

Propriedades magnéticas do modelo de Hubbard com saltos eletrônicos de longo alcance

Paulo C. L. Santos, Flavio dos Santos, Andre M. C. Souza

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

psantos@fisica.ufs.br

(Recebido em 12 de agosto de 2005; aceito em 26 de agosto de 2005)

O estudo de sistemas magnéticos de elétrons itinerantes com saltos de longo alcance é um importante campo de pesquisa pois pode determinar a influência do alcance do salto sobre o comportamento das fases magnéticas. Nesse trabalho utilizamos o modelo de Hubbard. Recorremos ao método das funções de Green empregando as aproximações Hartree-Fock e de fase aleatória com o objetivo de estudar o comportamento das bandas de energia e o diagrama de fases magnéticas em função do alcance dos saltos eletrônicos e do potencial coulombiano. Nossos resultados revelam que o aumento do alcance promove um aumento da região de parâmetros do modelo e da temperatura crítica em que ocorre a fase ferromagnética.

Palavras-chave: modelo de Hubbard; função de Green; propriedades magnéticas.

The study of systems of spins with electronic long-range jumps is an important field of research in solid state physics. It may determine the influence of the reach of the interaction on the magnetic critical behavior. In this work we use the Hubbard model with electronic long-range jumps. We apply the Green functions method using Hartree-Fock and random phase approximations to study the behavior of the energy bands and magnetic phases diagram as a function of the jumps and coulombian potential. We also obtain the critical magnetic temperature.

Keywords: Hubbard model; Green function; magnetic properties.

1. INTRODUÇÃO

Atualmente o magnetismo é um dos campos de estudo mais ativos da Física da Matéria Condensada. Esse interesse é facilmente explicado pois vários fenômenos magnéticos servem de base para o desenvolvimento de novas tecnologias, como sistemas de geração e distribuição de energia (hidroelétricas), sistemas de conversão eletromecânica (automóveis), equipamentos eletrônicos, e em diversas áreas como telecomunicações, informática, automação industrial e até na medicina. Nesse contexto, o estudo das propriedades magnéticas dos metais de transição 3d revela a presença de fortes correlações eletrônicas e a influência dessas correlações têm sido objetos de grande interesse na pesquisa do magnetismo. Sabe-se que os elétrons 3d possuem tanto um caráter localizado como também um certo grau de itinerância e, portanto, existe uma concorrência entre o modelo do tipo localizado (modelo de Heiton-London) e o modelo do tipo banda (modelo de Bloch). Em consequência, necessitamos de um modelo que considere de forma balanceada as contribuições dos modelos de Heiton-London e Bloch. Para contemplar o caráter localizado e itinerante desses elétrons, o modelo de Hubbard foi proposto em 1963 em três trabalhos independentes, Hubbard [1], Gutzwiller [2] e Kanamori [3] e com esse modelo podia-se descrever de forma satisfatória os dois comportamentos. Desde então o modelo de Hubbard tem sido muito utilizado não só no estudo de metais de transição, mas em diversos outros materiais que apresentam correlações entre elétrons em bandas estreitas.

O modelo de Hubbard apresenta uma forma simples, baseada em duas partes, uma que descreve o movimento dos elétrons entre sítios de uma rede e a outra que representa a interação coulombiana entre elétrons num mesmo sítio. O hamiltoniano do modelo pode ser escrito como

$$H = \sum_{ij} \sum_{\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} I \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} . \quad (1)$$

2. CORRELAÇÕES EM BANDAS ESTREITAS E SISTEMAS DE SPINS COM INTERAÇÕES DE LONGO ALCANCE

O método de cálculo do presente trabalho é baseado na técnica de funções de Green desenvolvida por Zubarev em 1960. Seja $G_{jk}^{\sigma}(E) = \langle\langle c_{j\sigma}; c_{k\sigma}^* \rangle\rangle$ a função de Green que permite calcular a ocupação média por sitio. Expressimos a densidade de estados como

