

TESE DE DOUTORADO

“Transição Metal-Isolante com Repulsão Coulombiana de Alcance Infinito: Estatística Fracionária e Estado Fundamental”

“Mecânica Estatística de Polímeros Magnéticos”

por

CARLINDO VITORIANO DOS SANTOS JÚNIOR

Banca Examinadora:

Maurício Domingues Coutinho Filho (Orientador) - UFPE.

Antônio Murilo S. Macêdo (Coorientador) - UFPE.

José Américo de Miranda Neto - UFPE.

Ernesto Carneiro Pessoa Raposo - UFPE.

Lindberg Lima Gonçalves - UFC.

Marcelo Leite Lyra - UFAL.

Centro de Ciências Exatas e da Natureza - CCEN

Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Departamento de Física - DF

Cidade Universitária

50670 - 901 Recife - PE Brasil

TESE DE DOUTORADO

Esta tese é dedicada
à minha mãe e à minha querida esposa Regina

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

“Transição Metal-Isolante com Repulsão Coulombiana de Alcance Infinito: Estatística Fracionária e Estado Fundamental”
“Mecânica Estatística de Polímeros Magnéticos”

Carlindo Vitoriano dos Santos Júnior

Tese apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, como parte dos pré-requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador:

Prof. Maurício Domingues Coutinho-Filho.

Coorientador:

Prof. Antônio Murilo S. Macêdo.

Março - 2000.

AGRADECIMENTOS

Agradecimento todo especial à minha querida esposa Regina e à minha mãe.

Agradeço ao meu orientador Maurício Domingues Coutinho-Filho, não somente pela sua competente orientação durante os nove anos em que convivemos, mas também pela sua extraordinária amizade.

Agradeço ao professor Antônio Murilo S. Macêdo por sua excelente contribuição à minha formação de Doutor.

Agradeço ao Professor Marcelo Lyra pelo convite para dar uma palestra intitulada “Transição metal-isolante com repulsão Coulombiana de alcance infinito: propriedades crítico-quânticas e estatística fracionária” no Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas - UFAL.

Agradeço a Ernesto Raposo pela sua contribuição no desenvolvimento desta tese e pela sua grande amizade.

Agradeço a Lucian Bogdan Bejan por sua grande colaboração no desenvolvimento de vários tópicos desta tese e pela sua grande amizade.

Agradeço a todos os meus amigos com os quais convivi durante a minha formação, entre eles cito explicitamente Carlos Alberto, Paulo Henrique, Alexandre Rosas,

Márcio Cabral, Gustavo Camelo, Alexandre Carvalho, Leonardo Viana, Marcos Lucena, Cláudio Furtado, Francisco Fidelis e João Eduardo.

Agradeço a Paula Francinette, Linet e Seu Ivo pelo apoio competente.

Prefácio

Esta tese é dividida em duas partes independentes. Na primeira delas, desenvolvida ao longo dos capítulos 1, 2 e 3 estudamos as propriedades do modelo de Hubbard na versão em que a interação é assumida ter alcance infinito [1]. No capítulo 1, fazemos uma breve revisão da literatura sobre a transição metal-isolante de Mott, com destaque para alguns limites especiais onde resultados não perturbativos podem ser obtidos. Discutimos também a teoria de líquido de Fermi e alguns mecanismos que levam um sistema fortemente correlacionado a desviar-se do comportamento de um líquido fermiônico. Ênfase especial é dada à mudança de estatística que alguns líquidos não fermiônicos podem apresentar. Logo em seguida, introduzimos o modelo de Hubbard com repulsão Coulombiana de alcance infinito e apresentamos a importância, no contexto da física de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados, para o seu estudo. No capítulo 2, discutimos com detalhe a estatística de exclusão introduzida por Haldane [2] e apresentamos o conceito de um gás ideal de exclusons desenvolvido por Wu [3], que consiste na aplicação da estatística de Haldane a um gás de partículas não interagentes. A partir do formalismo acima, mostramos o mapeamento do modelo num gás ideal de três espécies obedecendo à estatística de Haldane. No capítulo 3, estudamos as propriedades do modelo em $T = 0$ e obtemos a susceptibilidade a campo nulo do sistema em qualquer temperatura. Um diagrama de fase consistindo de diferentes regimes metálicos é apresentado. Finalmente, a função de Green é obtida, e a estrutura eletrônica e a densidade de estados interagente são analisadas.

