

# Propriedades Termodinâmicas do Modelo de Hubbard Unidimensional no Limite Uniforme

(Thermodynamic Properties of the One-dimensional Hubbard Model in the Uniform Limit)

F. A. G. Almeida e C. A. Macedo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000 São Cristóvão, SE, Brasil

falmeida@fisica.ufs.br

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

Visando o entendimento de propriedades termodinâmicas de sistemas de elétrons fortemente correlacionados, estudamos numericamente, no *ensemble* grande canônico, energia interna, calor específico, entropia, magnetização e susceptibilidade magnética em função da temperatura do modelo de Hubbard unidimensional sem transferência de momento nas interações. Os resultados foram obtidos para diversos valores da interação intra-sítio  $U$  e de campo magnético externo aplicado  $h$ . Foram observadas diferenças entre esse modelo e o modelo de Hubbard original em relação ao número de picos do calor específico e ao comportamento da susceptibilidade em temperaturas tendendo a zero. Essas diferenças evidenciam que os dois modelos possuem estruturas de correlação magnéticas diferentes.

Palavras-chave: propriedades termodinâmicas, sistemas de elétrons fortemente correlacionados, redes unidimensionais.

In order to contribute to understand well the thermodynamic properties of strongly correlated electron systems, we study numerically, in the grand canonical ensemble, the temperature dependence of the internal energy, specific heat, entropy, magnetization, and magnetic susceptibility of the one-dimensional Hubbard model without transference of moment in the interactions. The results have been obtained for a wide range of values of the on-site Coulombian repulsion  $U$  and of the external magnetic field  $h$ . Differences between this model and the original Hubbard model have been observed in relation to the number of peaks of the specific heat and to the behavior of the susceptibility in temperatures tending to zero. These differences evidence that the two models possess different magnetic structures of correlation.

Keywords: thermodynamic properties, strongly correlated electron systems, one-dimensional lattices.

## 1. INTRODUÇÃO

O Modelo de Hubbard<sup>1</sup> tem sido um dos mais usados para descrição das propriedades de sistemas de elétrons correlacionados em redes atômicas cristalinas. Seu hamiltoniano para uma rede no espaço real tem um significado físico muito nítido e é dado por

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

em que o primeiro termo representa a dinâmica intersítios (*hopping*), caracterizado pela energia de transferência  $t$  entre sítios vizinhos ( $\delta = \pm 1$ ),  $c_{i\sigma}^+$  e  $c_{i\sigma}$  são respectivamente os operadores de criação e destruição de elétrons no sítio  $i$  com spin  $\sigma$  (*up* ou *down*). O segundo termo do hamiltoniano (1) representa a interação coulombiana intra-sítio de magnitude  $U$ , em que  $n_{i\sigma} \equiv c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$  é o operador número de ocupação de  $i\sigma$ .

Usando as seguintes transformações de Fourier

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{L^{1/2}} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} c_{k\sigma}, \quad (2)$$

$$c_{j\sigma}^+ = \frac{1}{L^{1/2}} \sum_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} c_{k\sigma}^+, \quad (3)$$

considerando uma cadeia fechada com  $L$  sítios e adicionando o efeito Zeeman devido a um campo magnético estático e uniforme  $B_z$  na direção  $z$ , temos o hamiltoniano de Hubbard expresso no espaço de momentos

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} n_{k\sigma} + \frac{U}{L} \sum_{k,k',q} c_{k+q\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} c_{k'-q\downarrow}^{\dagger} c_{k'\downarrow}, \quad (4)$$

em que  $\varepsilon_{k\sigma} \equiv -2t \cos(ka) - h\sigma$ , sendo  $a$  a distância entre os sítios e  $h \equiv \mu_B B^z$ .

No segundo termo de (4) está explícita a transferência de momento  $q$  entre elétrons de spins opostos na interação coulombiana. A fig. 1 mostra esquematicamente a interação coulombiana com a transferência de momento.