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{i}{N} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_j \dots [G_{jj}^{\sigma}(E + i\varepsilon) - G_{jj}^{\sigma}(E - i\varepsilon)]. \quad (2)$$

Uma função de Green qualquer $\langle\langle A; B \rangle\rangle_E$ satisfaz a equação de movimento

$$E \langle\langle A; B \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_n \rangle + \langle\langle [A, H]; B \rangle\rangle_E. \quad (3)$$

em que H é o hamiltoniano do sistema. No caso do modelo de Hubbard, a equação de movimento para $T_{ij} \neq 0$ é dada por

$$EG_{ij}^{\sigma}(E) = \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} + \sum_k T_{ik} G_{kj}^{\sigma}(E) + \Gamma_{ij}^{\sigma}(E) \quad (4)$$

δ_{ij} é a função delta de Kroneker e $\Gamma_{ij}^{\sigma}(E)$ um conjunto de novas funções de Green (ver Eq. 5) que satisfazem novas equações de movimento. A complexidade destas novas funções está no fato delas darem origem a novas funções de movimento, e por consequência, novas função de Green. A quebra dessa seqüência pode ser feita desenvolvendo aproximações para os três novos termos da equação.

$$\begin{aligned} \langle\langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle_E &\cong \langle n_{i-\sigma} \rangle G_{jk}^{\sigma}(E) \\ \langle\langle c_{i-\sigma} c_{k-\sigma} c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle &\cong \langle c_{j\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle G_{ij}^{\sigma}(E) \\ \langle\langle c_{k-\sigma}^+ c_{i-\sigma} c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle &\cong \langle c_{k-\sigma}^+ c_{i-\sigma} \rangle G_{ij}^{\sigma}(E) \end{aligned} \quad (5)$$

As aproximações acima são as mais simples que podemos fazer compatíveis com o limite atômico, para cortar a cadeia de funções de Green. É importante ressaltar que essas aproximações resultam em uma subestimação do efeito das correlações. Após alguns cálculos, a densidade de estados do problema é dada por

$$\rho_{\sigma}(E) = P[g(E, n_{-\sigma})] \quad (6)$$

em que

$$g(E, n_{-\sigma}) = E - In_{-\sigma} - \frac{In_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})}{E - T_0 - I(1 - n_{-\sigma})} \quad (7)$$

Observa-se que no limite $I \rightarrow 0$ a função $g(E, n_{-\sigma})$ reduz-se a E e portanto, obtém-se a densidade de estados não perturbada $P(E)$.

Nesse trabalho buscamos estudar o modelo de Hubbard unidimensional em que o termo de saltos eletrônicos é definido por

$$T_{ij} = tr^{-\alpha}, \quad (8)$$

com

$$r = |\vec{R}_i - \vec{R}_j|. \quad (9)$$

Isso significa dizer que os elétrons podem saltar para um ponto qualquer da rede. O valor de α define o alcance do sistema, pois revela o grau de contribuição do termo de saltos eletrônicos (T_{ij}). Escrevemos para energia de saltos

$$\varepsilon_k = \frac{1}{N} \sum_{ij} T_{ij} \exp(-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j))$$

$$\varepsilon_k = \frac{1}{N} \sum_{ij} t \frac{\exp(-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j))}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|^\alpha}$$

Admitindo que a distância entre átomos vizinhos é 1, isto é, trabalhando na escala de unidades de comprimento atômico,

$$\varepsilon_k = \frac{t}{N} \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\exp(-ikn)}{|-n|^\alpha} + \frac{\exp(ikn)}{|n|^\alpha} \right)$$

$$\varepsilon_k = 2t \sum_{n=1} \left(\frac{\cos(kn)}{n^\alpha} \right) = 2t \left[\frac{\cos k}{1} + \frac{\cos 2k}{2^\alpha} + \frac{\cos 3k}{3^\alpha} \dots \right] \quad (10)$$

e a densidade de estados é dada pela por

$$P(E) = \frac{1}{N} \cdot \sum_k \delta(E - 2t \sum_{n=1} \left(\frac{\cos(kn)}{n^\alpha} \right)). \quad (11)$$

Observamos que se $\alpha \rightarrow \infty$ então $\varepsilon_k = 2t[\cos k]$. Isto é, quando α tende para infinito o sistema de longo alcance se reduz ao sistema de primeiros vizinhos.