Na segunda parte desta tese, desenvolvida ao longo dos capítulos 4 e 5, estudamos as propriedades termodinâmicas de um sistema quântico de spins numa classe particular de cadeias orgânicas unidimensionais, contendo uma célula unitária bipartida AB_2 . No capítulo 4, fazemos um breve resumo da física dos polímeros orgânicos condutores e magnéticos unidimensionais e apresentamos alguns resultados recentes [4, 5, 6, 7], decorrentes da modelagem através do Hamiltoniano de Hubbard numa célula unitária bipartida AB_2 . No capítulo 5, o modelo de Heisenberg na topologia AB_2 é estudado via aproximação de campo médio e no limite clássico, para o qual é possível obter uma solução exata na ausência de campo magnético. Obtemos também a solução exata do modelo de Ising nessa topologia, bem como as

propriedades termodinâmicas do modelo XY num campo transversal usando a aproximação de “tight-binding”. As conclusões de ambas as partes são apresentadas no capítulo 6.

Resumo

No capítulo 1, fazemos uma breve revisão da literatura sobre a transição de Mott e revemos alguns artigos da literatura sobre a estatística de exclusão de Haldane. Além disso, apresentamos o modelo de Hubbard com repulsão Coulombiana de alcance infinito e sua motivação no contexto da física de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados.

Nós mostramos, no capítulo 2, que o modelo de Hubbard na versão em que a interação Coulombiana é assumida ter alcance infinito [1] é mapeado num gás ideal de três espécies obedecendo à estatística fracionária de exclusão introduzida por Haldane [2], esclarecendo uma controvérsia da literatura [8, 9] sobre este mapeamento. Vale ser salientado que este modelo é o único da literatura até o momento que apresenta uma representação em segunda quantização e ao mesmo tempo apresenta estatística fracionária. Este resultado por si só atribui ao modelo grande interesse teórico para testar conceitos da estatística fracionária, minimizando em parte o ponto fraco na sua derivação a partir do alcance infinito da repulsão Coulombiana. Por exemplo, nós mostramos que um esquema que fora desenvolvido por Isakov e principalmente por Maskevitch [10, 11, 12] para incorporar a matriz estatística numa espécie de “renormalização” dos números quânticos não pode ter aplicação geral no contexto da estatística fracionária de Haldane. Apresentamos também alguns argumentos a partir deste mapeamento, e também da estrutura da função de Green, que torna improvável a separação spin-carga no limite em que a interação $U \rightarrow +\infty$ como foi reportada na literatura [9]. Como último resultado original deste capítulo, mostramos que a singularidade de alguns parâmetros microscópicos ou termodinâmicos pode levar a uma mudança brusca da estatística.

No capítulo 3, o estado fundamental do modelo é estudado e diferentes regimes metálicos, separados pelas linhas bem definidas $\rho = \rho_{min}$ e $\rho = \rho_{max}$, onde ρ é o preenchimento da banda, são identificados, permitindo assim a construção de um diagrama de fases do estado fundamental do sistema. Em particular, identificamos um regime metálico que reproduz qualitativamente, e em alguns casos até mesmo quantitativamente, várias grandezas físicas (a saber, o “gap”, a energia do estado fundamental, a compressibilidade de carga, a susceptibilidade magnética e a densidade de estados) do modelo de Hubbard unidimensional com repulsão local

