

# A técnica matriz de transferência aplicada ao modelo de Hubbard degenerado clássico

D. M. C. de Lucena & A. M. C. Souza

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

*dayse1307@hotmail.com*

*(Recebido em 30 de março de 2010; aceito em 31 de maio de 2011)*

---

O Modelo de Hubbard tem sido usado na descrição das propriedades magnéticas dos metais de transição, como também em diversos outros materiais que apresentam correlações entre elétrons em bandas estreitas. Neste trabalho estudamos o comportamento termodinâmico do modelo de Hubbard degenerado clássico para redes unidimensionais em que aplicamos a técnica de matriz transferência. Obtivemos soluções exatas para a dependência com relação à temperatura da susceptibilidade magnética, como função do número de orbitais e da repulsão coulombiana.

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

The Hubbard model has been used to describe the magnetic properties of transition metals, as well as in several other materials that show correlations between electrons in narrow bands. In this paper we study the thermodynamic behavior of the degenerate Hubbard model to classical one-dimensional arrays in which we apply the technique of transfer matrix. We obtained exact solutions for the dependence in the temperature of the magnetic susceptibility as a function of the number of orbitals and the Coulomb repulsion.

Keywords: magnetic properties, Hubbard model Degenerated Classic, one-dimensional systems.

---

## 1. INTRODUÇÃO

O modelo de Hubbard na sua forma original é bastante utilizado no estudo de materiais que apresentam magnetismo de elétrons itinerantes. Todavia, a sua forma com mais de uma banda apresenta uma fonte de informações físicas ainda pouco explorada, devido à complexidade dos cálculos envolvidos. Nosso trabalho busca encontrar essas informações físicas para o modelo com várias bandas, criando uma vertente do modelo que chamaremos de modelo de Hubbard degenerado clássico.

A determinação das propriedades magnéticas dos metais de transição é um problema complexo para a física estatística. Têm-se duas linhas teóricas contrastantes que se orientam na construção de modelos para descrever a estrutura eletrônica dos sólidos em geral. Uma delas toma a aproximação de orbitais moleculares de Hund e Mulliken, que é uma teoria de um elétron e conduz ao modelo da 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 ambas.

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 estreitas.

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 vizinhos. O modelo de Hubbard unidimensional em várias bandas no espaço real possui o seguinte Hamiltoniano:

$$H = \sum_{i,j,\sigma,m,m'} t_{ij}^{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijklm'm''\sigma\sigma'} \left\langle im\sigma, jm'\sigma' \left| \frac{1}{r} \right| km''\sigma, lm''\sigma' \right\rangle c_{im\sigma}^\dagger c_{jm'\sigma'}^\dagger c_{lm''\sigma'} c_{km''\sigma} \quad (1)$$

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. [4]

## 2. MODELO DE HUBBARD DEGENERADO CLÁSSICO

Iremos introduzir o modelo de Hubbard degenerado clássico a partir do modelo de Hubbard degenerado, o qual também pode ser representado pelo Hamiltoniano:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle m\alpha} t_{ij} c_{im\alpha}^\dagger c_{im\alpha} + (U + J) \sum_{im} n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} + \sum_{imm'\alpha} (1 - \delta_{mm'}) \left[ \frac{U}{2} n_{im\alpha} n_{im'-\alpha} - \frac{U - J}{2} n_{im\alpha} n_{im'\alpha} \right] \quad (2)$$

em que,  $m$  e  $m'$  representam os orbitais,  $\alpha$  o spin  $\uparrow$ (up) ou  $\downarrow$ (down) e  $c_{im\alpha}^\dagger c_{im\alpha}$  são operadores de criação e aniquilação do spin  $\alpha$  na rede  $i$ . Na equação (2), o primeiro termo representa os saltos dados pelos elétrons e o segundo termo representa a interação Coulombiana entre os elétrons e o  $J$  neste mesmo termo adiciona uma tendência ao ferromagnetismo, o terceiro termo trás o delta que mostra claramente que não se pode ter elétrons com mesmo  $m$ , ou seja, no mesmo orbital e com mesmo spin, introduzindo assim o princípio de exclusão de Pauli.

O Hamiltoniano de Hubbard degenerado clássico é definido substituindo o termo de saltos eletrônicos do hamiltoniano de Hubbard por um termo que conta o número de possíveis saltos eletrônicos. Deste modo o novo hamiltoniano pode ser diagonalizado e é neste sentido que iremos nos referir a ele como sendo clássico.

$$H = -2t \sum_{im} \{ n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} + n_{im\uparrow} n_{(i+1)m\uparrow} - n_{im\downarrow} n_{(i+1)m\downarrow} \} + (U + J) \sum_{im} n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} + \sum_{imm'} (1 - \delta_{mm'}) \left[ \frac{U}{2} (n_{im\uparrow} n_{im'\uparrow} + n_{im\downarrow} n_{im'\downarrow}) + \frac{U - J}{2} (n_{im\uparrow} n_{im'\uparrow} + n_{im\downarrow} n_{im'\downarrow}) \right] - \frac{\mu}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} + n_{(i+1)\uparrow} + n_{(i+1)\downarrow}) - \frac{\hbar}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} + n_{(i+1)\uparrow} - n_{(i+1)\downarrow}) \quad (3)$$

O termo de interação Coulombiana permanece o mesmo. Os estados do operador são autoestados do Hamiltoniano. No Modelo de Hubbard Degenerado, o Hamiltoniano é quântico e comparado com o Modelo Hubbard Degenerado Clássico, o Hamiltoniano deste segundo modelo é mais fácil de ser trabalhado.

