apresentam algumas semelhanças com cupratos. Em ambos os casos, o material

representam supercondutores orgânicos e, finalmente, círculos verdes simbolizam supercondutores convencionais, descritos pela teoria BCS. É interessante notar que, em 2015, observou-se um supercondutor convencional com temperatura crítica superior a de cupratos. Trata-se de um hidreto molecular, H_2S , que torna-se supercondutor quando submetido a pressões muito elevadas (em torno de 155 GPa) e temperaturas inferiores a 190 K [201].

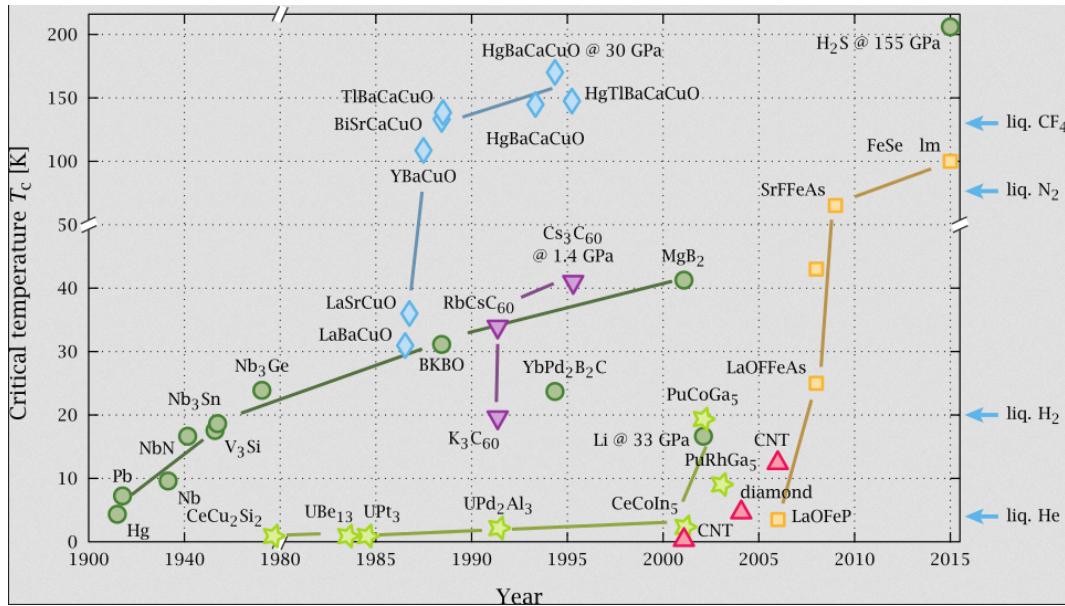


Figura 7.1: Temperaturas críticas de compostos supercondutores em função do tempo. Lozangos azuis representam cupratos, estrelas verdes correspondem a compostos de férmions pesados, quadrados laranjas indicam compostos baseados em ferro, triângulos representam supercondutores orgânicos e, finalmente, círculos verdes simbolizam supercondutores convencionais. Figura retirada de [202].

7.2 Algumas aplicações

O estudo de materiais supercondutores sempre foi associado à busca por aplicações tecnológicas. A ausência de resistividade, com a possibilidade de correntes persistentes, é útil tanto para a transmissão de correntes sem perda de energia por efeito Joule, quanto para a fabricação de dispositivos que produzem fortes campos magnéticos. Do ponto de vista de aplicações, quanto maiores a temperatura e o campo críticos, maior potencial de aplicação o material apresenta.

Uma aplicação idealizada de supercondutividade é a transmissão de energia elétrica comercial em centros urbanos. Devido à dificuldade de resfriar vários quilômetros de fios abaixo

apresenta uma fase normal (não-supercondutora) não líquido de Fermi e a fase supercondutora emerge a partir de dopagem de um composto com ordenamento antiferromagnético [192].

da temperatura crítica, essa aplicação ainda não é viável em larga escala, mas foi testada em algumas situações. Um exemplo ocorreu em maio de 2001, em Copenhague, Dinamarca, quando 150000 residências receberam eletricidade através de materiais supercondutores de alta temperatura crítica (*Copenhagen Denmark HTS Triax Project*) [203].

Campos magnéticos fortes produzidos por materiais supercondutores são usados em medicina, na obtenção de imagens por ressonância magnética (átomos de hidrogênio do corpo humano recebem energia do campo e emitem energia em frequências bem definidas, captadas por um sensor) [204]. Bobinas supercondutoras geradoras de campos fortes também são úteis em aceleradores, usados no estudo de partículas elementares.

Além disso, supercondutores que podem ser ligados e desligados rapidamente pela aplicação de campos externos têm potencial para substituir transistores atuais, produzindo dispositivos mais rápidos e eficientes [205].

Junções Josephson podem ser usadas na produção de dispositivos supercondutores de interferência quântica (SQUID - *Superconducting Quantum Interference Device*) [206, 207]. Esses materiais são apropriados para a detecção de pequenos campos magnéticos, pois variações suaves de campo produzem variações mensuráveis de corrente. Esses dispositivos são úteis em geologia, química e medicina, por exemplo.

7.3 Supercondutores não convencionais

Materiais nos quais a supercondutividade é descrita pela teoria BCS são considerados convencionais. Nesses casos, a “cola”, que mantém os pares portadores de corrente ligados, é a interação entre os elétrons e os fônons da rede cristalina (conforme discutido no Apêndice D). Em outros casos, a supercondutividade é denominada não convencional. Exemplos de materiais que apresentam uma fase supercondutora não convencional são férmions pesados, cupratos, compostos baseados em ferro, camadas de nitretos e alguns compostos orgânicos (ver Figura 7.1).

Há intensa investigação na literatura a respeito de quais características desses materiais são responsáveis pela presença de uma fase supercondutora. Sabe-se que os portadores de carga também são pares de elétrons ligados, como no caso convencional, porém, não há consenso na literatura a respeito do mecanismo que mantém os pares ligados, nem sabe-se se há um mecanismo comum a todos os supercondutores não convencionais. Um ponto interessante, no entanto, é que esses materiais apresentam importantes semelhanças entre si, como a presença de forte interação elétron-elétron e de instabilidades antiferromagnéticas, além de apresentarem, em geral, estrutura cristalina bidimensional. Semelhanças entre o diagrama de fase de cupratos e de compostos baseados em ferro podem ser vistas na Figura 7.2. Em ambos os casos, a fase supercondutora é induzida por dopagem de elétrons ou buracos a

partir de fases com ordenamento antiferromagnético. Além disso, a temperatura crítica, que delimita a fase supercondutora, apresenta um comportamento de domo (ou cúpula geodésica) em função da dopagem.

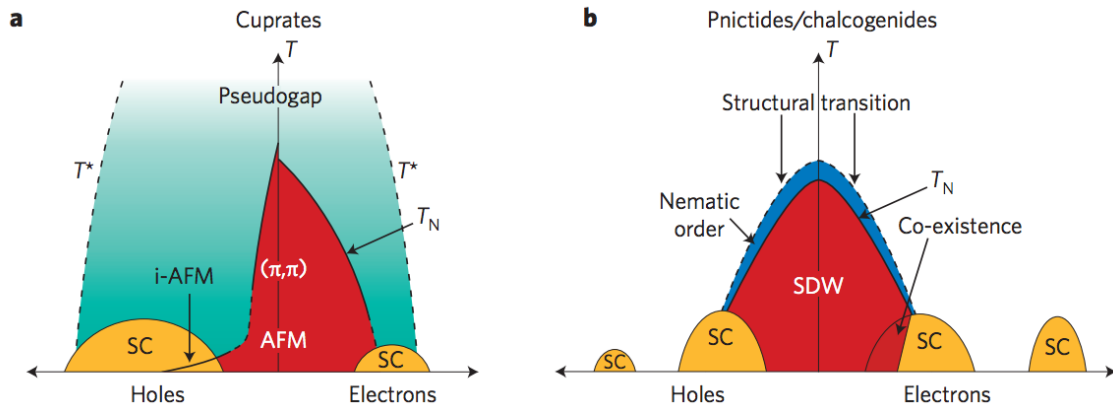


Figura 7.2: Comparação entre o diagrama de fase de (a) cupratos e (b) de supercondutores baseados em ferro. Em ambos os casos a supercondutividade (SC) é induzida por dopagem com elétrons ou buracos a partir de fases com ordenamento magnético (fase antiferromagnética, AFM, no caso de cupratos e fase de onda de densidade de spin, SDW, para compostos de ferro). T_N corresponde à temperatura de Néel, que limita as fases magnéticas, e T^* corresponde à temperatura limite da fase *pseudo-gap*. Figura retirada de [208].

A principal dificuldade na formulação de teorias microscópicas para supercondutores não convencionais é a presença de forte correlação eletrônica, que impede um tratamento perturbativo dos sistemas. Algumas tentativas de formulação de uma teoria comum a esses materiais envolvem a presença de pontos críticos quânticos dentro da fase supercondutora, relacionados a ondas de densidade de spin [209], e flutuações antiferromagnéticas [210]. As teorias não são, no entanto, amplamente aceitas pela comunidade científica. Dificuldades na busca por uma teoria para supercondutores fortemente interagentes, relacionadas à forte interação Coulombiana local e à presença de acoplamentos de troca consideráveis, são discutidas por P. W. Anderson na referência [211], na qual ele afirma que o “segredo” do mecanismo de pares é ainda desconhecido.

Para uma revisão geral de supercondutores não convencionais, sugerimos a referência [7]. A seguir, focaremos em cupratos, supercondutores de alta temperatura crítica que motivaram o trabalho apresentado no Capítulo 9.

7.3.1 Cupratos - supercondutores de alta temperatura crítica

Conforme citado anteriormente, supercondutividade em um material cerâmico foi observada pela primeira vez em 1986 por J. G. Bednorz e K. A. Muller, em um composto contendo

Superconducting compounds	T_c^{\max} (K)
<i>LMCO-type compounds</i>	
$\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ (LMCO) M = Ba, Sr, Ca	39
$\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$	45
$\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$	26
$\text{R}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ (RMCO) (electronically doped cuprates)	24
R = Pr, Nd, Sm, Eu, M = Ce, Th, Ce+Sr	
$\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (ladder compound)	12
- superconducting under high pressure at $x = 13.6$	
<i>YBCO-type compounds</i>	
$\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($x > 0.4$) (R-123) R = Y, La, Ca, RE;	93
RE = Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu	
$\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ (Y-124)	80
$\text{YBa}_2\text{Cu}_{3.5}\text{O}_{8-y}$ (Y-247)	87
$\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{ACu}_3\text{O}_{8+y}$, A = R + Sr, R + Ca	80
$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CaCu}_2\text{O}_8$	60
$\text{RuSr}_2\text{GdCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ (Ru-1212) (superconducting ferromagnet)	46
<i>Bi-, Tl-, Hg-type compounds</i>	
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4+\delta}$ Bi-22($n-1$) n^a ($n = 1-3$)	
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+\delta}$	10
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$	110
$\text{Tl}_m\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+m+2+\delta}$ Tl- $m2(n-1)n^a$ ($m = 1, 2; n = 1-4$)	
$\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$	93
$\text{Tl}_1\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{9+\delta}$	133
$\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$	125
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ Hg-12($n-1$) n^a ($n = 1-5$)	
$\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$	98
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$	135
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ (under pressure of 30 GPa)	164

Tabela 7.1: Tipos de cupratos e respectivas temperaturas críticas. Tabela retirada de [212].

bário, lantânio, cobre e oxigênio [189]. Desde então, vários outros compostos supercondutores baseados em óxidos de cobre têm sido descobertos e extensivamente estudados. Do ponto de vista de aplicações, vários trabalhos têm sido realizados com o objetivo de aumentar a temperatura crítica [213] e a quantidade de corrente que pode ser transportada sem dissipação, a fim de construir dispositivos em escala comercial. Por outro lado, grande esforço teórico e experimental tem sido realizado procurando compreender as bases físicas dos mecanismos responsáveis pela resistividade nula em tais materiais [214, 215]. Embora não haja ainda uma teoria que explique os supercondutores não convencionais, equivalente à teoria BCS, já se sabe muito a respeito das propriedades desses compostos, que apresentam, além de supercondutividade, a competição entre diferentes fases da matéria com propriedades peculiares.

Cupratos são associados a supercondutividade de alta temperatura crítica porque apresentam, em geral, supercondutividade a temperaturas superiores a 77.4 K, temperatura de produção de nitrogênio líquido. A substituição de hélio líquido por nitrogênio líquido torna a obtenção de supercondutividade mais barata e viável. Ainda assim, pesquisadores continuam procurando materiais que apresentem supercondutividade a temperatura ambiente.

Na busca por compostos com temperaturas críticas cada vez maiores, trabalhos experimentais revelaram diferentes classes de cupratos. Alguns exemplos de cupratos com dopagem do tipo buraco são $La_{2-x}M_xCuO_4$ (LMCO), $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ (YBCO) e os tipos $Bi-$, $Tl-$ e $Hg-$, todos descritos pela fórmula geral $A_mM_2Ca_{n-1}Cu_nO_x$, com $A = Bi, Tl, Hg$ e $M = Ba, Sr$. O composto baseado em Nd , $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$, é um exemplo de cuprato com dopagem do tipo elétron. A Tabela 7.1 apresenta exemplos de cupratos com as respectivas temperaturas críticas. Essa temperatura varia de uma classe para outra; além disso, em um dado composto, ela depende fortemente da concentração de dopantes. Os valores apresentados na Tabela 7.1 representam as temperaturas máximas correspondentes à dopagem ótima a pressão atmosférica.

Embora apresentem diferentes classes, os cupratos possuem diversas propriedades em comum. Eles se organizam em uma estrutura de multicamadas de CuO_2 separadas por camadas de outros átomos, como La , Ba , Y , Sr , Bi , etc (ver Figura 7.3.A). A supercondutividade nesses compostos é um fenômeno quase bidimensional, que ocorre basicamente nas camadas de CuO_2 (Fig. 7.3.B), enquanto as camadas intermediárias funcionam como reservatórios de carga.

Logo após a descoberta dos primeiros cupratos, percebeu-se que estes compartilham algumas propriedades com supercondutores descritos pela teoria BCS. Experimentos em um anel de YBCO submetido a campos magnéticos revelaram um comportamento de quantização de fluxo, com quantum de $h/2e$, sendo h a constante de Planck e e a carga do elétron [217]. Esse resultado indica que os portadores de carga em cupratos são pares de elétrons, semelhantes

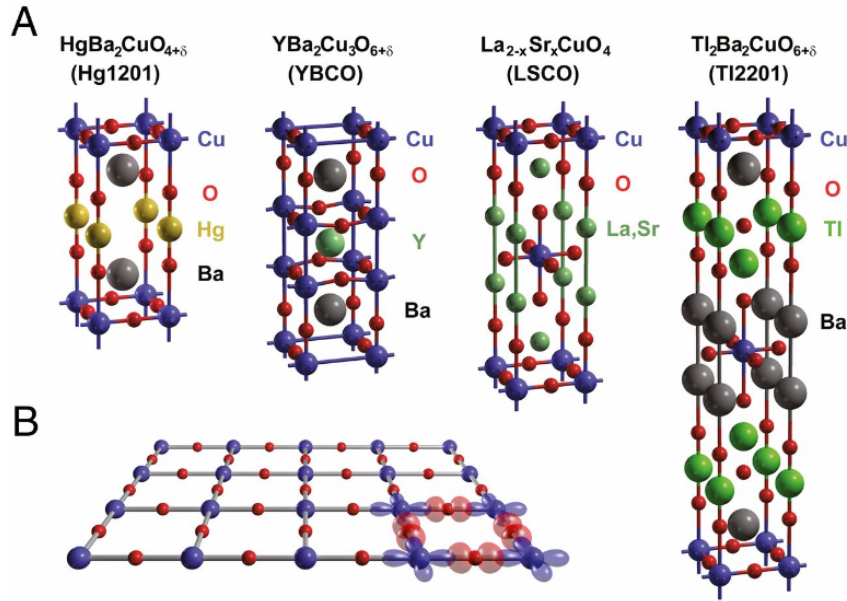


Figura 7.3: Figuras esquemáticas (A) da estrutura cristalina de diferentes cupratos e (B) do plano de cobre (esferas grandes, em azul) e oxigênio (esferas pequenas, em vermelho). Figura retirada de [216].

aos portadores descritos por BCS.³

Na mesma época, observou-se também diversas discrepâncias entre resultados experimentais de cupratos e as previsões da teoria formulada por Bardeen, Cooper e Schrieffer. Uma série de experimentos realizados na década de 90, comparando a fase de supercorrentes de cupratos em diferentes direções do plano, indicou uma defasagem de π no parâmetro de ordem supercondutor, quando computado em direções perpendiculares. Esse resultado indicou que o parâmetro ordem da supercondutividade tem a forma $\Delta(k_x, k_y) = \Delta_0[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$, característica de funções de onda com simetria d [218–220]. Concluiu-se, portanto, que a parte orbital da função de onda eletrônica nos supercondutores de alta temperatura crítica apresenta momento orbital $l = 2$ (função de onda orbital com simetria do tipo d), ao invés

³Para entender esse resultado, devemos lembrar que, segundo o efeito Aharonov–Bohm, a função de onda de portadores de carga que passam ao redor de um solenoide sofre uma mudança de fase $\delta\varphi$ causada pelo campo magnético contido dentro do solenoide, dada por

$$\delta\varphi = \frac{q\Phi_B 2\pi}{h}, \quad (7.1)$$

sendo q a carga e Φ_B o fluxo do campo magnético. Como a função de onda supercondutora é coerente em todo o anel supercondutor, a alteração de fase deve ser dada por $\delta\varphi = 2\pi n$, com n inteiro. Além disso, segundo o experimento realizado por Gough *et al.* [217], o fluxo Φ_B é dado por $nh/2e$. Substituindo as duas condições na equação (7.1) temos

$$2\pi n = \frac{q(nh/2e)2\pi}{h}, \quad (7.2)$$

o que indica que os portadores da supercorrente têm carga $q = 2e$.

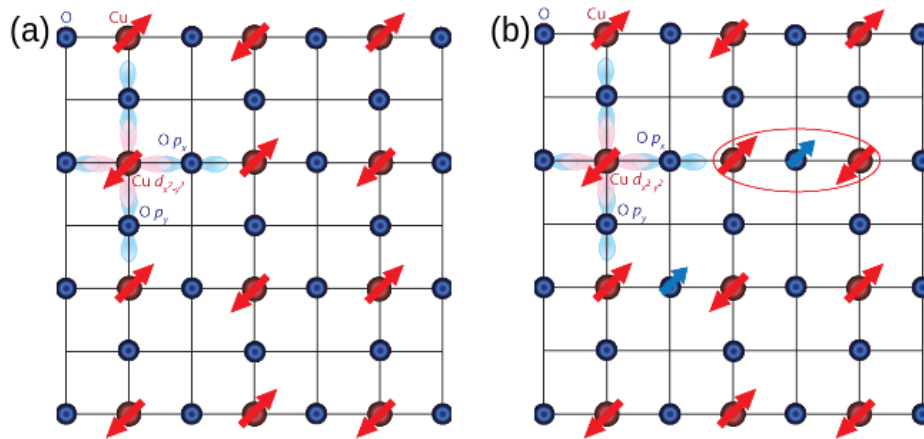


Figura 7.4: Figura esquemática do plano de cobre (vermelho) e oxigênio (azul) em cupratos. (a) Em semi-preenchimento, os elétrons do orbital d do cobre formam um isolante de Mott antiferromagnético; (b) o ordenamento é frustrado pelo acréscimo de novos portadores de carga resultantes da dopagem.

de $l = 0$ (tipo s) observado em supercondutores convencionais.

Além disso, sabe-se que supercondutores convencionais apresentam o chamado efeito isótopo, isto é, a temperatura crítica depende da massa dos íons que compõem a rede cristalina, pois a ligação entre os pares portadores de carga é mediada por fônons. Esse efeito praticamente não é observado em supercondutores não convencionais [221], o que sugere que, nesse caso, há um mecanismo diferente responsável pela formação dos pares.

As diferenças entre cupratos e supercondutores não convencionais não se limita à fase supercondutora. A teoria BCS prevê uma fase normal metálica, pois a estabilidade da fase supercondutora depende da existência de uma superfície de Fermi bem definida para $T > T_c$. Isso não ocorre em cupratos. Medidas de resistividade, condutividade ótica, intensidade de espalhamento Raman e coeficientes Hall, por exemplo, revelaram comportamentos anômalos (não líquido de Fermi) em cupratos para $T > T_c$ [222]. As diferenças descritas acima sugerem fortemente que a supercondutividade em compostos de óxido de cobre não podem ser descritos pela teoria BCS.

Experimentos e trabalhos teóricos investigam as características comuns aos cupratos a fim de entender a física por trás do fenômeno. Tais materiais têm em comum o fato de apresentarem forte interação elétron-elétron, sendo que a fase supercondutora é obtida por dopagem de um isolante de Mott. Mais especificamente, os orbitais mais relevantes nas camadas de CuO_2 são os orbitais $d_{x^2-y^2}$ do cobre e os orbitais p_σ do oxigênio. Há, nesse caso, um elétron desemparelhado em cada orbital d de cobre, formando assim uma rede quadrada na fase isolante de Mott antiferromagnética, conforme representado esquematicamente na Figura 7.4(a). Aplicando-se dopagem (x), a fase antiferromagnética é destruída pela presença

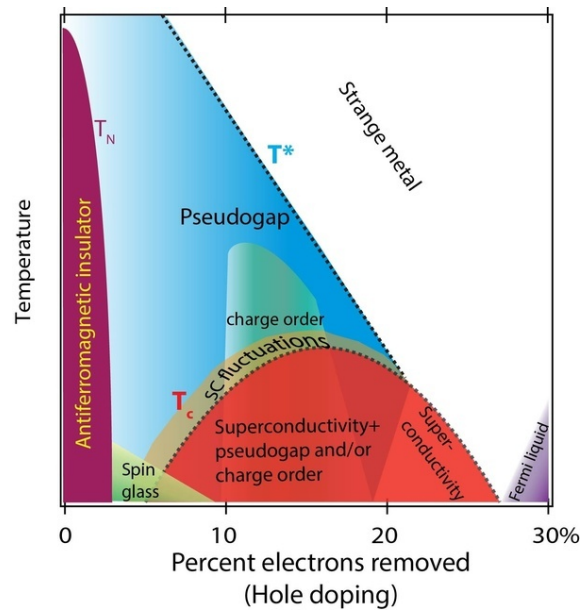


Figura 7.5: Figura esquemática do diagrama de fase de temperatura em função da dopagem com buracos, comum aos cupratos. Há a competição entre diferentes fases da matéria. Figura retirada de [225].

de novos portadores de carga [Figura 7.4(b)] e observa-se uma fase metálica paramagnética, com supercondutividade abaixo de uma dada temperatura crítica, T_c . Correlações antiferromagnéticas de curto alcance, no entanto, permanecem presentes e parecem relevantes no mecanismo de supercondutividade.

A Figura 7.5 apresenta um esquema do diagrama de fase comum aos cupratos. Observa-se que a temperatura crítica apresenta uma forma de “domo” em função da densidade de portadores. A quantidade de dopagem para a qual a temperatura é máxima é chamada de dopagem ótima, x_{opt} . Para $x < x_{opt}$ (*underdoped region*), esses materiais apresentam propriedades físicas anômalas abaixo de uma temperatura T^* , com a presença de uma fase *pseudo-gap*. Investiga-se ainda a existência de outras fases, como vidros de spin [223] e ondas de densidade de carga [224]. Essas características serão exploradas nas subseções sobre observações experimentais e modelos para cupratos.

Apesar do intenso trabalho realizado pela comunidade científica nos últimos 30 anos, ainda não se sabe exatamente qual o mecanismo responsável pela formação de pares em cupratos. Alguns autores sugerem que esse mecanismo é relacionado a interações antiferromagnéticas e flutuações de spin [210, 226, 227]. Essa ideia se baseia no fato de que cupratos apresentam, na fase supercondutora, um modo ressonante no espectro de spin, com energia que aumenta com a dopagem x até a dopagem ótima e em seguida diminui, seguindo o comportamento de domo de T_c em função de x . Não há, no entanto, um modelo microscópico que descreve quantitativamente o mecanismo de pareamento. Além disso, a ideia apresenta problemas na

região $x < x_{opt}$, pois o estado-normal apresenta um *pseudo-gap*, enquanto excitações de spin não possuem *gap* [228].

Não é apenas o mecanismo responsável pela supercondutividade que intriga os pesquisadores. Mesmo o estado normal (não-supercondutor) desses materiais não é completamente compreendido. Conforme mencionado anteriormente, há a competição entre diferentes fases da matéria com propriedades não convencionais; estudos teóricos e experimentais procuram entender como essas competições influenciam na supercondutividade de alta temperatura crítica. Em particular, a fase *pseudo-gap* atrai muita atenção da comunidade científica; sua explicação teórica permanece em aberto e inclui efeitos de correlação eletrônica, parâmetros de ordem escondidos devido a vários fatores e precursores de pares [229]. Essa fase foi explorada em nosso trabalho, apresentado no Capítulo 9.

A literatura sobre cupratos é extremamente extensa; a seguir, descrevemos alguns trabalhos na área. Não nos propomos, no entanto, a fazer uma revisão da literatura, apenas mencionamos as principais metodologias experimentais e métodos numéricos utilizados para estudar esses materiais e apresentamos alguns exemplos de resultados importantes.

7.3.2 Observações experimentais

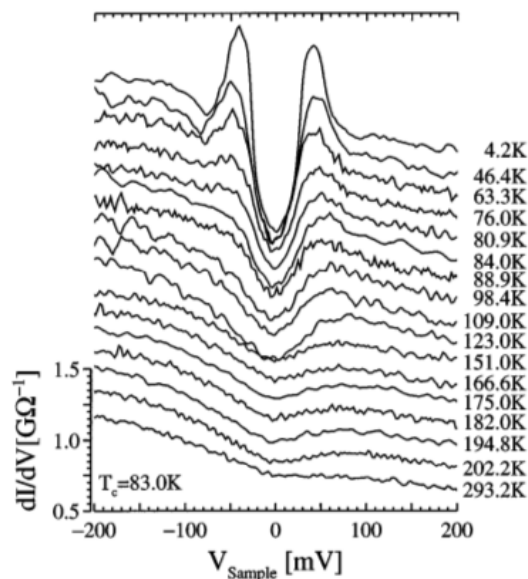


Figura 7.6: Espectro de tunelamento de $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ para diferentes temperaturas, obtido por STM. Figura retirada de [230].

Do ponto de vista experimental, importantes informações sobre a estrutura eletrônica de cupratos podem ser obtidas por técnicas de espectroscopia e microscopia. Microscopia de tunelamento (STM, do inglês, *scanning tunneling microscope*), por exemplo, é capaz de

detectar a densidade de estados local, $\rho(\omega)$, dos materiais, $\rho(\omega) = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}, \omega)$, sendo $A(\vec{k}, \omega)$ a função espectral. Experimentos realizados com essa técnica revelaram a presença de *gaps* locais a temperaturas superiores à temperatura crítica. Esse resultado era, a princípio, inesperado, pois em supercondutores convencionais a fase supercondutora apresenta um *gap* que se fecha quando $T > T_c$, já que a fase normal é um metal tradicional. A persistência do *gap* em cupratos indica a presença da fase *pseudo-gap* no estado normal desses materiais. Isso pode ser visto, por exemplo, na Figura 7.6, que apresenta o espectro de tunelamento (condutividade obtida a partir da corrente que flui entre a ponta metálica e a amostra, em função da voltagem aplicada entre elas) para diferentes temperaturas [230]. Nesse exemplo, realizado em uma amostra de $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ na região em que $x < x_{opt}$, os autores observaram a persistência do *gap* para $T > T_c = 83$ K.

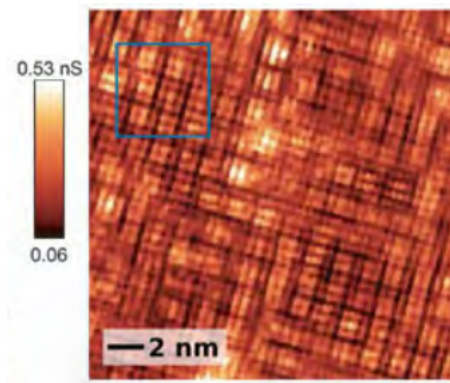


Figura 7.7: Topografia de $Ca_{1.9}Na_{0.1}CuO_2Cl_2$ obtida por STM. A Figura mostra um mapa de condutância ao longo da amostra e revela a presença de ordenamento de carga, com uma modulação de quatro células unitárias de CuO_2 . Figura retirada de [231].

Mais recentemente, outros experimentos utilizando STM têm revelado novas características da parte normal do diagrama de fase de cupratos, como a presença de ordenamento de carga do tipo CDW (*charge density wave*). A Figura 7.7 representa uma topografia de $Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$ obtida por STM, com $x = 0.1$ e baixas temperaturas, e indica a presença de forte modulação espacial, com correlações espaciais de quatro células unitárias de CuO_2 [231], indicando a presença de ordenamento de carga.

Além de STM, microscopia de fotoemissão resolvida em ângulo (ARPES, *angle-resolved photoemission spectroscopy*) é também uma das principais técnicas utilizadas no estudo de supercondutores não convencionais, pois captura diretamente a função espectral $A(\vec{k}, \omega)$ do material em torno do nível de Fermi ($\omega \approx 0$) com resolução de momento, \vec{k} , fornecendo importantes informações sobre a competição e cooperação entre diferentes fases da matéria. Resultados de ARPES [232,233] revelaram, por exemplo, que tanto a fase *pseudo-gap* quanto o *gap* supercondutor apresentam grande anisotropia no espaço de momento. Um exemplo

de resultado pode ser visto na Figura 7.8, retirada da referência [233], que apresenta a dependência do *gap* com relação ao momento (ângulo) em amostras de $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$. A figura apresenta a magnitude do *gap* em função do ângulo, ou momento (ver *inset* para a correspondência entre ambos), para $T = 14$ K e três valores de dopagens, que geram diferentes temperaturas críticas $T_c = 10, 83$ e 87 K. Os autores observaram a presença de um *gap* ao longo da linha $\bar{M}Y$ da zona de Brillouin, que se fecha na direção ΓY . O *gap* existe tanto para $T < T_c$ (*gap* supercondutor) quanto para $T > T_c$ (*pseudo-gap*).

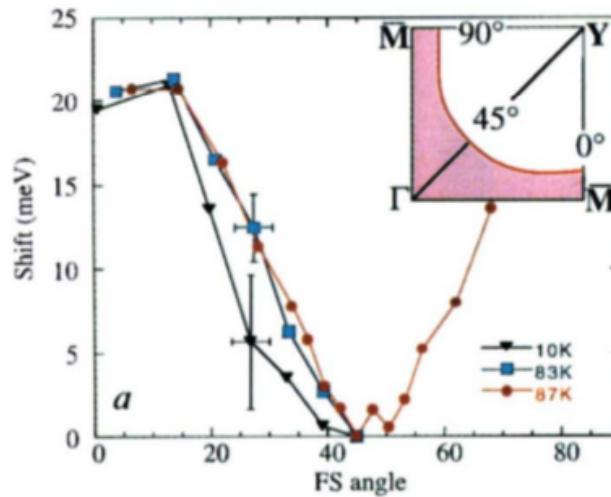


Figura 7.8: Dependência do *gap* com relação ao momento para temperatura fixa $T = 14$ K e três diferentes dopagens, que geram temperaturas críticas $T_c = 10, 83$ e 87 K. O *gap* é proporcional ao chamado *leading edge shift*, computado via ARPES. O *inset* apresenta a correspondência entre ângulo e momento. Figura retirada de [233].

Outra representação da anisotropia do *gap* no espaço de momento na fase *pseudo-gap*, obtida via ARPES, pode ser vista na Figura 7.9(b), que representa a função espectral $A(\vec{k}, \omega)$ em função da energia (proporcional à frequência ω) para diferentes valores de momento. Fica clara a presença de *gap* na região anti-nodal da zona de Brillouin, e a ausência de *gap* na região nodal [ver Figura 7.9(a) para a definição das regiões no espaço de momento].

Resultados semelhantes podem ser vistos na Figura 7.10, que apresenta o peso espectral em torno do nível de Fermi em função do momento. O código de cores indica a intensidade de $A(\vec{k}, \omega = 0)$ em função de k_x e k_y e observamos que, partindo de um isolante de Mott ($x = 0$) e acrescentando dopagem, x , o (*pseudo*)*gap* permanece presente na região $(\pi, 0)$, mas há a formação de bandas de quase-partículas que cruzam o nível de Fermi na direção nodal $(0, 0) - (\pi, \pi)$. Isso significa que apenas uma parte da superfície de Fermi sobrevive, como um arco em torno da região nodal.

Hoje sabe-se que o *gap* supercondutor segue a simetria de onda-d. O *pseudo-gap* apresenta um comportamento ainda mais complicado, deixando regiões sem *gap* em seções da superfície

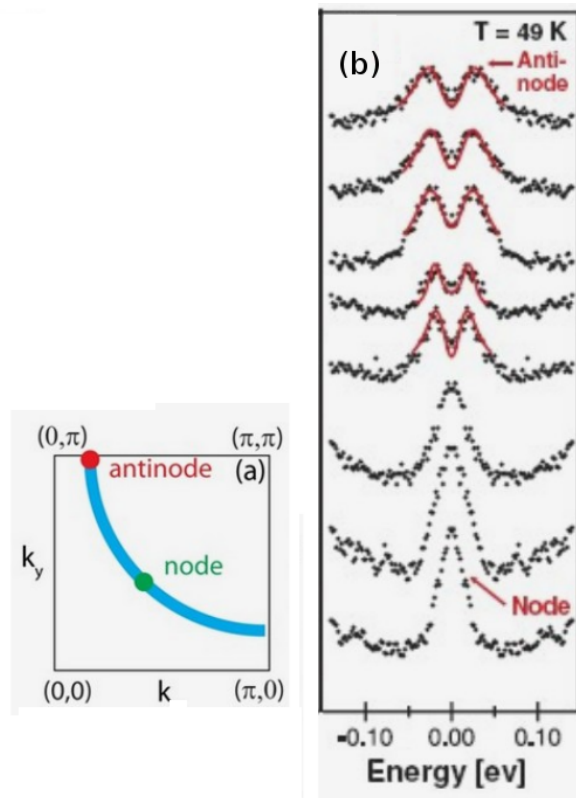


Figura 7.9: Função espectral em função da energia para diferentes valores de momento \vec{k} . Medidas de ARPES para LaSrCuO ($T_c = 30$ K), obtidas a $T = 49$ K ($T > T_c$) evidenciam a anisotropia do *gap* no espaço de momento. Figura retirada de [234].

de Fermi em torno dos nós, $\vec{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ [236]. Mais tarde essas regiões foram chamadas de arcos de Fermi e observou-se que o tamanho dos arcos evolui com a variação da temperatura: é zero abaixo da temperatura crítica e ocupa toda a superfície de Fermi quando $T > T^*$, sendo $T^* \gg T_c$ a temperatura abaixo da qual observa-se a fase *pseudo-gap* [237].

Outros resultados importantes podem ser observados por meio de experimentos de difração de nêutrons, que fornecem medidas da magnetização com resolução local. Com esse método é possível observar, por exemplo, que, em um composto de $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ sem dopagem ($x = 0$), um elétron desemparelhado em cada átomo de cobre dos planos de CuO_2 se orienta com spin oposto aos spins dos elétrons dos átomos vizinhos (o composto encontra-se na fase isolante de Mott antiferromagnética). À medida que dopar-se o material com Sr , retira-se elétrons do plano de óxido de cobre (dopagem com buracos) e surgem, quando $T > T_c$, estreitas tiras condutoras (*stripes*) com portadores de carga (buracos) livres que coexistem com regiões isolantes de Mott [238, 239].