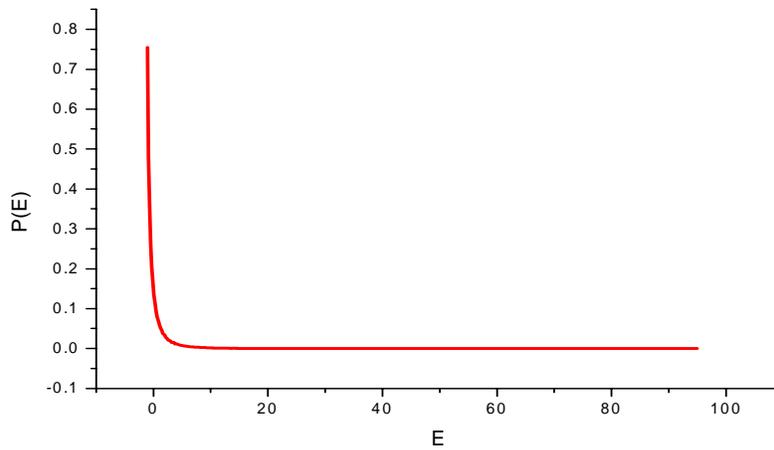


Figura 1: Densidade de estados de energia $P(E)$ em função da energia E para um sistema de longo alcance com $\alpha=0.5$ e $t=0$.

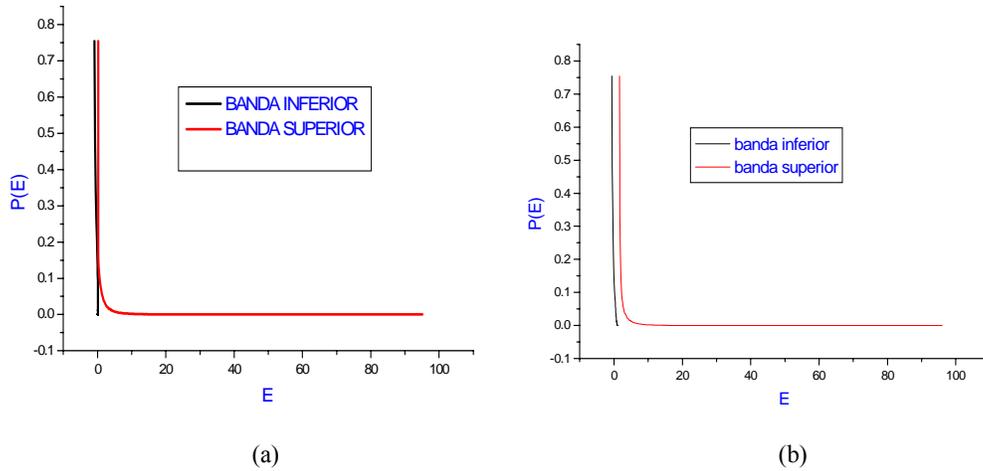


Figura 2: Densidade de estados de energia em função da energia para um sistema de longo alcance com $\alpha=0.5$ e (a) $I/t=0.3$ e (b) $I/t=2$.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A figura 1 mostra a densidade de estados em função da energia para um sistema com $\alpha=0.5$ e $I/t=0$. As figuras 2(a) e 2(b) mostram resultados para I/t diferente de zero. A banda de energia sem interação é dividida em duas bandas de energia.

A figura 3 mostra para $\alpha=1$ (de maneira semelhante ao que acontece para todos os α estudados) o *gap* de energia em função do potencial coulombiano. O *gap* apresenta um comportamento aproximadamente linear para grandes valores de I/t , além do seu surgimento ocorrer sempre para $I/t \rightarrow 0$.