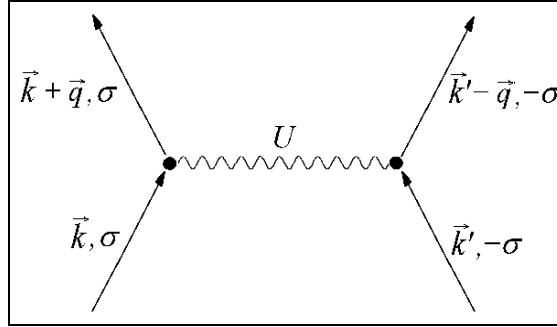


Figura 1. Ilustração da transferência de momento entre elétrons de spins opostos na interação.

No limite uniforme a transferência de momento é nula ( $q = 0$ ). Sendo assim o hamiltoniano do modelo de Hubbard unidimensional no limite uniforme é

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} n_{k\sigma} + \frac{U}{L} \sum_{kk'} c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k'\downarrow}, \quad (5)$$

mas como  $n_{k\sigma} = c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}$  e o operador número total de elétrons com spin  $\sigma$  é  $N_{\sigma} \equiv \sum_k n_{k\sigma}$ ,

ficamos com

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} n_{k\sigma} + \frac{U}{L} N_{\uparrow} N_{\downarrow}. \quad (6)$$

O segundo termo do hamiltoniano (6) representa a interação em bloco de todos elétrons de um estado de spin com todos os outros de spin oposto não dependendo da posição ou do momento de cada um, ou seja, cada elétron interage igualmente com todos elétrons de spin oposto.

O hamiltoniano (6) é diagonal, diferente do hamiltoniano do modelo de Hubbard original. Esse hamiltoniano simplificado facilita o cálculo de algumas propriedades termodinâmicas úteis para o entendimento de sistemas de elétrons fortemente correlacionados.

## 2. METODOLOGIA

O hamiltoniano (6) atua sobre uma base ortonormal do espaço de Hilbert de dimensão  $4L$ , já que são  $L$  sítios  $k$  e cada um pode ser configurado de quatro formas: vazio  $[0]$ , um elétron *up*  $[\uparrow]$ , um elétron *down*  $[\downarrow]$ , ou dois elétrons de spins opostos  $[\uparrow\downarrow]$ . O espectro de energia do sistema é obtido diretamente, já que o hamiltoniano é diagonal. Da mesma forma, calculamos os espectros dos operadores número total de spin *up* ( $N_{\uparrow}$ ) e *down* ( $N_{\downarrow}$ ). Com esses três espectros, um valor de potencial químico  $\mu$  e de temperatura  $T$  calculamos as grandezas termodinâmicas através do ensemble grande canônico<sup>2</sup>. Como o sistema que queremos estudar é meio-cheio, o valor de  $\mu$  escolhido é fixo e igual a  $U/2$ , independente da temperatura<sup>3</sup>.

Todas propriedades termodinâmicas são calculadas em função da temperatura do sistema para diversos valores de  $U$ ,  $h$  e  $L$ . Extrapolamos os resultados para o limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ), usando o método de regressão linear para cada grandeza em função de  $1/L$ .

### 3. PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

Para mostrar efeitos importantes do modelo de Hubbard no limite uniforme, consideramos alguns valores de  $U$  e  $h$  para estudar a energia interna, calor específico, entropia, magnetização e susceptibilidade magnética.

#### A. Energia interna

A energia interna média  $\langle E \rangle$  é obtida através do espectro de energia, proveniente do hamiltoniano (6). A fig. 2 mostra o comportamento da energia interna em função da temperatura. Percebemos, em baixas temperaturas, uma suave mudança de concavidade da curva da energia interna apenas para  $U/t = 1$  em  $k_B T/t \approx 0,035$ . À medida que  $U$  cresce, essa mudança de concavidade deixa de acontecer nessa faixa de temperatura, mas outra mudança de concavidade ocorre para os três valores de  $U$  em temperaturas mais elevadas e diferentes para cada valor de interação. As mudanças de concavidade são decorrentes de alterações da correlação eletrônica por efeito da variação da temperatura.