É importante mencionar ainda que resultados experimentais recentes sugerem uma relação entre a fase *pseudo-gap* e a topologia da superfície de Fermi. Tais resultados serviram de motivação direta para nosso trabalho, descrito no Capítulo 9. Mais especificamente, resultados

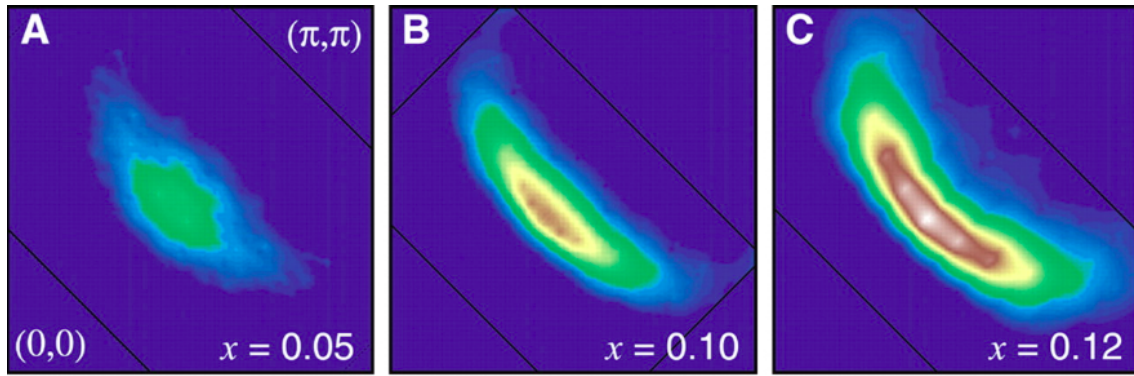


Figura 7.10: Peso espectral em função do momento obtido em uma janela de ± 10 -meV em torno da energia de Fermi para diferentes valores de dopagem em $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$. O código de cores indica a intensidade de $A(\vec{k}, \omega \approx 0)$, sendo que azul (preto, em preto e branco) indica valores próximos de zero e marrom (branco, em preto e branco) corresponde a intensidades superiores. Os dados foram obtidos a 15 K (as amostras com $x = 0.10$ e $x = 0.12$ possuem $T_c = 13$ e 22 K, respectivamente). Figura obtida via ARPES, retirada de [235].

de espectroscopia em monocamadas de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6-\delta}$ [240] e bicamadas de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ [241, 242] revelaram que a fase *pseudo-gap* termina abruptamente para dopagem p^* no regime *overdoped* ($p > p_{opt}$). Esse valor de dopagem coincide com p_{lt} , dopagem na qual ocorre a transição de Lifshitz, que caracteriza a mudança da topologia da superfície de Fermi entre uma superfície tipo buraco e uma superfície tipo elétron.⁴

Ambas as dopagens críticas podem ser vistas na Figura 7.11, obtida por espectroscopia Raman e retirada da referência [241]. Os círculos indicam a razão entre a intensidade Raman integrada nas geometrias $B1_g$ e $B2_g$, que exploram as regiões anti-nodais [em torno de $\vec{k} = (\pm\pi, 0)$ e $\vec{k} = (0, \pm\pi)$] e nodais [em torno de $\vec{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$], respectivamente. O pico na razão entre as intensidades, indicado pela seta vertical, é relacionado a um aumento na densidade de estados na região antinodal da zona de Brillouin. Os autores associam isso à dopagem crítica da transição de Lifshitz, p_{lt} (na referência [241], resultados experimentais são comparados a resultados numéricos, que corroboram para a associação entre o pico na razão $B1_g/B2_g$ e a mudança na topologia da superfície de Fermi). As estrelas, por outro lado, indicam a perda de peso espectral. Quando a perda se anula, o sistema atinge a dopagem limite da fase *pseudo-gap* (PG), p^* . A coincidência entre as dopagens críticas pode ser observada na figura.

A relação entre dopagem limite da fase *pseudo-gap* e a transição de Lifshitz também foi analisada na referência [243], na qual os autores utilizaram campos magnéticos a fim de suprimir a fase supercondutora em diferentes compostos cupratos (LSCO representa $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_2$, Nd-LSCO é uma abreviação para $\text{La}_{1.6x}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ e finalmente Bi2201

⁴Mais detalhes sobre a topologia da superfície de Fermi são discutidos no Capítulo 9. Esboços de superfície do tipo elétron e do tipo buraco são representados na Figura 9.4.

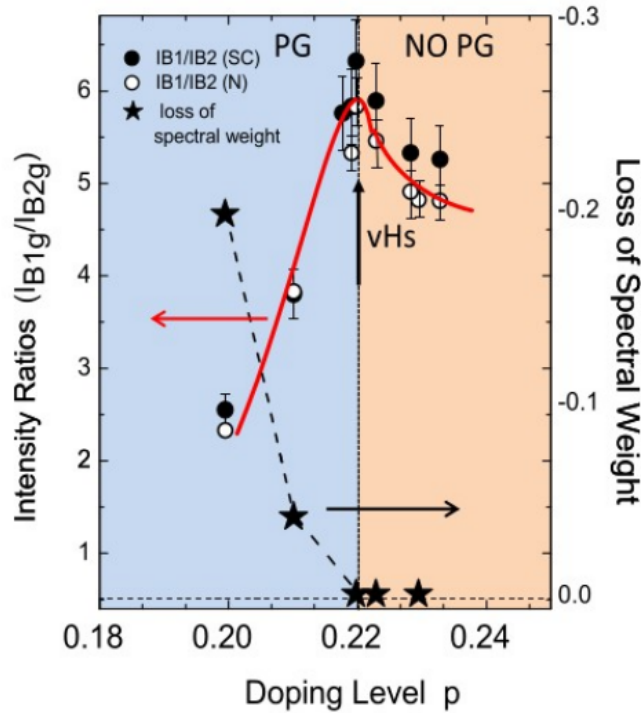


Figura 7.11: Evolução, em função da dopagem, da razão I_{B1g}/I_{B2g} das intensidades Raman integradas em diferentes geometrias e da perda de peso espectral relacionada à fase *pseudo-gap*. O pico na razão I_{B1g}/I_{B2g} coincide com a dopagem crítica $p^* = 0.22$ na qual o *pseudo-gap* desaparece. O pico é uma consequência da transição de Lifshitz entre superfícies de Fermi do tipo buraco e do tipo elétron, que ocorre quando o potencial químico é tal que a superfície de Fermi cruza uma singularidade de van Hove. Figura retirada de [241].

corresponde a $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2y}\text{CuO}_{6+\delta}$). Assim, p^* foi definido por medidas de resistividade, enquanto medidas de ARPES forneceram os valores de p_{lt} . Embora as dopagens sejam diferentes para diferentes compostos, para cada um deles temos $p^* \sim p_{lt}$, conforme indicado pela figura 7.12.

As razões e implicações desta coincidência são ainda um assunto em aberto e serão discutidas em nosso trabalho, apresentado no Capítulo 9.

7.3.3 Estudo de modelos para cupratos

No estudo de cupratos, a análise de modelos capazes de descrever a fase supercondutora e sua relação com as fases isolante de Mott e *pseudo-gap* é de fundamental importância para percebermos os ingredientes físicos fundamentais comuns a cupratos supercondutores, nos aproximando, assim, de uma compreensão mais completa do mecanismo responsável pelo fenômeno.

Estudos realizados via Teoria do Funcional da Densidade revelam que as características

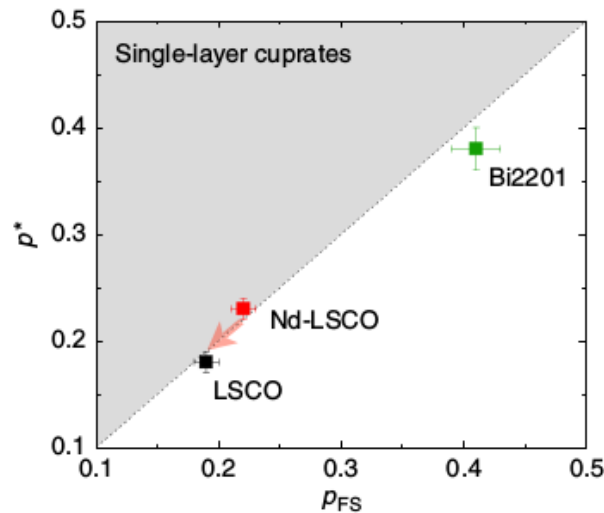


Figura 7.12: Dopagem limite para a fase *pseudo-gap*, p^* , em função da dopagem característica da transição de Lifshitz, p_{FS} ($= p_t$) para diferentes compostos cupratos. Figura retirada de [243].

mais importantes da estrutura eletrônica de cupratos são a grande hibridização entre os orbitais $O2p$ e $Cu3d$ e uma forte repulsão Coulombiana local nos estados $3d$ do Cobre [244].

Devido à complexidade da descrição de sistemas de muitos corpos, a solução de modelos que levam em conta múltiplas bandas é muito complicada. Logo após a descoberta dos primeiros supercondutores de alta temperatura crítica, P. W. Anderson sugeriu que o modelo de Hubbard repulsivo de uma única banda com dopagem deveria ser suficiente para descrever os ingredientes essenciais desses sistemas [245, 246]. O Hamiltoniano de Hubbard é o modelo mais simples capaz de descrever a competição entre a energia cinética e a energia de interação elétron-elétron.

Apesar da simplicidade do modelo, ele só possui solução exata no caso unidimensional, via ansatz de Bethe [181], e em dimensão infinita via Teoria de Campo Médio Dinâmico (DMFT, *dynamical mean field theory*) [247]. No caso do modelo de Hubbard bidimensional, usado para descrever os planos de CuO_2 em cupratos, trabalhos teóricos recorrem a cálculos via Monte Carlo Quântico [248–251] e extensões de *cluster* da DMFT [252, 253], dentre as quais destaca-se a Aproximação Dinâmica de *Cluster* (DCA, *dynamical cluster approximation*) e a Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular (CDMFT, *cellular dynamical mean field theory*), esses métodos serão descritos no próximo capítulo.

A Figura 7.13 apresenta uma comparação entre resultados obtidos com dois dos principais métodos numéricos utilizados para descrever o modelo de Hubbard em uma rede quadrada, Monte Carlo variacional (VMC, *variational Monte Carlo*) e Aproximação Dinâmica de *Cluster* (DCA, *dynamical cluster approximation*, uma extensão de *cluster* da DMFT formulada

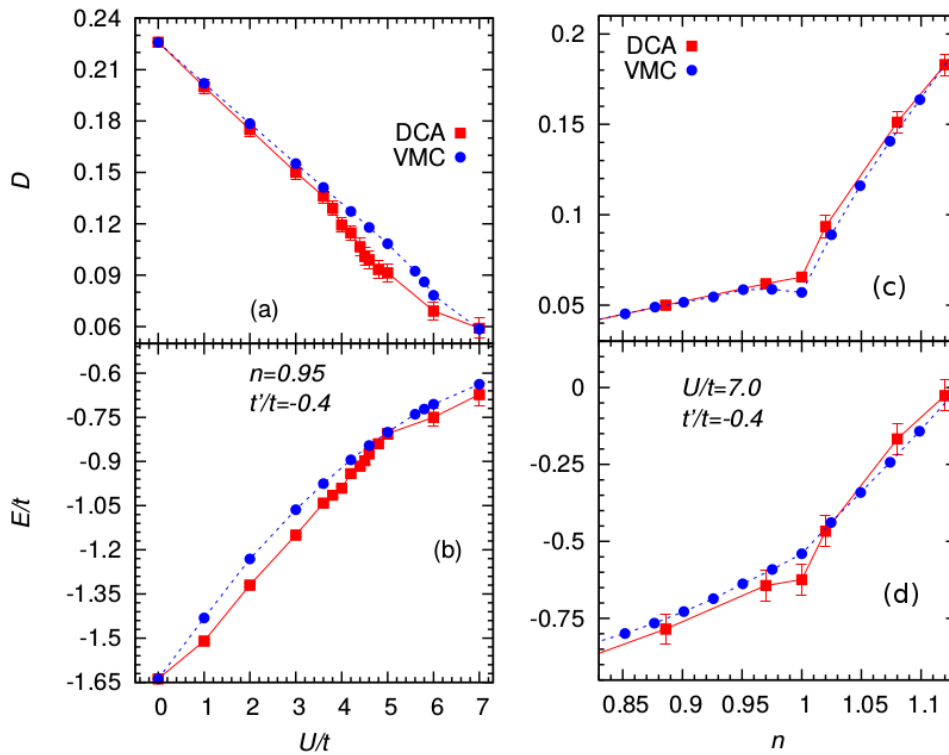


Figura 7.13: Comparações entre duas metodologias numéricas, Monte Carlo variacional (VMC, *variational Monte Carlo*) e Aproximação Dinâmica de *Cluster* (DCA, *dynamical cluster approximation*), para a descrição do modelo de Hubbard em uma rede quadrada. (a) e (c) Probabilidade de dupla ocupação e (b) e (d) energia do estado fundamental, em função da interação [(a) e (b)] e da dopagem [(c) e (d)]. Figura retirada de [254].

no espaço de momento). Os apinéis (a) e (b) indicam a probabilidade de dupla ocupação por sítio, D , e a energia do estado fundamental, E , em função da interação local, U , para um sistema próximo de semi-preenchimento (dopagem de 5%). Fica clara a grande concordância entre ambos os métodos, especialmente nos limites de U pequeno e U grande. Para interação intermediária, há pequena diferença nos resultados entre as duas metodologias, pois a interação crítica, U_c , na qual ocorre a transição metal-isolante de Mott em semi-preenchimento, é um pouco maior no cálculo via VMC ($U_c = 5.8 \pm 0.2$ [255]) do que via DCA (4.6 ± 0.4 [256, 257]). Nos painéis (c) e (d) vemos os mesmos observáveis, mas em função da ocupação, para $U = 7.0$. Nesse caso, a concordância entre os métodos é ainda mais evidente.

Estudos de *cluster*-DMFT para o modelo de Hubbard bidimensional descrevem apropriadamente o estado normal dos cupratos, incluindo o isolante de Mott em semi-preenchimento [258–260] e em função da dopagem [261], além de uma fase *pseudo-gap* induzida por dopagem [262, 263]. A Figura 7.14, por exemplo, apresenta um resultado numérico para a densidade espectral no nível de Fermi para diferentes valores de dopagem. Na região *under-*

doped (dopagem inferior a 16%) é possível observar o *pseudo-gap* nas regiões anti-nodais e a presença dos arcos de Fermi, em concordância com resultados de ARPES (ver Figura 7.10); para dopagens maiores, o sistema se encontra em uma fase metálica líquido de Fermi e a superfície de Fermi é definida em toda a zona de Brillouin.

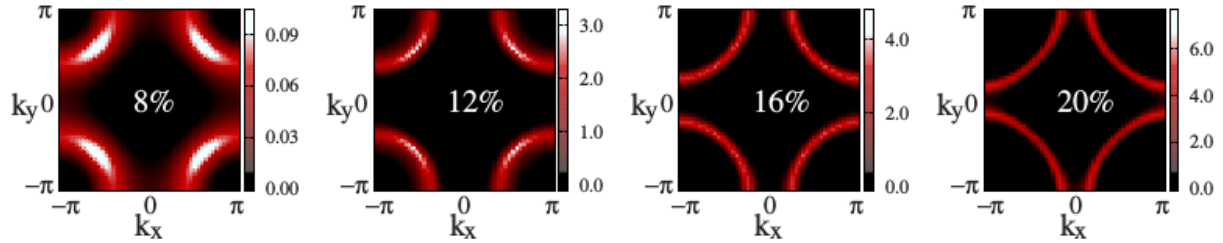


Figura 7.14: Mapa de intensidade da função espectral $A(\vec{k}, 0)$ para diferentes níveis de dopagem. Resultados obtidos por *cluster*-DMFT para o modelo de Hubbard atrativo bidimensional, retirados de [263].

Como não se sabe ao certo o mecanismo físico responsável pela supercondutividade, a descrição dessa fase não segue naturalmente de elementos fundamentais do Hamiltoniano; ainda assim, é possível incluir supercondutividade no modelo de Hubbard acrescentando “artificialmente” um termo de correlações de pares elétron-elétron com spins opostos, “emprestado” do tratamento de campo médio do Hamiltoniano BCS (descrito no Apêndice D), porém com simetria de onda-d. Mais detalhes sobre a inclusão da supercondutividade no modelo serão apresentados na seção 8.4. Resultados obtidos com extensões não-locais da DMFT confirmam que o modelo de Hubbard bidimensional suporta uma fase supercondutora [23–26].

7.3.4 Transição metal-isolante em sistemas bidimensionais

Conforme discutido na seção anterior, explorar modelos para cupratos é fundamental para entendermos os mecanismos físicos envolvidos no diagrama de fase desses materiais. Nesse contexto, é relevante, além de incluir dopagem, explorar a transição metal-isolante de Mott em redes quadradas, representativas dos planos de cobre e oxigênio em cupratos. Assim, na presente seção, apresentamos contradições encontradas na literatura a respeito da presença da transição no modelo de Hubbard bidimensional.

Sabe-se que, no caso de semi-preenchimento, o modelo de Hubbard bidimensional é um isolante antiferromagnético [264, 265] com temperatura de Néel $T_N = 0$ [266]. No caso teórico, é conveniente impor-se uma solução paramagnética na solução de campo médio. Dessa forma, é possível analisar separadamente as contribuições de antiferromagnetismo e de correlações eletrônicas no processo de localização das funções de onda. No contexto da solução paramagnética do modelo de Hubbard, uma questão relevante é se, para duas dimensões e

U pequeno, há um *gap* no sistema, como no caso unidimensional [178] e conforme sugerido por Anderson [267], ou se o sistema se torna um metal regular para $U < U_c$ (isto é, se ocorre uma transição isolante-metal de Mott), como no caso de dimensões maiores [247, 268].

Essa questão foi abordada por vários grupos por meio de métodos de *cluster*, mas ainda não foi completamente esclarecida. Nesses tratamentos, considera-se a solução paramagnética do modelo de Hubbard, mas correlações antiferromagnéticas provenientes de *superexchange* de Anderson⁵ são incluídas na extensão do *cluster*, via *hopping*. Enquanto alguns trabalhos indicam a existência da transição metal-isolante, outros grupos afirmam que o *gap* persiste até interações pequenas, de forma que o modelo bidimensional não suportaria uma transição de Mott.

Dentre os trabalhos que defendem a existência de uma transição metal-isolante para um valor finito de interação U_c , podemos citar as referências [259, 262], nas quais os autores observaram que a inclusão de correlações de curto alcance não locais deslocam a transição de Mott para valores menores de U , em comparação com o caso de *single-site* DMFT. Além disso, os resultados indicaram a presença de uma fase intermediária entre um metal líquido de Fermi e um isolante de Mott, identificada como um metal incoerente [259] ou como uma fase *pseudo-gap* [262].

Por outro lado, S. Moukouri e M. Jarrell [270] sugeriram que a inclusão de correlações antiferromagnéticas de longo alcance podem destruir o comportamento líquido de Fermi. Mais especificamente, eles realizaram um estudo do modelo de Hubbard bidimensional via DCA a temperatura finita e observaram que, à medida em que aumenta-se o tamanho do *cluster*, a probabilidade de dupla ocupação diminui e um *gap* se abre na densidade de estados local. Nesse caso, a largura do *gap* apresenta dois diferentes regimes: é linear com U para acoplamento forte e exponencial no limite de U pequeno. Mais recentemente, T. Schafer *et al.* [271] também observaram, por meio de uma descrição do modelo de Hubbard bidimensional via *dynamical vertex approximation* (método diagramático que acessa o limite termodinâmico), que a inclusão de flutuações antiferromagnéticas leva U_c a zero no regime de baixas temperaturas.

A contradição entre as afirmações a respeito da existência ou não da transição de Mott torna-se mais complicada porque a ausência de transição não foi observada apenas no contexto de *clusters* extensos, que incluem correlações antiferromagnéticas de longo alcance. Outros

⁵O fenômeno de *superexchange* descreve a interação magnética entre elétrons de dois íons magnéticos quando esses encontram-se separados por um íon não magnético, como a interação de spins entre elétrons de átomos de manganês separados por átomos de oxigênio em moléculas de Mn_2O , por exemplo. Esse comportamento foi explicado por P. W. Anderson em 1959 [269], por meio de um modelo de elétrons fortemente interagentes nos quais o *hopping* entre sítios vizinhos é descrito por teoria de perturbação. Em um sistema semi-preenchido com repulsão local forte (isolante de Mott), o *hopping* quebra a degenerescência de spin do sistema: devido ao princípio de exclusão de Pauli, “saltos virtuais” de elétrons são permitidos apenas quando sítios vizinhos são ocupados por elétrons de spins opostos. Isso gera uma interação de troca antiferromagnética efetiva, mediada pelo *hopping*.

trabalhos que consideram a solução paramagnética do modelo de Hubbard, com flutuações antiferromagnéticas de curto alcance, incluídas apenas na extensão do *cluster* (de 2 ou 4 sítios), também relataram a persistência de um *gap* mesmo para interações muito pequenas. Tudor D. Stanescu *et al.* [272], por exemplo, observaram, por meio de um estudo do modelo de Hubbard via CDMFT, que a fase *pseudo-gap* é obtida independentemente de ordenamento antiferromagnético de longo alcance, pois é encontrada mesmo quando impõe-se uma solução paramagnética para o modelo. Os autores afirmam que, no caso de semi-preenchimento e sem frustração (isto é, sem *hopping* entre segundos vizinhos), o modelo de Hubbard bidimensional apresenta um *pseudo-gap* mesmo para U muito pequeno, sugerindo a ausência de uma transição metal-isolante para U finito. Em outro trabalho, T. D. Stanescu e P. Phillips [273] chegaram a uma conclusão semelhante por meio de um método não perturbativo, sugerindo que o modelo de Hubbard bidimensional tem comportamento semelhante ao caso unidimensional. O. Parcollet *et al.* [258] também estudaram a solução paramagnética do modelo de Hubbard bidimensional via CDMFT (com solução do *cluster* via Monte Carlo Quântico) e só observaram a presença de transição metal-isolante no caso em que a frustração⁶ (produzida pela presença de *hopping* além de sítios primeiros vizinhos) é suficientemente grande.

No nosso trabalho, apresentado no Capítulo 9, estudamos o modelo de Hubbard bidimensional por uma extensão de *cluster* da DMFT e contribuímos para o esclarecimento a respeito dessas contradições.

⁶A presença de *hopping* t' entre segundos vizinhos, no *cluster* de 4 sítios apresentado na Figura 8.3, gera uma frustração geométrica do ordenamento antiferromagnético dentro do cluster.

Capítulo 8

Metodologia: Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular

O presente capítulo tem como objetivo apresentar uma breve descrição do método numérico utilizado para tratar sistemas fortemente interagentes, incluindo supercondutores de alta temperatura crítica, a Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular (CDMFT, *cellular dynamical mean field theory*). Para uma descrição mais detalhada, sugerimos a leitura da tese do professor Marcello Civelli [23], supervisor do estágio sanduíche¹ durante o qual desenvolvemos o trabalho descrito nesta parte da tese.

8.1 Ponto de partida: DMFT

Grande progresso na descrição de sistemas fortemente correlacionados foi obtido por meio da Teoria de Campo Médio Dinâmico (DMFT, *dynamical mean field theory*), proposta em 1992 por A. Georges e G. Kotliar [247]. Na teoria, um modelo de uma rede de elétrons interagentes é mapeado em um modelo de uma impureza envolvida por um banho de elétrons livres, determinado de forma auto-consistente.

A fim de apresentar a teoria, consideremos o modelo de Hubbard [já apresentado na equação (3.1)] em uma rede d -dimensional:

$$H_{hub} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (8.1)$$

sendo $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ operadores de criação e aniquilação de elétrons no sítio i , com spin σ , e $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ o operador número. t_{ij} representa a amplitude de *hopping* entre os sítios i e j , μ corresponde ao potencial químico, que controla a ocupação da rede, e U representa a interação

¹O estágio foi realizado em Orsay, França, no *Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud*, de setembro de 2016 a março de 2017, com recursos da FAPEMIG.

entre elétrons que ocupam o mesmo sítio. Esse modelo descreve a competição entre a energia cinética do sistema, representada pelo termo de *hopping*, e a energia de interação elétron-elétron, que desfavorece dupla ocupação e portanto tende a localizar o sistema. Apesar de sua relativa simplicidade, o modelo de Hubbard só apresenta solução exata no caso $d = 1$, via ansatz de Bethe [181]. Em casos de maiores dimensões recorremos à DMFT, que se torna exata no limite oposto, isto é, número de primeiros vizinhos na rede tendendo a infinito.

Na solução via DMFT, mapeamos a rede em um modelo de uma única impureza interagente, enquanto o efeito dos demais sítios é descrito por um banho efetivo de elétrons não interagentes. A vantagem do mapeamento é que há, na literatura, diversos métodos apropriados para tratar o problema de uma impureza, como Hartree-Fock, bósons escravos, Monte Carlo quântico, Grupo de Renormalização numérico, teoria de perturbação e diagonalização exata.

Ao contrário de um campo médio clássico, a DMFT descreve a dependência temporal do sistema, isto é, considera a troca de partículas entre a impureza e o banho. Os parâmetros do banho são determinados de forma iterativa por meio de equações auto-consistentes que relacionam a função de Green da impureza à função de Green local do modelo original. O mapeamento dinâmico do modelo da rede no problema de uma impureza pode ser visto na Figura 8.1.

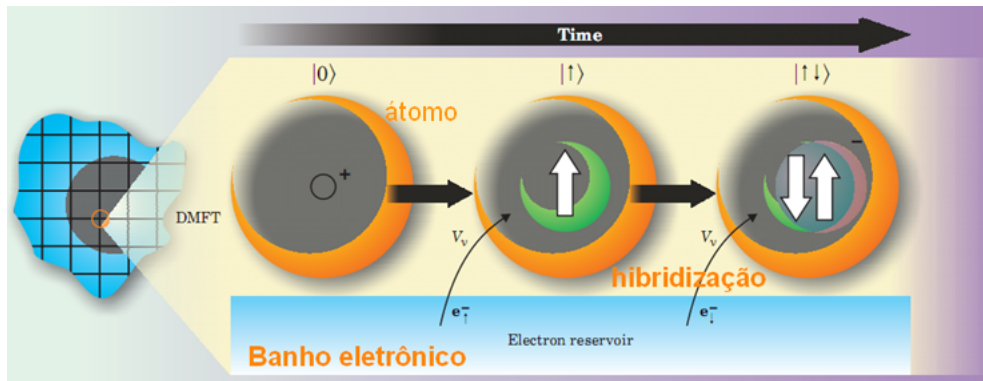


Figura 8.1: Mapeamento e evolução temporal da DMFT. Olhamos para um único sítio, que pode ser visto como um átomo ou uma impureza, enquanto os demais sítios formam um banho de elétrons livres que interage com o átomo, podendo ganhar ou ceder elétrons. A interação elétron-elétron está presente quando dois elétrons ocupam a impureza. Figura retirada de [274].

O problema de uma impureza pode ser descrito pelo modelo de Anderson

$$H_{AIM} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{i\sigma} V_i \left(a_{i\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + c_{\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} \right) + \epsilon_c \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow}, \quad (8.2)$$

sendo que os elétrons tipo c são localizados (elétrons no sítio da impureza) e os elétrons tipo

a são delocalizados (elétrons de condução). O primeiro termo corresponde à energia cinética dos elétrons de condução; o segundo representa a hibridização entre os dois tipos de estados, sendo V_i o potencial de hibridização; o terceiro representa a energia dos elétrons localizados e o último termo representa a interação Coulombiana local entre os elétrons tipo c .

Na análise do modelo de uma impureza, cuja solução será descrita na subseção 8.2.1, fornecemos um “chute” inicial para a função de Weiss

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n) = [i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(i\omega_n)]^{-1}, \quad (8.3)$$

sendo $\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}$ a “função banho” ($\tilde{\varepsilon}_l$ representa a transformada de Fourier da dispersão $\varepsilon_{\vec{k}}$ e $i\omega_n$ são frequências de Matsubara, definidas no eixo imaginário a partir de uma “temperatura efetiva” do sistema, conforme descrito mais adiante), e obtemos a função de Green interagente do problema auxiliar de uma impureza

$$G_{imp}(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}, \quad (8.4)$$

sendo $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ a auto-energia, proporcional à interação U .

Na DMFT, assumimos que a auto-energia da rede de Hubbard é local (tal aproximação torna-se exata no limite $d \rightarrow \infty$ [275]) e igual à auto-energia do problema auxiliar de uma impureza, isto é

$$\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) = \Sigma_{imp}(i\omega_n). \quad (8.5)$$

Assim, podemos calcular a função de Green local da rede,

$$G(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu + \varepsilon_0 - \varepsilon_{\vec{k}} - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}. \quad (8.6)$$

Igualando a função de Green local da rede de Hubbard à função de Green da impureza de Anderson, $G(i\omega) = G^{imp}(i\omega_n)$, podemos reobter o campo de Weiss por meio da equação de Dyson,

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = G^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_{imp}(i\omega_n). \quad (8.7)$$

Essa função pode ser usada como novo “chute” para calcular uma nova solução para o problema de uma impureza. Repetimos o processo até a convergência de $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$.

A DMFT descreve satisfatoriamente várias propriedades de sistemas fortemente correlacionados, como por exemplo a transição metal-isolante de Mott.² O mapeamento da DMFT mantém as flutuações dinâmicas, mas é um tratamento local, ou seja, não descreve flutuações espaciais. Fases como supercondutores de onda-d, presentes em cupratos, e transições metal-

²Mais detalhes a respeito da metodologia e de motivações experimentais podem ser encontrados na minha dissertação de mestrado [33].

isolante de alguns compostos, como o Ti_2O_3 [276], não são satisfatoriamente descritas por DMFT, pois nesses casos efeitos não locais são mais relevantes. É possível estender a DMFT para incluir correlações não locais, substituindo o mapeamento em um único sítio por um mapeamento em um *cluster* de N_c sítios com um dado arranjo espacial [252], como descrito na próxima seção.

8.2 Extensão não local: CDMFT

A extensão de *cluster* da DMFT pode ser formulada de diferentes maneiras, sendo que as principais são a Aproximação Dinâmica de *Cluster* (DCA, do inglês *dynamic cluster approximation*) [277] e a Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular (CDMFT, *cellular DMFT*) [278]. No primeiro método, o *cluster* é construído no espaço de momento, o que preserva a simetria translacional da rede original, porém produz maior dependência dos resultados com o tamanho do *cluster*. No segundo método, por outro lado, o *cluster* é definido no espaço real. Isso quebra a simetria translacional da rede, já que os sítios na extremidade do *cluster* possuem condições abertas de contorno, mas permite a avaliação de quantidades internas ao *cluster* sem a necessidade de uma média sobre momento, resultando em uma descrição satisfatória mesmo com *clusters* pequenos, com apenas 4 sítios, por exemplo [279]. Na CDMFT, a invariância translacional da rede original é recuperada apenas no final do cálculo, após a convergência, por meio de processos de periodização, conforme explicado mais adiante. As duas formulações citadas acima apresentam resultados semelhantes e possuem vantagens e desvantagens para diferentes regimes. Sugerimos as referências [280, 281] para uma discussão acerca da eficiência das diferentes extensões de *cluster* da DMFT. No presente trabalho utilizamos a CDMFT, cujos detalhes estão descritos a seguir.

A principal diferença entre DMFT e CDMFT é que, no segundo caso, a função de Weiss $\mathcal{G}_{0,ij\sigma}(i\omega_n)$ (i e j indicam coordenadas dentro do *cluster*) é uma matriz de dimensão $N_c \times N_c$, que inclui as relações entre os N_c sítios do *cluster*.

Ao mapearmos a rede em um *cluster* de impurezas, substituímos o modelo de Anderson de uma impureza [equação (8.2)] por um Hamiltoniano que descreve um conjunto de sítios interagentes embebidos em um banho não interagente

$$\begin{aligned}
 H_{AIM}^{cluster} &= \sum_{ij} \sum_{\sigma} E_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} + \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} \\
 &+ \sum_l \sum_{i\sigma} \left(V_{li\sigma} a_{l\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + V_{li\sigma}^* c_{i\sigma}^{\dagger} a_{l\sigma} \right). \tag{8.8}
 \end{aligned}$$

Acima, usamos a mesma notação da equação (8.2), isto é, $c_{i\sigma}^{\dagger}$ cria um elétron com spin σ

no sítio i do *cluster* interagente, enquanto o operador $a_{l\sigma}^\dagger$ cria um elétron com mesmo spin, no sítio l do banho. A matriz $E_{ij\sigma}$ contém os parâmetros de *hopping* e potencial químico do modelo original (no caso do modelo de Hubbard com *hopping* entre primeiros vizinhos, $E_{ij\sigma}$ possui o potencial químico na diagonal e $-t$ para $|i - j| = 1$). A dispersão do banho, $\varepsilon_{\vec{k}\sigma}$, e a hibridização entre *cluster* e banho, $V_{i\sigma}$, são determinados de forma auto-consistente. Uma representação esquemática do mapeamento da rede original em um *cluster* de impurezas embebido em um banho determinado de forma auto-consistente pode ser vista na Figura 8.2.

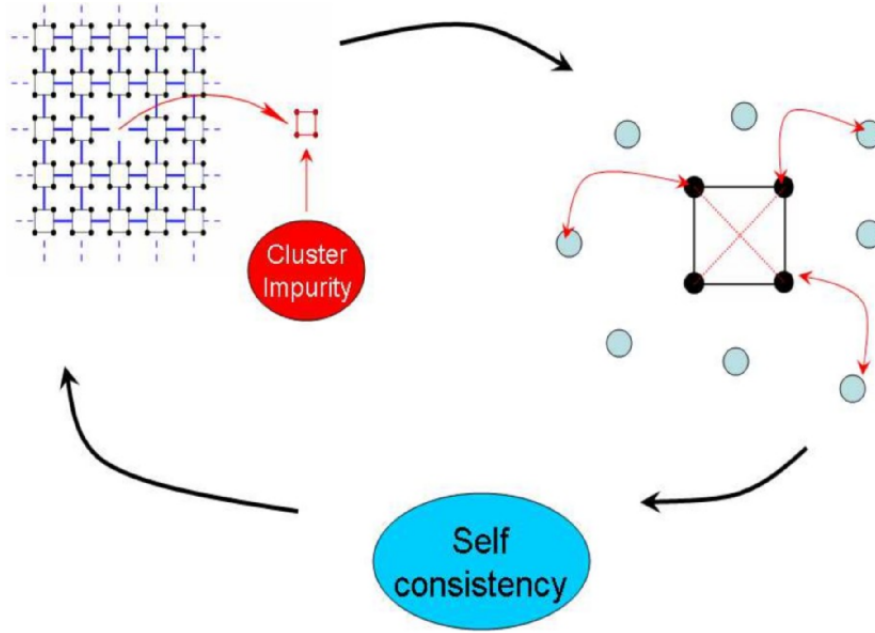


Figura 8.2: Mapeamento entre a rede original e um *cluster* de impurezas interagentes, realizado em CDMFT. No modelo auxiliar, o *cluster* é embebido por um banho de elétrons interagentes determinado por um processo auto-consistente. Figura retirada de [23].

A função de Green e a auto-energia do *cluster* são agora representadas por matrizes $N_c \times N_c$. No mapeamento entre a rede e o *cluster*, usamos a mesma ideia de DMFT, mas consideramos uma “super-rede”, na qual cada “sítio” é dado por uma estrutura com a geometria do *cluster* considerado. Para encontrarmos a solução, “chutamos” um valor inicial para $\mathcal{G}_{0,ji\sigma}^{-1}(i\omega_n)$ e resolvemos o problema do *cluster* de impurezas, obtendo $\hat{\Sigma}(i\omega_n)$, como será descrito adiante. Em seguida, assumimos novamente que a auto-energia da rede é “local”, isto é, restrita ao *cluster* (dessa forma levamos em conta interações de curto alcance, dentro da extensão do *cluster*). A função de Green “local” da rede é obtida por meio de um somatório sobre a zona de Brillouin reduzida (ZBR) pela partição da rede original em *clusters* de N_c sítios

$$\hat{G}_{loc}(i\omega_n) = \sum_{\vec{K}} \hat{G}(\vec{K}, i\omega_n) = \int_{ZBR} \frac{1}{(i\omega_n + \mu) \mathbb{1} - \hat{t}_K - \hat{\Sigma}(i\omega_n)} \frac{dK^d}{(2\pi)^d / N_c}, \quad (8.9)$$

sendo que \vec{K} descreve o vetor momento no espaço recíproco da “super-rede”. As entradas da matriz $\hat{t}_{\vec{K}}$, $t_{ij}(\vec{K}) = \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} + \vec{K}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \epsilon_{\vec{k} + \vec{K}}$, são funções da dispersão ϵ_k da rede quadrada.

A relação de auto-consistência é fechada considerando-se que a função de Green “local” da rede é igual à função de Green obtida para o *cluster*; assim calculamos uma nova função de Weiss pela relação

$$\mathcal{G}_{0,ji\sigma}^{-1}(i\omega_n) = G_{loc,ij\sigma}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_{ij}(i\omega_n). \quad (8.10)$$

A função $\mathcal{G}_{0,ji\sigma}^{-1}(i\omega_n)$ é usada como nova entrada para o problema do *cluster* de impurezas. Repetimos o procedimento até a convergência.

8.2.1 Processo iterativo da DMFT com a solução do *cluster* de impurezas via diagonalização exata

O modelo de Anderson de uma impureza foi originalmente introduzido para descrever momentos magnéticos locais gerados por impurezas magnéticas em metais não magnéticos [37]; desde então foi extensivamente estudado na literatura. Alguns métodos utilizados para resolver esse problema são diagonalização exata, grupo de renormalização numérico, Hartree-Fock, Monte Carlo quântico e teoria de perturbação.

Neste trabalho resolvemos o *cluster* de impurezas de Anderson, descrito pela equação (8.8), por diagonalização exata (DE). Dentre as vantagens desse método, podemos citar a precisão na determinação das propriedades do estado fundamental, a facilidade de acesso a quantidades tanto no eixo real quanto no eixo imaginário (continuação analítica trivial) e a possibilidade de solução do sistema para qualquer regime de interação U (o limite de U grande, por exemplo, não é bem descrito por Monte Carlo quântico). A desvantagem do método, no entanto, é a limitação do tamanho do *cluster* que pode ser descrito. Além disso, a maior simplificação da descrição do Hamiltoniano 8.8 via diagonalização exata é que o banho é truncado em um número finito de orbitais. Na prática, diagonalizamos um sistema finito de $N_s = N_c + N_b$ sítios, sendo N_b o número de sítios no banho. A truncagem do modelo efetivo de Anderson é uma limitação da solução via diagonalização exata e não implica na truncagem do modelo original da rede, que permanece no limite termodinâmico.

Em geral, ao longo deste trabalho utilizamos $N_c = 4$ (a Fig. 8.3 representa um esboço do *cluster* utilizado no presente trabalho) e $N_b = 8$. Esse tamanho de *cluster* é a escolha mínima capaz de descrever a geometria de supercondutores de onda-d. A escolha de N_b como um múltiplo inteiro de N_c é conveniente para uma parametrização do banho mais eficiente, conforme descrito mais adiante. O sistema efetivo de $N_s = 12$ sítios é diagonalizado usando o algoritmo de Lanczos (ver Apêndice E). O processo auto-consistente de DE-CDMFT é realizado conforme descrito a seguir.

