

Susceptibilidade Magnética do Modelo de Hubbard Unidimensional em Duas Bandas

(Magnetic Susceptibility of the One-dimensional Two Bands Hubbard Model)

Rodrigo F. Gomes e Cláudio A. Macedo

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

rgomes@fisica.ufs.br

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

O modelo de Hubbard na sua forma original é o mais utilizado no estudo de materiais que apresentam magnetismo itinerante e é amplamente discutido na literatura científica. Porém a sua forma com mais de uma banda apresenta uma fonte de informações físicas que ainda é pouco explorada devido ao aumento da complexidade dos cálculos envolvidos. Neste trabalho verificamos que a inclusão de mais uma banda no modelo aumenta a precisão com que ele representa a natureza tornando-o ainda mais útil no avanço da tecnologia envolvendo materiais com magnetismo itinerante.

Palavras-chave: propriedades magnéticas, modelo de Hubbard degenerado, sistemas unidimensionais.

The Hubbard model in its original form is used in the study of materials that present itinerant magnetism and is widely discussed in the scientific literature. However its form with more than a band presents a source of physical information that has not been more explored due to the increase of the complexity of the calculations. In this work we verify that the inclusion of one more band in the model increases the precision for representing natural phenomena, making it thus more useful in the advance of the technology involving materials with itinerant magnetism.

Keywords: magnetic properties, two bands Hubbard model, one-dimensional systems.

1. INTRODUÇÃO

A determinação das propriedades magnéticas dos metais de transição é um problema difícil para a física estatística¹⁻⁴. Duas linhas teóricas contrastantes têm orientado a construção de modelos para descrever a estrutura eletrônica dos sólidos em geral. Uma delas adota a aproximação de orbitais moleculares de Hund e Mulliken, que é uma teoria de um elétron e conduz ao modelo de banda de Bloch. Interações entre elétrons são levadas em conta apenas através de um campo autoconsistente e correlações entre os movimentos de diferentes elétrons são desprezadas. Esta aproximação é bastante satisfatória para a banda de condução de um metal normal. A outra linha é o modelo Heitler-London, ou modelo de elétron localizado, que é uma descrição puramente atômica do sólido. Esta descrição é satisfatória para a maior parte dos isolantes, e para os elétrons *f* dos metais de terras raras. Porém, nenhuma das duas linhas teóricas consegue explicar de forma satisfatória as propriedades dos materiais de transição pois os elétrons da camada *d* incompleta apresentam características de ambas⁵.

Dessa forma há necessidade de se considerar o caráter localizado e itinerante desses elétrons na elaboração de um modelo que trate das propriedades magnéticas dos metais de transição. Em 1963, Hubbard apresentou um modelo que descrevia de forma satisfatória os dois comportamentos e que desde então tem sido muito utilizado não só no estudo de metais de transição, mas em diversos outros materiais que apresentam correlações entre elétrons em bandas estreitas⁶.

Diversas modificações foram feitas nesse modelo a fim de atender a situações específicas. São exemplos dessas modificações a inclusão de bandas degeneradas e a interação entre elétrons de sítios que não são primeiros vizinhos⁶. No nosso trabalho estudamos o modelo de Hubbard unidimensional em que foram consideradas duas bandas. A característica principal deste modelo é a inclusão da degenerescência (que é uma característica da banda *d* de um metal de transição) e do acoplamento entre elétrons devido a regra de Hund (que é um dos responsáveis pelo magnetismo nos metais de transição).