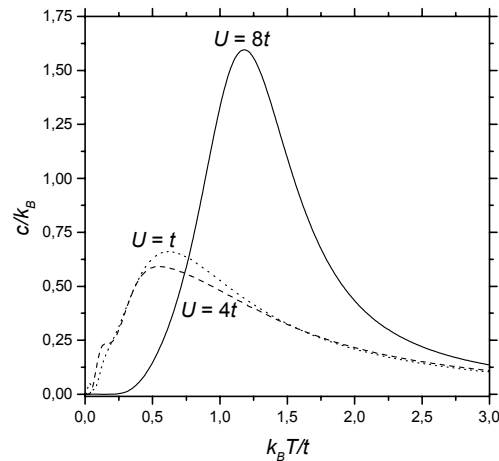
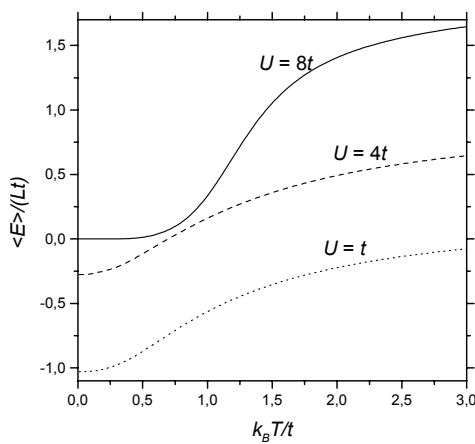


Figura 2. Energia interna em função temperatura para um anel com  $U/t = 1, 4$  e  $8$ ,  $L \rightarrow \infty$  e  $h = 0$ . Figura 3. Calor específico em função temperatura para um anel com  $U/t = 1, 4$  e  $8$ ,  $L \rightarrow \infty$  e  $h = 0$ .

#### B. Calor específico

Fazendo a derivada da energia interna por sítios em relação à temperatura, obtemos o calor específico (fig. 3). Os picos que ocorrem nas curvas de calor específico em função da temperatura estão relacionados às mudanças de concavidades das curvas de energia interna. Notamos um pequeno e estreito pico em  $k_B T/t \approx 0,035$  e outro mais largo em torno de  $k_B T/t \approx 0,625$  para  $U/t = 1$ . Já para  $U/t = 4$  e  $U/t = 8$ , o calor específico possui apenas um pico em  $k_B T/t \approx 0,55$  e  $k_B T/t \approx 1,18$  respectivamente. A existência de apenas um pico na curva de calor específico para valores grandes de interação explicita uma forte diferença em relação ao comportamento do modelo de Hubbard original, que nessa situação apresenta dois picos<sup>4</sup>.

#### C. Entropia

A entropia é calculada através da derivada em relação à temperatura do grande potencial. A fig. 4 mostra que a entropia é nula, em  $T = 0$ , para os três valores de interação. Para  $U/t = 1$  e  $U/t = 4$ , o comportamento da curva é aproximadamente linear e para  $U/t = 8$ , a entropia permanece nula em temperaturas baixas  $k_B T/t < 0,3$ .

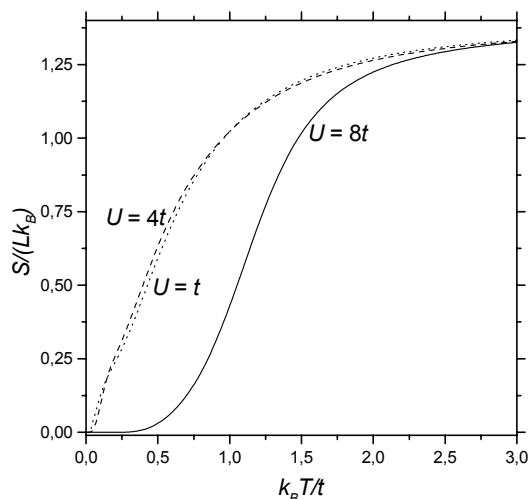


Figura 4. Entropia em função temperatura para um anel com  $U/t = 1, 4$  e  $8, L \rightarrow \infty$  e  $h = 0$ .