1. Inicialmente, partimos de um chute inicial dos parâmetros ε_l e $V_{li\sigma}$ utilizados para

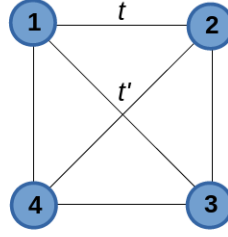


Figura 8.3: Esboço do *cluster* de $N_c = 4$ sítios utilizado neste trabalho. Os números indicam os índices dos sítios; t e t' correspondem às amplitudes de *hopping* entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

definir a função de Weiss

$$\mathcal{G}_0^{N_b}(i\omega_n) = [i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \sum_l^{N_b} \frac{|V_{li\sigma}|^2}{i\omega_n - \varepsilon_l}]^{-1} \quad (8.11)$$

que a impureza vê. Note que, na solução do problema do *cluster* via DE, a função de Weiss é “simplificada”, pois a função banho é projetada em um número finito de sítios, N_b .

2. Dado o chute inicial para o banho, obtemos o estado fundamental $|gs\rangle$ do Hamiltoniano efetivo de Anderson via Lanczos (método descrito no Apêndice E). O procedimento torna-se mais eficiente quando exploramos a simetria do sistema. O espaço de Hilbert do Hamiltoniano é dado pelo conjunto de estados $|n_1^\uparrow, \dots, n_{N_s}^\uparrow\rangle |n_1^\downarrow, \dots, n_{N_s}^\downarrow\rangle$, sendo $n_i^\sigma = 0, 1$. Na prática, escrevemos o Hamiltoniano na forma de uma matriz bloco diagonal e diagonalizamos separadamente cada setor $(n^\uparrow, n^\downarrow)$, onde $n^\sigma = \sum_i n_i^\sigma$.
3. Para o cálculo da função de Green do estado fundamental, utilizamos o processo de diagonalização via Lanczos uma segunda vez, empregando $c^\dagger|gs\rangle$ como estado inicial, sendo $|gs\rangle$ o estado fundamental do Hamiltoniano [estado de menor energia entre todos os setores $(n^\uparrow, n^\downarrow)$]. A função de Green é calculada a partir de uma expansão das excitações de partícula ($G^>$) e de buraco ($G^<$)

$$G(\omega) = G^>(\omega) + G^<(\omega), \quad (8.12)$$

sendo

$$G^>(\omega) = \frac{\langle gs|cc^\dagger|gs\rangle}{\omega - a_0^> - \frac{b_1^>}{\omega - a_1^> - \frac{b_2^>}{\omega - a_2^> - \dots}}} \quad (8.13)$$

e

$$G^<(\omega) = \frac{\langle gs|c^\dagger c|gs\rangle}{\omega - a_0^< - \frac{b_1^<}{\omega - a_1^< - \frac{b_2^<}{\omega - a_2^< - \dots}}}. \quad (8.14)$$

Os parâmetros a_i^α e b_i^α , $\alpha = >, <$, estão definidos no Apêndice E.

4. De posse da função de Green do *cluster*, podemos obter a função de Green “local” do problema original da rede (limite termodinâmico), por meio da equação (8.9), e encontrar então uma nova função de Weiss, $\mathcal{G}_0^{nova}(\omega_n)$, pela equação (8.10). A função de Weiss obtida neste passo é, no entanto, referente a uma rede calculada no limite termodinâmico e não pode ser diretamente aplicada ao problema auxiliar de uma impureza. É preciso projetá-la novamente no subespaço de N_b sítios. Este é o passo mais complicado da implementação do cálculo iterativo CDMFT com solução do problema de uma impureza via DE. Essa projeção é realizada definindo-se a função distância

$$f = \sum_n \frac{1}{\omega_n} |\mathcal{G}_0^{N_b}(i\omega_n)^{-1} - \mathcal{G}_0^{nova}{}^{-1}(i\omega_n)| \quad (8.15)$$

e procurando os novos valores de ε_l e $V_{li\sigma}$ que a minimizam [note que a função $\mathcal{G}_0^{N_b}(i\omega_n)$ depende de ε_l e $V_{li\sigma}$ através da equação (8.11)]. Há mais de uma escolha possível para a definição da distância entre as funções de Weiss. A escolha apresentada acima, usada ao longo deste trabalho, favorece a descrição de baixas energias [23].

5. Retornamos ao item 2 e repetimos o procedimento até a convergência de $\mathcal{G}_0^{nova}(i\omega_n)$.

Acrescentamos que a análise da função distância para a determinação dos novos parâmetros do banho ao longo do cálculo iterativo auto-consistente é feita no eixo imaginário, pois a função de Weiss é mais suave nesse caso. Para isso, introduzimos uma temperatura efetiva $T_{eff} = 1/\beta$ para a definição das frequências de Matsubara, $\omega_n = (2n - 1)\pi/\beta$; essa temperatura define uma frequência mínima para o sistema, mas não deve ser interpretada como uma temperatura física real; o cálculo é feito a $T = 0$.

Conforme comentado acima, a determinação dos novos parâmetros do banho é o ponto mais delicado do cálculo iterativo auto-consistente. É importante encontrar uma boa combinação entre convergência CDMFT e um valor pequeno para a função distância. Há o risco, por exemplo, de ficarmos presos em um mínimo local da função f que satisfaz com alguma precisão as equações da CDMFT, mas não tem significado físico.

A fim de conduzir a solução para parâmetros do banho com significado físico, introduzimos uma parametrização reduzida que explora as simetrias da rede quadrada. Além disso, reduzindo o número de parâmetros livres no banho, otimizamos a rotina de minimização da função distância, produzindo resultados mais rápidos e mais fáceis de serem interpretados. Essa parametrização alternativa é discutida em detalhes a seguir.

8.2.2 Parametrização reduzida do banho

A princípio, na descrição do problema auxiliar de uma impureza (Hamiltoniano 8.8), o banho é considerado através da expressão

$$\sum_l^{N_b} \sum_\sigma \epsilon_{l\sigma} a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} + \sum_l^{N_b} \sum_{i\sigma}^{N_c} (V_{li\sigma} a_{l\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + V_{li\sigma}^* c_{i\sigma}^\dagger a_{l\sigma}), \quad (8.16)$$

na qual cada sítio do *cluster* ($i = 1, \dots, N_c$) pode hibridizar, com diferentes amplitudes $V_{li\sigma}$, com todos os sítios do banho, $l = 1, \dots, N_b$, que apresentam diferentes energias ϵ_l . Assim, temos $2 * N_c * N_b$ parâmetros livres $V_{li\sigma}$ de hibridização e $2 * N_b$ energias locais nos sítios do banho (a multiplicação por 2 se deve aos graus de liberdade de spin e pode ser suprimida no caso de cálculos na fase paramagnética). No caso de $N_c = 4$ e $N_b = 8$, por exemplo, temos que minimizar a distância entre funções de Weiss utilizando 80 parâmetros livres.

Alternativamente, podemos considerar uma parametrização diferente, na qual dividimos os sítios do banho em conjuntos com a mesma geometria do *cluster*. Para o caso de $N_b = 8$ temos $M_b = N_b/N_c = 2$ sub-banhos. Considerando simetria de translação dentro de cada sub-banho, impomos a mesma energia ϵ_α para todos os sítios, sendo que o índice $\alpha = 1, \dots, M_b$ indica o sub-banho. Além disso, consideramos que um elétron em um sítio do *cluster* hibridiza apenas com o sítio correspondente em cada sub-banho, com uma amplitude que não depende do sítio, mas apenas de α , isto é, $V_{li\sigma} = \delta_{l,i} V_{\alpha\sigma}$. Além disso, permitimos o *hopping* entre sítios primeiros e segundos vizinhos dentro dos sub-banhos, com amplitudes t_α e t'_α . Nessa parametrização alternativa, temos apenas $2 * 4 * M_b$ parâmetros livres (16 parâmetros, no caso $N_c = 4$, $N_b = 8$). Uma representação esquemática de ambas as parametrizações pode ser vista na Figura 8.4

Na prática, temos o banho descrito por

$$\sum_{\alpha=1}^{M_b} \sum_\sigma (\phi_{\alpha\sigma}^\dagger \hat{E}_{\alpha\sigma} \phi_{\alpha\sigma} + \phi_{\alpha\sigma}^\dagger \hat{V}_{\alpha\sigma} \psi_\sigma + \psi_\sigma^\dagger \hat{V}_{\alpha\sigma}^\dagger \phi_{\alpha\sigma}), \quad (8.17)$$

sendo que introduzimos notações de spinor para o *cluster*

$$\psi_\sigma = (c_{1\sigma}, \dots, c_{N_c\sigma}) \quad (8.18)$$

e para cada sub-banho α

$$\phi_{\alpha\sigma} = (a_{1\sigma}^\alpha, \dots, a_{N_c\sigma}^\alpha). \quad (8.19)$$

No caso mais geral, com parametrização livre, as matrizes \hat{E} e \hat{V} apresentam as formas

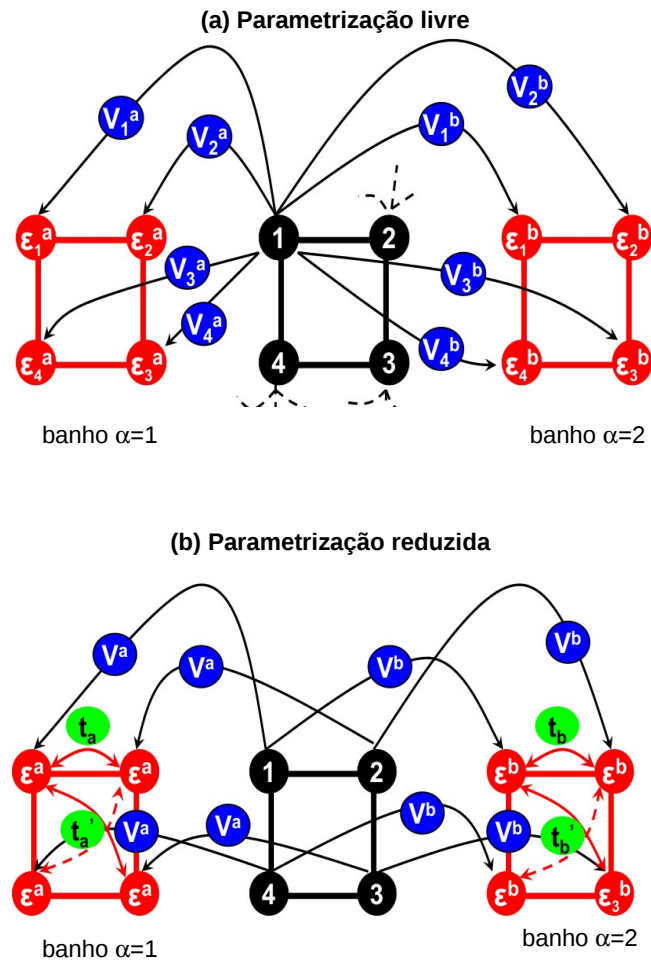


Figura 8.4: (a) Parametrização livre e (b) parametrização alternativa para o banho que envolve o *cluster* de impurezas no cálculo CDMFT. Em ambos os casos, o conjunto de sítios do meio (em preto) corresponde ao *cluster* interagente, enquanto os conjuntos da esquerda e direita (em vermelho) representam os sítios do banho, sem repulsão eletrônica local. Os índices $\alpha = a$ e b indicam os dois diferentes sub-banhos. Figura retirada de [23].

$$\hat{E}_{\alpha\sigma} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1\sigma}^\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{2\sigma}^\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{3\sigma}^\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{4\sigma}^\alpha \end{pmatrix} \quad (8.20)$$

e

$$\hat{V}_{\alpha\sigma} = \begin{pmatrix} V_{11\sigma}^\alpha & V_{12\sigma}^\alpha & V_{13\sigma}^\alpha & V_{14\sigma}^\alpha \\ V_{21\sigma}^\alpha & V_{22\sigma}^\alpha & V_{23\sigma}^\alpha & V_{24\sigma}^\alpha \\ V_{31\sigma}^\alpha & V_{32\sigma}^\alpha & V_{33\sigma}^\alpha & V_{34\sigma}^\alpha \\ V_{41\sigma}^\alpha & V_{42\sigma}^\alpha & V_{43\sigma}^\alpha & V_{44\sigma}^\alpha \end{pmatrix}, \quad (8.21)$$

enquanto que na parametrização alternativa temos

$$\hat{E}'_{\alpha\sigma} = \begin{pmatrix} \varepsilon_\sigma^\alpha & t_\sigma^\alpha & t_\sigma'^\alpha & t_\sigma^\alpha \\ t_\sigma^\alpha & \varepsilon_\sigma^\alpha & t_\sigma^\alpha & t_\sigma'^\alpha \\ t_\sigma'^\alpha & t_\sigma^\alpha & \varepsilon_\sigma^\alpha & t_\sigma^\alpha \\ t_\sigma^\alpha & t_\sigma'^\alpha & t_\sigma^\alpha & \varepsilon_\sigma^\alpha \end{pmatrix} \quad (8.22)$$

e

$$\hat{V}'_{\alpha\sigma} = \begin{pmatrix} V_\sigma^\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_\sigma^\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_\sigma^\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_\sigma^\alpha \end{pmatrix}. \quad (8.23)$$

É importante notar que a função banho,

$$\Delta(i\omega) = V^T (i\omega \mathbb{1} - E)^{-1} V, \quad (8.24)$$

deve se manter invariante, independentemente da escolha de parametrização. Para passarmos da parametrização livre para a parametrização alternativa, devemos procurar a transformação S ($SS^T = \mathbb{1}$) que diagonaliza $E'_{\alpha\sigma}$, isto é, $E_{\alpha\sigma} = SE'_{\alpha\sigma}S^T$ e $V_{\alpha,\sigma} = S^T V'_{\alpha\sigma}$.

8.3 Saídas do cálculo CDMFT

8.3.1 Quantidades “locais”

Após a convergência do cálculo numérico, obtemos quantidades “locais” do problema original, isto é, restritas a “sítios” da “super-rede” com a geometria do *cluster*, conforme discutido no início da seção 8.2. No caso de um *cluster* de $N_c = 4$ sítios (Fig. 8.3), obtemos três

auto-energias: a auto-energia local, $\Sigma_{11}(\omega)$; a auto-energia entre primeiros vizinhos, $\Sigma_{12}(\omega)$, e a auto-energia entre segundos vizinhos, $\Sigma_{13}(\omega)$. Alternativamente, podemos considerar a auto-energia em três pontos de momento no primeiro quadrante da zona de Brillouin

$$\begin{aligned}\Sigma_A &= \Sigma_{11} - \Sigma_{13}, \\ \Sigma_B &= \Sigma_{11} - 2\Sigma_{12} + \Sigma_{13}, \\ \Sigma_C &= \Sigma_{11} + \Sigma_{13} + \Sigma_{13},\end{aligned}\tag{8.25}$$

sendo que A corresponde aos pontos $\vec{k} = (0, \pi)$ e $\vec{k} = (\pi, 0)$ (pontos anti-nodais); B corresponde a $\vec{k} = (\pi, \pi)$ e C a $\vec{k} = (0, 0)$ no espaço de momento (conforme apresentado na Fig. F.1, no Apêndice F). Essas funções correspondem aos auto-valores da matriz auto-energia do *cluster* Σ_{ij} ; nessa representação, Σ respeita causalidade, isto é, a parte imaginária da auto-energia é sempre negativa. Em geral, as estruturas mais relevantes em baixas energias encontram-se em torno dos pontos anti-nodais $\vec{k} = (0, \pi)$ e $\vec{k} = (\pi, 0)$; é nesse ponto que encontramos, na fase supercondutora, uma auto-energia anômala não nula, devido à simetria de onda-d, conforme discutido mais adiante.

Observáveis no eixo real podem ser calculados a partir de quantidades no eixo imaginário por meio de uma continuação analítica, na qual substituímos $i\omega_n$ por $\omega + i\eta$. Testes sistemáticos revelam que os resultados qualitativos não dependem de η , desde que esse seja suficientemente pequeno. Nos resultados apresentados no Capítulo 9 utilizamos $\eta = 0.05$.

8.3.2 Reconstrução de quantidades da rede

Conforme discutido acima, quantidades “locais” (restritas ao *cluster*) fornecem resultados para três pontos de alta-simetria no espaço de momento [$\vec{k} = (0, \pi)$, $\vec{k} = (\pi, \pi)$ e $\vec{k} = (0, 0)$]. É interessante, no entanto, recuperarmos a dependência dos observáveis com o momento, \vec{k} , em toda a zona de Brillouin. Para isso, realizamos uma expansão de Fourier das quantidades “locais”, isto é,

$$Q^R(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{N_c} \sum_{i,j=1}^{N_c} Q_{ij}^c(i\omega_n) \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)],\tag{8.26}$$

sendo que os índices R e c indicam quantidades da rede como um todo e quantidades “locais”, respectivamente, e \vec{r}_i e \vec{r}_j são coordenadas espaciais internas ao “super-sítio” com a geometria do *cluster*. Diferentes esquemas de periodização, correspondentes a diferentes escolhas da quantidade Q , foram propostos, tais como a auto-energia, Σ [24], o cumulante, $M = [i\omega_n + \mu - \Sigma]^{-1}$ [272, 282], e a função de Green, G [25, 283]. Comparações entre resultados obtidos por meio desses diferentes esquemas de periodização podem ser encontradas na

referência [23]; sabe-se que a escolha $Q = M$ produz melhores resultados nas proximidades da transição de Mott, além de apresentar menor dependência com o tamanho do *cluster* [279]; essa é a periodização que usamos neste trabalho.

No caso $Q = M$ (periodização do cumulante), a função de Green e a auto-energia da rede podem ser obtidas por meio das expressões abaixo

$$G^R(\vec{k}, i\omega_n) = \left[M^R(\vec{k}, i\omega_n)^{-1} - \varepsilon(\vec{k}) \right]^{-1} \quad (8.27)$$

e

$$\Sigma^R(\vec{k}, i\omega_n) = i\omega_n + \mu - M^R(\vec{k}, i\omega_n)^{-1}. \quad (8.28)$$

Esse foi o processo realizado para a obtenção dos resultados apresentados na Figura 9.8, por exemplo.

8.3.3 Energia

Algumas vezes é conveniente calcular, além de quantidades dependentes da frequência e do momento, a energia do estado fundamental. A energia da rede deve ser obtida a partir da função de Green do modelo original, calculada pelo método de periodização descrito anteriormente.

Para o modelo de Hubbard, a energia total $E = K + D U$ do sistema é dada pela soma da energia potencial de interação elétron-elétron, $D U$, sendo $D = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ a probabilidade de dupla ocupação ao longo da rede de L sítios, e da energia cinética do sistema, [284]

$$K = \frac{1}{N_k \beta} \sum_{\sigma, \vec{k}, n} \xi_{\vec{k}} G(\vec{k}, i\omega_n), \quad (8.29)$$

sendo $\xi_{\vec{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu$ a dispersão eletrônica da rede quadrada com *hopping* entre primeiros (t) e segundos vizinhos (t'), N_k o número de pontos no espaço de momento e β o inverso da temperatura efetiva (usada para definir o *grid* de Masturbara na implementação DE-CDMFT). No caso de uma solução paramagnética, a soma em spin corresponde a um fator 2. A soma em frequências de Matsubara, por outro lado, é mais complicada e deve ser feita cuidadosamente, a fim de considerar corretamente a “cauda” da função de Green para grandes frequências [285].

8.4 Incluindo supercondutividade

Nas seções anteriores, descrevemos o estudo da fase normal do Hamiltoniano de Hubbard. Algumas modificações são necessárias para a descrição da fase supercondutora.

Conforme descrito no Apêndice D, em supercondutores convencionais, descritos pela teoria BCS, há a formação de pares de elétrons, que permanecem ligados devido às interações com fônons da rede. A fase supercondutora em materiais fortemente correlacionados apresenta propriedades diferentes daquelas previstas pela teoria BCS. Também ocorre a formação de pares nesses materiais, conforme revisado no Capítulo 7, porém a “cola” que mantém os elétrons ligados não é relacionada a vibrações da rede cristalina.

Como o mecanismo responsável pela supercondutividade em sistemas fortemente correlacionados é ainda uma questão em aberto, os pares não surgem naturalmente de elementos fundamentais incluídos no modelo, mas são acrescentados “artificialmente”. Na extensão de CDMFT para a descrição de estados supercondutores, incluímos correlações de pares no banho e analisamos se elas geram correlações supercondutoras no *cluster*, e consequentemente no modelo original da rede, ao longo das iterações do cálculo auto-consistente. Na prática, o modelo de Hubbard é mapeado em um *cluster* interagente acoplado a um banho contendo correlações supercondutoras. Tais correlações podem ser escritas na forma de pares partícula-partícula ou buraco-buraco “emprestadas” do Hamiltoniano de campo médio BCS [equação (D.15)]. Assim, o Hamiltoniano auxiliar para o caso supercondutor tem a forma [286]

$$\begin{aligned}
H_{imp} = & \sum_{ij\sigma} E_{ij\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{m\sigma\alpha} \epsilon_{m\sigma}^\alpha a_{m\sigma}^\dagger a_{m\sigma}^\alpha \\
& + \sum_{mi\sigma} V_{mi\sigma}^\alpha (a_{m\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + h.c.) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \\
& + \sum_{\alpha} \Delta^\alpha (a_{1\uparrow}^\alpha a_{2\downarrow}^\alpha - a_{2\uparrow}^\alpha a_{3\downarrow}^\alpha + a_{3\uparrow}^\alpha a_{4\downarrow}^\alpha - a_{4\uparrow}^\alpha a_{1\downarrow}^\alpha \\
& + a_{2\uparrow}^\alpha a_{1\downarrow}^\alpha - a_{3\uparrow}^\alpha a_{2\downarrow}^\alpha + a_{4\uparrow}^\alpha a_{3\downarrow}^\alpha - a_{1\uparrow}^\alpha a_{4\downarrow}^\alpha + h.c.). \tag{8.30}
\end{aligned}$$

Note a semelhança entre o Hamiltoniano acima e aquele apresentado na equação (8.8). No caso acima, utilizamos a representação do banho em sub-redes com a mesma geometria do *cluster*, conforme descrito na subseção 8.2.2. A principal diferença com relação ao Hamiltoniano 8.8 é a inclusão de correlações supercondutoras em cada sub-banho, com amplitude Δ^α e geometria de onda-d. Tais correlações são do tipo singleto entre sítios primeiros vizinhos, $\psi_{ij} = \langle a_{i\uparrow} a_{j\downarrow} \rangle$, e obedecem à relação $\psi = \psi_{12} = -\psi_{23} = \psi_{34} = -\psi_{41}$ (com os índices nos sub-banhos organizados como na Figura 8.3). Além disso, consideramos que correlações desse tipo no mesmo sítio e em sítios segundos vizinhos são nulas. Dessa forma, a transformada de Fourier das correlações, $\phi_k = 2\psi(\cos k_x - \cos k_y)$, apresenta simetria de onda *d*.³ Nesse caso,

³A nomenclatura “supercondutores do tipo *s*” (maioria dos supercondutores tradicionais) e “supercondutores do tipo *d*” (cupratos, por exemplo) se deve ao momento angular orbital da função de onda que descreve os compostos; no primeiro caso temos $l = 0$, enquanto no segundo caso temos $l = 2$. Em geral, os

além de ϵ^α e V^α , também devemos determinar Δ^α de forma auto-consistente.

Conforme mencionado acima, a presença de correlações supercondutoras no banho é adicionada “artificialmente” e analisamos se elas são capazes de gerar correlações no *cluster* ao longo do processo iterativo. Nesse processo, calculamos não apenas a parte normal da função de Green do *cluster*, mas também a parte anômala, que é nula no estado normal. Para isso, é conveniente introduzirmos uma notação de Nambu-spinor:

$$\Psi^\dagger = (c_{1\uparrow}^\dagger, \dots, c_{N_c\uparrow}^\dagger, c_{1\downarrow}, \dots, c_{N_c\downarrow}). \quad (8.31)$$

Com essa notação, a função de Weiss $\hat{\mathcal{G}}_0$ é uma matriz de dimensão $2N_c \times 2N_c$ que contém ambas as partes normal (partícula-buraco) e anômala (partícula-partícula). Fisicamente, isso corresponde ao *cluster* embebido em um banho com correlações supercondutoras. Dado um chute inicial para $\hat{\mathcal{G}}_0$, calculamos a função de Green do *cluster*, \hat{G}_c , também uma matriz $2N_c \times 2N_c$,

$$\hat{G}_c(\tau, \tau') = \begin{pmatrix} \hat{G}_\uparrow(\tau, \tau') & \hat{F}(\tau, \tau') \\ \hat{F}^\dagger(\tau, \tau') & -\hat{G}_\downarrow(\tau, \tau') \end{pmatrix}, \quad (8.32)$$

sendo $\hat{G}_\sigma(\tau, \tau')$ e $\hat{F}(\tau, \tau')$ matrizes de dimensão $N_c \times N_c$ e elementos $G_{ij,\sigma} = \langle -Tc_{i\sigma}(\tau)c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$ e $F_{ij} = \langle -Tc_{i\uparrow}(\tau)c_{j\downarrow}(\tau') \rangle$, correspondentes às partes normal e anômala da função de Green, respectivamente. O cálculo iterativo CDMFT é construído então da mesma forma que no caso normal, isto é, computamos a auto-energia do *cluster*

$$\hat{\Sigma}_c = \hat{\mathcal{G}}_0^{-1} - \hat{G}_c^{-1} \quad (8.33)$$

e a utilizamos para determinar a função de Green da “super-rede”

$$\hat{G}(\vec{K}, i\omega_n) = \left[i\omega_n + i - \hat{t}(\vec{K}) - \hat{\Sigma}(i\omega_n) \right]^{-1}. \quad (8.34)$$

Em seguida somamos sobre a zona de Brillouin renormalizada da “super-rede” para obtermos a função de Green “local” $\hat{G}_{loc} = \sum_{\vec{K}} \hat{G}(\vec{K}, i\omega_n)$, a partir da qual obtemos uma nova função de Weiss

$$\hat{\mathcal{G}}_0^{nova}(i\omega_n)^{-1} = \hat{G}_{loc}^{-1}(i\omega_n)^{-1} + \hat{\Sigma}_c(i\omega_n). \quad (8.35)$$

Repetimos o procedimento até a convergência.

Para a descrição do estado supercondutor, utilizamos como entrada a solução convergida para o estado normal, porém incluímos correlações de pares, acrescentando um pequeno valor

pares, responsáveis pela supercondutividade, se organizam na forma de um singleto; assim, devemos ter l par a fim de garantir a antissimetria da função de onda total. Enquanto supercondutores de onda s têm simetria esférica e apresentam *gap* isotrópico, os supercondutores de onda d têm simetria do tipo $d_{x^2-y^2}$ e *gap* anisotrópico, nulo em quatro linhas nodais diagonais na primeira zona de Brillouin [220].

de Δ^α nos parâmetros que descrevem o “chute” inicial do banho. Sabe-se que, para certas regiões de parâmetros, a inclusão de correlações de pares no banho gera, ao longo do ciclo auto-consistente, funções de Green anômalas não-nulas no *cluster* [23, 25]. Isso significa que a solução CDMFT do modelo de Hubbard bidimensional suporta um estado supercondutor de onda- d .

Após a convergência, podemos extrair quantidades dependentes do momento por meio de um processo de periodização semelhante ao descrito na seção 8.3.2. Quantidades internas ao “super-sítio”, no entanto, já fornecem informações importantes sobre o estado supercondutor. Podemos calcular diretamente, por exemplo, o parâmetro de ordem supercondutor, $\Phi = F_{i,i+1}(\tau = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F_{12}(\omega)$, que quantifica a correlação de pares.

Outro resultado importante é a parte anômala da auto-energia. No estado normal, ela é sempre igual a zero; no estado supercondutor, por outro lado, a parte real da auto-energia anômala entre primeiros vizinhos, calculada no eixo de Matsubara, é consideravelmente diferente de zero e apresenta uma alternância de sinal característica de onda- d ao longo dos pares de sítios do *cluster*. O parâmetro de ordem Φ pode ser comparado com a parte anômala da auto-energia entre primeiros vizinhos Σ_{12}^{ano} , o que permite quantificar o comportamento não-BCS do supercondutor: quando a teoria BCS se aplica, temos $\Sigma_{12}^{ano}(\omega = 0) \sim g\Phi$, sendo g um parâmetro que descreve a força da interação de pares [287].

Capítulo 9

Resultados: Estado normal do modelo de Hubbard bidimensional¹

Nos dois capítulos anteriores, apresentamos uma breve revisão da literatura a respeito de supercondutividade e descrevemos o método numérico utilizado para tratar materiais supercondutores fortemente interagentes. O presente capítulo é dedicado aos nossos resultados.

Em supercondutores não convencionais, não é apenas a emergência da fase supercondutora que tem intrigado os físicos teóricos e experimentais nas últimas décadas, mas sim todo o diagrama de fase desses materiais. Para entendermos a supercondutividade, é preciso entendermos também a fase normal, que existe para $T > T_c$. No caso de cupratos, a fase *pseudo-gap* (ver o diagrama de fase da Figura 7.5) apresenta tantos ou mais desafios do que a própria fase supercondutora.

A fim de contribuir para a compreensão de supercondutores não convencionais, realizamos um estudo do modelo de Hubbard bidimensional via CDMFT. A metodologia foi descrita no capítulo anterior e o Hamiltoniano em questão é dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (9.1)$$

Acima, usamos a notação padrão de segunda quantização na qual $c_{\vec{k}\sigma} = (1/\sqrt{L}) \sum_i \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) c_{i,\sigma}$ destrói um elétron com spin σ e momento \vec{k} e $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador densidade no sítio i de uma rede quadrada de L sítios. A dispersão eletrônica é dada por $\xi_{\vec{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu$, sendo t (t') o *hopping* entre sítios primeiros (segundos) vizinhos e μ o potencial químico, que controla o nível de dopagem $p = 1 - (1/L) \sum_{i,\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle$. Ao longo

¹O trabalho apresentado neste capítulo está publicado como Helena Bragança, Shiro Sakai, M.C.O. Aguiar e Marcello Civelli, “*Correlation-Driven Lifshitz Transition at the Emergence of the Pseudogap Phase in the Two-Dimensional Hubbard Model*”, Phys. Rev. Lett. **120**, 067002 (2018).

do trabalho utilizamos $t = 1$ como unidade de energia.

Nossos principais resultados estão relacionados à coexistência de duas soluções distintas: um metal correlacionado tradicional, descrito pela teoria de líquido de Fermi, que chamamos de metal de Fermi correlacionado (MFC), e uma fase *pseudo-gap* (PG). A segunda solução viola a teoria de líquido de Fermi devido ao desenvolvimento de uma divergência na auto-energia, que gera *gaps* anisotrópicos no espaço de momento (resultados experimentais para a fase *pseudo-gap* podem ser vistos nas Figuras 7.8 e 7.9).

Nossos resultados lançam luz sobre um debate antigo a respeito da existência ou não da transição de Mott no modelo de Hubbard bidimensional em semi-preenchimento. Mais importante, incluindo dopagem, observamos uma relação entre a emergência da fase *pseudo-gap* e a mudança de topologia da superfície de Fermi, em concordância com experimentos recentes [240–242].

9.1 Transição de Mott no sistema semi-preenchido

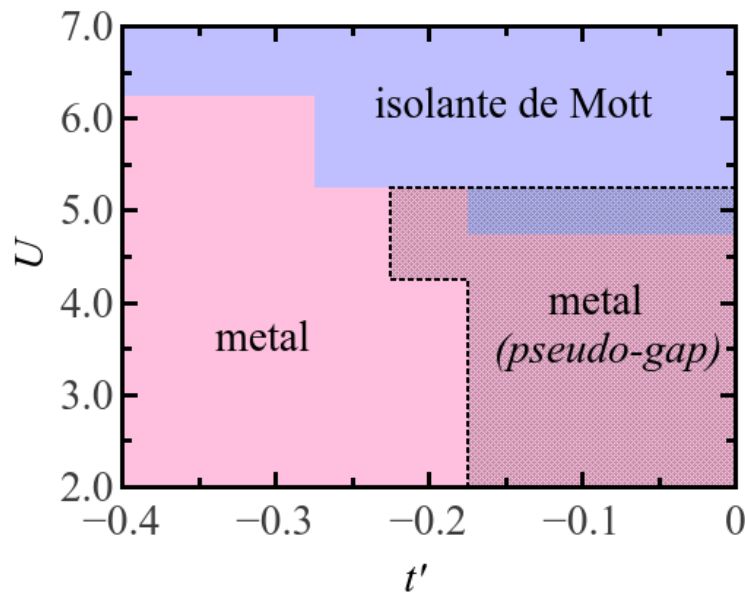


Figura 9.1: Diagrama de fase $U \times t'$ para o modelo de Hubbard bidimensional obtido via DE-CDMFT a temperatura $T = 0$ e semi-preenchimento (sem dopagem, $p = 0$). As regiões em azul, rosa e cinza delimitam as fases isolante de Mott, metal de Fermi correlacionado e *pseudo-gap*, respectivamente. A fase metálica tem sempre energia inferior à fase *pseudo-gap* (fase metaestável, entre parênteses).

Conforme descrito na seção 7.3.4, há uma contradição na literatura a respeito da presença ou não de uma fase metálica tradicional no modelo de Hubbard em semi-preenchimento. Alguns trabalhos [259, 262] indicam a presença de uma interação crítica, U_c , abaixo da qual

o sistema apresenta comportamento líquido de Fermi, enquanto outras referências [258,270–273] afirmam que há a persistência do *gap* mesmo para interações muito pequenas. Em geral, os autores analisaram o caso com simetria partícula-buraco, isto é, sem *hopping* entre segundos vizinhos ($t' = 0$). Esse caso é especialmente complicado porque o vetor de *nesting* $\vec{Q} = (\pi, \pi)$ atua em toda a superfície de Fermi, produzindo susceptibilidades divergentes (ver Apêndice F). É provável que nesse caso um *gap* sempre se abra no sistema a $T = 0$. Assim, para analisarmos a transição de Mott no sistema bidimensional, consideramos o caso $t' \neq 0$. Nosso principal resultado é que, para interação U menor do que um valor crítico, encontramos duas soluções, um metal de Fermi correlacionado (MFC) e um *pseudo-gap* (PG), conforme observado no diagrama de fase da Figura 9.1, obtido a temperatura $T = 0$ em função de U e t' . O PG coexiste com o MFC para uma região considerável de U e t' , desaparecendo apenas para $|t'|$ grande. Para interações maiores que $U \simeq 5t$, recuperamos o isolante de Mott.

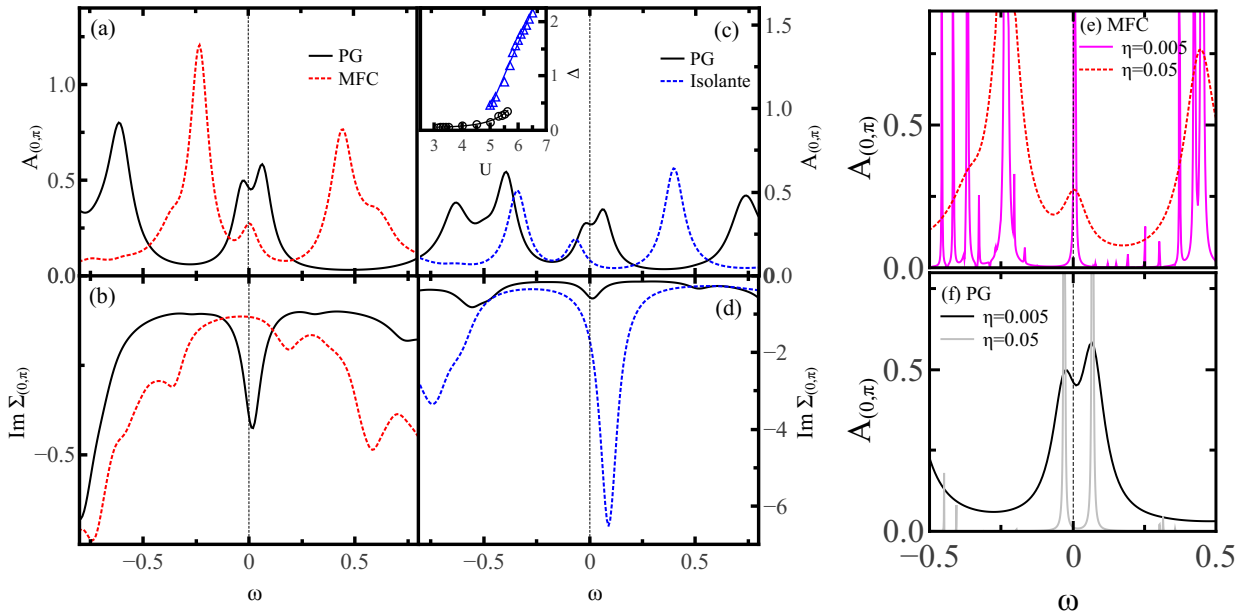


Figura 9.2: (a) Função espectral $A_{\vec{k}}(\omega)$ próximo ao nível de Fermi para $\vec{k} = (0, \pi)$ e (b) parte imaginária da auto-energia $\text{Im}\Sigma_{\vec{k}}(\omega)$ correspondente para as duas soluções coexistentes, MFC e PG, em semi-preenchimento, $U = 4.0$ e $t' = -0.1$. Comparação de (c) $A_{(0,\pi)}(\omega)$ e (d) $\text{Im}\Sigma_{(0,\pi)}(\omega)$ entre o PG e o isolante de Mott para $U = 5.0$ e $t' = -0.1$. O *inset* apresenta o *gap* na função espectral em função de U para o PG (círculos) e para o isolante (triângulos). Em (e) e (f), apresentamos os mesmos dados de (a), porém para dois valores de η , parâmetro de alargamento da continuação analítica.