O modelo de Hubbard unidimensional em duas bandas no espaço de momentos possui o seguinte Hamiltoniano²:

$$H = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,j,\sigma} n_{i\sigma} n_{i\sigma} + V \sum_{i,\sigma,\sigma'} n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} - J \sum_{i,\sigma,\sigma'} c_{i1\sigma}^\dagger c_{i1\sigma'} c_{i2\sigma'}^\dagger c_{i2\sigma}$$

O primeiro termo expressa a dinâmica eletrônica intersítios (hopping) caracterizado pela integral de transferência eletrônica entre sítios T_{ij} , o segundo termo representa a repulsão colombiana entre elétrons de sítios vizinhos caracterizado pela energia U , o terceiro termo representa a repulsão colombiana entre elétrons em um mesmo sítio mas em bandas diferentes caracterizado pela energia V e o quarto e último termo representa o acoplamento devido a regra de Hund caracterizado pela energia J . Os três últimos parâmetros de energia não são independentes, a simetria orbital do Hamiltoniano requer que $U = V+J$ e que $V > J$ para que a integral direta seja maior que a integral de troca².

2. CÁLCULO DA SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA ATRAVÉS DE FUNÇÕES DE GREEN

O método de cálculo do presente trabalho é baseado na técnica de funções de Green como foi desenvolvida por Zubarev em 1960⁶.

A susceptibilidade dinâmica transversal de um sistema de duas bandas é definida por:

$$\chi_{tot}^{+-}(q, \omega) = -2\pi \langle\langle S_1^-(q) + S_2^-(q); S_1^+(-q) + S_2^+(-q) \rangle\rangle$$

em que

$$S_1^-(q) = \frac{1}{N} \sum_k c_{k1\downarrow}^\dagger c_{k+q1\uparrow}$$

$$S_1^+(-q) = \frac{1}{N} \sum_k c_{k+q1\uparrow}^\dagger c_{k1\downarrow}$$

Para calcular a susceptibilidade dinâmica transversal precisamos então calcular 4 funções de Green de duas partículas:

$$\langle\langle S_1^-(q); S_1^+(-q) \rangle\rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{k_1, k_2} \langle\langle c_{k_1 1 \downarrow}^\dagger c_{k_1 + q 1 \uparrow}; c_{k_2 + q 1 \uparrow}^\dagger c_{k_2 1 \downarrow} \rangle\rangle$$

$$\langle\langle S_1^-(q); S_2^+(-q) \rangle\rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{k_1, k_2} \langle\langle c_{k_1 1 \downarrow}^\dagger c_{k_1 + q 1 \uparrow}; c_{k_2 + q 2 \uparrow}^\dagger c_{k_2 2 \downarrow} \rangle\rangle$$

$$\langle\langle S_2^-(q); S_1^+(-q) \rangle\rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{k_1, k_2} \langle\langle c_{k_1 2 \downarrow}^\dagger c_{k_1 + q 2 \uparrow}; c_{k_2 + q 1 \uparrow}^\dagger c_{k_2 1 \downarrow} \rangle\rangle$$

$$\langle\langle S_2^-(q); S_2^+(-q) \rangle\rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{k_1, k_2} \langle\langle c_{k_1 2 \downarrow}^\dagger c_{k_1 + q 2 \uparrow}; c_{k_2 + q 2 \uparrow}^\dagger c_{k_2 2 \downarrow} \rangle\rangle$$

Para calcular as funções de Green necessárias utilizamos a seguinte equação de movimento:

$$\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_\eta \rangle + \langle\langle [A, H]_+; B \rangle\rangle_\omega$$

em que

$$[A, B]_\eta = AB - \eta BA, \eta = \pm 1$$

O hamiltoniano no espaço dos momentos tem a seguinte forma:

$$H = \sum_{k,l,\sigma} \epsilon_k c_{kl\sigma}^\dagger c_{kl\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{k,k',q,l,\sigma} c_{k+q,l\sigma}^\dagger c_{kl\sigma} c_{k'l-\sigma}^\dagger c_{k'+q,l-\sigma} + \frac{V}{N} \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} c_{k+q,1\sigma}^\dagger c_{k,1\sigma} c_{k',2\sigma'}^\dagger c_{k'+q,2\sigma'} - \frac{J}{N} \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} c_{k+q,1\sigma}^\dagger c_{k,1\sigma'} c_{k',2\sigma'}^\dagger c_{k'+q,2\sigma}$$