Observamos ainda que os casos para $0 < \alpha < 1$ podem ser tratados independentemente de α se consideramos que o termo de salto eletrônico seja renormalizado tal que $t'=t/N(\alpha)$, onde $N(\alpha)=(N^{1-\alpha}-1)/(1-\alpha)$, em que N é o número de sítios da rede. Para esta situação todas as densidades de estados ficam idênticas ao caso $\alpha=0$ quando $N \rightarrow \infty$, análogo ao que foi observado para o modelo de Ising por Cannas e Tamarit[4]. Sem esta renormalização a banda de energia para $0 < \alpha < 1$ fica ilimitada e o limite termodinâmico fica indefinido. Esta renormalização restabelece o limite termodinâmico do sistema.

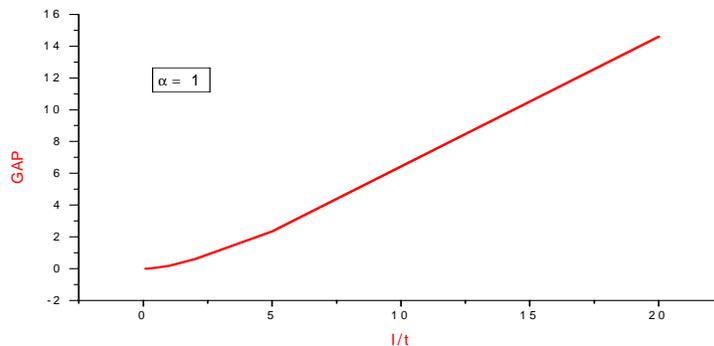


Figura 3: *Gap* de energia em função do potencial I/t , para um sistema de longo alcance com $\alpha=1$.

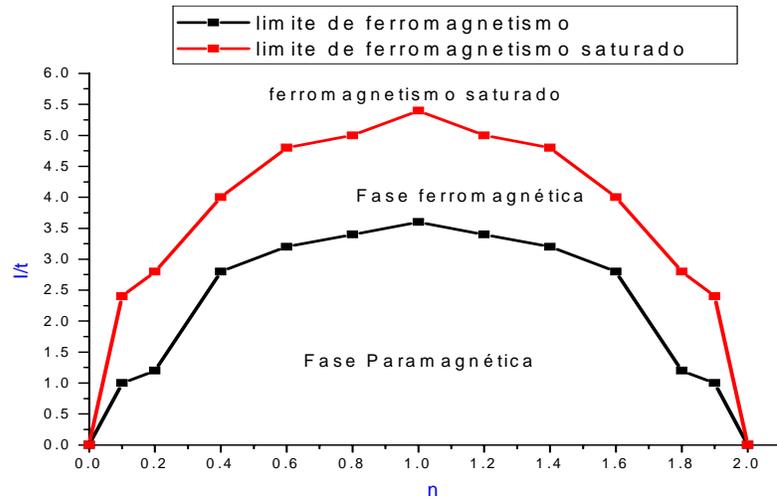


Figura 4: Diagrama de fases magnéticas para $\alpha=10$.

Estudamos o diagrama de fases para alguns sistemas de longo alcance especificamente para $\alpha=1, 2, 3$ e 10 em função da densidade de elétrons ($n=n_{\uparrow}+n_{\downarrow}$). A condição de ferromagnetismo da aproximação obtida nas equações (6) e (7) não foi atingida para nenhum dos casos estudados. Este fato tem sido observado na literatura para outros sistemas. O próprio Hubbard observou que este tipo de aproximação restringe bastante a ordem magnética[1]. Considerando este fato, usamos a aproximação Hartree-Fock para estabelecer o diagrama de fases do nosso problema. Neste caso

$$g(E, n_{-\sigma}) = E - In_{-\sigma}. \tag{12}$$

Os resultados são mostrados nas figuras 4, 5, 6 e 7. Notamos que existe uma evolução do diagrama de fases quando decrescemos o valor de α e esse diagrama está intimamente ligado ao gráfico da densidade de estados em relação à energia pois verificamos que o diagrama de fases para $\alpha \leq 2$ deixa de ser simétrico para a banda meio-cheia ($n=1$). O comportamento da magnetização em função da temperatura é apresentado nas figuras 8 e 9.