intra-sítio no regime de forte acoplamento. Uma análise da superfície de Fermi é feita para o sistema unidimensional, destacando suas propriedades não triviais tais como a possibilidade de excitações com $k = 0$ (anulamento do momento de Fermi) e deformações da superfície em função do preenchimento da banda ou da interação. Mostramos também que o sistema satisfaz rigorosamente a condição de continuidade adiabática (usada por alguns autores como a própria definição de um líquido de Fermi normal); no entanto, esta condição não assegura ao sistema um comportamento de líquido fermiônico. Mostramos o caráter rigorosamente não perturbativo do sistema (mesmo no limite $U \ll t$, onde t é a amplitude de “hopping”) através do cálculo exato da energia do estado fundamental e provando a impossibilidade de obter este resultado, partindo do caso não interagente, usando métodos perturbativos convencionais. Obtemos o potencial químico e a compressibilidade de carga, enfatizando seu comportamento singular ao cruzarem as linhas $\rho = \rho_{min}$ e ρ_{max} . Nós mostramos que o volume da superfície de Fermi, com singularidades determinada por $|\Delta\nu_i| = 1/2$, é preservado quando a interação é ligada. Este resultado, contudo, não deve ser considerado como uma prova do teorema de Luttinger na sua forma generalizada por Haldane, pois as singularidades da superfície de Fermi mudam de $|\Delta\nu_i| = 1$ para $|\Delta\nu_i| = 1/2$ quando a interação é ligada. No entanto, nós enfatizamos que uma vez ligada a interação, $|\Delta\nu_i|$ não depende mais do valor de $U > 0$. A susceptibilidade magnética a campo nulo foi mostrada exibir comportamento predominantemente Curie em baixas temperaturas tanto na fase isolante como em todos os regimes metálicos. Além disso, obtemos também a estrutura eletrônica e a densidade de estados interagente $D(\omega)$, permitindo uma análise microscópica dos regimes metálicos e da fase isolante.

No capítulo 4, fazemos uma breve revisão da literatura sobre polímeros magnéticos, com ênfase às suas propriedades de transporte e magnéticas.

No capítulo 5, onde os resultados originais da segunda parte da tese são apresentados, nós estudamos o modelo de Heisenberg na topologia AB_2 na aproximação de campo médio e no limite clássico, onde uma solução exata na ausência de campo magnético é obtida. Na abordagem de campo médio, dois tipos de solução para o modelo acima podem ser encontrados conforme o valor do campo magnético. A magnetização em $T = 0$ obtida nesta aproximação é detalhadamente discutida. Além disso, o comportamento do modelo na topologia AB_2 no limite clássico é mostrado ser qualitativamente igual ao apresentado por ele numa cadeia linear. Logo em seguida, o modelo de Ising na topologia AB_2 é resolvido exatamente e suas propriedades termodinâmicas são obtidas, com ênfase à magnetização do estado fundamental em função do campo magnético. Nós também obtemos a solução do modelo XY num campo transversal na topologia acima, usando a aproximação

de “tight-binding”, e mostramos que ele apresenta um comportamento qualitativamente distinto do apresentado por ele numa cadeia linear. Finalmente, as conclusões são apresentadas no capítulo 6.

ABSTRACT

In chapter 1, the current literature on the Mott transition and fractional exclusion statistics will be briefly reviewed. Next, we introduce the Hubbard model with infinite range Coulomb repulsion [1] and give some arguments, in the context of strongly correlated electron systems, that make this model very interesting.

In chapter 2, we show that this model is mapped onto an ideal gas of three species of particles obeying fractional exclusion statistics, thus clarifying some disagreements between previous works [8, 9]. This model is the only one introduced in the literature that presents a representation in second quantization and simultaneously displays fractional exclusion statistics. This characteristic ascribes to this model pronounced theoretical interest to test concepts on Haldane's statistics. In fact, we show that the scheme developed by Maskevitch [10, 11, 12] to incorporate the interaction matrix g into renormalized quantum numbers is presents limitations in the context of fractional exclusion statistics. Moreover, from both this mapping and the analysis of the Green function, we present some arguments that become implausible the spin-charge separation as was reported in [9]. Finally, we demonstrate that singular parameters in the Hamiltonian give rise to an abrupt change in the interaction matrix g .

