

Propriedades Magnéticas de Elétrons Itinerantes em Redes Triangulares

(Magnetic Properties of Itinerant Electrons in Triangular Lattices)

André N. Ribeiro e Cláudio A. Macedo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe 49100-00 – São Cristóvão, SE, Brasil

aribeiro@fisica.ufs.br

(Recebido em 01 de março de 2005; aceito em 15 de março de 2005)

A investigação das propriedades magnéticas de sistemas de elétrons itinerantes tem sido objeto de enorme interesse da física estatística desde o surgimento da teoria quântica. Durante todo esse tempo houve importantes progressos na compreensão de diversos sistemas, mas pouco esforço foi empregado na elucidação das propriedades específicas de sistemas em redes com estruturas triangulares que apresentam frustração nas correlações antiferromagnéticas. Visando contribuir para o entendimento desses sistemas, aplicamos o método da equação de movimento da função de Green ao modelo de Hubbard para calcular a densidade de estados e as propriedades termodinâmicas magnéticas de um sistema paramagnético com banda meio-cheia nos casos de rede triangular e de rede cúbica de face centrada (fcc). Determinamos a energia interna e a susceptibilidade magnética em função da temperatura (T) e da interação coulombiana intra-sítio (U). Os resultados mostram a forte dependência das grandezas examinadas com T e com o U . Particularmente, explicitamos a dependência da temperatura crítica (T_c) com U na transição ferromagnética-paramagnética, e o valor crítico da interação (U_c) a partir do qual o sistema pode apresentar ferromagnetismo.

Palavras-chave: propriedades magnéticas, modelo de Hubbard, redes triangulares.

The investigation of the magnetic properties of itinerant electron systems has been object of enormous interest of statistical physics since the beginning of quantum theory. During all this time it has important progress in the understanding of diverse systems, but little effort was used in the elucidation of the specific properties of systems in lattices with triangular structures that present frustration in antiferromagnetic correlations. In order to contribute to a better understanding of these systems we use the method of the equation of motion of the Green function on the Hubbard model to calculate the density of states and the magnetic thermodynamic properties of a paramagnetic system with half-filled-band in the cases of triangular and face centered cubic (fcc) lattices. We determine the internal energy and the magnetic susceptibility in function of the temperature (T) and the on-site Coulomb repulsion (U). The results show the strong dependence of the examined quantities with T and U . Particularly, we explicit the dependence of the critical temperature (T_c) with U in the ferromagnetic-paramagnetic transition, and the critical value of the interaction (U_c) from which the system can present ferromagnetism.

Keywords: magnetic properties, Hubbard model, triangular lattices.

1. INTRODUÇÃO

A investigação das propriedades termodinâmicas de sistemas magnéticos de elétrons itinerantes tem sido objeto de enorme interesse da física estatística desde o surgimento da teoria quântica. Durante todo esse tempo houve importantes progressos na compreensão de diversos sistemas, mas pouco esforço foi empregado na elucidação das propriedades específicas de sistemas em redes com estruturas triangulares que apresentam frustrações antiferromagnéticas.

Visando contribuir para o entendimento desses sistemas, aplicamos o método da equação de movimento da função de Green ao modelo de Hubbard para calcular a densidade de estados e as propriedades termodinâmicas magnéticas para um paramagneto com banda meio-cheia, nos casos de rede triangular e de rede cúbica de face centrada (fcc).

O método da equação de movimento da função de Green para aplicação em sistemas magnéticos de elétrons itinerantes foi originalmente empregado por Hubbard¹ em 1963,

baseando-se no trabalho de Zubarev.² Trata-se de um método seguro que tem sido empregado regularmente na investigação de propriedades termodinâmicas de sistemas magnéticos de elétrons itinerantes.³⁻⁵

O modelo de Hubbard¹ em sua versão mais simples descreve os efeitos de correlação dos elétrons em uma rede cristalina considerando-se uma banda *s* como hipoteticamente estreita. O hamiltoniano do modelo (1) consiste de duas partes: o termo que expressa a dinâmica eletrônica intersítios (“hopping”), caracterizado pela integral de transferência eletrônica *t* entre sítios vizinhos e o termo de repulsão coulombiana intra-sítio, representado pela energia *U*.