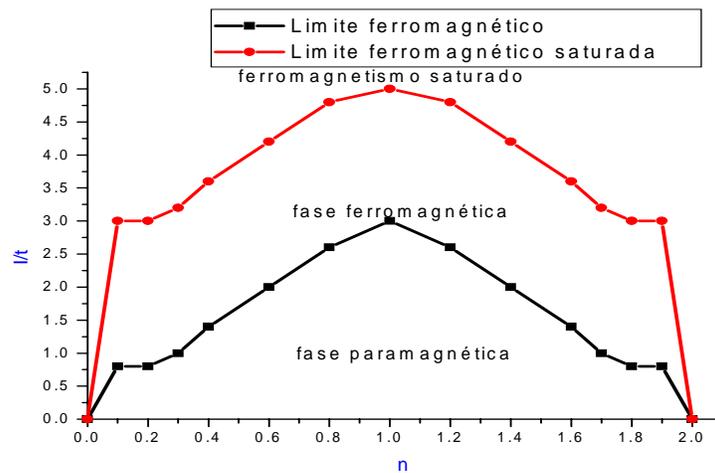


Figura 5: Diagrama de fases para $\alpha=3$.

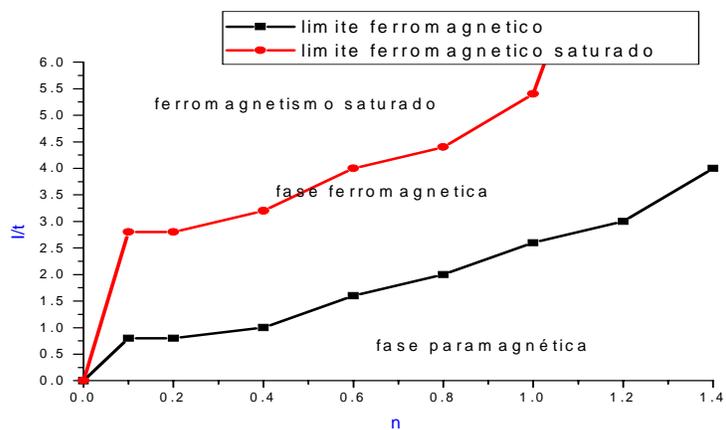


Figura 6: Diagrama de fases para $\alpha=2$.

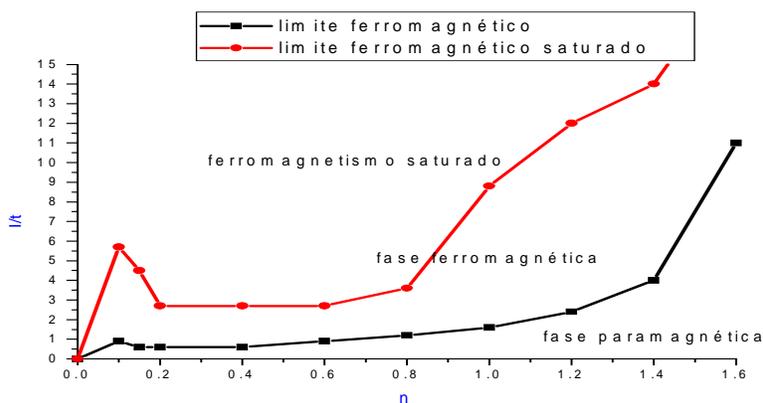


Figura 7: Diagrama de fases para $\alpha=1$.