In chapter 3, we report a thorough analysis of the ground state properties including a phase diagram, in which different metallic regimes are separated by critical lines $\rho = \rho_{min}$ and $\rho = \rho_{max}$, where the chemical potential and the charge compressibility display singular behavior. The electronic one-particle dynamical properties of the model, with particular emphasis on the interacting density of states, is also presented. We identify a particular regime that reproduces some properties of the Hubbard model in the strongly coupling limit by explicit calculation of the gap, ground state energy, charge compressibility, magnetic susceptibility and density of states. We study the changes in the shape of the Fermi surface as a function of both the interaction and the band filling, emphasizing its non-trivial aspects. We demonstrate that this system satisfies the adiabatic hypothesis (for some authors, this is the own definition of a Fermi liquid), however this condition is not sufficient to guarantee a fermionic behavior for the system. We show that perturbative schemes are unable to get the ground state energy of the system, even in the weak coupling

limit ($U \ll t$). Finally, we show that the volume of the Fermi surface is preserved as the interaction is switched on, but this cannot be considered as a proof of the validity of the Luttinger's theorem in the generalized form proposed by Haldane, since $|\Delta\nu_i|$ changes from 1 to 1/2 as the interaction is switched on.

In chapter 4, we briefly review the literature on conducting and magnetic organic polymers. In chapter 5, in which our original results of the second part of this thesis are presented, we study the bipartite AB_2 Heisenberg lattice in mean field approximation. In this approach, we find two kind of solutions according to the value of the magnetic field, and the magnetization at $T = 0$ is discussed. We also show that the behavior of both the AB_2 Heisenberg and the linear Heisenberg chains in zero magnetic field are qualitatively similar. Next, we obtain the exact solution of the AB_2 Ising lattice and its thermodynamic properties. Finally, we get the thermodynamic properties of the $AB_2 XY$ lattice by using the tight-binding approximation and show that this model displays qualitatively distinct behavior from its version in a linear chain. Conclusions are presented in chapter 6.

Sumário

1	Transição Metal-Isolante	7
1.1	Introdução	7
1.2	Transição metal-isolante de Mott-Hubbard	11
1.3	Modelo de Hubbard com interação Coulombiana de alcance infinito	17
2	Mapeamento do modelo em um gás ideal de exclusões	21
2.1	Estatística de Haldane	21
2.2	Mapeamento	22
2.3	Termodinâmica	29
2.4	Considerações sobre o mapeamento	32
3	Propriedades do Estado Fundamental e Susceptibilidade Magnética	37
3.1	Estado Fundamental	37
3.2	Superfície de Fermi, continuidade adiabática e o caráter não perturbativo	46
3.3	Potencial químico	48
3.4	Compressibilidade de Carga	50
3.5	Teorema de Luttinger	52
3.6	Susceptibilidade Magnética	55
3.7	Estrutura Eletrônica e Densidade de Estados	61
4	Polímeros Magnéticos	73
4.1	Introdução	73
4.2	Motivação	79
5	Mecânica Estatística e Magnetismo de Cadeias Poliméricas	87
5.1	Introdução	87

5.2	Modelo de Heisenberg na Topologia AB_2 na Presença de Campo Magnético	88
5.2.1	Campo médio: Solução Ising	89
5.2.2	Campo médio: Solução Heisenberg	93
5.3	Modelo de Ising na topologia AB_2 na Presença de Campo Magnético	108
5.4	Modelo XY na topologia AB_2 na presença de um Campo Transverso	119
6	Conclusões e Perspectivas	131