Para mostrar que a solução MFC corresponde a um metal líquido de Fermi, enquanto o PG apresenta sempre um *gap* anisotrópico na zona de Brillouin, analisamos em detalhes o caso no qual $t' = -0.1$. Na Figura 9.2, apresentamos a função espectral $A(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\vec{k}, \omega)$

e a parte imaginária da auto-energia $\text{Im}\Sigma(\vec{k}, \omega)$, ambas no ponto anti-nodal,² $\vec{k} = (0, \pi)$ e em torno do nível de Fermi ($|\omega| < 0.8t$). O MFC (curva vermelha pontilhada) apresenta características típicas de um líquido de Fermi: peso espectral finito no nível de Fermi $\omega = 0$ [Fig. 9.2(a)] e um comportamento $\sim \omega^2$ na parte imaginária da auto-energia [Fig. 9.2(b)]. Por outro lado, o PG (linha preta sólida) apresenta características claramente distintas: $A(\vec{k}, \omega)$ possui um mínimo em $\omega = 0$ [Fig. 9.2(a)], apresentando um pequeno *gap* Δ , que plotamos no *inset* da Fig. 9.2(c) (círculos) em função de U , juntamente com o *gap* isolante (triângulos). Além disso, $\text{Im}\Sigma(\vec{k}, \omega)$ apresenta uma divergência em torno de $\omega = 0$ [Fig. 9.2(b)], que é um comportamento não líquido de Fermi. Esse comportamento é semelhante ao que é observado no isolante de Mott [curva azul pontilhada na Fig. 9.2(d)], no qual o *gap* é sempre caracterizado por um polo na auto-energia. A intensidade do polo na fase PG é menor do que no isolante de Mott e as duas soluções não são continuamente conectadas, apresentando uma região de coexistência [*inset* da Fig 9.2(c)].

Conforme discutido no Capítulo 8, o cálculo das quantidades físicas, ao longo dos *loops* ED-CDMFT, é realizado no eixo imaginário. Para obter as quantidades no eixo real, apresentadas na Figura 9.2, utilizamos uma continuação analítica trivial, isto é, substituímos $i\omega_n$ por $\omega + i\eta$, sendo que η é um parâmetro pequeno, que produz um alargamento em funções delta que surgem na função espectral. Em geral, utilizamos $\eta = 0.05$ nas figuras apresentadas ao longo deste capítulo, pois esse valor de alargamento produz curvas suaves das quantidades físicas no eixo real, em função da frequência. No entanto, esse valor de η não é suficientemente pequeno para descrever o estreito *gap* observado na fase PG [representado pelos círculos pretos no *inset* da Fig. 9.2(c)]. Para calculá-lo, é preciso utilizar um η ainda menor. Nos painéis (e) e (f) da Fig. 9.2, apresentamos, para comparação, funções espectrais obtidas a partir dos mesmos dados convergidos, no eixo imaginário, mas utilizando diferentes valores de η para a continuação analítica. As curvas vermelha e preta correspondem às apresentadas no painel (a), enquanto os dados em magenta e cinza correspondem ao caso no qual $\eta = 0.005$. Nesse caso, as funções espectrais não são funções suaves de ω , mas fica evidente a presença de um *gap* na solução PG [Fig. 9.2(f)] e a presença de um pico no nível de Fermi na solução MFC [Fig. 9.2(e)]. Calculamos o valor do *gap* Δ da fase PG a partir da distância entre os dois picos em torno de $\omega = 0$ observados com η pequeno; confirmamos que Δ independe de η , desde que este parâmetro seja suficientemente pequeno.

A fim de concluir qual das soluções, o MFC ou o PG, corresponde ao verdadeiro estado fundamental, calculamos a energia total ($E = K + U D$) de cada solução, seguindo o procedimento descrito na subseção 8.3.3. Observamos que, para semi-preenchimento e diferentes valores de t' , o MFC possui sempre menor energia do que o PG, conforme observado na Figura 9.3(a). É útil também separar as contribuições das energias potencial ($U D$) e cinética

²Ao longo deste trabalho, apresentamos as quantidades físicas principalmente no ponto anti-nodal da zona de Brillouin [$\vec{k} = (0, \pi)$], pois sabe-se que a fase PG apresenta um *gap* para esse valor de momento.

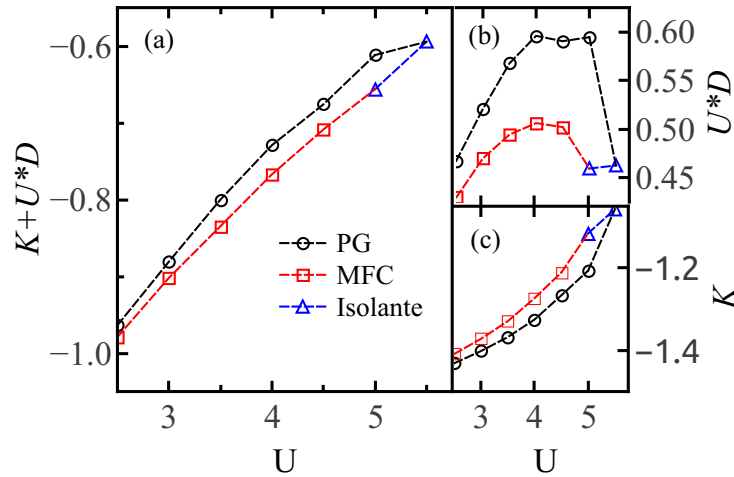


Figura 9.3: Comparação entre as energias das diferentes soluções, metal de Fermi correlacionado, *pseudo-gap* e isolante. Resultados obtidos em semi-preenchimento ($p = 0$) para $t' = -0.1$, para a energia total (a), dada pela soma das energias potencial (b) e cinética (c).

(K) sobre a energia total. Nossos resultados indicam que a fase PG possui maior probabilidade de dupla ocupação (D) e, portanto, maior energia potencial, porém menor energia cinética.

A presença das duas soluções com energias semelhantes no tratamento de campo médio pode justificar a contradição observada na literatura a respeito da presença da transição induzida por interação (ver Capítulo 7). Nossos resultados indicam que a fase PG é metaestável, enquanto o MFC é o verdadeiro estado fundamental. Isso nos permite concluir que o modelo de Hubbard bidimensional apresenta uma transição de Mott, com um comportamento líquido de Fermi para $U < U_c \sim 5.0t$.

Apesar de, em semi-preenchimento, a solução PG apresentar maior energia, ela se torna a solução estável de menor energia para certos valores de dopagem e interação, conforme discutido na próxima seção.

9.2 Fase *pseudo-gap* e topologia da superfície de Fermi

Conforme discutido no Capítulo 7, o entendimento da fase *pseudo-gap* presente em cupratos (ver diagrama de fase da Figura 7.5) é fundamental para a compreensão da física dos supercondutores fortemente correlacionados.

A existência do *pseudo-gap* foi inicialmente identificada em respostas espectroscópicas [215] e em propriedades termodinâmicas e de transporte [289], pela observação da perda de peso espectral em certas regiões do espaço de momento, produzindo resultados que não podem ser descritos por uma teoria de líquido de Fermi tradicional. Desde então, uma questão central

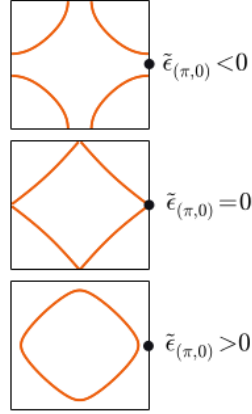


Figura 9.4: Esboço da topologia da superfície de Fermi e respectivo valor da energia de quase-partícula renormalizada no ponto anti-nodal $\vec{k} = (\pi, 0) = (0, \pi)$. Figura retirada de [288].

que tem intrigado a comunidade científica é a definição de por que e em que condições surge a fase *pseudo-gap*.

Resultados recentes de espectroscopia em monocamadas de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6-\delta}$ [240] e bicamadas de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ [241, 242] revelaram que a fase *pseudo-gap* termina abruptamente para dopagem p^* no regime *overdoped*. Esse valor de dopagem é próximo de p_{lt} , dopagem na qual ocorre a transição de Lifshitz, que caracteriza a mudança da topologia da superfície de Fermi entre uma superfície tipo buraco e uma superfície tipo elétron. A observação experimental da coincidência entre as duas dopagens críticas foi discutida no Capítulo 7 e podem ser vistas nas Figuras 7.11 e 7.12, retiradas das referências [241, 243].

Apesar de nossos resultados serem obtidos a partir da dopagem com buracos, a superfície de Fermi pode, a princípio, apresentar qualquer uma das topologias, devido à inclusão de interação U e *hopping* t' entre segundos vizinhos. A nomenclatura “superfície de Fermi do tipo elétron (buraco)” deve-se à forma que a superfície de Fermi assume, no caso em que $U = t' = 0$, quando o sistema é dopado com portadores de carga negativos (positivos). Uma descrição da definição da superfície de Fermi pode ser encontrada no Apêndice F. A topologia da superfície de Fermi é controlada pelo sinal da energia de quase-partícula renormalizada, dada por $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} = \xi_{\vec{k}} + \text{Re}\Sigma(\vec{k}, \omega = 0)$, que, no ponto anti-nodal, $\vec{k} = (0, \pi)$, corresponde a $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)} = 4t' - \mu + \text{Re}\Sigma_{(0,\pi)}(\omega = 0)$. Para valores positivos (negativos) de $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}$ a superfície de Fermi é do tipo elétron (buraco), conforme representado na Figura 9.4 e discutido no Apêndice F.

A proximidade entre p^* e p_{lt} observada experimentalmente sugere a existência de uma relação entre a fase *pseudo-gap* e a topologia da superfície de Fermi. A investigação da estabilidade das duas soluções encontradas em nosso trabalho, o MFC e o PG, em função da dopagem p e da interação U , fornece-nos informações sobre a fase *pseudo-gap*, bem como

sobre sua relação com a transição de Lifshitz.

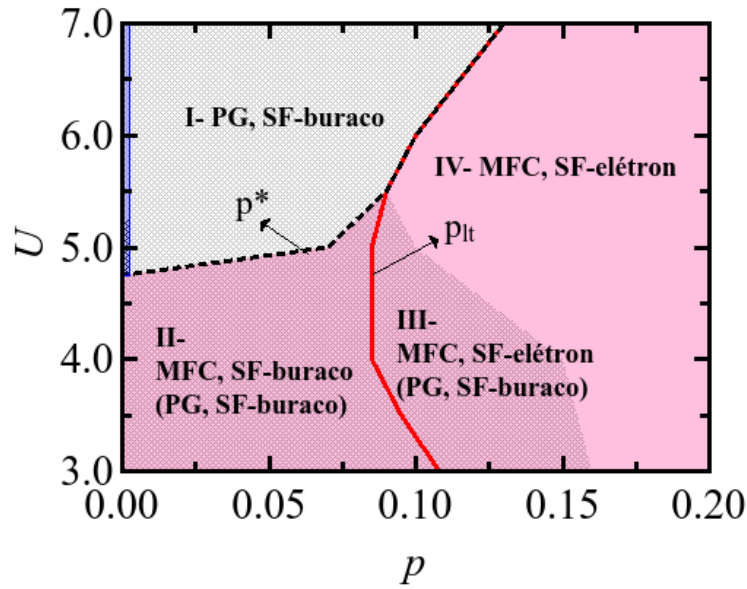


Figura 9.5: Diagrama de fase $U \times p$ para $T = 0$ e $t' = -0.1$. A região em rosa indica a fase MFC, enquanto a região hachurada em cinza delimita a fase PG. A linha vermelha contínua indica a p_{lf} , ou seja, marca a transição de Lifshitz, na qual a superfície de Fermi da fase MFC muda do tipo buraco (SF-buraco) para o tipo elétron (SF-elétron). A linha preta pontilhada, por sua vez, define a dopagem limite p^* abaixo da qual a fase PG apresenta menor energia do que a fase MFC. A barra azul vertical indica a região onde observamos um isolante de Mott para $p = 0$.

Nossos principais resultados para o caso com dopagem podem ser observados na Figura 9.5, na qual apresentamos um diagrama de fase $U \times p$ obtido mantendo-se $t' = -0.1$ fixo. Nesse caso, identificamos claramente três diferentes regiões, uma na qual o PG é a solução estável (I); outra na qual observamos apenas uma solução líquido de Fermi (IV), e finalmente uma região em que ambas as soluções coexistem (II e III).

Na região de parâmetros para a qual observamos ambas as soluções, o MFC apresenta menor energia total, conforme observado na Figura 9.6 (casos $U = 3.0$ e $U = 4.0$, por exemplo). Para $U > U_c \simeq 5t$, no entanto, a fase PG torna-se estável para pequenas dopagens ($p < p^*$), enquanto a fase MFC persiste para valores maiores de p . Em resumo, observamos que, apesar de em semi-preenchimento a fase PG ser metaestável, ela emerge como solução estável a partir da dopagem do isolante de Mott, em concordância com resultados anteriores presentes na literatura [261].

Assim como no caso de semi-preenchimento, as principais propriedades físicas que diferenciam as fases MFC e PG também são encontradas no sistema com dopagem. Mais especificamente, a fase PG sempre viola o comportamento líquido de Fermi, apresentando um pico na parte imaginária da auto-energia [ver Figura 9.7(a), (c) e (d)], que agora se moveu um

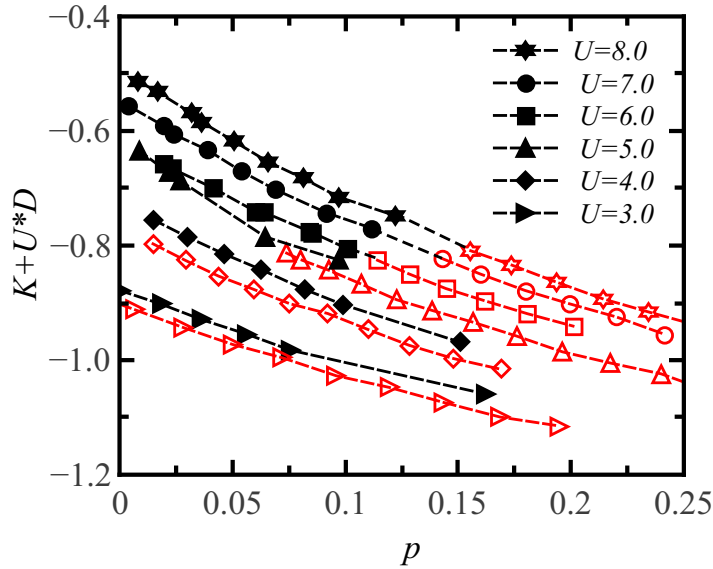


Figura 9.6: Energia total $E = K + U D$ em função da dopagem, para $t' = -0.1$ e diferentes valores de U . Símbolos vermelhos (cinzas, em preto e branco) abertos correspondem à solução MFC, enquanto símbolos pretos preenchidos indicam o PG. Para pequenas interações, observamos simultaneamente ambas as soluções e o MFC possui menor energia. Para U grande, no entanto, o PG é estável para pequenas dopagens, enquanto o MFC é observado para maiores valores de p . A legenda para símbolos fechados vale também para símbolos iguais, porém abertos.

pouco para frequências positivas. Por outro lado, a fase MFC apresenta um comportamento líquido de Fermi em todo o diagrama de fase [Figura 9.7(b), (c) e (d)].

Os resultados discutidos acima possuem importantes implicações no contexto da fase *pseudo-gap* observada em cupratos e sua relação com a topologia da superfície de Fermi. A primeira observação importante é que o polo na auto-energia na fase PG aumenta muito o espalhamento nas vizinhanças de $\vec{k} = (0, \pi)$ e $\vec{k} = (\pi, 0)$, regiões correspondentes aos anti-nós nos cupratos. Como consequência, o peso espectral na superfície de Fermi em torno desse ponto é fortemente reduzido, dando origem à conhecida quebra da superfície de Fermi em arcos. Esse efeito pode ser visto na função espectral $A(\vec{k}, \omega = 0)$ representada na Figura 9.8, painéis (a) e (c).³ Esses resultados concordam com resultados de CDMFT anteriores [24, 263, 290], bem como com resultados experimentais obtidos via ARPES [215]. A solução MFC, por outro lado, não apresenta arcos de Fermi [Figura 9.8(b) e (d)]; ao contrário, a intensidade espectral aumenta em torno dos anti-nós.

A segunda observação importante, apresentada nos *insets* da Figura 9.7, é que a solução PG *sempre apresenta uma superfície de Fermi do tipo buraco*. A solução MFC pode apre-

³Nessa figura observamos quantidades dependentes do momento, obtidas por meio da periodização via cumulante, descrita na seção 8.3.2.

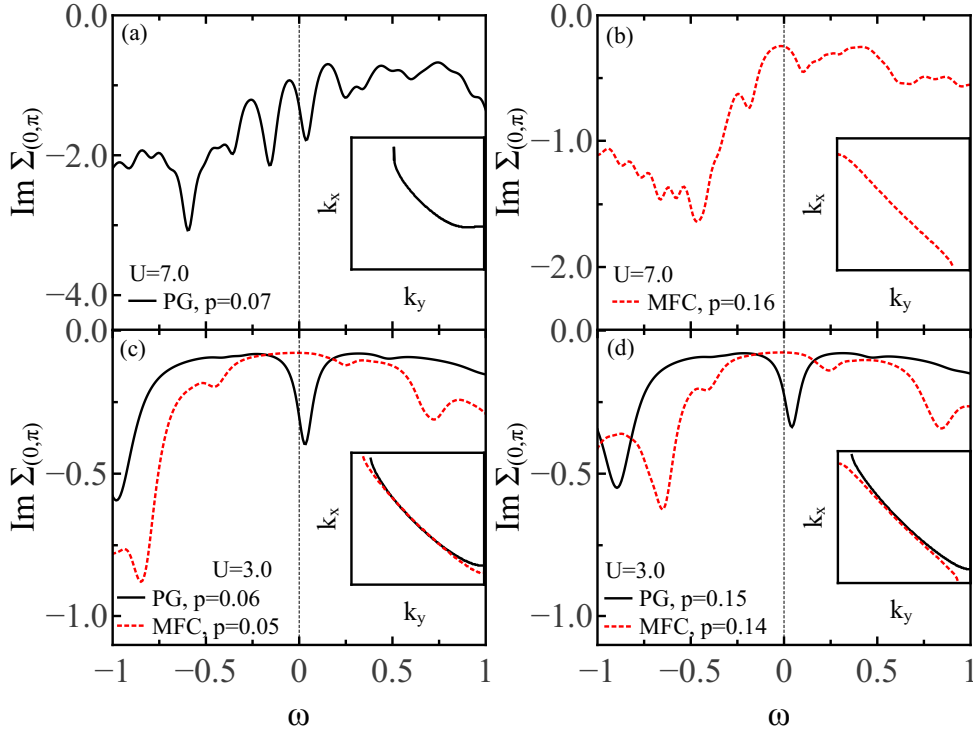


Figura 9.7: Comparação da parte imaginária da auto-energia no ponto anti-nodal $\mathbf{k} = (0, \pi)$ entre as soluções MFC e PG em várias regiões do diagrama de fase $U \times p$: (a) região I, (b) IV, (c) II e (d) III. Os *insets* apresentam as superfícies de Fermi correspondentes no primeiro quadrante da zona de Brillouin ($k_x, k_y \in [0, \pi]$).

sentar ambas as topologias, dependendo dos valores de t' e U .

Mais detalhes a respeito da relação entre correlação e topologia da superfície de Fermi podem ser estudados pela investigação dos efeitos da interação U sobre a energia renormalizada $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}(\omega) = \text{Re}\Sigma_{\vec{k}}(\omega) - \omega + \xi_{\vec{k}}$. Conforme discutido no Apêndice F, a superfície de Fermi é definida a partir dos pontos, no espaço de momento, nos quais $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}(\omega = 0)$ muda de sinal. Para um dado valor de \vec{k} no espaço de momento, o estado é ocupado quando $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}(0) < 0$. Se consideramos o ponto anti-nodal $\vec{k} = (0, \pi)$, uma solução metálica tem superfície de Fermi do tipo buraco se $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}(0) < 0$ e do tipo elétron se $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}(0) > 0$ (isto é, se o estado $\vec{k} = (0, \pi)$ está vazio), conforme representado na Figura 9.4.

Assim, é interessante compararmos o comportamento de $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}(\omega)$ com $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}^0(\omega) = -\omega + \xi_{(0,\pi)}$, a energia renormalizada do sistema não interagente com a mesma densidade e mesmo *hopping*. Os efeitos da interação sobre a energia renormalizada podem ser observados na Figura 9.9. No painel (a), observamos $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}(\omega)$ para a fase PG com $U = 7.0$ e pequena dopagem, $p = 0.07$, bem como a $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}^0(\omega)$ correspondente. Observamos que $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}^0(\omega = 0) < 0$ e a superfície de Fermi é do tipo buraco. A inclusão de interação leva $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}(\omega = 0)$ para valores mais negativos, e a superfície de Fermi tem o caráter de buraco mais acentuado. Na fase

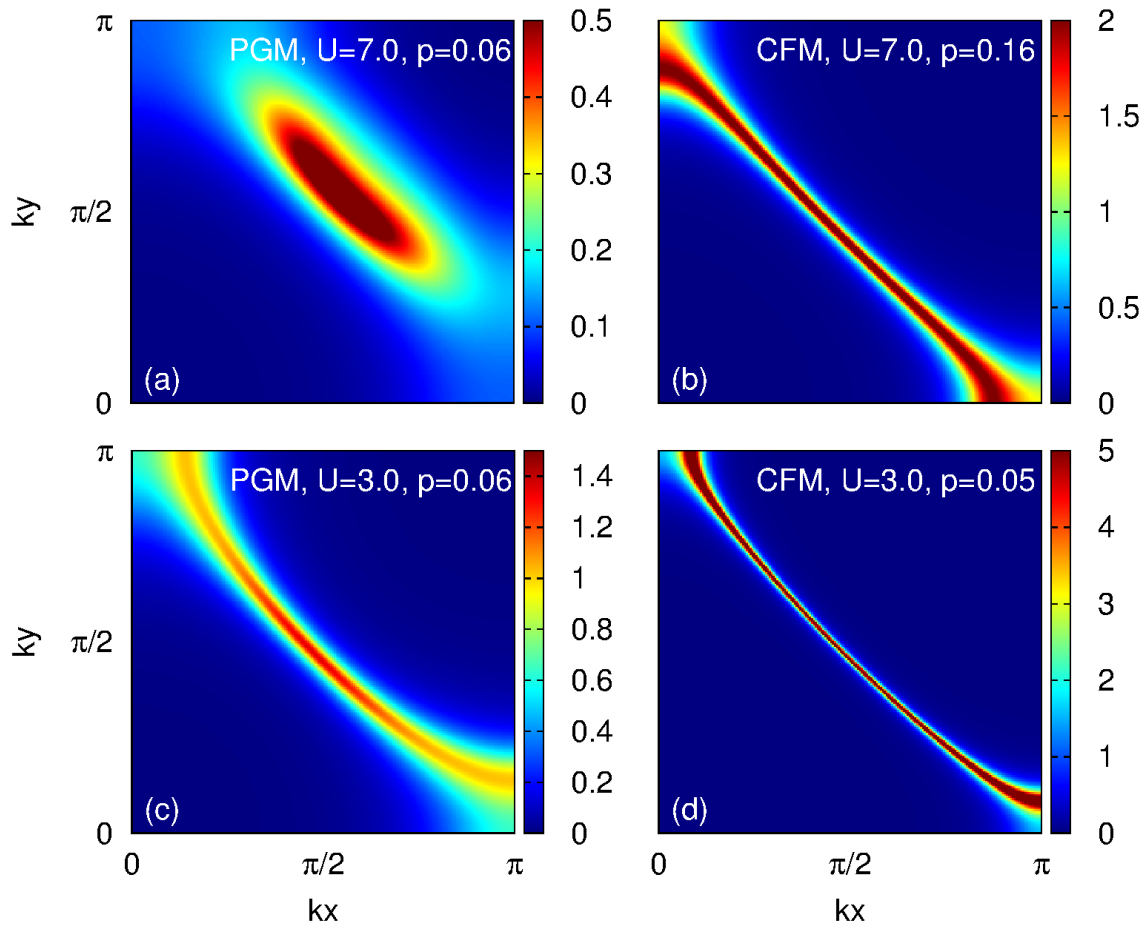


Figura 9.8: Função espectral $A(\vec{k}, \omega = 0)$ no primeiro quadrante da zona de Brillouin para as fases MFC e PG. Com interação fraca, $U = 3$, e pequena dopagem, $p \approx 0.05$ [painéis (c) e (d)], a superfície de Fermi é do tipo buraco em ambas as soluções. Nesse caso, o MFC é a solução estável e não apresenta arcos de Fermi. Com interação forte $U = 7.0$, o PG apresenta arcos de Fermi do tipo buraco e é a solução estável com pequena dopagem [(a), $p = 0.06$], enquanto o MFC se estabiliza para dopagem maior [(b), $p = 0.16$] e apresenta uma superfície de Fermi do tipo elétron, sem arcos.

pseudo-gap, o comportamento de singularidade da auto-energia em torno do nível de Fermi (observado na Figura 9.7, por exemplo) pode ser descrito por $\Sigma(\vec{k}, \omega) \simeq \frac{V^2}{\omega - \xi_{\vec{k}}(\omega=0)}$ [291, 292], com $\xi_{\vec{k}}(\omega=0) > 0$. A contribuição da auto-energia sobre a energia renormalizada pode ser interpretada como um aumento no potencial químico efetivo e desloca $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}(\omega)$ para valores mais negativos.

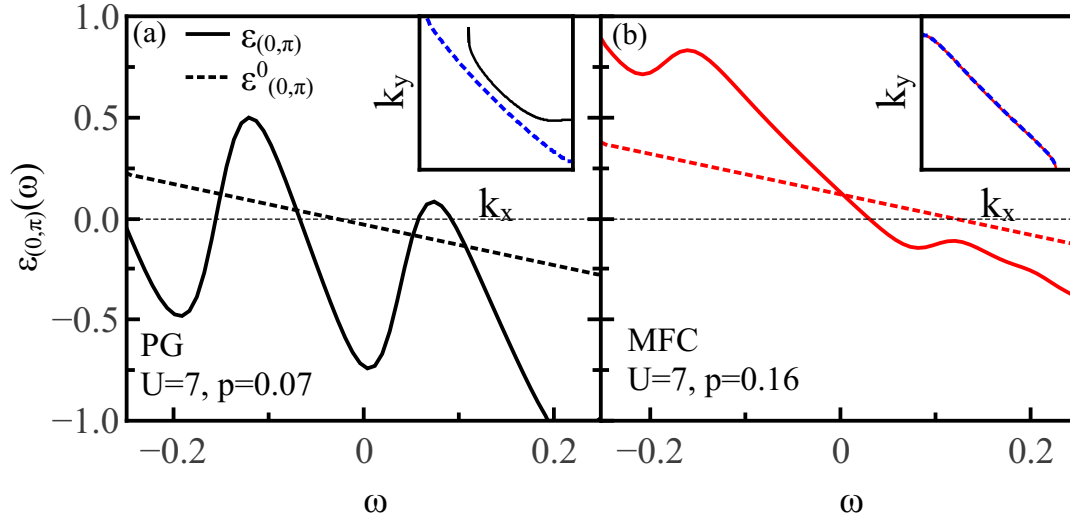


Figura 9.9: Energias renormalizadas $\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}$ e $\tilde{\epsilon}^0_{(0,\pi)}$ para baixas frequências, calculadas no ponto anti-nodal $\vec{k} = (0, \pi)$ para $t' = -0.1$. Os *insets* apresentam comparações entre as superfícies de Fermi interagente (linha contínua) e não interagente (linha pontilhada).

O comportamento é diferente na fase MFC, conforme observado na Figura 9.9(b) para $U = 7.0$ e $p = 0.16$. Nesse caso, a auto-energia não apresenta polos em torno do nível de Fermi (Figura 9.7) e a interação U praticamente não afeta a topologia da superfície de Fermi. Na figura, observamos que, para $U = 0$ e $p = 0.16$, a superfície de Fermi é do tipo elétron ($\tilde{\epsilon}^0_{(0,\pi)}(\omega=0) > 0$) e a inclusão da interação para esse valor de dopagem não altera o sinal da energia renormalizada ($\tilde{\epsilon}_{(0,\pi)}(\omega=0) > 0$). No *inset*, observamos que, nesse caso, as superfícies de Fermi são praticamente iguais para $U = 0$ e $U = 7.0$.

Em resumo, observamos que, começando por U pequeno, a solução estável é o MFC, que apresenta superfície de Fermi do tipo buraco para dopagem pequena e do tipo elétron para valores maiores de p , com uma transição de Lifshitz em $p = p_{lt}$ (linha vermelha contínua no diagrama de fase da Figura 9.5). Nesse caso, o sistema apresenta comportamento líquido de Fermi, enquanto a fase PG é instável (maior energia total). Para $U \approx 5.5t$, no entanto, a linha p_{lt} coincide com p^* (linha preta pontilhada). Nesse caso, para $p < p^*$ o PG torna-se a solução estável. Essa solução sempre apresenta superfície de Fermi do tipo buraco. Por outro lado, para $p > p^*$ o estado fundamental é um MFC, que nesse caso possui superfície de Fermi do tipo elétron. Isso significa que, para U grande, ao aumentar p , a mudança de topologia

entre superfície de Fermi do tipo buraco e tipo elétron coincide com a transição PG-MFC ($p_{lt} = p^*$). Observamos assim uma relação entre interações coulombianas e a transição de Lifshitz.

9.3 Conclusão

Estudamos o estado normal (não supercondutor) do modelo de Hubbard bidimensional a temperatura $T = 0$ para diferentes valores de interação U , frustração t' e dopagem p . Nosso principal resultado é a coexistência entre duas soluções, um metal de Fermi correlacionado e uma fase *pseudo-gap*, que não apresenta comportamento líquido de Fermi.

Em semi-preenchimento, contribuimos para um debate em aberto a respeito da existência da transição de Mott no modelo bidimensional, mostrando que a solução líquido de Fermi é estável e o modelo passa por uma transição metal-isolante com o aumento da interação, apesar da existência de uma solução *pseudo-gap* metaestável.

Em seguida mostramos que, para grandes interações e pequenas dopagens, região relevante para cupratos *underdoped*, a solução *pseudo-gap* torna-se estável (menor energia) e apresenta sempre uma superfície de Fermi do tipo buraco. Esse resultado demonstra que a transição de Lifshitz está relacionada a mecanismos de correlação eletrônica, pois o aumento da dopagem gera uma transição entre uma fase *pseudo-gap* com superfície de Fermi do tipo buraco para um metal líquido de Fermi com superfície de Fermi do tipo elétron. Isso explica a relação entre a dopagem limite para a fase *pseudo-gap* e a transição de Lifshitz, observada em experimentos recentes [240–242].

Acrescentamos que, em um trabalho teórico recente, realizado em paralelo ao nosso, Wei Wu, M. Scheurer, S. Chatterjee, S. Sachdev, Antoine Georges e Michel Ferrero [288] também analisaram a coincidência entre a dopagem limite da fase *pseudo-gap* e a dopagem crítica da transição de Lifshitz utilizando soluções de Monte Carlo Quântico e de DCA do modelo de Hubbard bidimensional. Eles observaram que a fase *pseudo-gap* existe apenas quando a superfície de Fermi é do tipo buraco e que, para um grande conjunto de parâmetros, a abertura do *gap* coincide com a mudança de topologia da superfície de Fermi do tipo buraco para o tipo elétron, à medida em que a dopagem diminui. Para justificar a relação entre os valores críticos de dopagem, eles argumentam que o polo presente na auto-energia, associado à formação da fase *pseudo-gap* [que observamos em nossos resultados nas Figuras 9.7(c) e (d), por exemplo], também controla o grau de assimetria partícula-buraco e portanto a transição de topologia da superfície de Fermi. Os autores não observam, no entanto, a coincidência entre a mudança na topologia da superfície de Fermi e a transição de primeira ordem entre o metal líquido de Fermi e a fase *pseudo-gap*, isto é, não comentam sobre o mecanismo de interação envolvido na transição de Lifshitz.

Conclusões Gerais e Perspectivas Futuras

Ao longo do doutorado, estudamos problemas diferentes, mas sempre relacionados a fenômenos que emergem da interação eletrônica. Utilizamos métodos numéricos (Grupo de Renormalização da Matriz Densidade e uma extensão de *cluster* da Teoria de Campo Médio Dinâmico) para investigar Hamiltonianos modelos que retêm os ingredientes fundamentais de determinados fenômenos físicos, como o modelo de Hubbard, o modelo de férmions interagentes sem spin (modelo de Hubbard polarizado) e cadeias de Heisenberg anisotrópicas. Dessa forma, abordamos problemas como transições de fase de ordem infinita, efeitos de conjugação entre interação e desordem, dinâmica de sistemas interagentes após *quenches* e fase normal observada próxima à fase supercondutora em sistemas fortemente interagentes.

No primeiro trabalho, apresentado no Capítulo 2 e publicado no Phys. Rev. B em 2014 [21], investigamos a relação entre propriedades de informação quântica e transições de fases de diferentes ordens em cadeias de spin. Mais especificamente, analisamos a convertibilidade local de estados quânticos de muitos corpos, quantidade relacionada a não analiticidades do espectro de emaranhamento e que fornece informações sobre o potencial computacional de processos adiabáticos e protocolos envolvendo operações locais e comunicação clássica. Nossos resultados sugerem fortemente que esta perspectiva operacional de estados quânticos não está necessariamente relacionada a transições de fase, mas reflete características do espectro de emaranhamento que estão intimamente relacionadas a simetrias do modelo microscópico. Mostramos explicitamente exemplos de mudanças na convertibilidade local que não correspondem a transições de fase e de transições de fase que não são acompanhadas por alterações no perfil de convertibilidade. Além disso, observamos que modelos diferentes que pertencem à mesma classe de universalidade podem exibir propriedades de convertibilidade distintas.

No Capítulo 3, apresentamos um trabalho publicado no Journal of Physics: Condensed Matter [38]. Assim como no caso anterior, utilizamos ferramentas de informação quântica para a investigação de sistemas fortemente interagentes. Especificamente, analisamos a média temporal do *Loschmidt echo* de estados maximamente localizados, que pode ser usada para caracterizar localização no espaço de estados, pois fornece uma estimativa do inverso da

taxa de participação. Mostramos que, no caso de partículas não interagentes, o *echo* médio é inversamente proporcional ao comprimento de localização, revelando uma relação direta entre localização da dinâmica no espaço de estados e localização no espaço real. Estendemos essa ideia para localização em sistemas de muitos corpos e usamos essa abordagem para analisar modelos contendo interação e desordem. Observamos que, apesar de ambos os efeitos, isoladamente, gerarem localização das funções de onda no espaço real, a combinação dos ingredientes pode levar a um regime mais delocalizado. Mostramos também que essa combinação não trivial se manifesta na distribuição de *gaps* do Hamiltoniano, indicando uma relação entre localização e integrabilidade do Hamiltoniano. Finalmente, mostramos que os efeitos de delocalização tornam-se mais pronunciados à medida em que aumentamos o tamanho do sistema.

Investigamos também a evolução temporal de sistemas interagentes após a alteração abrupta de parâmetros do sistema. Nesses casos, mudanças no sistema geram alterações em observáveis locais, que são transmitidas, ao longo do sistema, com velocidades bem definidas. É possível observar, portanto, cones de luz efetivos na dinâmica de observáveis locais.

Nesse contexto, participei de um trabalho, publicado no Phys. Rev. B [40], no qual estudamos um *quench* local em que conectamos duas cadeias XXZ preparadas em fases diferentes. Mais especificamente, investigamos se uma cadeia preparada na fase ferromagnética é capaz de gerar magnetização em uma cadeia preparada inicialmente na fase líquido de Luttinger (fase crítica), sem ordenamento magnético. Observamos que a conexão entre as cadeias gera pulsos de magnetização e entropia, formando cones de luz. As velocidades dos cones são definidas por excitações de equilíbrio, mágnons (na cadeia ferromagnética), spinons e estados ligados (na cadeia preparada na fase crítica).

Além disso, em um trabalho em andamento, investigamos a formação do efeito Kondo a partir de um *quench* de hibridização, no qual conectamos uma cadeia interagente a uma impureza magnética. Nos resultados analisados até o momento, observamos que, após o acoplamento de uma impureza a cadeias metálicas de elétrons interagentes, o sistema tende a evoluir para a condição de equilíbrio e a equilibração é mais rápida e evidente nos casos de impurezas menos interagentes. Observamos também que o aumento da interação U nas cadeias metálicas fortalece as correlações Kondo, conforme esperado no caso de equilíbrio. Nossos resultados indicam também que a entropia de emaranhamento do sistema bipartido aumenta ao longo da dinâmica, superando a entropia de equilíbrio. Além disso, observamos a formação de cones de luz após o *quench* e variações locais de carga e spin se propagam com velocidades diferentes, devido à separação spin-carga das excitações no modelo de Hubbard.