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

em que $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$, são os operadores de criação e destruição, respectivamente; $\sigma = \pm 1$, ou \uparrow e \downarrow , indica o spin; $n_{i\sigma}$ é o operador número de ocupação das partículas com spin σ no sítio *i* e é expresso por $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$.

Esse trabalho está organizado da seguinte forma: na seção 2 é descrito o método da equação de movimento da função de Green, as grandezas calculadas e os resultados obtidos são apresentados na seção 3. Nós encerramos com a conclusão na seção 4.

2. O MÉTODO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO DA FUNÇÃO DE GREEN

O método da equação de movimento que empregamos no desenvolvimento deste trabalho é baseada na técnica de funções de Green descrita por Hubbard e Zubarev.^{1,2} As funções de Green retardada (+) e avançada (-) são definidas por

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^{(\pm)} = \mp i \theta[\pm(t-t')] \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle, \quad (2)$$

em que $[A, B]_{\eta} = AB - \eta BA$, $\eta = \pm 1$, e $\theta(x)$ é a função teta de Heaviside $\theta(x) = 1$ se $x > 0$ e $\theta(x) = 0$ nos outros casos. Estas funções de Green satisfazem a equação de movimento

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^{(\pm)} = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t)]_{\eta} \rangle + \langle\langle [A(t), H]; B(t') \rangle\rangle^{(\pm)}. \quad (3)$$

Como $\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^{(\pm)}$ são funções de $t - t'$ apenas, nós podemos definir as transformadas de Fourier

$$\langle\langle A; B \rangle\rangle_E^{(\pm)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A(t); B(0) \rangle\rangle^{(\pm)} e^{iEt} dt. \quad (4)$$

A partir de (3) e (4) pode ser mostrado que

$$E \langle\langle A; B \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{\eta} \rangle + \langle\langle [A, H]; B \rangle\rangle_E, \quad (5)$$

e

$$\langle B(t') A(t) \rangle = i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} [\langle\langle A; B \rangle\rangle_{E+i\epsilon} - \langle\langle A; B \rangle\rangle_{E-i\epsilon}] \frac{e^{-iE(t-t')}}{e^{i\beta(E-\mu)} - \eta} dE. \quad (6)$$

Resolvendo o problema de correlação como descrito por Hubbard¹, usando $G_{ij}^{\sigma}(E) = \langle\langle c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle_E$ ($\eta = -1$) e fazendo a aproximação descrita por Zubarev² encontra-se através da transformação de Fourier

$$G_{ij}^{\sigma}(E) = N^{-1} \sum_k G^{\sigma}(\vec{k}, E) \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)],$$

$$G^{\sigma}(\vec{k}, E) = \frac{1}{2\pi N} \frac{E - T_0 - U(1 - n_{-\sigma})}{(E - \epsilon_k)(E - T_0 - U) + n_{-\sigma} U(T_0 - \epsilon_k)}. \quad (7)$$

em que *N* é o número de sítios, ϵ_k é a energia de elétrons correspondente ao estado de Bloch (k, σ) e k é o vetor de onda. Os valores de ϵ_k para uma rede triangular⁶ e uma rede fcc⁷ são dados, respectivamente, por

$$\epsilon_A(\vec{k}) = -t \left(2 \cos(k_x) + 4 \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y\right) \right) \quad (8)$$

e

$$\epsilon_{FCC}(\vec{k}) = -4t \left(\cos\left(\frac{k_x}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y}{2}\right)\cos\left(\frac{k_z}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x}{2}\right)\cos\left(\frac{k_z}{2}\right) \right). \quad (9)$$