Para encontrar as funções de Green empregamos a aproximação de fase aleatória (RPA) que consiste em considerar apenas os termos do tipo $\Theta_k^l(q)n_{k'l\sigma}$, em que $\Theta_k^l(q) = c_{kl\downarrow}^+ c_{k+q,l\uparrow}$ e $n_{k'l\sigma} = \langle n_{k'l\sigma} \rangle$, desprezando os demais termos.

Após alguns cálculos, encontramos:

$$\langle\langle S_1^-(q); S_1^+(-q) \rangle\rangle \approx \frac{-\Upsilon_1}{2\pi \left[1 - \left(U + \frac{J^2 \Upsilon_2}{1-U\Upsilon_2} \right) \Upsilon_1 \right]}$$

$$\langle\langle S_2^-(q); S_2^+(-q) \rangle\rangle \approx \frac{-\Upsilon_2}{2\pi \left[1 - \left(U + \frac{J^2 \Upsilon_1}{1-U\Upsilon_1} \right) \Upsilon_2 \right]}$$

$$\langle\langle S_2^-(q); S_1^+(-q) \rangle\rangle \approx -\frac{J\Upsilon_2\Upsilon_1}{2\pi \left(1 - U\Upsilon_1 \right) \left[1 - \left(U + \frac{J^2 \Upsilon_1}{1-U\Upsilon_1} \right) \Upsilon_2 \right]}$$

$$\langle\langle S_1^-(q); S_2^+(-q) \rangle\rangle \approx -\frac{J\Upsilon_1\Upsilon_2}{2\pi \left(1 - U\Upsilon_2 \right) \left[1 - \left(U + \frac{J^2 \Upsilon_2}{1-U\Upsilon_2} \right) \Upsilon_1 \right]}$$

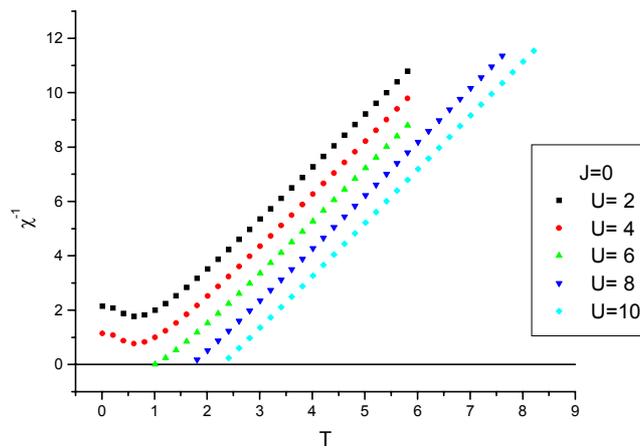


Figura 1: Inverso da susceptibilidade em função da temperatura para $J = 0$ e alguns valores de U .

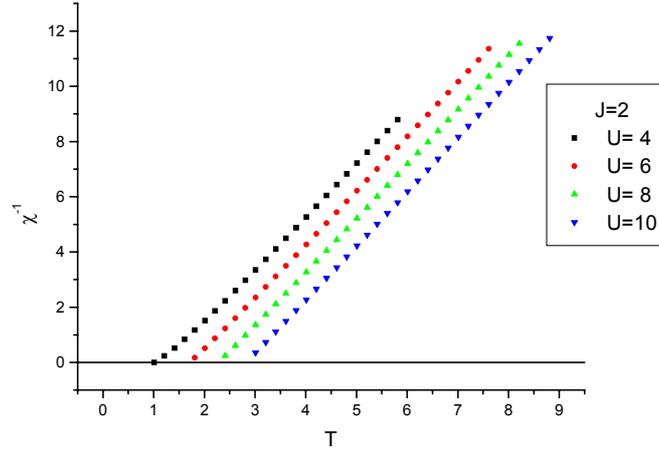


Figura 2: Inverso da susceptibilidade em função da temperatura para $J = 2$ e alguns valores de U .