Nos trabalhos descritos acima, investigamos cadeias unidimensionais. Na Parte III, por outro lado, investigamos o modelo de Hubbard bidimensional. A motivação para essa análise foi a investigação de supercondutores fortemente interagentes, como cupratos, nos quais a fase

supercondutora em planos de CuO_2 é induzida por dopagem de isolantes de Mott. Investigamos o estado normal do modelo de Hubbard bidimensional e observamos a existência de duas soluções, uma fase *pseudo-gap* e um metal de Fermi correlacionado. Em semi-preenchimento, a segunda solução apresenta menor energia; assim, o sistema apresenta uma transição entre um metal líquido de Fermi e um isolante, à medida em que aumentamos a interação. Nossos resultados contribuíram para o esclarecimento de um debate existente na literatura a respeito da existência da transição de Mott no modelo de Hubbard bidimensional. Observamos também que, ao incluirmos dopagem no caso fortemente interagente, a solução *pseudo-gap* torna-se a solução de menor energia, em concordância com resultados conhecidos para cupratos. Além disso, mostramos que a fase *pseudo-gap* apresenta sempre uma superfície de Fermi do tipo buraco. Aumentando-se ainda mais a dopagem, observamos uma transição para um metal convencional, acompanhada por uma mudança na topologia da superfície de Fermi. Nossos resultados revelam, assim, uma relação entre a transição de Lifshitz (mudança de uma superfície de Fermi do tipo buraco para uma superfície de Fermi do tipo elétron) e a intrigante fase *pseudo-gap*. A coincidência entre a dopagem limite para estabilidade da fase *pseudo-gap* e a dopagem crítica da transição de Lifshitz foi observado em resultados experimentais recentes, mas ainda não havia sido explicada teoricamente. Os resultados foram publicados no Phys. Rev. Lett. [41].

Em resumo, durante o doutorado aprendemos novas metodologias numéricas (que não eram utilizadas anteriormente em nosso grupo), o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade e uma extensão de *cluster* da Teoria de Campo Médio Dinâmico, apropriadas para descrever sistemas interagentes em uma e duas dimensões, respectivamente. Dessa forma, abordamos o estudo de diferentes fenômenos emergentes descritos por Hamiltonianos de muitos corpos em baixas dimensionalidades. Estes trabalhos contribuem para a compreensão de fenômenos relevantes do ponto de vista de física básica e também de possível aplicação via novos dispositivos.

Perspectivas futuras incluem a finalização do trabalho envolvendo a dinâmica de não-equilíbrio do efeito Kondo. Além disso, planejamos completar o estudo do Hamiltoniano de Hubbard bidimensional incluindo supercondutividade. Mais especificamente, planejamos observar os efeitos da transição de Lifshitz, presente no estado normal, sobre a fase supercondutora.

Referências Bibliográficas

- [1] Anderson, Philip W *et al.*: *More is different*. Science, 177(4047):393–396, 1972. Citado na página 1.
- [2] Smith, JL e EA Kmetko: *Magnetism or bonding: A nearly periodic table of transition elements*. Journal of the Less Common Metals, 90(1):83–88, 1983. Citado na página 1.
- [3] Coleman, Piers: *Introduction to many-body physics*. Cambridge University Press, 2015. Citado na página 2.
- [4] Coleman, Piers: *Heavy fermions and the Kondo lattice: a 21st century perspective*. arXiv preprint arXiv:1509.05769, 2015. Citado na página 2.
- [5] McWhan, DB, A Menth, JP Remeika, WF Brinkman e TM Rice: *Metal-insulator transitions in pure and doped V_2O_3* . Physical Review B, 7(5):1920, 1973. Citado 2 vezes nas páginas 2 and 11.
- [6] McWhan, DB, TM Rice e JP Remeika: *Mott transition in Cr-doped V_2O_3* . Physical Review Letters, 23(24):1384, 1969. Citado 2 vezes nas páginas 2 and 11.
- [7] Stewart, GR: *Unconventional superconductivity*. Advances in Physics, 66(2):75–196, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 2 and 86.
- [8] Bardeen, John, Leon N Cooper e J Robert Schrieffer: *Microscopic theory of superconductivity*. Physical Review, 106(1):162, 1957. Citado 3 vezes nas páginas 3, 81, and 82.
- [9] Avella, Adolfo e Ferdinando Mancini: *Strongly correlated systems: numerical methods*, volume 176. Springer Science & Business Media, 2013. Citado na página 3.
- [10] Eisert, Jens, Marcus Cramer e Martin B Plenio: *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*. Reviews of Modern Physics, 82(1):277, 2010. Citado na página 3.

-
- [11] Amico, Luigi, Rosario Fazio, Andreas Osterloh e Vlatko Vedral: *Entanglement in many-body systems*. Reviews of modern physics, 80(2):517, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 3 and 18.
- [12] Li, Hui e F Duncan M Haldane: *Entanglement spectrum as a generalization of entanglement entropy: Identification of topological order in non-abelian fractional quantum hall effect states*. Physical review letters, 101(1):010504, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 3 and 18.
- [13] Mund, C, Ö Legeza e RM Noack: *Quantum information analysis of the phase diagram of the half-filled extended Hubbard model*. Physical Review B, 79(24):245130, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 3, 18, and 19.
- [14] Pollmann, Frank, Ari M Turner, Erez Berg e Masaki Oshikawa: *Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension*. Physical review b, 81(6):064439, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 3 and 18.
- [15] Zhang, Yi, Tarun Grover e Ashvin Vishwanath: *Entanglement entropy of critical spin liquids*. Physical review letters, 107(6):067202, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 3 and 18.
- [16] Goldstein, Moshe, Yuval Gefen e Richard Berkovits: *Entanglement entropy and quantum phase transitions in quantum dots coupled to Luttinger liquid wires*. Physical Review B, 83(24):245112, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 3, 18, and 23.
- [17] De Chiara, G, L Lepori, M Lewenstein e A Sanpera: *Entanglement spectrum, critical exponents, and order parameters in quantum spin chains*. Physical review letters, 109(23):237208, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 3 and 18.
- [18] Lepori, L, G De Chiara e A Sanpera: *Scaling of the entanglement spectrum near quantum phase transitions*. Physical Review B, 87(23):235107, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 3 and 18.
- [19] Giampaolo, SM, S Montangero, F Dell'Anno, S De Siena e F Illuminati: *Universal aspects in the behavior of the entanglement spectrum in one dimension: Scaling transition at the factorization point and ordered entangled structures*. Physical Review B, 88(12):125142, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 3 and 18.
- [20] Iemini, Fernando, Thiago O Maciel e Reinaldo O Vianna: *Entanglement of indistinguishable particles as a probe for quantum phase transitions in the extended Hubbard model*. Physical Review B, 92(7):075423, 2015. Citado na página 3.

- [21] Bragança, Helena, Eduardo Mascarenhas, GI Luiz, C Duarte, Rodrigo Gonçalves Pereira, MF Santos e MCO Aguiar: *Nonuniversality of entanglement convertibility*. Physical Review B, 89(23):235132, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 3, 5, and 131.
- [22] Georges, Antoine, Gabriel Kotliar, Werner Krauth e Marcelo J Rozenberg: *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*. Reviews of Modern Physics, 68(1):13, 1996. Citado na página 3.
- [23] Civelli, Marcello: *Investigation of strongly correlated electron systems with cellular dynamical mean field theory*. arXiv preprint arXiv:0710.2802, Tese de doutorado defendida na Universidade de Rutgers, 2007. Citado 8 vezes nas páginas 3, 100, 103, 107, 110, 112, 115, and 118.
- [24] Civelli, Marcello, Massimo Capone, SS Kancharla, Olivier Parcollet e Gabriel Kotliar: *Dynamical breakup of the Fermi surface in a doped Mott insulator*. Physical review letters, 95(10):106402, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 3, 100, 114, and 126.
- [25] Kancharla, SS, B Kyung, David Sénéchal, M Civelli, M Capone, G Kotliar e A MS Tremblay: *Anomalous superconductivity and its competition with antiferromagnetism in doped Mott insulators*. Physical Review B, 77(18):184516, 2008. Citado 4 vezes nas páginas 3, 100, 114, and 118.
- [26] Maier, Th A, M Jarrell, TC Schulthess, PRC Kent e JB White: *Systematic study of d-wave superconductivity in the 2d repulsive hubbard model*. Physical review letters, 95(23):237001, 2005. Nenhuma citação no texto.
- [27] Giamarchi, Thierry: *Quantum physics in one dimension*, volume 121. Oxford university press, 2004. Citado 6 vezes nas páginas 3, 9, 22, 36, 59, and 69.
- [28] Bloch, Immanuel: *Ultracold quantum gases in optical lattices*. Nature Physics, 1(1):23–30, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 4 and 36.
- [29] Schreiber, Michael, Sean S Hodgman, Pranjal Bordia, Henrik P Lüschen, Mark H Fischer, Ronen Vosk, Ehud Altman, Ulrich Schneider e Immanuel Bloch: *Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasirandom optical lattice*. Science, 349(6250):842–845, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 4 and 40.
- [30] Kondov, SS, WR McGehee, W Xu e B DeMarco: *Disorder-induced localization in a strongly correlated atomic Hubbard gas*. Physical review letters, 114(8):083002, 2015. Citado na página 4.

- [31] Hart, Russell A, Pedro M Duarte, Tsung Lin Yang, Xinxing Liu, Thereza Paiva, Ehsan Khatami, Richard T Scalettar, Nandini Trivedi, David A Huse e Randall G Hulet: *Observation of antiferromagnetic correlations in the Hubbard model with ultracold atoms*. Nature, 519(7542):211–214, 2015. Citado na página 4.
- [32] Cocchi, Eugenio, Luke A Miller, Jan H Drewes, Marco Koschorreck, Daniel Pertot, Ferdinand Brennecke e Michael Köhl: *Equation of state of the two-dimensional Hubbard model*. Physical review letters, 116(17):175301, 2016. Citado na página 4.
- [33] Souza Braganca, Helena de: *Efeitos de localização de Anderson próximo à transição metal-isolante de Mott*. Dissertação de mestrado defendida no departamento de física da UFMG, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 4, 34, and 105.
- [34] Berezinskii, VL: *Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group I. classical systems*. Sov. Phys. JETP, 32(3):493–500, 1971. Citado 2 vezes nas páginas 5 and 9.
- [35] Kosterlitz, John Michael e David James Thouless: *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*. Journal of Physics C: Solid State Physics, 6(7):1181, 1973. Citado 2 vezes nas páginas 5 and 9.
- [36] Mott, Nevill F: *The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals*. Proceedings of the Physical Society. Section A, 62(7):416, 1949. Citado 2 vezes nas páginas 5 and 10.
- [37] Anderson, Philip W: *Absence of diffusion in certain random lattices*. Physical review, 109(5):1492, 1958. Citado 4 vezes nas páginas 5, 11, 38, and 108.
- [38] Mascarenhas, Eduardo, Helena Bragança, R Drumond, MCO Aguiar e M França Santos: *Nonequilibrium localization and the interplay between disorder and interactions*. Journal of Physics: Condensed Matter, 28(19):195602, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 6, 40, and 131.
- [39] Eisert, Jens, Mathis Friesdorf e Christian Gogolin: *Quantum many-body systems out of equilibrium*. Nature Physics, 11(3215):124–130, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 6 and 48.
- [40] Paula Jr, AL de, H Bragança, RG Pereira, RC Drumond e MCO Aguiar: *Spinon and bound-state excitation light cones in Heisenberg XXZ chains*. Physical Review B, 95(4):045125, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 6, 49, 68, and 132.

-
- [41] Braganca, Helena, Shiro Sakai, MCO Aguiar e Marcello Civelli: *Correlation-driven Lifshitz transition at the emergence of the pseudogap phase in the two-dimensional Hubbard model*. Physical review letters, 120:067002, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 7 and 133.
- [42] Sachdev, Subir: *Quantum phase transitions*. Wiley Online Library, 2007. Citado na página 8.
- [43] Peierls, RE: *Quelques proprietes typiques des corpses solides*. Ann. IH Poincare, 5:177–222, 1935. Citado na página 9.
- [44] Kosterlitz, John Michael: *Nobel Lecture: Topological defects and phase transitions*. Reviews of Modern Physics, 89(4):040501, 2017. Citado na página 9.
- [45] Haldane, F Duncan M: *Nobel Lecture: Topological quantum matter*. Reviews of Modern Physics, 89(4):040502, 2017. Citado na página 9.
- [46] Hung, Chen Lung, Xibo Zhang, Nathan Gemelke e Cheng Chin: *Observation of scale invariance and universality in two-dimensional Bose gases*. Nature, 470(9722):236–239, 2011. Citado na página 9.
- [47] Lewenstein, Maciej, Anna Sanpera, Veronica Ahufinger, Bogdan Damski, Aditi Sen e Ujjwal Sen: *Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond*. Advances in Physics, 56(2):243–379, 2007. Citado na página 9.
- [48] Ashcroft, Neil W e N David Mermin: *Solid State Physics (Saunders College, Philadelphia, 1976)*. Google Scholar, página 29, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 10 and 81.
- [49] Hubbard, John: *Electron correlations in narrow energy bands*. Em *Proceedings of the royal society of london a: mathematical, physical and engineering sciences*, volume 276, páginas 238–257. The Royal Society, 1963. Citado na página 10.
- [50] Jördens, Robert, Niels Strohmaier, Kenneth Günter, Henning Moritz e Tilman Esslinger: *A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice*. Nature, 455(7244):204–207, 2008. Citado na página 11.
- [51] Mott, Nevill F e WD Twose: *The theory of impurity conduction*. Advances in Physics, 10(38):107–163, 1961. Citado na página 12.
- [52] Borland, RE: *The nature of the electronic states in disordered one-dimensional systems*. Em *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and*

- Engineering Sciences*, volume 274, páginas 529–545. The Royal Society, 1963. Citado na página 12.
- [53] Abrahams, Elihu, PW Anderson, DC Licciardello e TV Ramakrishnan: *Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions*. Physical Review Letters, 42(10):673, 1979. Citado na página 12.
- [54] Richardella, Anthony, Pedram Roushan, Shawn Mack, Brian Zhou, David A Huse, David D Awschalom e Ali Yazdani: *Visualizing critical correlations near the metal-insulator transition in $Ga_{1-x}Mn_xAs$* . Science, 327(5966):665–669, 2010. Citado na página 13.
- [55] Billy, Juliette, Vincent Josse, Zhanchun Zuo, Alain Bernard, Ben Hambrecht, Pierre Lugan, David Clément, Laurent Sanchez-Palencia, Philippe Bouyer e Alain Aspect: *Direct observation of Anderson localization of matter-waves in a controlled disorder*. Nature, 453(7000):891–894, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 13 and 14.
- [56] Peschel, Ingo: *Special review: entanglement in solvable many-particle models*. Brazilian Journal of Physics, 42(3-4):267–291, 2012. Citado na página 17.
- [57] Ekert, Artur e Peter L Knight: *Entangled quantum systems and the Schmidt decomposition*. American Journal of Physics, 63(5):415–423, 1995. Citado na página 17.
- [58] Shannon, Claude E: *A mathematical theory of communication*. ACM SIGMOBILE Mobile Computing and Communications Review, 5(1):3–55, 2001. Citado na página 18.
- [59] Deville, Alain e Yannick Deville: *Clarifying the link between von Neumann and thermodynamic entropies*. The European Physical Journal H, páginas 1–25, 2013. Citado na página 18.
- [60] Cui, Jian, Mile Gu, Leong Chuan Kwek, Marcelo França Santos, Heng Fan e Vlatko Vedral: *Quantum phases with differing computational power*. Nature communications, 3:221, 2012. Citado 5 vezes nas páginas 18, 19, 20, 21, and 29.
- [61] Cui, Jian, Jun Peng Cao e Heng Fan: *Entanglement-assisted local operations and classical communications conversion in quantum critical systems*. Physical Review A, 85(2):022338, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 18 and 29.
- [62] Cui, Jian, Luigi Amico, Heng Fan, Mile Gu, Alioscia Hamma e Vlatko Vedral: *Local characterization of one-dimensional topologically ordered states*. Physical Review B, 88(12):125117, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 18 and 20.

- [63] Hamma, Alioscia, Lukasz Cincio, Siddhartha Santra, Paolo Zanardi e Luigi Amico: *Local response of topological order to an external perturbation*. Physical review letters, 110(21):210602, 2013. Citado na página 18.
- [64] Jonathan, Daniel e Martin B Plenio: *Entanglement-assisted local manipulation of pure quantum states*. Physical Review Letters, 83(17):3566, 1999. Citado na página 19.
- [65] Turgut, S: *Catalytic transformations for bipartite pure states*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 40(40):12185, 2007. Citado na página 19.
- [66] Sanders, Yuval Rishu e Gilad Gour: *Necessary conditions for entanglement catalysts*. Physical Review A, 79(5):054302, 2009. Citado na página 19.
- [67] Nielsen, Michael A: *Conditions for a class of entanglement transformations*. Physical Review Letters, 83(2):436, 1999. Citado na página 20.
- [68] Stanley, H Eugene e Guenter Ahlers: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Physics Today, 26:71, 1973. Citado na página 22.
- [69] LIEB, ELLIOTT, THEODORE SCHULT e DANIEL MATTIS: *Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain*. Mathematical Physics in One Dimension: Exactly Soluble Models of Interacting Particles, 16:466, 2013. Citado na página 22.
- [70] Okamoto, Kiyomi e Kiyohide Nomura: *Critical properties of the XXZ chain in an external staggered magnetic field*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 29(9):2279, 1996. Citado na página 23.
- [71] Nijs, Marcel den e Koos Rommelse: *Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains*. Physical Review B, 40(7):4709, 1989. Citado na página 23.
- [72] Chen, Wei, Kazuo Hida e BC Sanctuary: *Ground-state phase diagram of $S=1$ XXZ chains with uniaxial single-ion-type anisotropy*. Physical Review B, 67(10):104401, 2003. Citado 4 vezes nas páginas 23, 24, 30, and 32.
- [73] Haldane, F Duncan M: *Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: identification with the $O(3)$ nonlinear sigma model*. Physics Letters A, 93(9):464–468, 1983. Citado na página 23.
- [74] Tsukano, Masayoshi e Kiyohide Nomura: *Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition of spin-1 XXZ chains in a staggered magnetic field*. Journal of the Physical Society of Japan, 67(1):302–306, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 23 and 29.

- [75] Heng Su, Yao, Sam Young Cho, Bo Li, Hong Lei Wang e Huan Qiang Zhou: *Non-local correlations in the Haldane phase for an XXZ spin-1 chain: A perspective from infinite matrix product state representation*. Journal of the Physical Society of Japan, 81(7):074003, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 23 and 29.
- [76] Kitazawa, Atsuhiko, Keigo Hijii e Kiyohide Nomura: *An $SU(2)$ symmetry of the one-dimensional spin-1 XY model*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 36(23):L351, 2003. Citado na página 23.
- [77] White, Steven R: *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Physical review letters, 69(19):2863, 1992. Citado na página 24.
- [78] White, Steven R: *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Physical Review B, 48(14):10345, 1993. Citado na página 24.
- [79] Wilson, Kenneth G: *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Reviews of Modern Physics, 47(4):773, 1975. Citado 2 vezes nas páginas 24 and 55.
- [80] Legeza, Ö, J Sólyom, L Tincani e RM Noack: *Entropic analysis of quantum phase transitions from uniform to spatially inhomogeneous phases*. Physical review letters, 99(8):087203, 2007. Citado na página 28.
- [81] Francesco, Philippe, Pierre Mathieu e David Sénéchal: *Conformal field theory*. Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 31.
- [82] Calabrese, Pasquale e John Cardy: *Entanglement entropy and quantum field theory*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2004(06):P06002, 2004. Citado na página 31.
- [83] Bragança, Helena, MCO Aguiar, J Vučičević, D Tanasković e V Dobrosavljević: *Anderson localization effects near the Mott metal-insulator transition*. Physical Review B, 92(12):125143, 2015. Citado na página 34.
- [84] Lee, Patrick A e TV Ramakrishnan: *Disordered electronic systems*. Reviews of Modern Physics, 57(2):287, 1985. Citado na página 34.
- [85] Belitz, D e TR Kirkpatrick: *The anderson-mott transition*. Reviews of modern physics, 66(2):261, 1994. Citado na página 34.
- [86] Miranda, E e V Dobrosavljević: *Disorder-driven non-Fermi liquid behaviour of correlated electrons*. Reports on Progress in Physics, 68(10):2337, 2005. Citado na página 34.

- [87] Vojta, Thomas, Frank Epperlein e Michael Schreiber: *Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!* Physical review letters, 81(19):4212, 1998. Citado na página 34.
- [88] Basko, DM, IL Aleiner e BL Altshuler: *Metal-insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states.* Annals of physics, 321(5):1126–1205, 2006. Citado na página 34.
- [89] Nandkishore, Rahul e David A Huse: *Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics.* Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 6(1):15–38, 2015. Citado na página 34.
- [90] Gogolin, Christian e Jens Eisert: *Equilibration, thermalisation, and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems.* Reports on Progress in Physics, 79(5):056001, 2016. Citado na página 34.
- [91] Oganesyan, Vadim e David A Huse: *Localization of interacting fermions at high temperature.* Physical Review B, 75(15):155111, 2007. Citado na página 34.
- [92] Goold, J, Christian Gogolin, SR Clark, Jens Eisert, A Scardicchio e A Silva: *Total correlations of the diagonal ensemble herald the many-body localization transition.* Physical Review B, 92(18):180202, 2015. Citado na página 34.
- [93] Andraschko, Felix, Tilman Enss e Jesko Sirker: *Purification and many-body localization in cold atomic gases.* Physical review letters, 113(21):217201, 2014. Citado na página 34.
- [94] Bardarson, Jens H, Frank Pollmann e Joel E Moore: *Unbounded growth of entanglement in models of many-body localization.* Physical review letters, 109(1):017202, 2012. Citado na página 34.
- [95] Serbyn, Maksym, Z Papić e Dmitry A Abanin: *Universal slow growth of entanglement in interacting strongly disordered systems.* Physical review letters, 110(26):260601, 2013. Citado na página 34.
- [96] Vosk, Ronen e Ehud Altman: *Many-body localization in one dimension as a dynamical renormalization group fixed point.* Physical review letters, 110(6):067204, 2013. Citado na página 34.
- [97] Nanduri, Arun, Hyungwon Kim e David A Huse: *Entanglement spreading in a many-body localized system.* Physical Review B, 90(6):064201, 2014. Citado na página 34.

- [98] Luitz, David J, Nicolas Laflorencie e Fabien Alet: *Many-body localization edge in the random-field Heisenberg chain*. Physical Review B, 91(8):081103, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 34 and 35.
- [99] Lieb, Elliott, Theodore Schultz e Daniel Mattis: *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*. Em *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models*, páginas 543–601. Springer, 2004. Citado na página 36.
- [100] Blatt, Rainer e Christian F Roos: *Quantum simulations with trapped ions*. Nature Physics, 8(4):277, 2012. Citado na página 36.
- [101] De Luca, Andrea e Antonello Scardicchio: *Ergodicity breaking in a model showing many-body localization*. EPL (Europhysics Letters), 101(3):37003, 2013. Citado na página 36.
- [102] Hoffman, Kenneth e Ray Kunze: *Linear algebra. 1971*. Englewood Cliffs, New Jersey. Citado na página 37.
- [103] Goussev, Arseni, Rodolfo A Jalabert, Horacio M Pastawski e Diego Wisniacki: *Loschmidt echo*. arXiv preprint arXiv:1206.6348, 2012. Citado na página 38.
- [104] Mondaini, Rubem e Marcos Rigol: *Many-body localization and thermalization in disordered Hubbard chains*. Physical Review A, 92(4):041601, 2015. Citado na página 40.
- [105] Stöckmann, Hans Jürgen: *Quantum chaos: an introduction*, 2000. Citado na página 44.
- [106] Rabson, David A, BN Narozhny e AJ Millis: *Crossover from Poisson to Wigner-Dyson level statistics in spin chains with integrability breaking*. Physical Review B, 69(5):054403, 2004. Citado na página 44.
- [107] Bloch, Immanuel: *Ultracold quantum gases in optical lattices*. Nature Physics, 1(1):23–30, 2005. Citado na página 47.
- [108] Bloch, Immanuel, Jean Dalibard e Wilhelm Zwerger: *Many-body physics with ultracold gases*. Rev. Mod. Phys., 80(3):885, 2008. Citado na página 47.
- [109] Jaksch, Dieter e Peter Zoller: *The cold atom Hubbard toolbox*. Ann. Phys., 315(1):52–79, 2005. Citado na página 47.
- [110] Duan, L M, E Demler e MD Lukin: *Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices*. Phys. Rev. Lett., 91(9):090402, 2003. Citado na página 47.

- [111] Polkovnikov, Anatoli, Krishnendu Sengupta, Alessandro Silva e Mukund Vengalattore: *Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems*. Rev. Mod. Phys., 83(3):863, 2011. Citado na página 47.
- [112] Greiner, Markus, Olaf Mandel, Theodor W Hänsch e Immanuel Bloch: *Collapse and revival of the matter wave field of a Bose–Einstein condensate*. Nature, 419(6902):51–54, 2002. Citado na página 47.
- [113] Sommer, Ariel, Mark Ku, Giacomo Roati e Martin W Zwierlein: *Universal spin transport in a strongly interacting Fermi gas*. Nature, 472(7342):201–204, 2011. Citado na página 47.
- [114] Strohmaier, Niels, Daniel Greif, Robert Jördens, Leticia Tarruell, Henning Moritz, Tilman Esslinger, Rajdeep Sensarma, David Pekker, Ehud Altman e Eugene Demler: *Observation of elastic doublon decay in the Fermi-Hubbard model*. Physical review letters, 104(8):080401, 2010. Citado na página 47.
- [115] Schneider, Ulrich, Lucia Hackermüller, Jens Philipp Ronzheimer, Sebastian Will, Simon Braun, Thorsten Best, Immanuel Bloch, Eugene Demler, Stephan Mandt, David Rasch et al.: *Fermionic transport and out-of-equilibrium dynamics in a homogeneous Hubbard model with ultracold atoms*. Nature Physics, 8(3):213, 2012. Citado na página 47.
- [116] Pertot, D, A Sheikhan, E Cocchi, LA Miller, JE Bohn, M Koschorreck, M Köhl e C Kollath: *Relaxation dynamics of a Fermi gas in an optical superlattice*. Physical review letters, 113(17):170403, 2014. Citado na página 47.
- [117] Will, Sebastian, Deepak Iyer e Marcos Rigol: *Observation of coherent quench dynamics in a metallic many-body state of fermionic atoms*. Nature communications, 6:6009, 2015. Citado na página 47.
- [118] Iyer, Deepak, Rubem Mondaini, Sebastian Will e Marcos Rigol: *Coherent quench dynamics in the one-dimensional Fermi-Hubbard model*. Physical Review A, 90(3):031602, 2014. Citado na página 47.
- [119] Riegger, L, G Orso e F Heidrich-Meisner: *Interaction quantum quenches in the one-dimensional Fermi-Hubbard model with spin imbalance*. Physical Review A, 91(4):043623, 2015. Citado na página 47.
- [120] Kennes, DM, V Meden e R Vasseur: *Universal quench dynamics of interacting quantum impurity systems*. Physical Review B, 90(11):115101, 2014. Citado na página 47.

- [121] Karrasch, C, JE Moore e F Heidrich-Meisner: *Real-time and real-space spin and energy dynamics in one-dimensional spin-1 2 systems induced by local quantum quenches at finite temperatures*. Phys. Rev. B, 89(7):075139, 2014. Citado na página 48.
- [122] Eisler, Viktor e Ingo Peschel: *Evolution of entanglement after a local quench*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., 2007(06):P06005, 2007. Citado na página 48.
- [123] Langer, S, F Heidrich-Meisner, J Gemmer, IP McCulloch e U Schollwöck: *Real-time study of diffusive and ballistic transport in spin-1 2 chains using the adaptive time-dependent density matrix renormalization group method*. Phys. Rev. B, 79(21):214409, 2009. Citado na página 48.
- [124] Langer, Stephan, Markus Heyl, Ian P McCulloch e Fabian Heidrich-Meisner: *Real-time energy dynamics in spin-1 2 Heisenberg chains*. Phy Rev. B, 84(20):205115, 2011. Citado na página 48.
- [125] Rajak, Atanu e Uma Divakaran: *Effect of double local quenches on the Loschmidt echo and entanglement entropy of a one-dimensional quantum system*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., (4):043107, 2016. Citado na página 48.
- [126] Sabetta, Thiago e Grégoire Misguich: *Nonequilibrium steady states in the quantum XXZ spin chain*. Phys. Rev. B, 88:245114, Dec 2013. Citado na página 48.
- [127] Bhaseen, M. J., Benjamin Doyon, Andrew Lucas e Koenraad Schalm: *Energy flow in quantum critical systems far from equilibrium*. Nat. Phys., 11(6):509–514, junho 2015. Citado na página 48.
- [128] Biella, Alberto, Andrea De Luca, Jacopo Viti, Davide Rossini, Leonardo Mazza e Rosario Fazio: *Energy transport between two integrable spin chains*. Phys. Rev. B, 93:205121, May 2016. Citado na página 48.
- [129] Bertini, B., M. Collura, J. De Nardis e M. Fagotti: *Transport in out-of-equilibrium XXZ chains: exact profiles of charges and currents*. Phys. Rev. Lett., 117:207201, Nov 2016. Citado na página 48.
- [130] Lieb, Elliott H. e Derek W. Robinson: *The finite group velocity of quantum spin systems*. Communications in Mathematical Physics, 28(3):251–257, 1972. Citado na página 48.
- [131] Manmana, Salvatore R, Stefan Wessel, Reinhard M Noack e Alejandro Muramatsu: *Time evolution of correlations in strongly interacting fermions after a quantum quench*. Phys. Rev. B, 79(15):155104, 2009. Citado na página 48.

- [132] Bertini, Bruno, Mario Collura, Jacopo De Nardis e Maurizio Fagotti: *Transport in Out-of-Equilibrium $X X Z$ Chains: Exact Profiles of Charges and Currents*. Physical review letters, 117(20):207201, 2016. Citado na página 48.
- [133] Läuchli, Andreas M e Corinna Kollath: *Spreading of correlations and entanglement after a quench in the one-dimensional Bose–Hubbard model*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2008(05):P05018, 2008. Citado na página 48.
- [134] Carleo, Giuseppe, Federico Becca, Laurent Sanchez-Palencia, Sandro Sorella e Michele Fabrizio: *Light-cone effect and supersonic correlations in one-and two-dimensional bosonic superfluids*. Physical Review A, 89(3):031602, 2014. Citado na página 48.
- [135] Gobert, Dominique, Corinna Kollath, Ulrich Schollwöck e Gunter Schütz: *Real-time dynamics in spin-1/2 chains with adaptive time-dependent density matrix renormalization group*. Physical Review E, 71(3):036102, 2005. Citado na página 48.
- [136] Collura, Mario, Pasquale Calabrese e Fabian HL Essler: *Quantum quench within the gapless phase of the spin-1/2 heisenberg xxz spin chain*. Physical Review B, 92(12):125131, 2015. Citado na página 48.
- [137] Alba, Vincenzo e Fabian Heidrich-Meisner: *Entanglement spreading after a geometric quench in quantum spin chains*. Physical Review B, 90(7):075144, 2014. Citado na página 48.
- [138] Vlijm, Rogier, Martin Ganahl, Davide Fioretto, Michael Brockmann, Masudul Haque, Hans Gerd Evertz e J S Caux: *Quasi-soliton scattering in quantum spin chains*. Physical Review B, 92(21):214427, 2015. Citado na página 48.
- [139] Jesenko, Simon e Marko Žnidarič: *Finite-temperature magnetization transport of the one-dimensional anisotropic Heisenberg model*. Physical Review B, 84(17):174438, 2011. Citado na página 48.
- [140] Cheneau, Marc, Peter Barmettler, Dario Poletti, Manuel Endres, Peter Schauß, Takeshi Fukuhara, Christian Gross, Immanuel Bloch, Corinna Kollath e Stefan Kuhr: *Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*. Nature, 481(7382):484–487, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 48 and 49.
- [141] Jurcevic, Petar, Ben P Lanyon, Philipp Hauke, Cornelius Hempel, Peter Zoller, Rainer Blatt e Christian F Roos: *Quasiparticle engineering and entanglement propagation in a quantum many-body system*. Nature, 511(7508):202–205, 2014. Citado na página 48.
- [142] Takahashi, Minoru: *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. Cambridge University Press, 2005. Citado na página 49.

- [143] Korepin, V.E., N.M. Bogoliubov e A.G. Izergin: *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*. Cambridge University Press, 1997. Citado na página 49.
- [144] Kouwenhoven, Leo e Leonid Glazman: *Revival of the Kondo effect*. Physics world, 14(1):33, 2001. Citado na página 52.
- [145] Bloch, F: *Zum elektrischen Widerstandsgesetz bei tiefen Temperaturen*. Zeitschrift für Physik, 59(3-4):208–214, 1930. Citado na página 52.
- [146] Kondo, Jun: *Resistance minimum in dilute magnetic alloys*. Progress of theoretical physics, 32(1):37–49, 1964. Citado na página 53.
- [147] Anderson, PW: *Nobel Lecture 1977*. Nobel Lectures Physics, 1980:371–398, 1971. Citado na página 53.
- [148] Anderson, Philip Warren: *Localized magnetic states in metals*. Physical Review, 124(1):41, 1961. Citado 2 vezes nas páginas 53 and 55.
- [149] Friedel, J: *Metallic alloys*. Il Nuovo Cimento (1955-1965), 7:287–311, 1958. Citado na página 54.
- [150] Blandin, A e J Friedel: *Propriétés magnétiques des alliages dilués. Interactions magnétiques et antiferromagnétisme dans les alliages du type métal noble-métal de transition*. Journal de Physique et le Radium, 20(2-3):160–168, 1959. Citado na página 54.
- [151] Ternes, Markus, Andreas J Heinrich e Wolf Dieter Schneider: *Spectroscopic manifestations of the Kondo effect on single adatoms*. Journal of Physics: Condensed Matter, 21(5):053001, 2008. Citado na página 56.
- [152] Nozieres, Philippe: *A “Fermi-liquid” description of the Kondo problem at low temperatures*. Journal of low temperature physics, 17(1):31–42, 1974. Citado na página 55.
- [153] Andrei, Natan, K Furuya e JH Lowenstein: *Solution of the Kondo problem*. Reviews of modern physics, 55(2):331, 1983. Citado na página 55.
- [154] Affleck, Ian: *Conformal field theory approach to the Kondo effect*. arXiv preprint cond-mat/9512099, 1995. Citado na página 56.
- [155] Gubernatis, JE, JE Hirsch e DJ Scalapino: *Spin and charge correlations around an Anderson magnetic impurity*. Physical Review B, 35(16):8478, 1987. Citado 3 vezes nas páginas 56, 57, and 73.

- [156] Borda, László: *Kondo screening cloud in a one-dimensional wire: Numerical renormalization group study*. Physical Review B, 75(4):041307, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 56 and 57.
- [157] Hand, Thomas, Johann Kroha e Hartmut Monien: *Spin correlations and finite-size effects in the one-dimensional kondo box*. Physical review letters, 97(13):136604, 2006. Citado na página 56.
- [158] Affleck, Ian: *The Kondo screening cloud: what it is and how to observe it*. arXiv preprint arXiv:0911.2209, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 56, 57, and 58.
- [159] Goldhaber-Gordon, David, Hadas Shtrikman, D Mahalu, David Abusch-Magder, U Meirav e MA Kastner: *Kondo Physics in a Single Electron Transistor*. Nature, 391(34373):156–159, 1998. Citado na página 58.
- [160] Cronenwett, Sara M, Tjerk H Oosterkamp e Leo P Kouwenhoven: *A tunable Kondo effect in quantum dots*. Science, 281(5376):540–544, 1998. Citado na página 58.
- [161] Bauer, Johannes, Christophe Salomon e Eugene Demler: *Realizing a Kondo-correlated state with ultracold atoms*. Physical review letters, 111(21):215304, 2013. Citado na página 58.
- [162] Türeci, Hakan E, M Hanl, M Claassen, A Weichselbaum, T Hecht, B Braunecker, A Govorov, L Glazman, Atac Imamoglu e J von Delft: *Many-body dynamics of exciton creation in a quantum dot by optical absorption: A quantum quench towards kondo correlations*. Physical review letters, 106(10):107402, 2011. Citado na página 58.
- [163] Latta, Christian, Florian Haupt, Markus Hanl, Andreas Weichselbaum, Martin Claassen, Wolf Wuester, Parisa Fallahi, Stefan Faelt, Leonid Glazman, Jan von Delft *et al.*: *Quantum quench of Kondo correlations in optical absorption*. Nature, 474(10204):627–630, 2011. Citado na página 58.
- [164] Nordlander, Peter, Michael Pustilnik, Yigal Meir, Ned S Wingreen e David C Langreth: *How long does it take for the Kondo effect to develop?* Physical review letters, 83(4):808, 1999. Citado na página 58.
- [165] Paaske, Jens, A Rosch e P Wölfle: *Nonequilibrium transport through a Kondo dot in a magnetic field: Perturbation theory*. Physical Review B, 69(15):155330, 2004. Citado na página 58.
- [166] Anders, Frithjof B e Avraham Schiller: *Real-time dynamics in quantum-impurity systems: A time-dependent numerical renormalization-group approach*. Physical review letters, 95(19):196801, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 58 and 66.