A expressão (7) é uma função racional e pode ser resolvida mediante frações parciais. Desse modo

$$G^\sigma(\vec{k}, E) = \frac{1}{2\pi L} \left\{ \frac{A_{k\sigma}^{(1)}}{E - E_{k\sigma}^{(1)}} + \frac{A_{k\sigma}^{(2)}}{E - E_{k\sigma}^{(2)}} \right\}, \quad (10)$$

em que $E_{k\sigma}^{(1)} < E_{k\sigma}^{(2)}$ são as duas raízes de

$$(E - \epsilon_k)(E - T_0 - U) + n_{-\sigma}U(T_0 - \epsilon_k) = 0,$$

para

$$A_{k\sigma}^{(1)} = \frac{E_{k\sigma}^{(1)} - T_0 - U(1 - n_{-\sigma})}{E_{k\sigma}^{(1)} - E_{k\sigma}^{(2)}} \quad \text{e} \quad A_{k\sigma}^{(2)} = \frac{E_{k\sigma}^{(2)} - T_0 - U(1 - n_{-\sigma})}{E_{k\sigma}^{(2)} - E_{k\sigma}^{(1)}}.$$

3. DENSIDADE DE ESTADOS E PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS MAGNÉTICAS

Calculamos a densidade de estados e as propriedades termodinâmicas magnéticas para o modelo de Hubbard no caso meio-cheio e paramagnético, isto é, $n_\uparrow = n_\downarrow = 1/2$.

A energia interna e a susceptibilidade magnética foram calculadas em função da temperatura (T) e da interação coulombiana intra-sítio (U), com o número de sítios $N=L^d$, em que L é igual a 20 e d é a dimensão da rede. A densidade de estados, foi determinada com $L=1000$ para a rede triangular e $L=100$ para a fcc.

A. DENSIDADE DE ESTADOS

A densidade de estados é definida¹ como

$$\rho_\sigma(E) = i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_k \left\{ G^\sigma(\vec{k}, E + i\epsilon) - G^\sigma(\vec{k}, E - i\epsilon) \right\}$$

em que a soma em \mathbf{k} é feita sobre a primeira zona de Brillouin. Substituindo (10) nessa expressão, temos

$$\rho_\sigma(E) = N^{-1} \sum_k \left\{ A_{k\sigma}^{(1)} \delta[E - E_{k\sigma}^{(1)}] + A_{k\sigma}^{(2)} \delta[E - E_{k\sigma}^{(2)}] \right\}.$$

A figura 1 mostra a densidade de estados com $\rho = \rho_\uparrow = \rho_\downarrow$ para $U = 0$ e $U = 4.0$ para as redes triangular e fcc. Observando-se as curvas obtidas, pode-se concluir que essas redes não possuem simetria partícula-buraco, uma característica de redes que possuem frustrações, e portanto $\mu \neq U/2$ ($\mu =$ potencial químico dos elétrons), situação que diferencia essas redes em relação às redes quadrada e cúbica, que no caso meio-cheio, $\mu = U/2$. Dependendo do valor de U tanto a rede triangular quanto a fcc apresentam uma separação (*gap*) da banda de energia eletrônica em duas sub-bandas, indicando uma transição metal-isolante.

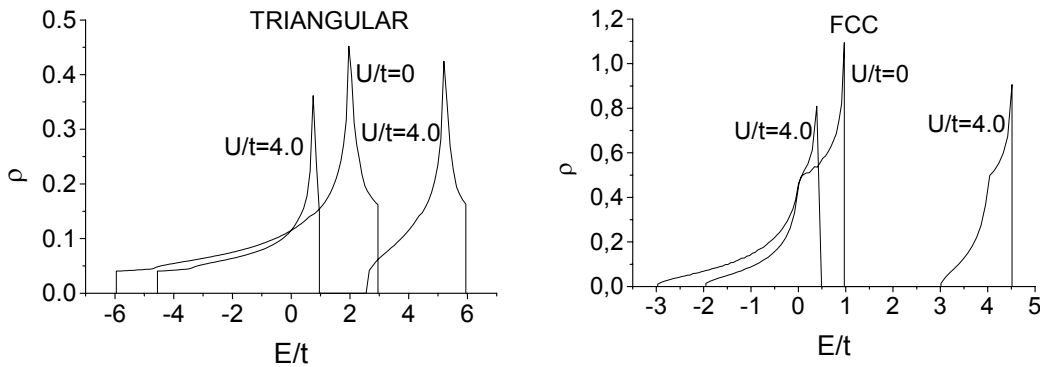


Figura 1: Densidade de estados ρ .