em que

$$\Upsilon_l = \frac{1}{N} \sum_{k_1} \frac{\langle n_{k_1+q|l} - n_{k_1l} \rangle}{(\omega + \epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_1+q} + \Delta_l)}$$

$$\Delta_1 = U\Delta n_1 + J\Delta n_2$$

$$\Delta_2 = U\Delta n_2 + J\Delta n_1$$

$$\Delta n_l = \frac{1}{N} \sum_k \langle n_{k|l} - n_{kl} \rangle$$

Na região paramagnética a susceptibilidade está relacionada com a susceptibilidade transversal através de⁶:

$$\chi_S = \frac{1}{2} g^2 \mu_B \chi_{tot}^{-+}(0,0)$$

3. RESULTADOS E CONCLUSÕES

As figuras 1, 2 e 3 mostram gráficos do inverso da susceptibilidade em função da temperatura para um conjunto de valores de U e J . O ponto em que a curva do inverso da susceptibilidade corta o eixo das temperaturas é a temperatura crítica em que o sistema sofre a transição de ferromagnético para paramagnético.

Vemos pelos gráficos apresentados que a presença do termo de acoplamento devido à regra de Hund aumenta o valor da temperatura crítica, indicando assim que ele desempenha um papel importante nas propriedades magnéticas do sistema que justifica o aumento na complexidade dos cálculos em relação ao hamiltoniano de Hubbard de apenas uma banda.

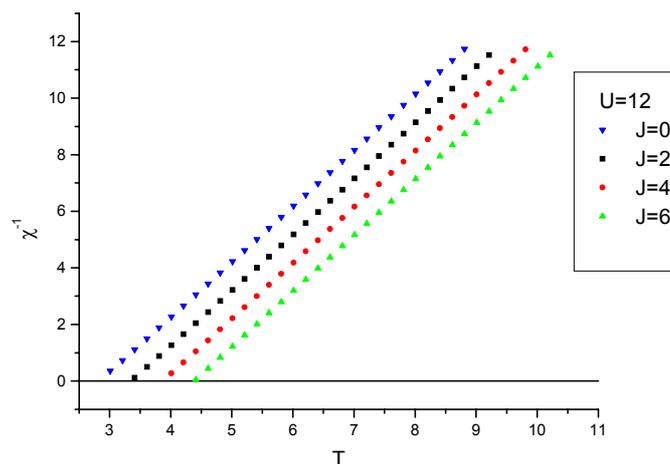


Figura 3: Inverso da susceptibilidade em função da temperatura para $U = 12$ e alguns valores de J .

4. AGRADECIMENTOS

Agradecemos às agências CAPES e FAP-SE pelo apoio financeiro.

-
1. HUBBARD, J. Electron Correlations in Narrow Bands II: The Degenerate Band Case. *Proc. Roy. Soc. of London*, A277:237-257,1964.
 2. GILL, W. Phase Diagram of a One-Dimensional Doubly-Degenerate Hubbard Model by Exact Diagonalization. *JKPS*, 29(4): 494-500, 1996.
 3. MACÊDO, M. A., MACÊDO, C. A. Termodinâmica do Modelo de Hubbard de Dois Átomos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 21 (3): 321-327, 1999.
 4. MATTIS, D. C. *The Theory of Magnetism I*. Berlin: Springer-Verlag, 1988.
 5. WHITE, R. M. *Quantum Theory of Magnetism*. Berlin: Springer-Verlag, 1983.
 6. MOTA, R., COUTINHO-FILHO, M. D. A Model of Itinerant and Quasi-Localized Electrons for the Magnetism of Iron. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 54-57: 987-988,1986.