- [167] Kehrein, Stefan: *Scaling and decoherence in the nonequilibrium Kondo model*. Physical review letters, 95(5):056602, 2005. Citado na página 58.
- [168] Pletyukhov, Mikhail e Herbert Schoeller: *Nonequilibrium Kondo model: Crossover from weak to strong coupling*. Physical review letters, 108(26):260601, 2012. Citado na página 58.
- [169] Schrieffer, JR e PA Wolff: *Relation between the anderson and kondo hamiltonians*. Physical Review, 149(2):491, 1966. Citado na página 58.
- [170] Medvedyeva, M, A Hoffmann e S Kehrein: *Spatiotemporal buildup of the Kondo screening cloud*. Physical Review B, 88(9):094306, 2013. Citado na página 58.
- [171] Lechtenberg, Benedikt e Frithjof B Anders: *Spatial and temporal propagation of Kondo correlations*. Physical Review B, 90(4):045117, 2014. Citado na página 58.
- [172] Ghosh, Shreyoshi, Pedro Ribeiro e Masudul Haque: *Dynamics of the impurity screening cloud following quantum quenches of the resonant level model*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2015(8):P08002, 2015. Citado na página 58.
- [173] Nuss, Martin, Martin Ganahl, Enrico Arrigoni, Wolfgang von der Linden e Hans Gerd Evertz: *Nonequilibrium spatiotemporal formation of the Kondo screening cloud on a lattice*. Physical Review B, 91(8):085127, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 58, 59, and 66.
- [174] Lee, Dung Hai e John Toner: *Kondo effect in a Luttinger liquid*. Physical review letters, 69(23):3378, 1992. Citado na página 59.
- [175] Horvat, Alen *et al.*: *Kondo effect at low electron density and high particle-hole asymmetry in 1D, 2D, and 3D*. Physical Review B, 94(12):125138, 2016. Citado na página 59.
- [176] Hallberg, KA e CA Balseiro: *Static and dynamical properties of a magnetic impurity in a strongly correlated electronic system*. Physical Review B, 52(1):374, 1995. Citado na página 59.
- [177] Costamagna, S, CJ Gazza, ME Torio e JA Riera: *Anderson impurity in the one-dimensional Hubbard model for finite-size systems*. Physical Review B, 74(19):195103, 2006. Citado 6 vezes nas páginas 59, 60, 61, 63, 65, and 74.
- [178] Ovchinnikov, AA: *Excitation spectrum of an antiferromagnetic Heisenberg chain*. Sov. Phys. JETP, 29(4), 1969. Citado 2 vezes nas páginas 63 and 101.

- [179] Lobaskin, Dmitry e Stefan Kehrein: *Crossover from nonequilibrium to equilibrium behavior in the time-dependent Kondo model*. Physical Review B, 71(19):193303, 2005. Citado na página 66.
- [180] Cohen, Guy, Emanuel Gull, David R Reichman, Andrew J Millis e Eran Rabani: *Numerically exact long-time magnetization dynamics at the nonequilibrium Kondo crossover of the Anderson impurity model*. Physical Review B, 87(19):195108, 2013. Citado na página 66.
- [181] Lieb, Elliott H e F Yu Wu: *Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension*. Physical Review Letters, 20(25):1445, 1968. Citado 3 vezes nas páginas 68, 98, and 104.
- [182] Korepin, Vladimir E e Itzhak Roditi: *Charge and spin separation in the 1D Hubbard model*. arXiv preprint cond-mat/0012266, 2000. Citado na página 68.
- [183] Ogata, Masao e Hiroyuki Shiba: *Bethe-ansatz wave function, momentum distribution, and spin correlation in the one-dimensional strongly correlated Hubbard model*. Physical Review B, 41(4):2326, 1990. Citado na página 69.
- [184] Enss, Tilman e Jesko Sirker: *Light cone renormalization and quantum quenches in one-dimensional Hubbard models*. New Journal of Physics, 14(2):023008, 2012. Citado na página 69.
- [185] Schulz, HJ: *Interacting fermions in one dimension: from weak to strong correlation*. arXiv preprint cond-mat/9302006, 1993. Citado na página 69.
- [186] Corak, WS, BB Goodman, CB Satterthwaite e A Wexler: *Exponential temperature dependence of the electronic specific heat of superconducting vanadium*. Physical Review, 96(5):1442, 1954. Citado na página 81.
- [187] Jerome, D, A Mazaud, M Ribault e K Bechgaard: *Superconductivity in a synthetic organic conductor (TMTSF) 2PF 6*. Journal de Physique Lettres, 41(4):95–98, 1980. Citado na página 82.
- [188] Lang, Michael e Jens Müller: *Organic superconductors*. Em *The Physics of Superconductors*, páginas 453–554. Springer, 2004. Citado na página 82.
- [189] Bednorz, J George e K Alex Müller: *Possible highTc superconductivity in the Ba-La-Cu- O system*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 64(2):189–193, 1986. Citado 3 vezes nas páginas 82, 83, and 88.

- [190] Keimer, B, SA Kivelson, MR Norman, S Uchida e J Zaanen: *From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides*. Nature, 518(7538):179, 2015. Citado na página 82.
- [191] Kamihara, Yoichi, Takumi Watanabe, Masahiro Hirano e Hideo Hosono: *Iron-based layered superconductor La [O_{1-x}F x] FeAs (x= 0.05- 0.12) with T_c= 26 K*. Journal of the American Chemical Society, 130(11):3296–3297, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 82 and 83.
- [192] Si, Qimiao, Rong Yu e Elihu Abrahams: *High-temperature superconductivity in iron pnictides and chalcogenides*. Nature Reviews Materials, 1:16017, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 82, 83, and 84.
- [193] Onnes, H Kamerlingh: *The resistance of pure mercury at helium temperatures*. Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden, 12(120):1, 1911. Citado na página 82.
- [194] London, Fritz e Heinz London: *The electromagnetic equations of the supraconductor*. Em *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 149, páginas 71–88. The Royal Society, 1935. Citado na página 82.
- [195] Ginzburg, Vitalii L e Lev D Landau: *On the theory of superconductivity*. Zh. eksp. teor. Fiz, 20(1064-1082):35, 1950. Citado na página 82.
- [196] Josephson, Brian David: *Possible new effects in superconductive tunnelling*. Physics letters, 1(7):251–253, 1962. Citado na página 83.
- [197] Josephson, BRIAN D: *The discovery of tunnelling supercurrents*. Reviews of Modern Physics, 46(2):251, 1974. Citado na página 83.
- [198] Andres, K, JE Graebner e HR Ott: *4 f-Virtual-Bound-State Formation in Ce Al₃ at Low Temperatures*. Physical Review Letters, 35(26):1779, 1975. Citado na página 83.
- [199] Steglich, Frank, J Aarts, CD Bredl, W Lieke, D Meschede, W Franz e H Schäfer: *Superconductivity in the Presence of Strong Pauli Paramagnetism: Ce Cu₂ Si₂*. Physical Review Letters, 43(25):1892, 1979. Citado na página 83.
- [200] Mathur, ND, FM Grosche, SR Julian, IR Walker *et al.*: *Magnetically mediated superconductivity in heavy fermion compounds*. Nature, 394(6688):39, 1998. Citado na página 83.
- [201] Zhang, Shoutao, Yanchao Wang, Jurong Zhang, Hanyu Liu, Xin Zhong, Hai Feng Song, Guochun Yang, Lijun Zhang e Yanming Ma: *Phase diagram and high-temperature*

- superconductivity of compressed selenium hydrides*. Scientific reports, 5, 2015. Citado na página 84.
- [202] Wikimedia Commons, The free media repository: *Timeline of Superconductivity from 1900 to 2015*. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Timeline_of_Superconductivity_from_1900_to_2015.svg. Citado na página 84.
- [203] Malozemoff, AP, J Yuan e CM Rey: *High-temperature superconducting (HTS) AC cables for power grid applications*. Em *Superconductors in the Power Grid*, páginas 133–188. Elsevier, 2015. Citado na página 85.
- [204] Aarnink, René e Johan Overweg: *Magnetic Resonance Imaging, a success story for superconductivity*. Europhysics News, 43(4):26–29, 2012. Citado na página 85.
- [205] Giazotto, Francesco: *Superconducting transistors: A boost for quantum computing*. Nature Physics, 11(7):527–528, 2015. Citado na página 85.
- [206] Fagaly, RL: *Superconducting quantum interference device instruments and applications*. Review of scientific instruments, 77(10):101101, 2006. Citado na página 85.
- [207] Aprili, Marco: *Superconducting electronics: The nanoSQUID makes its debut*. Nature nanotechnology, 1(1):15–16, 2006. Citado na página 85.
- [208] Basov, DN e Andrey V Chubukov: *Manifesto for a higher T_c -lessons from pnictides and cuprates*. arXiv preprint arXiv:1104.1949, 2011. Citado na página 86.
- [209] Taillefer, Louis: *Scattering and pairing in cuprate superconductors*. Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 1(1):51–70, 2010. Citado na página 86.
- [210] Scalapino, Douglas J: *A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors*. Reviews of Modern Physics, 84(4):1383, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 86 and 91.
- [211] Anderson, Philip W: *Is there glue in cuprate superconductors?* Science, 316(5832):1705–1707, 2007. Citado na página 86.
- [212] Plakida, Nikolay: *High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications*, volume 166. Springer Science & Business Media, 2010. Citado na página 87.
- [213] Greene, Laura H, Hamood Z Arham, Cassandra R Hunt e Wan Kyu Park: *Design of New Superconducting Materials, and Point-Contact Spectroscopy as a Probe of Strong*

- Electron Correlations*. Journal of superconductivity and novel magnetism, 25(7):2121–2126, 2012. Citado na página 88.
- [214] Dagotto, Elbio: *Correlated electrons in high-temperature superconductors*. Reviews of Modern Physics, 66(3):763, 1994. Citado na página 88.
- [215] Damascelli, Andrea, Zahid Hussain e Zhi Xun Shen: *Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors*. Reviews of modern physics, 75(2):473, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 88, 123, and 126.
- [216] Barišić, Neven, Mun K Chan, Yuan Li, Guichuan Yu, Xudong Zhao, Martin Dressel, Ana Smontara e Martin Greven: *Universal sheet resistance and revised phase diagram of the cuprate high-temperature superconductors*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 110(30):12235–12240, 2013. Citado na página 89.
- [217] Gough, CE, MS Colclough, EM Forgan, RG Jordan e M Keene: *Flux quantization in a high- T (c) superconductor*. Nature, 326:855, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 88 and 89.
- [218] Wollman, DA, DJ Van Harlingen, WC Lee, DM Ginsberg e AJ Leggett: *Experimental determination of the superconducting pairing state in YBCO from the phase coherence of YBCO-Pb dc SQUIDs*. Physical Review Letters, 71(13):2134, 1993. Citado na página 89.
- [219] Tsuei, CC, John R Kirtley, CC Chi, Lock See Yu-Jahnes, A Gupta, T Shaw, JZ Sun e MB Ketchen: *Pairing symmetry and flux quantization in a tricrystal superconducting ring of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$* . Physical Review Letters, 73(4):593, 1994. Citado na página 89.
- [220] Tsuei, CC e JR Kirtley: *Pairing symmetry in cuprate superconductors*. Reviews of Modern Physics, 72(4):969, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 89 and 117.
- [221] Tilley, David R e John Tilley: *Superfluidity and superconductivity*. CRC Press, 1990. Citado na página 90.
- [222] Varma, CM, P Be Littlewood, S Schmitt-Rink, E Abrahams e AE Ruckenstein: *Phenomenology of the normal state of Cu-O high-temperature superconductors*. Physical Review Letters, 63(18):1996, 1989. Citado na página 90.
- [223] Hasselmann, N, AH Castro Neto e C Morais Smith: *Spin-glass phase of cuprates*. Physical Review B, 69(1):014424, 2004. Citado na página 91.

- [224] Badoux, S, W Tabis, F Laliberté, G Grissonnanche, B Vignolle, D Vignolles, J Béard, DA Bonn, WN Hardy, R Liang *et al.*: *Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor*. Nature, 531(16983):210–214, 2016. Citado na página 91.
- [225] *Figura disponível em <https://www.quora.com/What-are-the-significances-of-charge-density-waves-CDW-and-spin-density-waves-SDW-in-condensed-matter-physics>*. Citado na página 91.
- [226] Bickers, NE, DJ Scalapino e RT Scalettar: *CDW and SDW mediated pairing interactions*. International Journal of Modern Physics B, 1(03n04):687–695, 1987. Citado na página 91.
- [227] Dahm, Thomas, V Hinkov, SV Borisenko, AA Kordyuk, VB Zabolotnyy, J Fink, B Büchner, DJ Scalapino, W Hanke e B Keimer: *Strength of the spin-fluctuation-mediated pairing interaction in a high-temperature superconductor*. Nature Physics, 5(1180):217–221, 2009. Citado na página 91.
- [228] Keimer, Bernhard: *9 Recent Advances in Experimental Research on High-Temperature Superconductivity*. Emergent Phenomena in Correlated Matter: Autumn School Organized by the Forschungszentrum Jülich and the German Research School for Simulation Sciences at Forschungszentrum Jülich 23-27 September 2013; Lecture Notes of the Autumn School Correlated Electrons 2013, 3, 2013. Citado na página 92.
- [229] Rice, TM, Kai Yu Yang e FC Zhang: *A phenomenological theory of the anomalous pseudogap phase in underdoped cuprates*. Reports on Progress in Physics, 75(1):016502, 2012. Citado na página 92.
- [230] Renner, Ch, Bernard Revaz, J Y Genoud, K Kadowaki e Ø Fischer: *Pseudogap precursor of the superconducting gap in under- and overdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* . Physical review letters, 80(1):149, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 92 and 93.
- [231] Hanaguri, T, C Lupien, Y Kohsaka, D H Lee, M Azuma, M Takano, H Takagi e JC Davis: *A 'checkerboard' electronic crystal state in lightly hole-doped $\text{Ca}_{1-2x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$* . Nature, 430(2861):1001–1005, 2004. Citado na página 93.
- [232] Loeser, AG, ZX Shen, DS Dessau, DS Marshall, CH Park, P Fournier e W Kapitulnik: *Excitation gap in the normal state of underdoped*. Science, 273(19), 1996. Citado na página 93.
- [233] Ding, Hong, T Yokoya, JC Campuzano, T Takahashi, M Randeria, MR Norman, T Mochiku, K Kadowaki e J Giapintzakis: *Spectroscopic evidence for a pseudogap in the*

- normal state of underdoped high-Tc superconductors*. Nature, 382(6586):51–54, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 93 and 94.
- [234] Shi, Ming, A Bendounan, E Razzoli, S Rosenkranz, MR Norman, JC Campuzano, J Chang, Martin Månsson, Y Sassa, Tomas Claesson *et al.*: *Spectroscopic evidence for preformed Cooper pairs in the pseudogap phase of cuprates*. EPL (Europhysics Letters), 88(2):27008, 2009. Citado na página 95.
- [235] Shen, Kyle M, F Ronning, DH Lu, F Baumberger, NJC Ingle, WS Lee, W Meevasana, Y Kohsaka, M Azuma, M Takano *et al.*: *Nodal quasiparticles and antinodal charge ordering in $Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$* . Science, 307(5711):901–904, 2005. Citado na página 96.
- [236] Marshall, DS, DS Dessau, AG Loeser, CH Park, AY Matsuura, JN Eckstein, I Bozovic, P Fournier, A Kapitulnik, WE Spicer *et al.*: *Unconventional electronic structure evolution with hole doping in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$: Angle-resolved photoemission results*. Physical Review Letters, 76(25):4841, 1996. Citado na página 95.
- [237] Norman, MR, H Ding, M Randeria, JC Campuzano, T Yokoya, T Takeuchi, T Takahashi, T Mochiku, K Kadowaki, P Guptasarma *et al.*: *Destruction of the Fermi surface in underdoped high Tc superconductors*. Nature, 392(32366):157–160, 1998. Citado na página 95.
- [238] Tranquada, JM, BJ Sternlieb, JD Axe, Y Nakamura e S Uchida: *Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors*. nature, 375(6532):561, 1995. Citado na página 95.
- [239] Božin, ES, GH Kwei, H Takagi e SJL Billinge: *Neutron diffraction evidence of microscopic charge inhomogeneities in the CuO 2 plane of superconducting $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ($0 < x < 0.30$)*. Physical review letters, 84(25):5856, 2000. Citado na página 95.
- [240] Piriou, Alexandre, Nathan Jenkins, Christophe Berthod, Ivan Maggio-Aprile e Ø Fischer: *First direct observation of the Van Hove singularity in the tunnelling spectra of cuprates*. Nature communications, 2:221, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 96, 120, 124, and 130.
- [241] Benhabib, S, A Sacuto, M Civelli, I Paul, M Cazayous, Y Gallais, M A Méasson, RD Zhong, J Schneeloch, GD Gu *et al.*: *Collapse of the Normal-State Pseudogap at a Lifshitz Transition in the $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ Cuprate Superconductor*. Physical review letters, 114(14):147001, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 96, 97, 120, 124, and 130.

- [242] Loret, B, S Sakai, S Benhabib, Y Gallais, M Cazayous, MA Méasson, RD Zhong, J Schneeloch, GD Gu, A Forget *et al.*: *Vertical temperature boundary of the pseudogap under the superconducting dome in the phase diagram of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* . Physical Review B, 96(9):094525, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 96, 120, 124, and 130.
- [243] Doiron-Leyraud, N, O Cyr-Choinière, S Badoux, A Ataei, C Collignon, A Gourgout, S Dufour-Beauséjour, FF Tafti, F Laliberté, M E Boulanger *et al.*: *Pseudogap phase of cuprate superconductors confined by Fermi surface topology*. Nature communications, 8(1):2044, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 96, 98, and 124.
- [244] Pickett, Warren E: *Electronic structure of the high-temperature oxide superconductors*. Reviews of Modern Physics, 61(2):433, 1989. Citado na página 98.
- [245] Anderson, PW: *The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity*. Science, 235(4793):196–1198, 1987. Citado na página 98.
- [246] Anderson, PW: *A re-examination of concepts in magnetic metals: the ‘nearly antiferromagnetic Fermi liquid’*. 1997. Citado na página 98.
- [247] Georges, Antoine e Gabriel Kotliar: *Hubbard model in infinite dimensions*. Physical Review B, 45(12):6479, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 98, 101, and 103.
- [248] Yokoyama, Hisatoshi e Hiroyuki Shiba: *Variational Monte-Carlo studies of Hubbard model. i*. Journal of the Physical Society of Japan, 56(4):1490–1506, 1987. Citado na página 98.
- [249] Aimi, Takeshi e Masatoshi Imada: *Does simple two-dimensional Hubbard model account for high- T_c superconductivity in copper oxides?* Journal of the Physical Society of Japan, 76(11):113708–113708, 2007. Citado na página 98.
- [250] Varney, CN, C R Lee, ZJ Bai, S Chiesa, M Jarrell e RT Scalettar: *Quantum Monte Carlo study of the two-dimensional fermion Hubbard model*. Physical Review B, 80(7):075116, 2009. Citado na página 98.
- [251] Qin, Mingpu, Hao Shi e Shiwei Zhang: *Benchmark study of the two-dimensional Hubbard model with auxiliary-field quantum Monte Carlo method*. Physical Review B, 94(8):085103, 2016. Citado na página 98.
- [252] Maier, Thomas, Mark Jarrell, Thomas Pruschke e Matthias H Hettler: *Quantum cluster theories*. Reviews of Modern Physics, 77(3):1027, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 98 and 106.

- [253] Tremblay, A MS, B Kyung e D Sénéchal: *Pseudogap and high-temperature superconductivity from weak to strong coupling. towards a quantitative theory*. Low Temperature Physics, 32(4):424–451, 2006. Citado na página 98.
- [254] Tocchio, Luca F, Hunpyo Lee, Harald O Jeschke, Roser Valentí e Claudius Gros: *Mott correlated states in the underdoped two-dimensional Hubbard model: Variational Monte Carlo versus a dynamical cluster approximation*. Physical Review B, 87(4):045111, 2013. Citado na página 99.
- [255] Tocchio, Luca F, Federico Becca e Claudius Gros: *Strong renormalization of the Fermi-surface topology close to the Mott transition*. Physical Review B, 86(3):035102, 2012. Citado na página 99.
- [256] Gull, Emanuel, Olivier Parcollet e Andrew J Millis: *Superconductivity and the pseudogap in the two-dimensional Hubbard model*. Physical review letters, 110(21):216405, 2013. Citado na página 99.
- [257] Sordi, G, P Sémon, K Haule e A MS Tremblay: *Strong coupling superconductivity, pseudogap, and mott transition*. Physical review letters, 108(21):216401, 2012. Citado na página 99.
- [258] Parcollet, Olivier, G Biroli e G Kotliar: *Cluster dynamical mean field analysis of the Mott transition*. Physical review letters, 92(22):226402, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 99, 102, and 121.
- [259] Park, Hyowon, Kristjan Haule e Gabriel Kotliar: *Cluster dynamical mean field theory of the Mott transition*. Physical review letters, 101(18):186403, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 99, 101, and 120.
- [260] Balzer, Matthias, Bumsoo Kyung, David Sénéchal, A MS Tremblay e Michael Potthoff: *First-order Mott transition at zero temperature in two dimensions: Variational plaquette study*. EPL (Europhysics Letters), 85(1):17002, 2009. Citado na página 99.
- [261] Sordi, Giovanni, K Haule e A MS Tremblay: *Finite doping signatures of the Mott transition in the two-dimensional Hubbard model*. Physical review letters, 104(22):226402, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 99 and 125.
- [262] Zhang, YZ e Masatoshi Imada: *Pseudogap and Mott transition studied by cellular dynamical mean-field theory*. Physical Review B, 76(4):045108, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 99, 101, and 120.

- [263] Ferrero, Michel, Pablo S Cornaglia, Lorenzo De Leo, Olivier Parcollet, Gabriel Kotliar e Antoine Georges: *Pseudogap opening and formation of Fermi arcs as an orbital-selective Mott transition in momentum space*. Physical Review B, 80(6):064501, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 99, 100, and 126.
- [264] Hirsch, Jorge E: *Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study*. Physical Review B, 31(7):4403, 1985. Citado na página 100.
- [265] White, SR, DJ Scalapino, RL Sugar, EY Loh, JE Gubernatis e RT Scalettar: *Numerical study of the two-dimensional Hubbard model*. Physical Review B, 40(1):506, 1989. Citado na página 100.
- [266] Mermin, N David e Herbert Wagner: *Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models*. Physical Review Letters, 17(22):1133, 1966. Citado na página 100.
- [267] Anderson, Philip W *et al.*: *The theory of superconductivity in the high- T_c cuprate superconductors*, volume 446. Princeton University Press Princeton, NJ, 1997. Citado na página 101.
- [268] Imada, Masatoshi, Atsushi Fujimori e Yoshinori Tokura: *Metal-insulator transitions*. Reviews of modern physics, 70(4):1039, 1998. Citado na página 101.
- [269] Anderson, Philip W: *New approach to the theory of superexchange interactions*. Physical Review, 115(1):2, 1959. Citado na página 101.
- [270] Moukouri, Samuel e Mark Jarrell: *Absence of a Slater transition in the two-dimensional Hubbard model*. Physical review letters, 87(16):167010, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 101 and 121.
- [271] Schäfer, T, F Geles, D Rost, G Rohringer, E Arrigoni, K Held, N Blümer, M Aichhorn e A Toschi: *Fate of the false Mott-Hubbard transition in two dimensions*. Physical Review B, 91(12):125109, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 101 and 121.
- [272] Stanescu, Tudor D, Marcello Civelli, Kristjan Haule e Gabriel Kotliar: *A cellular dynamical mean field theory approach to Mottness*. Annals of Physics, 321(7):1682–1715, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 102, 114, and 121.
- [273] Stanescu, Tudor D e Philip Phillips: *Local dynamics and strong correlation physics: One-and two-dimensional half-filled Hubbard models*. Physical Review B, 64(23):235117, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 102 and 121.

- [274] Kotliar, Gabriel e Dieter Vollhardt: *Strongly Correlated materials: Insights from dynamical mean field theory*. Physics Today, 57(3):53–60, 2004. Citado na página 104.
- [275] Metzner, Walter e Dieter Vollhardt: *Correlated lattice fermions in $d=$ dimensions*. Physical review letters, 62(3):324, 1989. Citado na página 105.
- [276] Poteryaev, AI, AI Lichtenstein e G Kotliar: *Nonlocal Coulomb Interactions and Metal-Insulator Transition in Ti_2O_3 : A Cluster LDA+DMFT Approach*. Physical review letters, 93(8):086401, 2004. Citado na página 106.
- [277] Hettler, MH, AN Tahvildar-Zadeh, M Jarrell, Th Pruschke e HR Krishnamurthy: *Non-local dynamical correlations of strongly interacting electron systems*. Physical Review B, 58(12):R7475, 1998. Citado na página 106.
- [278] Kotliar, Gabriel, Sergej Y Savrasov, Gunnar Pálsson e Giulio Biroli: *Cellular dynamical mean field approach to strongly correlated systems*. Physical review letters, 87(18):186401, 2001. Citado na página 106.
- [279] Sakai, Shiro, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held e Masatoshi Imada: *Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory*. Physical Review B, 85(3):035102, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 106 and 115.
- [280] Biroli, Giulio e Gabriel Kotliar: *Cluster methods for strongly correlated electron systems*. Physical Review B, 65(15):155112, 2002. Citado na página 106.
- [281] Aryanpour, K, Th A Maier e M Jarrell: *Comment on “Cluster methods for strongly correlated electron systems”*. Physical Review B, 71(3):037101, 2005. Citado na página 106.
- [282] Stanescu, Tudor D e Gabriel Kotliar: *Fermi arcs and hidden zeros of the Green function in the pseudogap state*. Physical Review B, 74(12):125110, 2006. Citado na página 114.
- [283] Sénéchal, David e A MS Tremblay: *Hot spots and pseudogaps for hole-and electron-doped high-temperature superconductors*. Physical review letters, 92(12):126401, 2004. Citado na página 114.
- [284] Gull, E e A Millis: *Energetics of superconductivity in the two dimensional Hubbard model*. Physical Review B, 86:241106, 2012. Citado na página 115.
- [285] Mahan, Gerald D: *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013. Citado na página 115.

- [286] Civelli, M: *The doping-driving evolution of the superconducting state of a doped mott insulator: a key for the high temperature superconductivity*. Physical Review B, 79:195113, 2009. Citado na página 116.
- [287] Civelli, M: *Evolution of the dynamical pairing across the phase diagram of a strongly correlated high-temperature superconductor*. Physical review letters, 103(13):136402, 2009. Citado na página 118.
- [288] Wu, Wei, Antoine Georges e Michel Ferrero: *Pseudogap and Fermi surface topology in the two-dimensional Hubbard model*. arXiv preprint arXiv:1707.06602, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 124 and 130.
- [289] Timusk, Tom e Bryan Statt: *The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey*. Reports on Progress in Physics, 62(1):61, 1999. Citado na página 123.
- [290] Sakai, Shiro, Yukitoshi Motome e Masatoshi Imada: *Evolution of electronic structure of doped Mott insulators: reconstruction of poles and zeros of Green's function*. Physical review letters, 102(5):056404, 2009. Citado na página 126.
- [291] Imada, Masatoshi, Youhei Yamaji, Shiro Sakai e Yukitoshi Motome: *Theory of pseudogap and superconductivity in doped Mott insulators*. Annalen der Physik, 523(8-9):629–637, 2011. Citado na página 129.
- [292] Sakai, Shiro, Marcello Civelli e Masatoshi Imada: *Evidence for hidden fermion that triggers high-temperature superconductivity in cuprates*. arXiv preprint arXiv:1411.4365, 2014. Citado na página 129.

Apêndice A

Motivações experimentais

A.1 Átomos frios em redes óticas

Recentemente, temos observado um grande avanço no estudo de sistemas de muitos corpos devido a trabalhos com átomos frios armadilhados em redes óticas. Esses arranjos experimentais funcionam como “sólidos artificiais”, que simulam sistemas bosônicos ou fermiônicos com a vantagem de permitirem alto controle dos parâmetros físicos. Enquanto sistemas reais são extremamente complexos - apresentam diversas complicações, como defeitos, vibrações da rede, acoplamentos entre múltiplas bandas, etc - redes óticas representam uma versão idealizada do cristal, contendo apenas os ingredientes fundamentais para a descrição de determinado fenômeno. Podemos considerar que as redes óticas são realizações experimentais de modelos Hamiltonianos, como os tratados nesta tese. Por isso, faremos uma revisão da literatura envolvendo átomos frios em redes óticas, como motivação experimental para nossos trabalhos. Para uma visão mais completa, sugerimos a referência [1].

Conforme descrito anteriormente, o estudo de sistemas de muitos corpos não é nada trivial; os graus de liberdade crescem exponencialmente com o número de partículas, o que exige muita memória computacional, limitando os modelos que podem ser descritos por métodos numéricos. Assim, a simulação de tais materiais em sólidos artificiais oferece uma boa alternativa para a investigação de sistemas de muitos corpos que apresentam importantes fenômenos emergentes, interessantes tanto na perspectiva de física básica quanto de física aplicada.

O prêmio Nobel de física de 1997 foi entregue a Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji e William D. Phillips, pelo desenvolvimento de métodos de resfriamento e armadilhamento de átomos via lasers [2]. Desde então, a possibilidade de simulação em redes óticas com átomos frios tem crescido muito, principalmente devido a avanços no controle de gases atômicos e ao desenvolvimento de novas técnicas de resfriamento e detecção com alta precisão e resolução atômica.

A capacidade de controlar e detectar cada átomo faz com que as simulações possibilitem ainda o estudo da dinâmica de não-equilíbrio em sistemas de muitos corpos, após a realização de um *quench*, por exemplo.

A.1.1 Montagem experimental

Na presente subseção, descreveremos a montagem experimental para a simulação dos sistemas de muitos corpos artificiais. Inicialmente, resfria-se átomos que farão o papel de elétrons, em seguida, estes são armadilhados na rede ótica, que faz o papel do cristal.

Átomos frios

A fim de armadilhar átomos em redes óticas, é preciso resfriá-los até temperaturas muito baixas e utilizar pequenas densidades. O resfriamento é feito via lasers ou evaporação. Em geral, utiliza-se átomos alcalinos, como ^{87}Rb e ^{23}Na para a representação de sistemas bosônicos e ^{40}K e ^6Li para sistemas fermiônicos. No segundo caso, os átomos representam elétrons na rede cristalina. Dois estados hiperfinos diferentes¹ fazem o papel de dois spins eletrônicos opostos. Sugerimos a referência [3] para maiores detalhes sobre o controle e detecção dos estados hiperfinos dos átomos.

A interação entre as partículas ocorre devido ao fenômeno de ressonância de Feshbach, o que permite que a força da interação varie ordens de grandeza e seja controlada por um campo magnético externo. De forma simplificada, a ressonância de Feshbach pode ser entendida por meio de um modelo básico de dois canais para gases atômicos [4], conforme representado na Figura A.1. $V_{bg}(R)$ representa um potencial de fundo (background potential), responsável pela colisão entre dois átomos livres no gás ultrafrio. Esse potencial corresponde a um canal energeticamente aberto, do qual os átomos podem escapar. $V_c(R)$, por outro lado, representa um canal fechado que produz estados moleculares ligados perto do limiar do canal aberto. O fenômeno de ressonância ocorre quando há dois átomos colidindo com energia E na entrada do canal aberto e essa energia coincide com a energia E_c do estado ligado criado pelo canal fechado. Em gases ultrafrios, colisões ocorrem a energias próximas de zero. Nesses casos, acoplamentos ressonantes podem ser controlados por campos magnéticos externos, capazes de reduzir o nível E_c para valores pequenos de energia.

Redes óticas

Redes óticas são formadas pela interferência de feixes de lasers contra-propagantes. O perfil de interferência gera potenciais efetivos capazes de armadilhar átomos neutros, desde que

¹A estrutura hiperfina corresponde a um pequeno deslocamento dos níveis de energia atômicos devido à interação do momento magnético do núcleo com os spins dos elétrons.

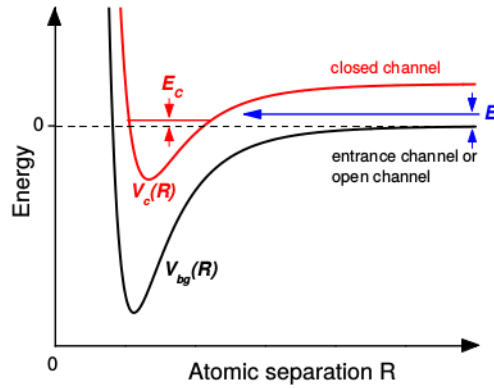


Figura A.1: Modelo de dois canais para a ressonância de Feshbach. Figura retirada de [4].

estes estejam suficientemente resfriados. As regiões intercaladas claras e escuras geradas por interferências de lasers são percebidas pelos átomos como um potencial periódico, devido à força de dipolo (em geral, momentos superiores, como quadripolos, podem ser negligenciados). Conforme discutido acima, os átomos frios fazem o papel de elétrons na rede cristalina.

Quando um átomo se encontra em uma região onde há um feixe de laser, o campo elétrico oscilante $\mathbf{E}(r, t) = \hat{e}E(r) \exp(-i\omega t)$ induz um momento de dipolo atômico $\mathbf{p}(r, t) = \hat{e}p(r) \exp(-i\omega t)$, sendo $E(r)$ e $p(r)$ as amplitudes do campo e do dipolo e \hat{e} o vetor unitário de polarização. As amplitudes se relacionam por meio da equação $p(r) = \alpha(\omega)E(r)$, sendo $\alpha(\omega)$ a polarizabilidade complexa. O potencial de interação entre o campo e o dipolo é dado por

$$V_{dip}(r) = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I(r), \quad (\text{A.1})$$

sendo $I = \epsilon_0 c |E|^2$ a intensidade do campo.

A forma do potencial indica que átomos são atraídos por mínimos ou máximos da intensidade do campo, dependendo do sinal da parte real da polarizabilidade. Se a intensidade $I(r)$ é periódica no espaço, haverá uma sequência de máximos e mínimos que reproduz o potencial periódico de sólidos. As frequências dos lasers utilizados devem ser bem diferentes de frequências de transições atômicas, para evitar excitações e aquecimento dos átomos.

Superpondo lasers em diferentes ângulos, é possível produzir redes de diferentes geometrias. A interferência entre dois lasers iguais orientados em direções opostas produz ondas estacionárias. Pela interferência de mais lasers é possível obter potenciais periódicos em uma, duas ou três dimensões. Redes cúbicas, por exemplo, são produzidas por três ondas estacionárias independentes. A estrutura de bandas e a topologia das redes podem ser modificadas alterando-se a intensidade, frequência ou fase dos lasers. Também é possível modular as redes com resolução temporal e espacial.

Em geral, o gás de átomos neutros apresenta apenas interações de colisão de curto alcance.

Isso significa que, quando organizados no potencial gerado pelos lasers, os átomos interagem apenas quando ocupam o mesmo sítio. Essa propriedade favorece a simulação do Hamiltoniano de Hubbard, caracterizado pela interação local U e pelo *hopping* t . A relação U/t pode ser controlada experimentalmente por um campo externo (que controla a ressonância de Feshbach e portanto o valor de U) ou mudando a profundidade do poço ótico (o que altera t). A Figura A.2 apresenta uma ilustração de um potencial periódico gerado por lasers, com átomos fazendo o papel de elétrons da rede cristalina.

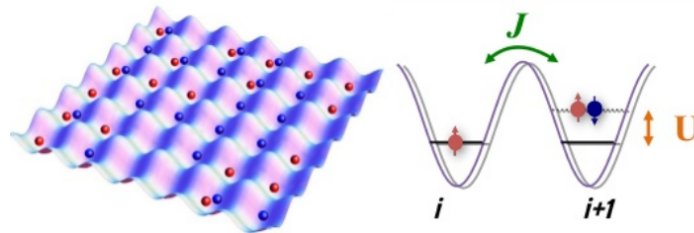


Figura A.2: Figura esquemática da simulação do modelo de Hubbard em redes óticas com átomos frios [5].

Imagens com resolução atômica

Em geral, medidas em redes óticas são realizadas por imagens de alta resolução de absorção, fluorescência [6] e microscopia eletrônica da distribuição de densidade do gás armadilhado.

Após preparar uma fase quântica de muitos corpos com átomos frios em redes óticas, é possível observar os átomos por meio de aplicação de luz com frequência próxima de ressonância, o que faz com que os átomos emitam fluorescência. A fluorescência induzida é capturada por uma câmera CCD (*charge coupled device*). Para uma resolução que permita a distinção entre cada átomo, é preciso que a câmera capture alguns milhares de fótons por átomo. Para atingir essa resolução sem alterar a posição dos átomos durante o processo de medida, a profundidade da rede ótica é aumentada 100 vezes. Além disso, processos de resfriamento via lasers ajudam a manter a temperatura dos átomos durante as medidas [5].

As técnicas recentes de medida permitem obter não apenas a distribuição média do número de partículas na rede, mas também correlações não locais, por meio da análise de um conjunto de medidas instantâneas.

A alta resolução espacial é útil não apenas nos processos de detecção, mas também na preparação dos sistemas. As técnicas permitem, por exemplo, o controle local de spins, por meio da alteração do nível hiperfino de cada átomo. Além disso, em uma montagem grande, é possível alterar os parâmetros localmente, explorando várias fases em diferentes regiões de uma mesma amostra de gás armadilhado.