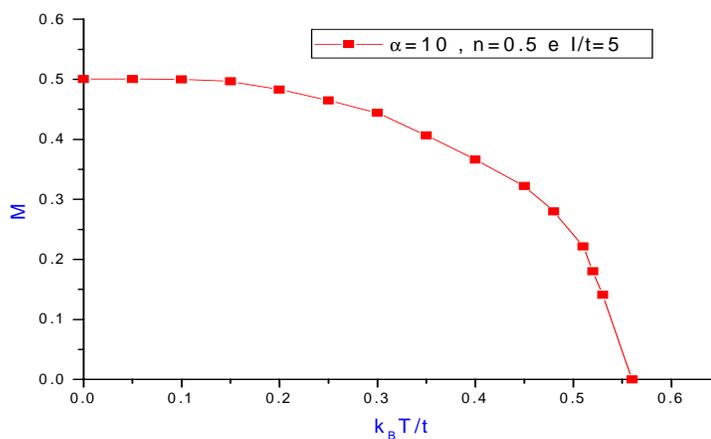


Figura 8: Magnetização em função da temperatura para $\alpha=10$, $n=0.5$ e $I/t=5$.

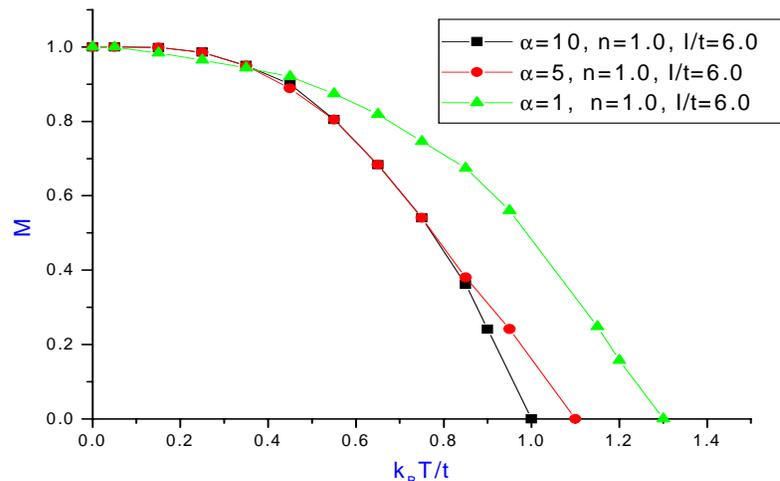


Figura 9: Magnetização em função da temperatura para $n=1.0$ e $I/t=6.0$ em que $\alpha=1$; 5 e 10.

4. CONCLUSÕES

Verificamos que quando há interação coulombiana ($I>0$) entre elétrons, o espectro de energia consiste sempre de duas sub-bandas separadas por um *gap*. A banda inferior sofre um pequeno deslocamento enquanto que a banda superior sofre um deslocamento mais significativo, principalmente quando I é grande, caso em que a banda se desloca proporcional a I .

O efeito das correlações proporciona o surgimento de fase ferromagnética. Quanto maior o alcance (menor α), mais rápido o material se magnetiza com a influência das interações. Ainda observamos que o aumento do alcance promove um aumento da temperatura crítica em que acaba a fase ferromagnética, mantido constante a interação coulombiana e número de elétrons.

5. AGRADECIMENTOS

A. M. C. Souza agradece ao CNPq pelo apoio financeiro.

-
- HUBBARD, J. Electron Correlations in Narrow Bands II: The Degenerate Band Case. *Proc. Roy. Soc. of London*, A277, pp.237-257, 1964.
 - GUTZWILLER, M. C. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Phys. Rev. Lett.*, v.10, n.5, pp.159-163, 1963.
 - KANAMORI, J. Electron correlation and ferromagnetism of the transition metals. *Prog. Theor. Phys.*, V.30, n.3, pp.275-205, 1963
 - CANNAS, S.; TAMARIT, F. A. Long Range interactions and nonextensivity in ferromagnetic spin models, *Phys. Rev. B*, v.54, n.18, pp. R12661, 1996.
 - NAKANO, H.; TAKAHASHI, M. Magnetic properties of quantum Heisenberg ferromagnets with long-range interactions. *Physical Review B*, v 52, pp 6606-6609, 1995.
 - SANTOS, P. C. L. *Propriedades Magnéticas do Modelo de Hubbard com Saltos Eletrônicos de Longo Alcance*. Dissertação de Mestrado em Física da Matéria Condensada. U.F.S. 2004.