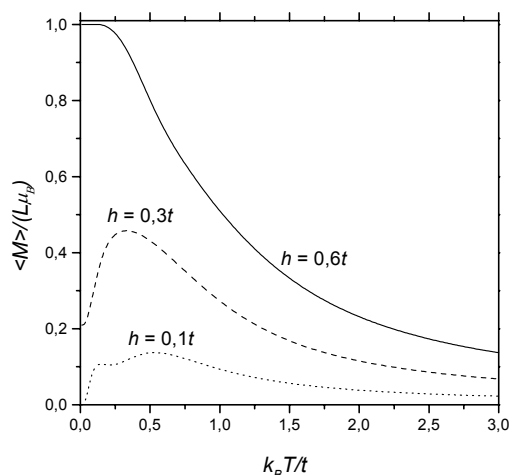


Figura 5. Magnetização em função temperatura para um anel com  $h = 0,1; 0,3; e 0,6; L \rightarrow \infty$  e  $U/t = 4$ .

#### D. Magnetização

O valor médio da magnetização  $\langle M \rangle / \mu_B$  é obtido a partir da diferença entre  $\langle N_{\uparrow} \rangle$  e  $\langle N_{\downarrow} \rangle$ . A fig. 5 apresenta a magnetização em função da temperatura para três valores de campo magnético. Podemos observar que para  $h/t = 0,6$  o sistema fica com magnetização máxima ( $\langle M \rangle / (L\mu_B) = 1$ ) em temperaturas baixas, enquanto para  $h/t = 0,3$  o sistema exibe em baixas temperaturas uma magnetização bem menor que a máxima.

#### E. Susceptibilidade magnética

A susceptibilidade magnética  $\chi$  por  $\mu_B$  é obtida pela derivada em relação ao  $h$  de  $\langle M \rangle / \mu_B$ , com  $h \rightarrow 0$ . Seu comportamento em função da temperatura, está na fig. 6. Notamos que para  $U/t = 8, \chi / (L\mu_B^2)$  diverge quando a temperatura é zero, caso que no modelo de Hubbard original não acontece.

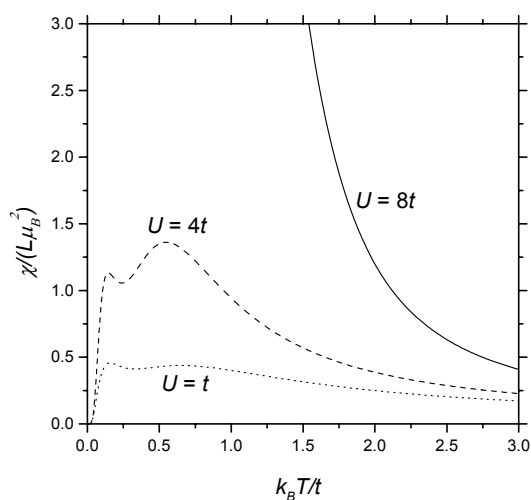


Figura 6. Susceptibilidade Magnética em função temperatura para um anel com  $U/t = 1, 4$  e  $8, L \rightarrow \infty$  e  $h = 0$ .

#### 4. CONCLUSÃO

Diferenças relevantes entre o modelo de Hubbard no limite uniforme e o modelo de Hubbard original foram destacadas nas curvas de calor específico e susceptibilidade magnética em função da temperatura para  $U/t = 8$ . Isso implica que quando se despreza a transferência de momento entre elétrons para valores grandes de interação as correlações magnéticas são bastante afetadas.

#### 5. AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao CNPq e a FAP-SE pelo apoio financeiro e ao professor André M. C. Souza pelas sugestões para o método de extrapolação para o limite termodinâmico.

- 
1. HUBBARD, J.. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc.* A276: 238-257, 1963.
  2. REICHL, L. E.. *A Modern Course in Statistical Physics*. Austin: University of Texas Press, 1980.
  3. KENNEDY, T.; LIEB, E. H.. An itinerant electron model with crystalline or magnetic long range order. *Physica A*, 138: 320-358, 1986.
  4. SHIBA, H.; PINCUS, P. A.. Thermodynamic of the One-Dimensional Half-Filled-Band Hubbard Model. *Physical Review B*, 5: 1966-1980, 1972.