A.1.2 Exemplos de simulações de sistemas fermiônicos de muitos corpos

Apesar de ser uma área recente, há, na literatura, diversos trabalhos nos quais sistemas de muitos corpos são simulados por átomos frios em redes óticas [7-13]. Na presente seção, selecionamos alguns exemplos que servem de motivação para os estudos numéricos apresentados nesta tese.

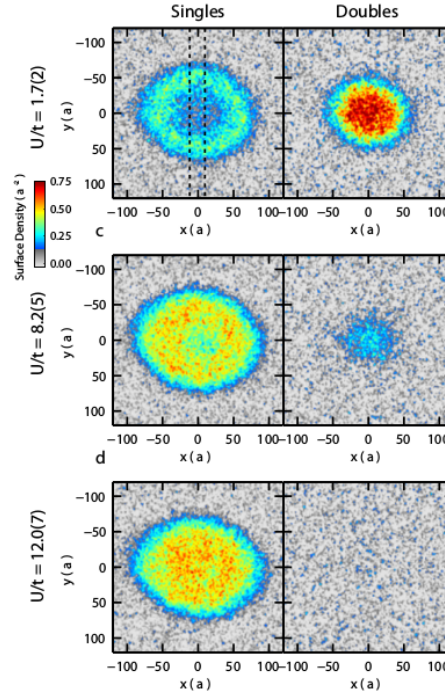


Figura A.3: Perfil de densidade local para sítios com ocupação simples (primeira coluna) e dupla (segunda coluna) no modelo de Hubbard 2D realizado em uma rede ótica. Figura retirada de [8].

Em um trabalho publicado em 2016, Michael Köhl e colaboradores simularam o modelo de Hubbard bidimensional em uma rede ótica com átomos frios [8]. Primeiramente, os autores prepararam um gás de átomos de ^{40}K resfriados via evaporação, com quantidades iguais de átomos nos dois estados hiperfinos $|F = 9/2, m_F = -9/2\rangle$ e $|F = 9/2, m_F = -7/2\rangle$ (F e m_F correspondem a números quânticos do estado hiperfino), que representam os spins $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, respectivamente. Em seguida, o gás foi separado em planos por meio da aplicação de lasers intensos na direção z . As camadas foram então submetidas a redes óticas quadradas bidimensionais. A interação local U entre dois átomos em diferentes estados hiperfinos ocupando o mesmo sítio da rede ótica foi controlada por ressonância de Feshbach. Variando um campo magnético externo entre 189G e 212G, eles obtiveram interações no intervalo $0 < U/t \leq 20$. Além disso, algumas medidas foram realizadas em função da temperatura. Nesses casos, o

gás foi aquecido pela aplicação de lasers com a mesma intensidade dos lasers horizontais da rede, mas com o dobro da frequência de armadilhamento, em seguida; os autores esperaram um tempo para que o sistema entre em novo estado de equilíbrio e realizaram as medidas.

Por meio de uma combinação entre espectroscopia de radio frequência e imagens de absorção, Köhl e colaboradores [8] detectaram, com resolução local, sítios com ocupação simples e ocupação dupla. As imagens de todo o perfil de densidade em função da temperatura e da interação forneceram uma caracterização detalhada do modelo bidimensional. Na Figura A.3, por exemplo, vemos a distribuição de sítios ocupados com um ou dois átomos para diferentes interações; é possível distinguir claramente uma fase metálica para U pequeno e uma fase isolante de Mott, caracterizada pela ausência de sítios duplamente ocupados, para interação forte. Os resultados foram ainda comparados com métodos numéricos próprios para tratar sistemas bidimensionais: *dynamical cluster approximation*, Monte-Carlo quântico e *numerical linked-cluster expansions*; os autores observaram boas concordâncias quantitativas entre a simulação e os cálculos numéricos.

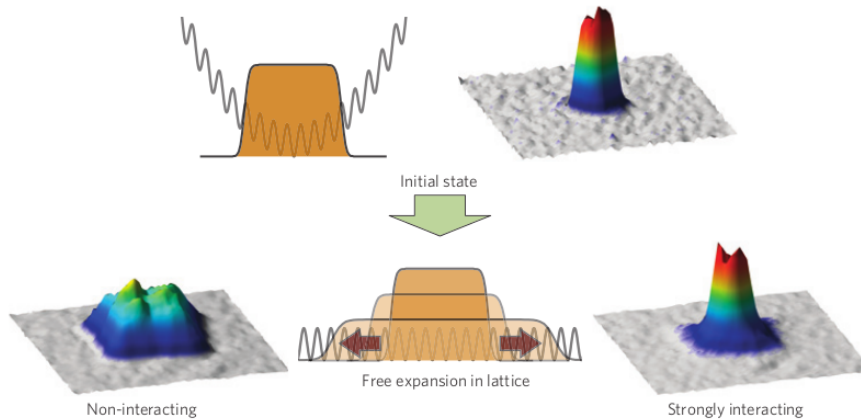


Figura A.4: Expansão dos átomos fermiônicos após um *quench* do potencial de armadilhamento. Figura retirada de [10].

Efeitos de dinâmica *pós-quench* também podem ser estudados em redes óticas. Ulrich Schneider *et al.*, por exemplo, analisaram a dinâmica de não-equilíbrio e os efeitos de transporte em uma simulação do modelo de Hubbard homogêneo em três dimensões [10]. Inicialmente, os autores prepararam um estado fermiônico de átomos de ^{40}K confinados espacialmente. Em seguida, eles eliminaram rapidamente os potenciais de confinamento e permitiram que os átomos se movimentassem na rede ótica. Uma representação esquemática do *quench* pode ser vista na Figura A.4. Os resultados do experimento revelaram que, no caso não interagente, os férmions se propagam balisticamente pela rede, porém, mesmo interações pequenas, são suficientes para gerar uma expansão bimodal, com grande redução da velocidade. Ainda mais interessante, os autores observaram que a dinâmica é simétrica para sistemas repulsivos

e atrativos, isto é, ela depende apenas do módulo da interação, mas não de seu sinal. A simetria com relação a valores de U positivos e negativos pode ser vista na Figura A.5.

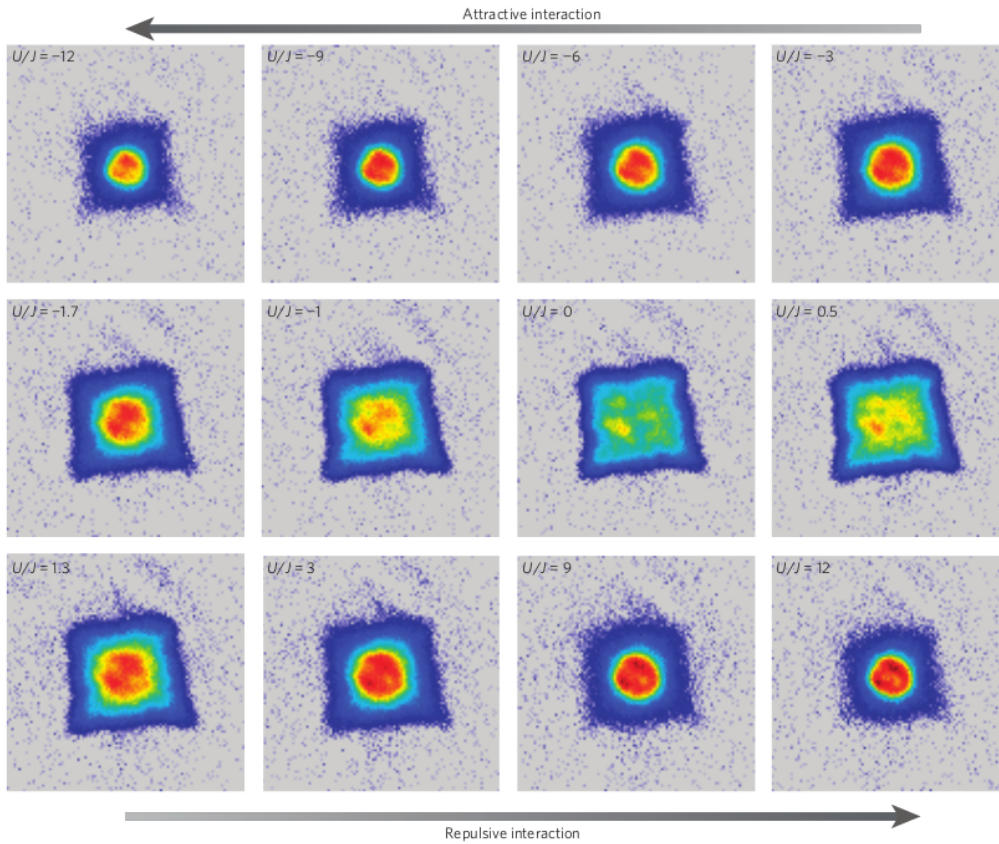


Figura A.5: Medidas da densidade local dos átomos fermiônicos na rede ótica 25 ms após a retirada do potencial de confinamento, para diferentes valores de interação. Figura retirada de [10].

Mais um trabalho recente relevante no contexto dos estudos numéricos apresentados nesta tese encontra-se na referência [14]. Nesse caso, Markus Greiner e colaboradores também estudaram o modelo de Hubbard bidimensional em redes óticas com átomos frios. Utilizando um microscópio de alta-resolução, os autores foram capazes de acessar temperaturas suficientemente baixas e produzir sistemas com grande homogeneidade na densidade, de tal forma que foi possível observar antiferromagnetismo de longo alcance. Eles resfriaram o sistema em semi-preenchimento e em seguida observaram como correlações de spin evoluem com dopagem do sistema. Mais especificamente, os autores exploraram as trajetórias marcadas pelas setas no diagrama de fase de cupratos apresentado na Figura A.6.a. Maiores avanços na manipulação de gases atômicos são necessários para a exploração de outras regiões do diagrama, como a fase supercondutora de onda-d. Esse trabalho, no entanto, constitui um importante passo na simulação de supercondutores não convencionais via redes óticas.

Para obter temperaturas baixas, o grupo da universidade de Havard utilizou um mi-

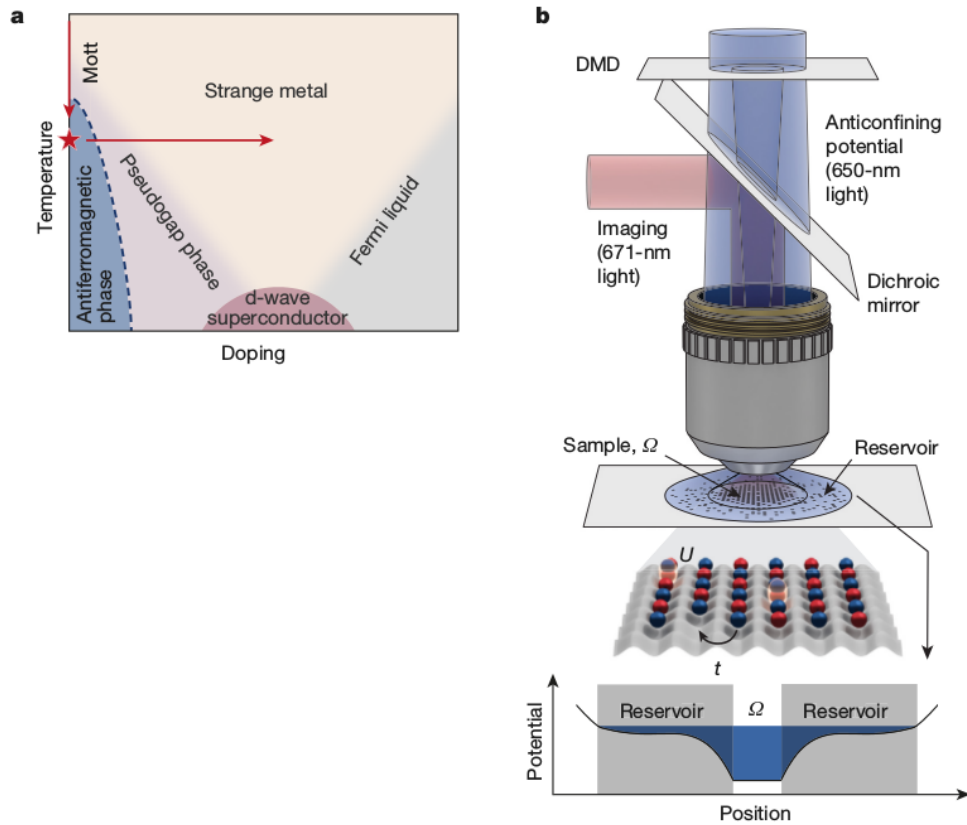


Figura A.6: (a) Diagrama de fase de cupratos. As setas indicam trajetórias exploradas na simulação com átomos frios em redes óticas. (b) Figura esquemática da montagem experimental. A presença de um reservatório externo à região estudada possibilitou o resfriamento do sistema, bem como a produção de uma região com densidade homogênea. Figura retirada de [14].

croscópio e um micro-espelho com resolução atômica para dividir a rede ótica em duas subpartes, um disco central contendo aproximadamente 75 átomos de ${}^6\text{Li}$, envolto por um grande reservatório [14]. A partição do sistema aumentou a redistribuição de entropia; o disco central pôde ser resfriado pelo deslocamento de entropia para o reservatório. Um esquema da montagem experimental pode ser visto na Figura A.6.b. Os resultados do trabalho revelaram que o resfriamento do sistema leva ao aumento do comprimento de correlação do ordenamento antiferromagnético. As medidas foram realizadas com um campo que produz uma interação Coulombiana local de $U/t = 7.2(2)$, valor relevante para o diagrama de fase de cupratos. A temperatura de cada amostra foi determinada por meio de comparações entre medidas experimentais e resultados obtidos por Monte Carlo quântico. A temperatura mais baixa alcançada no experimento foi $T/t = 0.25(2)$. Diminuindo a densidade da amostra, Markus Greiner *et al.* observaram que as correlações de spin diminuem com a dopagem com buracos, em concordância com resultados conhecidos para supercondutores não convencionais.

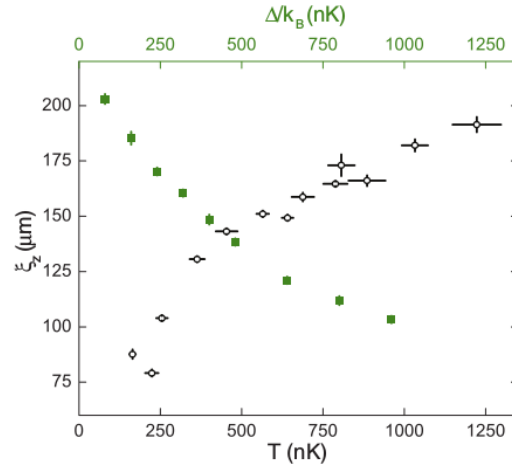


Figura A.7: Dependência do comprimento de localização ξ em função da desordem Δ para $T = 480\text{nK}$, e em função da temperatura, para $\Delta = 480k_B\text{nK}$. Figura retirada de [12].

Outro exemplo de trabalho interessante em redes óticas encontra-se na referência [12], que descreve não um sistema fermiônico interagente, mas sim desordenado. S. S. Kondov *et al.* estudaram a localização devido à desordem (localização de Anderson) em um sistema tridimensional de átomos frios. Eles utilizaram átomos de ^{40}K resfriados entre 170 e 1500 nK e armadilhados em um potencial de bipolo. Os spins foram polarizados a fim de eliminar a interação entre as partículas. O potencial desordenado foi gerado por um laser de 532 nm, aplicado em uma das direções, que passou por um filtro espalhador, gerando regiões claras e escuras aleatoriamente distribuídas. A intensidade da desordem, Δ , foi controlada pela potência do laser. Imagens de absorção permitiram a análise do perfil de densidade e o estudo da localização. Os autores confirmaram a previsão teórica de que o comprimento de localização ξ é inversamente proporcional à intensidade da desordem, Δ , e diretamente proporcional à temperatura, conforme apresentado na Figura A.7.

A.2 Experimentos de *pump and probe*

Conforme discutido no início deste capítulo, sistemas de átomos frios podem ser usados para simular modelos Hamiltonianos, que contêm ingredientes fundamentais de sistemas mais complexos. Por outro lado, o desenvolvimento de técnicas de espectroscopia resolvida no tempo permitiu o estudo da física de não-equilíbrio em sólidos reais [15,16].

Mais especificamente, avanços na tecnologia de laser possibilitaram a geração de pulsos “ultra-curtos”, com duração de femtosegundos [17], aumentando muito a resolução temporal de medidas experimentais e permitindo, assim, a análise de não-equilíbrio em matéria condensada [18].

Nesse contexto, experimentos são realizados por um processo conhecido como *pump and probe*. Um laser curto (10 a 100 fs) e intenso (*pump*) é usado para excitar o sistema, levando-o para uma condição fora do equilíbrio. Um segundo pulso (*probe*) é emitido, após um tempo de atraso δt , para medir o estado transiente do sistema. Variando-se δt é possível analisar a evolução do sistema após a excitação. Várias técnicas podem ser usadas para analisar o sistema, tais como espectroscopia de fotoemissão resolvida no tempo, reflexividade resolvida no tempo e difração de raio-X resolvida no tempo.

A investigação da relaxação de sistemas de muitos corpos após a excitação com um pulso ultra-curto permite a análise do papel de diferentes graus de liberdade sobre as propriedades do sistema, pois o pulso pode excitar os estados eletrônicos sem que haja, simultaneamente, alteração das propriedades da rede cristalina. Além disso, medidas em diferentes escalas de tempo permitem a diferenciação entre escalas de energia associadas a diversos graus de liberdade.

Experimentos pioneiros na área incluem transições isolante-metal induzidas por fótons em sistemas de Mott correlacionados [19-24], combinação entre dinâmica estrutural e eletrônica em sistemas com ondas de densidade de carga [25] e dinâmica ultra-rápida induzida em sistemas ferromagnéticos [26] e antiferromagnéticos [27]. Mais recentemente, experimentos de *pump and probe* foram usados também para analisar separadamente contribuições eletrônicas e de fônons sobre a “cola” que mantém pares de elétrons ligados em supercondutores de alta temperatura crítica [28].

Referências

- [1] Immanuel Bloch, Jean Dalibard e Sylvain Nascimbene, “*Quantum simulations with ultracold quantum gases*”, Nature Physics **8**, 267–276 (2012)
- [2] Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji e William D Phillips, “*The nobel prize in physics 1997*”, (2012).
- [3] Sebastian A Will, Jee Woo Park, Zoe Z Yan, Huanqian Loh e Martin W Zwierlein, “*Coherent microwave control of ultracold $\text{Na}^{23}\text{K}^{40}$ molecules*”, Phys. Rev. Lett., **116**, 225306 (2016).
- [4] Cheng Chin, Rudolf Grimm, Paul Julienne e Eite Tiesinga, “*Feshbach resonances in ultracold gases*”, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225-1286 (2010).
- [5] Jacob F Sherson, Christof Weitenberg, Manuel Endres, Marc Cheneau, Immanuel Bloch e Stefan Kuhr, “*Single-atom resolved fluorescence imaging of an atomic mott insulator*”, Nature **467**, 68–72 (2010).
- [6] Barbara Goss Levi, “*Putting quantum gases under the microscope*”, Physics Today **63**, 10, 18 (2010).

- [7] R. A. Hart *et al.*, “*Observation of antiferromagnetic correlations in the Hubbard model with ultracold atoms*”, *Nature* **519**, 211 (2015).
- [8] Eugenio Cocchi, Luke A. Miller, Jan H. Drewes, Marco Koschorreck, Daniel Pertot, Ferdinand Brennecke e Michael Kohl, “*Equation of State of the Two-Dimensional Hubbard Model*”, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 175301 (2016).
- [9] Robert Jordens, Niels Strohmaier, Kenneth Gunter, Henning Moritz, Tilman Esslinger, “*A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice*”, *Nature (London)* **455**, 204-207 (2008).
- [10] Ulrich Schneider, Lucia Hackermüller, Jens Philipp Ronzheimer, Sebastian Will, Simon Braun, Thorsten Best, Immanuel Bloch, Eugene Demler, Stephan Mandt, David Rasch, Achim Rosch, “*Fermionic transport in a homogeneous Hubbard model: Out-of-equilibrium dynamics with ultracold atoms*”, *Nature Physics* **8**, 213–218 (2012).
- [11] Schneider, U., et al. “*Metallic and insulating phases of repulsively interacting fermions in a 3D optical lattice*”, *Science* **322**, 1520-1525 (2008).
- [12] SS Kondov, WR McGehee, JJ Zirbel e B DeMarco, “*Three-dimensional anderson localization of ultracold matter*”, *Science* **334**, 66 (2011);
- [13] Florian Meinert, Manfred J. Mark, Katharina Lauber, Andrew J. Daley, Hanns-Christoph Nagerl, “*Floquet engineering of correlated tunneling in the Bose-Hubbard model with ultracold atoms*”, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 205301 (2016).
- [14] Anton Mazurenko, Christie S Chiu, Geoffrey Ji, Maxwell F Parsons, Márton Kanász-Nagy, Richard Schmidt, Fabian Grusdt, Eugene Demler, Daniel Greif e Markus Greiner, “*A cold-atom fermi-hubbard antiferromagnet*”, *Nature* **545**, 462–466 (2017).
- [15] Hideo Aoki, Naoto Tsuji, Martin Eckstein, Marcus Kollar, Takashi Oka, e Philipp Werner, “*Nonequilibrium dynamical mean-field theory and its applications*”, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 779 (2014).
- [16] Giacomo Mazza, “*Non-equilibrium phenomena in strongly correlated systems*” (2015).
- [17] Thomas Brabec e Ferenc Krausz, “*Intense few-cycle laser fields: Frontiers of nonlinear optics*”, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 545 (2000).
- [18] Ferenc Krausz e Misha Ivanov, “*Attosecond physics*”, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
- [19] S Iwai, M Ono, A Maeda, H Matsuzaki, H Kishida, H Okamoto e Y Tokura. “*Ultra-fast optical switching to a metallic state by photoinduced mott transition in a halogen-bridged nickel-chain compound*”, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 057401 (2003).
- [20] Carl Kubler, Henri Ehrke, Rupert Huber, R Lopez, A Halabica, RF Haglund Jr e A Leitenstorfer, “*Coherent structural dynamics and electronic correlations during an ultrafast insulator-to-metal phase transition in VO₂*”, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 116401 (2007).
- [21] T Ogasawara, M Ashida, N Motoyama, H Eisaki, S Uchida, Y Tokura, H Ghosh, A Shukla, S Mazumdar e M Kuwata-Gonokami, “*Ultrafast optical nonlinearity in the quasi-*

one-dimensional mott insulator Sr_2CuO_3 ”, Phys. Rev. Lett. **85**, 2204 (2000).

[22] H Okamoto, H Matsuzaki, T Wakabayashi, Y Takahashi e T Hasegawa, “*Photoinduced metallic state mediated by spin-charge separation in a one-dimensional organic mott insulator*”, Phys. Rev. Lett. **98**, 037401 (2007).

[23] L Perfetti, PA Loukakos, M Lisowski, U Bovensiepen, H Berger, S Biermann, PS Cornaglia, A Georges e M Wolf, “*Time evolution of the electronic structure of $1T-TaS_2$ through the insulator-metal transition*”, Phys. Rev. Lett. **97**, 067402 (2006).

[24] L. Perfetti, Panagiotis A Loukakos, Martin Lisowski, Uwe Bovensiepen, Martin Wolf, Helmuth Berger, Silke Biermann e Antoine Georges, “*Femtosecond dynamics of electronic states in the mott insulator $1T-TaS_2$ by time resolved photoelectron spectroscopy*”, New Journal of Physics **10**, 053019 (2008).

[25] Maximilian Eichberger, Hanjo Schafer, Marina Krumova, Markus Beyer, Jure Demsar, Helmuth Berger, Gustavo Moriena, Germán Sciaini e RJ Dwayne Miller, “*Snapshots of cooperative atomic motions in the optical suppression of charge density waves*”, Nature **468**, 799 (2010).

[26] E Beaurepaire, J-C Merle, A Daunois e J-Y Bigot, “*Ultrafast spin dynamics in ferromagnetic nickel*”, Phys. Rev. Lett. **76**, 4250 (1996).

[27] H Ehrke, RI Tobey, Simon Wall, SA Cavill, Michael Forst, Vikaran Khanna, Th Garl, N Stojanovic, D Prabhakaran, AT Boothroyd, et al., “*Photoinduced melting of antiferromagnetic order in $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_4$ measured using ultrafast resonant soft x-ray diffraction*”, Phys. Rev. Lett. **106**, 217401 (2011).

[28] S Dal Conte, Claudio Giannetti, Giacomo Coslovich, Federico Cilento, Davide Bosini, Tadesse Abebaw, F. Banfi, Gabriele Ferrini, Hiroshi Eisaki, Martin Greven, et al., “*Disentangling the electronic and phononic glue in a high- t_c superconductor*”, Science **335**, 1600–1603 (2012).

Apêndice B

DMRG

B.1 Introdução

Conforme discutido na introdução desta tese, a descrição de sistemas de muitos corpos é comumente realizada através de métodos numéricos, dentre os quais podemos citar, por exemplo, Monte Carlo Quântico, Grupo de Renormalização Numérico, Teoria de Campo Médio Dinâmico e Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG, do inglês *density matrix renormalization group*). Esse último método tem sido considerado “estado da arte” para a descrição de sistemas interagentes unidimensionais.

DMRG foi originalmente desenvolvido por Steven R. White em 1992 [1-2] para a descrição de propriedades do estado fundamental de sistemas unidimensionais, e mais tarde estendido para a descrição de propriedades dinâmicas. O método é baseado em um processo de truncagem selecionada do espaço de Hilbert. Inicialmente uma cadeia pequena é resolvida exatamente, isto é, por diagonalização exata. Em seguida, crescemos o sistema sem crescer o espaço de Hilbert. Essa é a ideia por trás do Grupo de Renormalização, introduzido em 1975 por K. Wilson [3]. Nesse caso, o Hamiltoniano do sistema maior é truncado na base dos auto-estados de menor energia do sistema anterior. Essa abordagem fornece uma boa descrição para o modelo Kondo e para o modelo de Anderson de uma impureza, porém não é apropriada para alguns outros sistemas fortemente correlacionados. Steven R. White percebeu que, para resolver modelos não descritos por Grupo de Renormalização, é conveniente substituir a truncagem baseada em energia por uma truncagem baseada nos auto-estados da matriz densidade reduzida, dando origem ao Grupo de Renormalização da Matriz Densidade.

Neste apêndice, apresentaremos uma breve revisão de DMRG. Sugerimos as referências [4-6] para uma visão mais completa.

B.2 Estrutura da cadeia no cálculo DMRG

Antes de apresentar uma revisão do algoritmo de DMRG, é conveniente introduzir certos elementos fundamentais. A cadeia unidimensional é dividida em dois blocos, com l sítios e dimensão do espaço de Hilbert m cada um, e dois sítios livres entre os blocos, conforme apresentado na Figura B.1. A junção de um bloco e um sítio forma um bloco aumentado, com $l+1$ sítios e dimensão $m*d$, sendo d a dimensão de um sítio ($d = 2$ no caso de uma cadeia de spin $1/2$ e $d = 4$ no modelo de Hubbard, por exemplo). A junção dos blocos aumentados da direita e da esquerda forma um super-bloco, que envolve todos os sítios da cadeia e tem dimensão $(m * d)^2$.

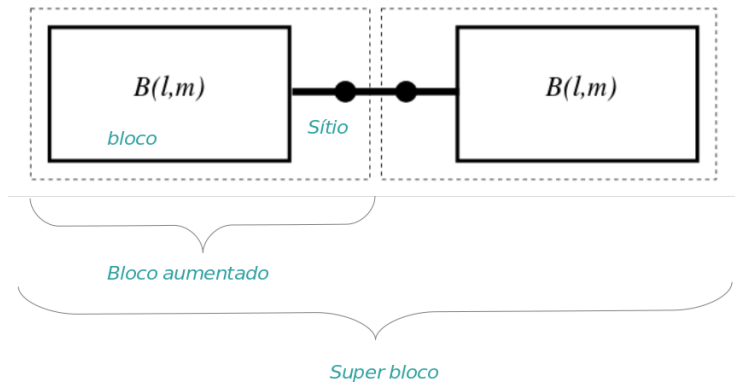


Figura B.1: Estrutura fundamental do DMRG.

O Hamiltoniano do bloco aumentado é dado por

$$H_{BA} = H_B + H_S + H_{BS}, \quad (\text{B.1})$$

sendo H_B o Hamiltoniano do bloco, H_S o Hamiltoniano do sítio livre e H_{BS} o Hamiltoniano de interação entre o bloco e o sítio. Caso o sistema seja invariante por translação, podemos construir apenas o bloco da esquerda e repeti-lo para representar o bloco da direita; caso contrário, é preciso construir os blocos aumentados da esquerda e da direita separadamente, representados por H_{BA}^L e H_{BA}^R , respectivamente. O Hamiltoniano do super-bloco é construído unindo-se os dois blocos aumentados:

$$H_{SupB} = H_{BA}^L + H_{BA}^R + H_{SLSR}, \quad (\text{B.2})$$

sendo H_{SLSR} o hamiltoniano de interação entre os dois sítios livres.

B.3 Cálculo do estado fundamental via DMRG

O algoritmo de DMRG começa com um processo conhecido como “parte infinita”, no qual crescemos o sistema até o tamanho desejado, seguido por uma “parte finita”, que garante a convergência da energia do estado fundamental.

B.3.1 Parte Infinita

No algoritmo de DMRG, inicialmente construímos uma cadeia exata, com os blocos da esquerda e da direita contendo l sítios cada e dimensão $m = d^l$; resolvemos o Hamiltoniano do super-bloco por diagonalização exata ou por um processo de diagonalização iterativa que forneça o estado fundamental, como o método de Lanczos, por exemplo. Nesse ponto, H_{SupB} corresponde a uma matriz de dimensão $m * d * m * d = d^{2(l+1)}$. Assim, l deve ser pequeno o suficiente para que uma solução exata seja numericamente viável (em geral, utilizamos bloco iniciais de aproximadamente $l = 7$ sítios).

Dado o estado inicial $|GS\rangle$, calculamos a matriz densidade reduzida do bloco aumentado da esquerda (direita), traçando fora os graus de liberdade dos sítios da direita (esquerda):

$$\rho_{L(R)} = \text{Tr}_{R(L)} |GS\rangle\langle GS|. \quad (\text{B.3})$$

Os m primeiros auto-estados da matriz densidade reduzida da esquerda (direita), correspondentes aos maiores auto-valores, são usados para renormalizar o bloco aumentado da esquerda (direita). Assim, aproximamos uma matriz de dimensão $m * d$ por uma matriz de dimensão m , conforme representado na Figura B.2(b).

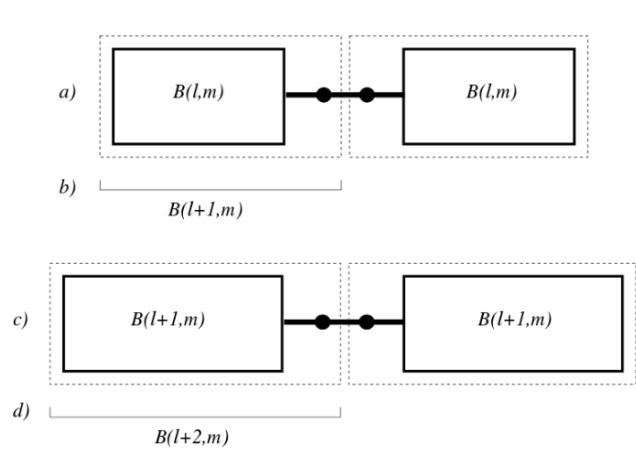


Figura B.2: Primeiros passos da parte infinita de DMRG.

O bloco aumentado renormalizado corresponde ao novo bloco no próximo passo do cálculo numérico. Nesse caso, o bloco não é mais exato: possui $l + 1$ sítios, mas dimensão $m = d^l$.

Nesse passo, aumentamos o tamanho da cadeia acrescentando dois novos sítios livres para unir os novos blocos (blocos aumentados do passo anterior), conforme representado na Figura B.2 (c). Em seguida, diagonalizamos o Hamiltoniano do novo super-bloco, que contém $2*(l+1)+2$ sítios, mas dimensão $m = d^{2(l+1)}$ (note que, dessa forma, crescemos o sistema sem crescer o espaço de Hilbert); usamos os m primeiros auto-estados da matriz densidade reduzida para renormalizar o bloco aumentado, produzindo o bloco do próximo passo, com $l + 2$ sítios e dimensão m ; acrescentamos dois novos sítios para aumentar o tamanho da cadeia e repetimos o processo até atingir o tamanho desejado.

Em alguns casos, pode-se continuar crescendo a cadeia até que a energia do estado fundamental pare de variar, dentro de uma margem de tolerância determinada. Nesse caso, o algoritmo simula o limite termodinâmico e o cálculo não precisa ser complementado pela parte finita. Tal procedimento, no entanto, apresenta muitos erros numéricos e não se aplica a cadeias com quebra de invariância translacional, como no caso de sistemas desordenados, por exemplo. O DMRG tem se mostrado mais preciso para a descrição de cadeias finitas: o algoritmo infinito é utilizado para construir a cadeia do tamanho desejado (podendo chegar a algumas centenas de sítios) e a convergência do estado fundamental é garantida pela parte finita, descrita na próxima subseção.

B.3.2 Parte Finita (*sweeps*)

No início da parte finita do algoritmo de DMRG, temos uma cadeia de N sítios, estruturada na forma de um bloco de $(N - 1)/2$ sítios à esquerda e outro com o mesmo número de sítios à direita, ambos de dimensão m , ligados por dois sítios livres no centro da cadeia. Em seguida, realizamos um processo semelhante ao descrito na subseção anterior, porém sem que haja a inclusão de novos sítios à cadeia. Inicialmente, o bloco da esquerda cresce pelo acréscimo de um sítio, enquanto o bloco da direita é reduzido por um sítio. O processo de renormalização é aplicado apenas ao bloco crescente (nesse caso o bloco da esquerda, com $N/2$ sítios), enquanto o bloco decrescente (da direita com $(N - 2)/2$ sítios) é representado por uma base armazenada na memória, que representava o bloco quando este possuía $(N - 2)/2$ sítios. O crescimento do bloco da esquerda é repetido até que a borda da direita seja atingida. Em seguida, o bloco da direita passa a crescer e é renormalizado, enquanto o bloco da esquerda é reduzido. Um ciclo completo, denominado *sweep*, está representado na Figura B.3 e vai até os dois sítios livres estarem novamente no meio da cadeia. O processo é repetido até que ocorra a convergência da energia do estado fundamental. Usualmente 2 a 3 *sweeps* são suficientes para a convergência.

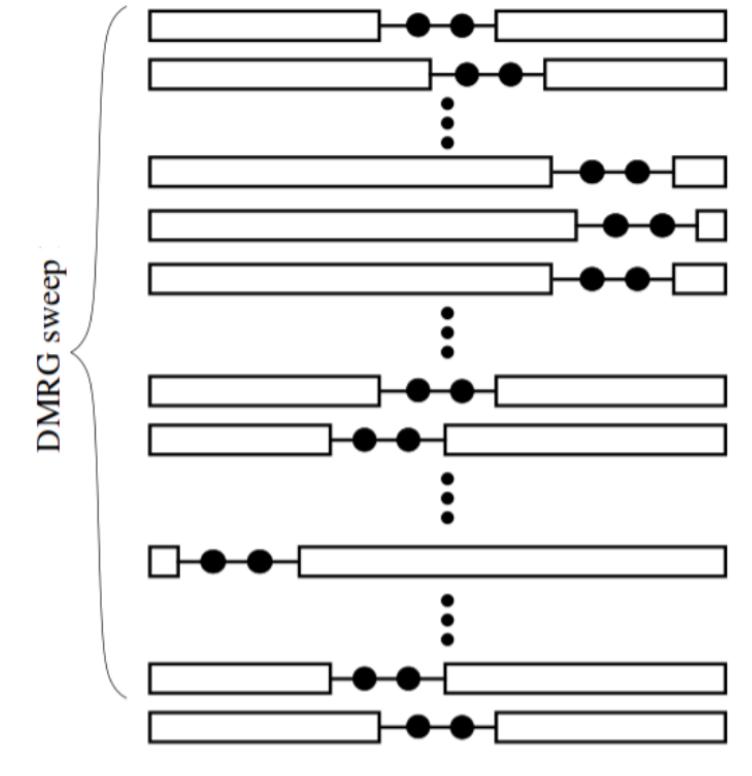


Figura B.3: Um *sweep* completo no cálculo DMRG.

B.4 Precisão da truncagem DMRG

A precisão do cálculo DMRG é estimada pelo peso da truncagem, ϵ , calculado como

$$\epsilon = 1 - \sum_{\alpha=1}^m \lambda_{\alpha}, \tag{B.4}$$

sendo $\{\lambda_{\alpha}\}$ o conjunto de auto-valores da matriz densidade reduzida, organizados em ordem decrescente. Em geral, para sistemas unidimensionais com interação de curto alcance, grande precisão ($\epsilon \approx 10^{-10}$) é alcançada com um número relativamente pequeno de estados ($m < 100$). A qualidade da truncagem está relacionada à quantidade de emaranhamento existente entre os blocos aumentados do sistema, conforme descrito a seguir.