B. ENERGIA INTERNA

A energia interna é dada por

$$\langle E \rangle = \frac{i}{2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_{k, \sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \{G^\sigma(\vec{k}, E + i\epsilon) - G^\sigma(\vec{k}, E - i\epsilon)\} (E + \epsilon_k) f(E) dE$$

em que $f(E)$ é a função de Fermi. Substituindo (10), obtemos para o caso paramagnético de banda semi-cheia

$$E = N^{-1} \sum_k \{ (E_{k\uparrow}^{(1)} + \epsilon_k) A_{k\uparrow}^{(1)} f(E_{k\uparrow}^{(1)}) + (E_{k\uparrow}^{(2)} + \epsilon_k) A_{k\uparrow}^{(2)} f(E_{k\uparrow}^{(2)}) \}$$

O gráfico de $\langle E \rangle$ em função da temperatura para alguns valores de U é mostrado na figura 2. O aumento da energia com U é natural considerando-se que o termo de repulsão coulombiana é positivo no hamiltoniano (1). A região de valores de T em que a energia para $U=4$ é maior do que para $U=8$, no gráfico da rede fcc, expressa uma situação de mudança de correlação magnética provocada pelo valor de U .

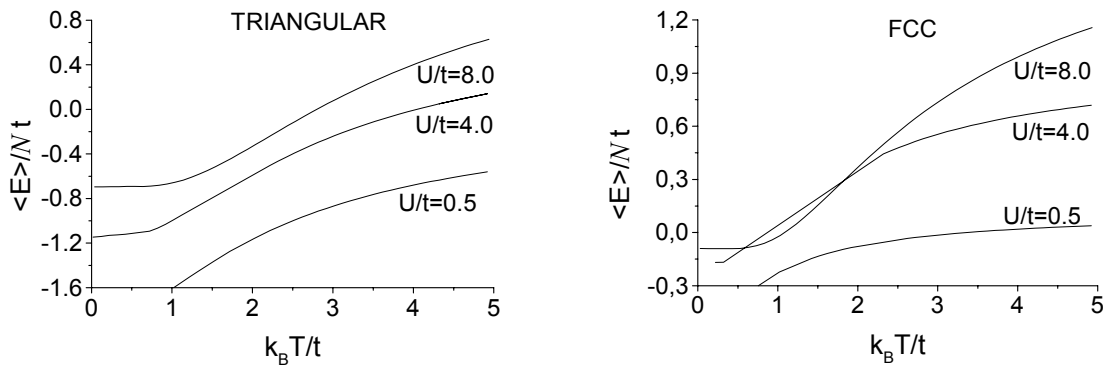


Figura 2: Energia interna $\langle E \rangle$.

C. SUCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA

Na região paramagnética a susceptibilidade estática e uniforme é dada³ por

$$\chi = \frac{Ng^2 \mu_B^2}{V} \frac{\chi^0}{1 - U\chi^0}$$

em que

$$\chi^0 = \frac{1}{N} \sum_k e^{-\beta(E_k - \mu)} f(E_k)^2 \quad \text{e} \quad E_k = \epsilon_k + Un_{-\sigma}$$

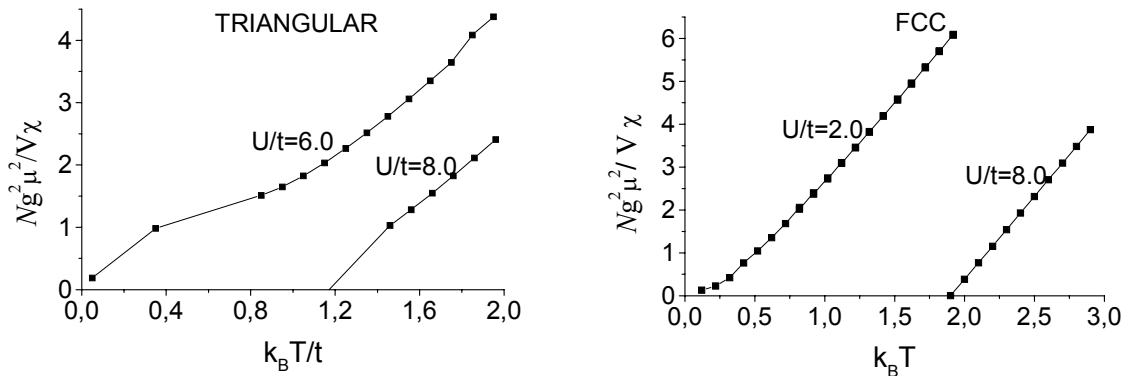


Figura 3: Inverso da susceptibilidade magnética χ .

A partir dessas expressões foram obtidos os gráficos da figura 3. Através da figura 3 é possível notar que a partir de um certo valor crítico U_c a curva do inverso da susceptibilidade tende a ter valores negativos. Como a susceptibilidade paramagnética não pode ser negativa, isso significa que para temperaturas menores que a temperatura T_c (temperatura em que o inverso da susceptibilidade se anula), a rede torna-se ferromagnética. A figura 4 mostra a relação entre T_c e U . Observando o gráfico da figura 4 encontramos que o valor U_c para a rede triangular é 6.0 enquanto que para a fcc é 2.0.

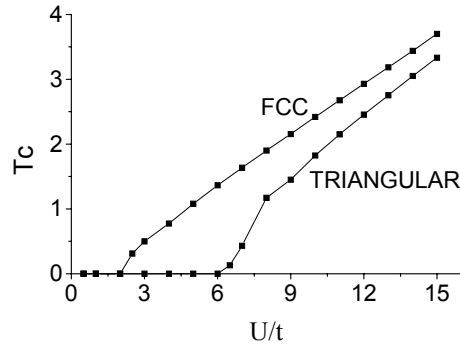


Figura 4: Relação entre T_c e U .

4. CONCLUSÕES

As curvas de densidade de estados calculadas mostram que dependendo do valor de U , tanto a rede triangular quanto a fcc apresentam uma separação (*gap*) da banda de energia eletrônica em duas sub-bandas indicando uma transição metal-isolante.

Os resultados mostram a forte dependência das grandezas examinadas com T e com o U . Particularmente, explicitamos a dependência com U da temperatura crítica (T_c) de transição ferromagnética-paramagnética, e o valor crítico da interação (U_c) a partir do qual o sistema pode apresentar ferromagnetismo.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao PIBIC/CNPq-UFS e a FAP-SE pelo apoio financeiro.

1. HUBBARD, J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proc. Roy. Soc. A* 276: 238-257, 1963.
2. ZUBAREV, D. N. Double-time Green functions in statistical physics. *Sov. Phys. Usp.* 3 (3): 320-345, 1960.
3. IZUYAMA, T.; KIM, D. J.; KUBO, R. Band theoretical interpretation of neutron diffraction phenomena in ferromagnetic metals. *J. Phys. Soc. Japan* 18 (7): 1025-1042, 1963.
4. KISHORE, R.; JOSHI, S. K. Electron correlation in ferromagnetism. *Phys. Rev.* 186 (2): 484-490, 1969.
5. EL-JAICK, L. J.; TROPER, A.; GOMES, A. A. Remarks on the ferromagnetic solutions of the extended Hubbard model. *Phys. Stat. Sol. (b)* 99: 397-407, 1980.
6. HANISCH, T.; KLEINE, B.; RITZL, A.; MÜLER-HARTMAN, E. Ferromagnetism in the Hubbard model: instability of the Nagaoka state on the triangular, honeycomb and Kagome lattices. *Ann. Physik* 4: 303-328, 1995.
7. JELITO, R. J. The density of states of some simple excitations in solids. *J. Phys. Chem. Solids* 30: 609-626, 1969.