Um estado puro de muitos corpos, $|\Psi\rangle$, composto por um sistema de duas subpartes, L e R , pode ser escrito como uma decomposição em $\{|\Phi_{L,i}\rangle\}$ e $\{|\Phi_{R,i}\rangle\}$, bases ortonormais das regiões L e R , por meio da decomposição de Schmidt (já mencionada no Capítulo 2):

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i} |\phi_{L,i}\rangle \otimes |\phi_{R,i}\rangle, \tag{B.5}$$

onde λ_i obedece à relação $\sum_i \lambda_i = 1$ e representa o conjunto de auto-valores da matriz densidade reduzida,

$$\rho_{L/R} = \text{Tr}_{L/R} |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_i \lambda_i |\phi_{L/R,i}\rangle\langle\phi_{L/R,i}|. \quad (\text{B.6})$$

No caso de um estado constituído do produto dos estados de cada subparte, temos que $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_i = 0 \forall i \neq 1$ e não há emaranhamento entre as subpartes. À medida que o emaranhamento entre as subpartes cresce, são necessários mais termos para uma boa representação do estado via decomposição de Schmidt e mais autovalores da matriz densidade reduzida assumem valores consideráveis.

Assim, para que a truncagem do espaço de Hilbert no cálculo DMRG seja eficiente (boa precisão retendo poucos estados) é preciso que o emaranhamento entre as subpartes seja pequeno. A qualidade do cálculo DMRG é garantida pela lei de área, que limita o emaranhamento de Hamiltonianos “locais” (interação de curto alcance) [7].

A escolha de truncagem por meio dos auto-estados da matriz densidade reduzida faz com que valores esperados de operadores locais sejam obtidos com erros pequenos, da ordem do peso de truncagem. A obtenção da função de onda e da entropia de emaranhamento também são otimizadas [8].

B.5 Evolução temporal via DMRG

A descrição da evolução temporal na mecânica quântica é dada pela solução da equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\Psi(0)\rangle \quad (\text{B.7})$$

(por simplicidade fizemos $\hbar = 1$). Porém, aplicar o operador evolução temporal $U = e^{-iHt}$ a um estado de muitos corpos não é tarefa trivial.

Há diferentes propostas de inclusão de evolução temporal no cálculo DMRG; aqui, nos concentraremos no método introduzido por White e Feiguin [9]. Nesse caso, dividimos o Hamiltoniano em termos locais por meio da decomposição de Suzuki-Trotter. Tal decomposição é aplicável apenas a Hamiltonianos contendo interações até primeiros vizinhos, mas essa classe inclui grande parte dos modelos de interesse em problemas de muitos corpos, como por exemplo os Hamiltonianos de Heisenberg e Hubbard. Nesse método, é conveniente dividir o tempo em pequenos intervalos $\tau = t/N_t$ e aplicar o operador evolução temporal N_t vezes, enquanto “seguimos” o estado no espaço de Hilbert, adaptando a base a cada passo, conforme descrito mais adiante.

A decomposição de Suzuki-Trotter consiste em dividir o Hamiltoniano em termos locais,

isto é $H = H_1 + H_2 + \dots + H_{N-1}$, sendo que H_1 inclui interações entre os sítios 1 e 2, H_2 contém interações entre os sítios 2 e 3 e assim sucessivamente. Dessa forma, o operador $e^{-iH_n\tau}$ pode ser aplicado à cadeia quando os sítios n e $n + 1$ forem os sítios livres.

A dificuldade da decomposição consiste no fato de que

$$e^{-iH\tau} = e^{-i(H_1+H_2+H_3+\dots)\tau} \neq e^{-iH_1\tau} e^{-iH_2\tau} e^{-iH_3\tau} \dots, \quad (\text{B.8})$$

pois $[H_n, H_{n+1}] \neq 0$. Para contornar essa dificuldade, dividimos os Hamiltonianos locais entre pares e ímpares, separando Hamiltonianos que atuam sobre um mesmo sítio. Dessa forma, definimos $H_A = H_2 + H_4 + H_6 + \dots$ e $H_B = H_1 + H_3 + H_5 + \dots$, conforme representado na Figura B.4. Após essa divisão, temos que

$$e^{-i(H_A+H_B)\tau} = e^{-iH_A\tau} e^{-iH_B\tau} e^{O(\tau^2)} \quad (\text{B.9})$$

ou

$$e^{-i(H_A+H_B)\tau} = e^{-i\frac{H_A}{2}\tau} e^{-iH_B\tau} e^{-i\frac{H_A}{2}\tau} e^{O(\tau^3)}, \quad (\text{B.10})$$

que correspondem às decomposições de Suzuki-Trotter de primeira e segunda ordem, respectivamente. Assim, é possível expandir as exponenciais envolvendo H_A e H_B em produtos de exponenciais, cada uma atuando em dois sítios.

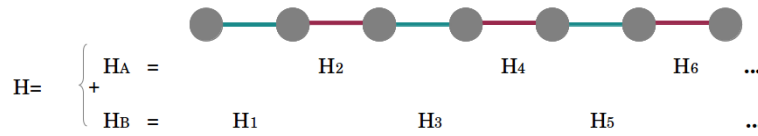


Figura B.4: Decomposição do Hamiltoniano em sítios pares e ímpares.

Como a exponencial da equação (B.9) fatora em termos de apenas dois sítios, o algoritmo de evolução temporal via Suzuki-Trotter fica semelhante ao algoritmo da parte finita, porém, ao longo dos *sweeps*, ao invés de diagonalizar o super-bloco, aplica-se o operador de evolução temporal referente aos sítios livres. No caso da decomposição de Suzuki-Trotter de primeira ordem, por exemplo, inicia-se a aplicação da evolução temporal na borda da esquerda e, enquanto o bloco da esquerda ganha sítios, aplica-se o operador de evolução de dois sítios, $e^{-iH_n\tau}$ (com $H_n \in H_B$), sempre que o sítio livre da esquerda for ímpar. Na volta, enquanto o bloco da direita cresce, o operador $e^{-iH_n\tau}$ ($H_n \in H_A$) é aplicado sempre que o sítio livre da esquerda for par. O processo é repetido N_t vezes.

O algoritmo pode ser resumido conforme apresentado abaixo.

1. Começa-se com um estado inicial, que pode ser o estado fundamental obtido por DMRG segundo um Hamiltoniano diferente, por exemplo.

2. Realiza-se *sweeps*, semelhantes ao cálculo da parte finita, porém, a cada passo aplica-se o operador $e^{-iH_n\tau}$ (n e $n + 1$ representam os dois sítios livres em cada passo).
3. Aplica-se uma normalização, semelhante à utilizada no DMRG estático, a partir dos auto-estados da matriz densidade reduzida do estado evoluído. Assim, o espaço de Hilbert é atualizado durante a evolução temporal.
4. Altera-se a representação do estado, a cada passo, usando um método de predição de estados introduzido por S. White.¹
5. Repete-se os itens 2 a 4 até que o tempo de evolução desejado seja atingido.

Os erros na evolução temporal podem ser reduzidos diminuindo-se o intervalo de tempo, τ , ou aumentando-se a ordem da decomposição de Suzuki-Trotter utilizada.

Referências

- [1] Steven R. White, “*Density matrix formulation for quantum renormalization groups*”, Phys. Rev. Lett. **69** (1992).
- [2] Steven R. White, “*Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*”, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [3] Kenneth G. Wilson, “*The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*”, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [4] Ulrich Schollwoeck, “*The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*”, Annals of Physics **326**, 96 (2011).
- [5] G. De Chiara, M. Rizzi, D. Rossini, S. Montangero, “*Density Matrix Renormalization Group for Dummies*”, J. Comput. Theor. Nanosci. **5**, 1277-1288 (2008).
- [6] A. L. Malvezzi, “*An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems*”, Braz. J. Phys. **33**, 55 (2003).
- [7] J. Eisert, M. Cramer, M.B. Plenio, “*Area laws for the entanglement entropy - a review*”, Rev. Mod. Phys. **82**, 277 (2010).
- [8] Ulrich Schollwoeck, “*The density matrix renormalization group*”, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- [9] Steven R. White e Adrian E. Feiguin, “*Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group*”, Phys. Rev. Lett. **93**, 076401 (2004).

¹O método de predição de estados de S. White foi originalmente introduzido para melhorar o chute inicial utilizado na diagonalização de Lanczos, no caso estático [10], mas é importante também para o processo de evolução temporal. Nesse método levamos o estado estruturado na forma $B(l-1, m) \bullet \bullet B(N-l-1, m)$ em um estado na forma $B(l, m) \bullet \bullet B(N-l-2, m)$, sendo que $B(l, m)$ representa um bloco de l sítios e dimensão m e \bullet representa um sítio livre. A transformação de base é feita multiplicando-se o estado por matrizes de transformação armazenadas na memória ao longo dos *sweeps*.

- [10] Steven R. White, “*Spin Gaps in a Frustrated Heisenberg Model for CaV_4O_9* ”, Phys. Rev. Lett. **77**, 3633 (1996).

Apêndice C

Líquido de Fermi e líquido de Luttinger

Excitações de baixa energia em sistemas interagentes de duas e três dimensões podem ser descritas, em muitos casos, pela teoria de líquido de Fermi (LF) [1]. Em uma dimensão, essa teoria é substituída pela teoria de líquido de Luttinger (LL) [2].

A teoria de LF foi introduzida em 1956 por Landau para descrever o hélio líquido, He^3 . O alcance da teoria, no entanto, é muito maior. Ela descreve qualitativamente bem propriedades de diferentes sistemas de muitos férmions interagentes a baixas temperaturas, especialmente de elétrons em metais. Pela teoria de LF, excitações próximas ao nível de Fermi em um sistema de muitos corpos podem ser representadas por quase-partículas de tempo de vida longo. Assim, as excitações de sistemas interagentes são mapeadas em excitações de sistemas não interagentes. Desse modo, a inclusão de interação não altera qualitativamente propriedades termodinâmicas a baixas temperaturas, mas apenas leva a uma renormalização dos parâmetros das quase-partículas.

Em sistemas unidimensionais, efeitos de interação são amplificados devido ao reduzido grau de liberdade espacial das partículas. Nesse caso, a teoria de LF de excitações elementares é substituída pela teoria de LL, na qual excitações de baixa energia de partículas interagentes são descritas por ondas de densidade de carga e spin (excitações coletivas). Ao contrário da teoria de LF, em uma dimensão funções de correlação seguem leis de potência não universais, com expoentes que dependem da interação. Essa dependência do expoente pode ser descrita por meio dos parâmetros K_ρ e K_s , conhecidos como parâmetro de Luttinger de carga e spin, respectivamente. Além dos parâmetros K , a física de baixas energias do sistema interagente depende também das velocidades v_ρ e v_s de propagação dos modos de carga e spin, respectivamente. Em geral, em sistemas descritos pela teoria de LL, $v_\rho \neq v_s$, o que dá origem ao fenômeno de separação dos graus de liberdade de carga e spin.

Referências

- [1] H.J. Schulz, G. Cuniberti, P. Pieri, “*Fermi liquids and Luttinger liquids*”, arXiv:cond-mat/9807366 (1998).
- [2] T. Giamarchi, “*Quantum Physics in One Dimension*” (Clarendon Press, Oxford, 2004).

Apêndice D

Supercondutividade convencional - Teoria BCS

Supercondutividade é uma fase macroscópica da matéria na qual cargas fluem sem nenhuma resistência. Além disso, campos magnéticos são blindados por materiais na fase supercondutora (efeito Meissner). Tais propriedades têm diversas aplicações tecnológicas, como por exemplo dispositivos supercondutores de interferência quântica (SQUID, do inglês *superconducting quantum interference devices*), dispositivos eletrônicos baseados no efeito Josephson e trens super-rápidos baseados em levitação magnética.

Fases supercondutoras convencionais foram observadas a partir do início do século XX, quando percebeu-se que a redução da temperatura abaixo de um valor crítico levava certos metais a conduzirem com resistência nula. Em metais, a resistividade diminui com a diminuição da temperatura, mas em metais supercondutores ela vai abruptamente a zero para $T < T_c$.

Materiais supercondutores considerados convencionais são descritos por uma teoria de supercondutividade introduzida em 1957 por Bardeen, Cooper e Schrieffer, conhecida como teoria BCS [1]. Nesse tipo de material, o transporte é realizado pelos chamados pares de Cooper, elétrons que se unem em pares devido a interações com vibrações da rede cristalina (fônons). Essa teoria será brevemente revisada neste apêndice. A descrição aqui presente é baseada principalmente em notas de aula de John Chalker [2]. Para mais informações sobre a teoria, sugerimos, por exemplo, a referência [3].

D.1 Interação atrativa mediada por fônons

A ideia central da teoria BCS é que a interação elétron-fônon leva a uma interação efetiva entre elétrons que possuem energias similares. Apesar desta interação ser fraca, a presença da nuvem eletrônica e o princípio de exclusão garantem que ela seja suficiente para que

os elétrons permaneçam ligados, formando pares de Cooper. O tamanho característico dos pares - isto é, o comprimento de correlação - é muito maior do que a separação entre eles. Como cada par interage com muitos outros, podemos tratar o problema por meio de uma aproximação de campo médio, conforme descrito mais adiante.

Para descrever a interação efetiva, partimos do Hamiltoniano

$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \hbar\omega \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{k}\vec{q}} M c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{k}} a_{\vec{q}} + h.c. \quad (D.1)$$

que descreve as energias dos elétrons e dos fônons, bem como a interação entre eles. Acima usamos a notação de segunda quantização, sendo que $c_{\vec{k}}^{\dagger}$ e $c_{\vec{k}}$ são operadores de criação e aniquilação de elétrons com momento \vec{k} , enquanto $a_{\vec{q}}^{\dagger}$ e $a_{\vec{q}}$ correspondem a operadores de fônons com momento \vec{q} . O primeiro termo corresponde à energia cinética dos elétrons, o segundo à energia dos fônons da rede, enquanto o último descreve a interação entre eles, sendo M a amplitude do acoplamento elétron-fônon. Na equação acima, omitimos os índices de spin por simplicidade; eles serão explicitados mais adiante.

A fim de nos concentrarmos no sistema eletrônico, vamos eliminar a interação elétron-fônon por meio de uma transformação canônica (transformação de Schrieffer-Wolff). O mesmo resultado pode ser obtido tratando-se o termo de interação, $H_1 = \sum_{\vec{k}\vec{q}} M c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{k}} a_{\vec{q}} + h.c$ por teoria de perturbação de segunda ordem. Tal procedimento justifica-se porque a energia de interação é pequena, comparada à energia do Hamiltoniano não perturbado, $H_0 = \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \hbar\omega \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}}$.

Na transformação de Schrieffer-Wolff, deduzimos um Hamiltoniano efetivo de baixas energias a partir de um Hamiltoniano inicial por meio de uma transformação unitária que desacopla subespaços de altas e baixas energias.¹ Nesse procedimento, o Hamiltoniano efetivo \tilde{H} é dado por

$$\tilde{H} = e^{-S} H e^{-S} = H + [H, S] + \frac{1}{2} [[H, S], S] + \dots, \quad (D.2)$$

sendo que o operador S obedece à condição

$$H_1 + [H_0, S] = 0. \quad (D.3)$$

Substituindo a equação (D.3) em (D.2) e mantendo termos até a segunda ordem em S , temos

$$\tilde{H} = H_0 + \frac{1}{2} [H_1, S] \equiv H_0 + H_{int} \rightarrow H_{int} \equiv \frac{1}{2} [H_1, S]. \quad (D.4)$$

Multiplicando a equação (D.3) à esquerda por $\langle n |$ e à direita por $| m \rangle$, sendo $| n \rangle$ e $| m \rangle$

¹Outro exemplo de contexto no qual a transformação de Schrieffer-Wolff é usada é a dedução do modelo Kondo a partir do Hamiltoniano de Anderson de uma impureza [4].

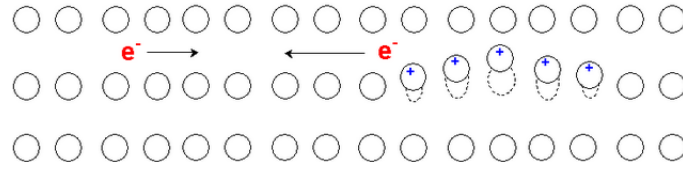


Figura D.1: Representação esquemática da ligação entre elétrons através de vibrações da rede.

auto-estados de H_0 , obtemos

$$\langle n|S|m\rangle = \frac{\langle n|H_1|m\rangle}{E_m - E_n}. \quad (\text{D.5})$$

Finalmente, multiplicando a equação (D.4) à esquerda por $\langle i|$ e à direita por $|f\rangle$ e usando o resultado de (D.5), temos

$$\langle f|H_{int}|i\rangle = \frac{1}{2} \sum_v \langle f|H_1|v\rangle \langle v|H_1|i\rangle \left(\frac{1}{E_i - E_v} + \frac{1}{E_f - E_v} \right). \quad (\text{D.6})$$

Do elemento de matriz acima, podemos reescrever o Hamiltoniano H_{int} como

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q}}^\dagger c_{\vec{p}} c_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}} |M|^2 \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k} - \vec{q}) - \hbar\omega} + \frac{1}{\epsilon(\vec{p} + \vec{q}) - \epsilon(\vec{p}) - \hbar\omega} \right). \quad (\text{D.7})$$

O termo de interação apresentado acima é atrativo quando a dispersão dos elétrons envolvidos obedece à relação $|\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k} - \vec{q})| < \hbar\omega$. Isto significa que o acoplamento com as vibrações da rede gera uma atração efetiva entre elétrons que possuem uma energia da ordem de $\hbar\omega$ em torno do nível de Fermi. Essa energia pode ser estimada pela energia de Debye, $\hbar\omega_D$, sendo que a frequência de Debye, ω_D , corresponde à frequência de vibração máxima dos átomos em um sólido.

Uma intuição a respeito da formação de pares de elétrons ligados por fônons pode ser obtida a partir do esboço apresentado na Figura D.1. Um elétron se movendo em uma rede formada por íons positivos pode deslocar alguns íons criando uma região de excesso de cargas positivas capaz de atrair outro elétron que viaja pela rede. Essa atração é retardada, pois os íons, mais pesados, se movem mais lentamente que os elétrons. De forma alternativa, pode-se afirmar que um elétron emite um fônon de energia $\hbar\omega$, que é absorvido por outro elétron.

D.2 Descrição qualitativa da função de onda BCS

Conforme comentado na seção anterior, a energia de interação atrativa gerada pelos fônons é pequena e portanto aparentemente insuficiente para manter os pares de elétrons ligados.

Para entendermos como uma atração fraca é capaz de criar os pares de Cooper, devemos lembrar que as partículas não se movem no espaço livre, mas sim acima de um mar de Fermi preenchido. Nesse contexto, o princípio de exclusão de Pauli facilita a ligação dos elétrons no par.

Na teoria BCS, a função de onda do estado fundamental da fase supercondutora com N elétrons de condução é dada por um produto de $N/2$ funções de onda de pares:

$$\Psi(\vec{r}_1 s_1, \dots, \vec{r}_N s_N) = \mathcal{A} \prod_{n=1}^{n=N/2} \phi(\vec{r}_{2n-1} s_{2n-1}, \vec{r}_{2n} s_{2n}), \quad (\text{D.8})$$

com

$$\phi(\vec{r}_1 \sigma_1, \vec{r}_2 \sigma_2) = (\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2) g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (\text{D.9})$$

Na função de onda do par, a parte de spin está no estado singlete, de forma que a parte orbital $g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ deve ser simétrica. Além disso, o fator \mathcal{A} indica a antissimetria do produto, característica de funções de onda fermiônicas. Se ϕ representasse estados monoelétrônicos, a antissimetria produziria uma função de onda total nula, em concordância com o princípio de exclusão de Pauli. Isso não ocorre para funções de onda de dois elétrons; assim, temos um comportamento semelhante a uma condensação de Bose-Einstein para os pares.

A função de onda pode também ser representada no espaço de momentos na notação de operadores:

$$|\phi\rangle = \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (\text{D.10})$$

e

$$|\Psi\rangle = \prod_{n=1}^{N/2} \left(\sum_{\vec{k}_n} g_{\vec{k}_n} c_{\vec{k}_n\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}_n\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{D.11})$$

Nesta representação, fica claro que os pares de Cooper são formados por elétrons com momentos iguais em módulo, porém sentidos opostos.

Uma análise da função de onda BCS, que consiste em um produto de funções de pares idênticas, nos permite entender a ausência de dissipação em correntes supercondutoras. Embora uma descrição matemática seja trabalhosa (sugerimos as referências [2] e [3] para uma dedução analítica), a ideia intuitiva consiste no fato de que processos de espalhamentos não podem destruir pares individuais, já que não é possível alterar a função de onda de apenas um par de Cooper. Enquanto elétrons individuais podem ser espalhados em correntes convencionais, a dissipação em supercondutores só ocorre com a destruição de todo o estado de emparelhamento, o que exige uma quantidade muito grande de energia.

D.3 Teoria de Campo Médio

Para entendermos mais características dos supercondutores dentro da teoria BCS, podemos recorrer à teoria de campo médio. Após as aproximações descritas entre as equações D.1 e D.7, temos um Hamiltoniano da forma

$$H - \mu N = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} - U \sum_{\vec{k}\vec{q}}' c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow}, \quad (\text{D.12})$$

sendo que $\sum_{\vec{k}\vec{q}}'$ indica a soma em estados de energia $\epsilon_{\vec{k}}$ e $\epsilon_{\vec{q}}$ entre $\hbar\omega_D$ e E_F , enquanto U corresponde à energia potencial de formação de pares.

Vamos agora tratar o termo interagente do Hamiltoniano por campo médio para reduzi-lo a uma forma quadrática. Nesse procedimento, usamos a relação $c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle + \delta(c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger)$ para reescrever o termo de interação:

$$\begin{aligned} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow} &= \left(\langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle + \delta(c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) \right) \left(\langle c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow} \rangle + \delta(c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow}) \right) \\ &= \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow} \rangle + \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \delta(c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow}) \\ &\quad + \langle c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow} \rangle \delta(c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) + \delta(c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) \delta(c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow}) \\ &\approx \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow} \rangle + \langle c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow} \rangle \left(c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) \\ &\quad - \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Acima desprezamos flutuações da forma $\delta(c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) \delta(c_{-\vec{q}\downarrow} c_{\vec{q}\uparrow})$. Além disso, definimos Δ como uma medida das correlações de pares, isto é,

$$\Delta = U \sum_{\vec{k}'} \langle c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (\text{D.14})$$

Com isso, temos

$$H - \mu N = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} - \Delta \sum_{\vec{k}}' \left(c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + h.c. \right). \quad (\text{D.15})$$

O Hamiltoniano de campo médio pode ser diagonalizado por transformação de Bogoliubov. Por simplicidade, não desenvolveremos a solução aqui (para mais informações, ver, por exemplo, referência [2]). É importante explicitar, no entanto, que a solução do modelo indica a presença de um *gap* de excitação, proporcional a Δ , que justifica propriedades térmicas e magnéticas observadas experimentalmente em supercondutores convencionais.

Referências

- [1] J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer, “*Microscopic Theory of Superconductivity*”, Phys. Rev. **106**, 162 (1957).
- [2] John Chalker, “*Quantum Theory of Condensed Matter*”, Physics Department, Oxford University (2013). Notas de aula, disponível em <https://www-thphys.physics.ox.ac.uk/people/JohnChalker/qnotes.pdf>.
- [3] P. Phillips, “*Advanced Solid State Physics*”, 2nd edn., New York, Cambridge.
- [4] J. R. Schrieffer e P.A. Wolff, “*Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians*”, Physical Review. **149**, 491–492 (1966).

Apêndice E

Método de Lanczos

O método de Lanczos corresponde a um cálculo iterativo para a obtenção do estado fundamental (e alguns estados excitados) de Hamiltonianos. Nesse método, a matriz a ser diagonalizada é representada em uma forma tridiagonal.

Conforme explicado mais adiante, a operação mais complicada em Lanczos é o cálculo de produtos $H|v\rangle$ entre matrizes e vetores (o que requer memória $\mathcal{O}(N)$, sendo $N \times N$ a dimensão do Hamiltoniano H), que podem ser calculados de forma especialmente eficiente para matrizes esparsas, como é o caso de Hamiltonianos de sistemas com interações de curto alcance.

A descrição sucinta do método apresentada aqui é baseada nas notas da escola de inverno apresentada na referência [1]. A fim de introduzir o método, consideramos um processo variacional para o cálculo do estado fundamental de um sistema físico.

Para minimizarmos o funcional

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle},$$

recorremos ao gradiente

$$\frac{\delta E[\Psi]}{\delta \langle \Psi |} = \frac{H|\Psi\rangle - E[\Psi]|\Psi\rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = |\Psi_a\rangle,$$

que aponta na direção crescente de $E[\Psi]$. Assim, $E[\Psi - \alpha\Psi_a] < E[\Psi]$, para α pequeno e positivo.

O valor ótimo de α pode ser encontrado por um processo de minimização de $E[\Psi - \alpha\Psi_a]$. Nesse processo introduzimos uma base ortonormal no subespaço definido por $|\Psi\rangle$ e $|\Psi_a\rangle$, ou, de forma equivalente, por $|\Psi\rangle$ e $H|\Psi\rangle$.

O primeiro vetor da base pode ser definido pela normalização de $|\Psi\rangle$:

$$|v_0\rangle = |\Psi\rangle / \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

e o segundo por uma processo de ortogonalização de $H|v_0\rangle$ com relação a $|v_0\rangle$

$$|\tilde{v}_1\rangle = H|v_0\rangle - |v_0\rangle\langle v_0|H|v_0\rangle \rightarrow |v_1\rangle = |\tilde{v}_1\rangle/\sqrt{\langle\tilde{v}_1|\tilde{v}_1\rangle}.$$

Definindo $a_n = \langle v_n|H|v_n\rangle$ e $b_1^2 = \langle\tilde{v}_1|\tilde{v}_1\rangle$, temos então

$$H|v_0\rangle = b_1|v_1\rangle + a_0|v_0\rangle;$$

multiplicando os dois lados da equação por $\langle v_1|$, vemos que $b_1 = \langle v_1|H|v_0\rangle$.

No subespaço ortonormalizado de $|\Psi\rangle$ e $H|\Psi\rangle$, descrito pela base $\{|v_0\rangle, |v_1\rangle\}$, podemos representar qualquer função de onda normalizada na forma

$$|v\rangle = \cos(\theta)|v_0\rangle + \sin(\theta)|v_1\rangle$$

e podemos encontrar o estado fundamental minimizando o valor esperado $\langle v|H|v\rangle$ com relação a θ . Alternativamente, podemos diagonalizar a matriz do Hamiltoniano projetado neste subespaço

$$H_{(\Psi, H\Psi)} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 \\ b_1 & a_1 \end{pmatrix}.$$

O estado variacional de menor energia, $|\Psi^{(2)}\rangle = \cos(\theta_{min})|v_0\rangle + \sin(\theta_{min})|v_1\rangle$, não corresponde ao estado fundamental do Hamiltoniano H , cuja descrição completa depende de uma base muito maior, da dimensão do espaço de Hilbert do sistema. $|\Psi^{(2)}\rangle$ é, no entanto, o estado mais próximo do estado fundamental no subespaço de dimensão 2.

Após esse processo, podemos usar $|\Psi^{(2)}\rangle$ como novo chute inicial para mais um passo de minimização, desta vez no subespaço definido por $|\Psi^{(2)}\rangle$ e $H|\Psi^{(2)}\rangle$.

Repetir esse processo sucessivamente fornece estados com energia cada vez menores. Após L passos, o estado resultante será parte do subespaço $K^L(H, |v_0\rangle) = (|v_0\rangle, H|v_0\rangle, \dots, H^L|v_0\rangle)$, conhecido como espaço de Krylov de dimensão $L + 1$ de H sobre $|v_0\rangle$.

Ao invés de repetir L vezes o processo de minimização em subespaços de dimensão 2, podemos encontrar direto o estado de menor energia no subespaço $K^L(H, |v_0\rangle)$. Na verdade, o maior número de graus de liberdade nesse caso leva a convergências mais rápidas.

Na prática, a construção do espaço de Krylov de H sobre $|v_0\rangle$ é feita conforme apresentado abaixo

$$b_1|v_1\rangle = |\tilde{v}_1\rangle = H|v_0\rangle - a_0|v_0\rangle,$$

$$b_2|v_2\rangle = |\tilde{v}_2\rangle = H|v_1\rangle - \sum_{i=0}^1 |v_i\rangle\langle v_i|H|v_1\rangle = H|v_1\rangle - a_1|v_1\rangle - b_1|v_0\rangle,$$

$$b_3|v_3\rangle = |\tilde{v}_3\rangle = H|v_2\rangle - \sum_{i=0}^2 |v_i\rangle\langle v_i|H|v_2\rangle = H|v_2\rangle - a_2|v_2\rangle - b_2|v_1\rangle$$

...

Note que acima usamos $\langle v_0|H|v_2\rangle = 0$, consequência do fato de que $H|v_2\rangle = b_2|v_1\rangle + a_2|v_2\rangle - b_3|v_3\rangle$, ou seja, uma combinação linear de vetores que são, por construção, ortogonais a $|v_0\rangle$. De fato, $\langle v_i|H|v_j\rangle = 0 \forall |i - j| > 1$.

De forma geral, temos

$$b_{n+1}|v_{n+1}\rangle = |\tilde{v}_{n+1}\rangle = H|v_n\rangle - \sum_{i=0}^n |v_i\rangle\langle v_i|H|v_n\rangle = H|v_n\rangle - a_n|v_n\rangle - b_n|v_{n-1}\rangle,$$

sendo $a_n = \langle v_n|H|v_n\rangle$ e $b_n^2 = \langle \tilde{v}_n|\tilde{v}_n\rangle$.

Rearranjando os termos, temos

$$H|v_n\rangle = b_nv_{n-1}|v_{n-1}\rangle + a_n|v_n\rangle + b_{n+1}|v_{n+1}\rangle$$

e fica claro que H neste subespaço assume uma forma tridiagonal:

$$H_{K^L(H,|v_0\rangle)} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & & 0 & 0 \\ & & \vdots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{L-1} & b_L \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b_L & a_L \end{pmatrix}. \quad (\text{E.1})$$

Além da facilidade em obter auto-valores extremos em matrizes tridiagonais, a vantagem do método de Lanczos é que não é preciso construir o Hamiltoniano em todo o espaço de Hilbert do sistema. Um espaço de Krylov da ordem de poucas centenas já é suficiente para fornecer uma ótima aproximação para o estado fundamental do sistema.

Em geral, a eficiência do cálculo do estado fundamental via Lanczos depende de dois fatores: (i) da escolha do estado inicial e (ii) do tamanho do espaço de Krylov considerado. Quanto ao item (i), a única exigência é que o estado inicial não seja ortogonal ao estado fundamental. Se não temos nenhum conhecimento *a priori* sobre o estado de menor energia do sistema, esse requisito pode ser satisfeito construindo-se um estado inicial com coeficientes aleatórios na base utilizada. Caso haja algum conhecimento anterior a respeito do estado fundamental, como o momento total ou o spin, é conveniente iniciar as iterações com um estado que pertença ao subespaço do estado fundamental, mas ainda com coeficientes aleatórios dentro desse subespaço.

Uma estimativa formal da qualidade da convergência foi derivada por Kaniel e Paige [2]: se o estado inicial $|v_0\rangle$ não é ortogonal ao estado fundamental, convergência é esperada em uma taxa que cresce com a raiz do *gap* para o primeiro estado excitado. Se quisermos obter estados excitados, devemos escolher um estado inicial $|v_0\rangle$ exatamente ortogonal ao estado fundamental.

Referências

- [1] E. Pavarini, E. Koch, Dieter Vollhardt e Alexander Lichtenstein(eds.): The LDA+DMFT approach to strongly correlated materials. Reihe Modeling and Simulation Vol. 1. Forschungszentrum Julich, 2011. <http://www.cond-mat.de/events/correl11>.
- [2] G.H.Golub e C. F. Van Loan. Matrix Computations (Johns Hopkins University Press, 1996).

Apêndice F

A primeira zona de Brillouin e a superfície de Fermi no caso de simetria partícula-buraco

A superfície de Fermi corresponde à superfície no espaço recíproco que separa estados eletrônicos ocupados de estados vazios a temperatura zero. A forma da superfície de Fermi na primeira zona de Brillouin fornece informações importantes sobre as propriedades físicas do metal. Do ponto de vista experimental, ela pode ser determinada por ARPES (*Angle resolved photoemission spectroscopy*). No caso de modelos teóricos, informações sobre a superfície de Fermi podem ser obtidas a partir da dispersão da rede, relacionada à estrutura eletrônica do sistema.

No cálculo numérico, a superfície de Fermi é definida a partir dos polos da função de Green G de uma partícula, ou seja, dos pontos, no espaço de momento, nos quais $Re \frac{1}{G(\vec{k}, \omega)}$ muda de sinal. Essa condição é satisfeita pela relação $\mu_{eff} = \epsilon_k$, sendo $\mu_{eff} = \mu - Re \Sigma(\vec{k}, \omega)$, μ o potencial químico, $\Sigma(\vec{k}, \omega)$ a auto-energia, proporcional à interação, e ϵ_k a dispersão do modelo, que, para uma rede quadrada com *hopping* t entre primeiros vizinhos, é dada por

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y).$$

Quando a interação U do sistema é nula, temos $\Sigma(\vec{k}, \omega) = 0$. Nesse caso, a condição de semi-preenchimento é dada por

$$\epsilon_k = 0 \rightarrow \cos k_x = -\cos k_y.$$

Essa relação define a superfície de Fermi do sistema não interagente com simetria partícula-buraco e delimita os estados ocupados do sistema, conforme representado na Figura F.1.

A Figura F.1 apresenta ainda o vetor de *nesting* \mathbf{Q} , que conecta diferentes segmentos

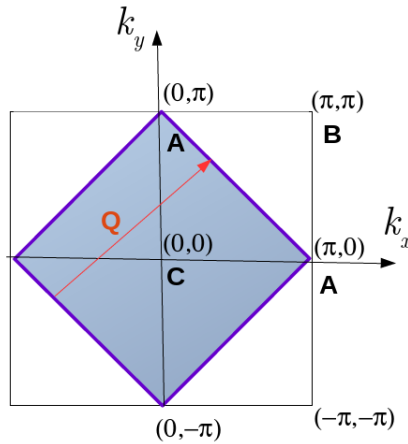


Figura F.1: Esboço da superfície de Fermi (linha azul) em uma rede quadrada de elétrons não interagentes. A região azul (cinza em preto e branco) marca os estados ocupados em semi-preenchimento; note a simetria partícula-buraco. Os pontos $A = (0, \pi)$ e $(\pi, 0)$; $B = (\pi, \pi)$ e $C = (0, 0)$ indicam pontos especiais no primeiro quadrante da zona de Brillouin. \mathbf{Q} indica o vetor de *nesting*, vetor de translação que conecta diferentes partes da superfície de Fermi.

da superfície de Fermi. Demarcamos também pontos especiais no primeiro quadrante da zona de Brillouin, $A = (0, \pi)$ e $(\pi, 0)$; $B = (\pi, \pi)$ e $C = (0, 0)$, relevantes para a análise de quantidades calculadas via CDMFT (conforme descrito no Capítulo 8). Nestes pontos, encontramos os auto-valores da auto-energia do *cluster* de $N_c = 4$ sítios.

Auto-valores da auto-energia do *cluster* para o modelo de Hubbard apresentam diferentes comportamentos em diferentes pontos do espaço de momento. Um ponto importante na análise da transição de Mott corresponde ao ponto A , que está sobre a superfície de Fermi. Se neste ponto o sistema apresenta um comportamento do tipo líquido de Fermi, consideramos que estamos em uma fase metálica convencional; caso contrário, temos uma fase *pseudo-gap* ou isolante, pois há a abertura de um *gap* na superfície de Fermi.

A inclusão de *hopping* t' entre segundos vizinhos altera a dispersão da rede para $\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y$ e conseqüentemente muda a forma da superfície de Fermi, conforme representado na Figura F.2, reduzindo o *nesting*. Não há alteração, no entanto, na escolha dos pontos principais para análise da transição, isto é, em nossos resultados apresentados no Capítulo 9, continuamos analisando as quantidades do *cluster* no ponto A , apesar da inclusão de $t' \neq 0$.

A inclusão de interação U também deforma a superfície de Fermi, pois altera a forma da auto-energia Σ . Essas alterações são discutidas no Capítulo 9 e uma comparação entre superfícies de Fermi interagentes e não-interagentes pode ser vista na Figura 9.9.

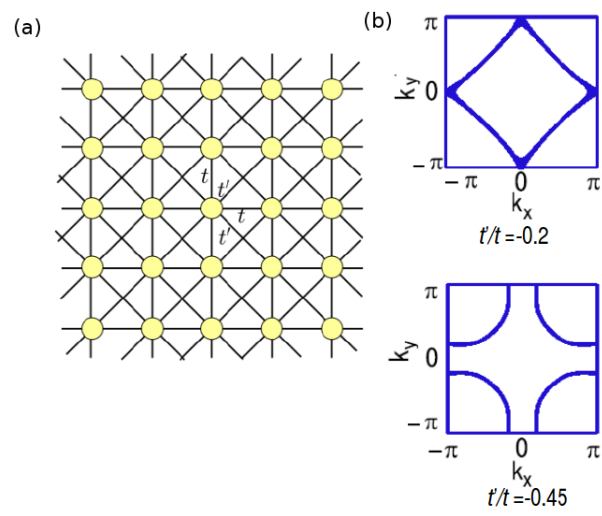


Figura F.2: (a) Rede quadrada contendo *hopping* entre primeiros e segundos vizinhos; as amplitudes dos *hoppings* são dada por t e t' , respectivamente. (b) Deformação da superfície de Fermi devido à inclusão de hopping t' entre segundos vizinhos.