## 3. MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

Para o Hamiltoniano (3) podemos escrever,  $H = \sum_i E_i$ , de modo que:

$$\begin{aligned}
 E_i = & -2t \{ n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} + n_{im\uparrow} n_{(i+1)m\uparrow} - n_{im\downarrow} n_{(i+1)m\downarrow} \} + (U + J) n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} \\
 & + (1 - \delta_{mm'}) \left[ \frac{U}{2} (n_{im\uparrow} n_{im'\uparrow} + n_{im\downarrow} n_{im'\downarrow}) + \frac{U - J}{2} (n_{im\uparrow} n_{im'\uparrow} + n_{im\downarrow} n_{im'\downarrow}) \right] \\
 & - \frac{\mu}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} + n_{(i+1)\uparrow} + n_{(i+1)\downarrow}) - \frac{\hbar}{2} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} + n_{(i+1)\uparrow} - n_{(i+1)\downarrow})
 \end{aligned} \tag{4}$$

Sabendo que:

$$n_{im\uparrow} = 1 \text{ ou } 0, \quad n_{im\downarrow} = 1 \text{ ou } 0, \quad n_{im'\uparrow} = 1 \text{ ou } 0, \quad n_{im'\downarrow} = 1 \text{ ou } 0, \quad n_{(i+)m\uparrow} = 1 \text{ ou } 0, \quad n_{(i+)m\downarrow} = 1 \text{ ou } 0$$

Podemos obter a chamada matriz transferência. Essa técnica consiste em obter os autovalores de uma matriz escrita a partir da função de partição do modelo unidimensional e colocar seus autovalores na função que representa a energia livre:

$$F = -k_B T \ln Z$$

A partir da energia livre obtemos às propriedades termodinâmicas e magnéticas do modelo, que derivam desta função.

A ordem da matriz transferência dependerá do número de orbitais, para o caso de um orbital, teremos uma matriz de ordem  $4 \times 4$ , já se tivermos dois orbitais sua ordem será  $16 \times 16$ , tendo  $n$  orbitais será de ordem  $4^n \times 4^n$ . A partir de dois orbitais trabalhamos com um programa numérico de diagonalização de matrizes e obtivemos os resultados exatos das propriedades magnéticas do modelo.

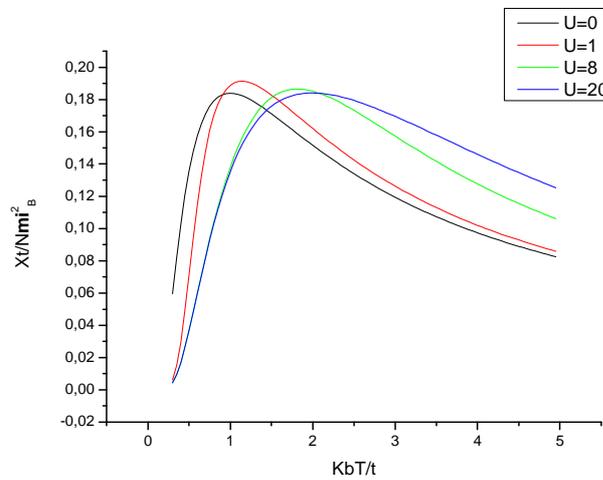


Figura 1. Suscetibilidade magnética versus temperatura para um orbital.

A figura 1 mostra a susceptibilidade magnética em função da temperatura para o caso de um orbital e vários valores de U. Comparando com o resultado obtido na referência [1] observamos uma concordância perfeita.

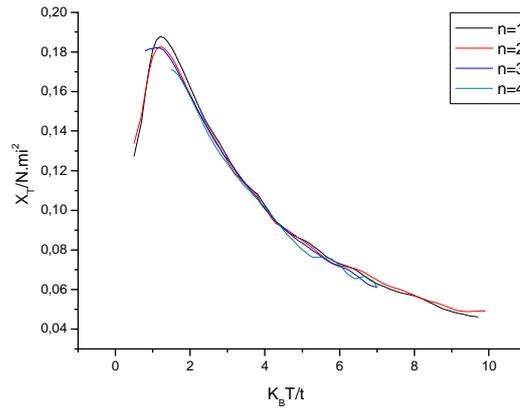


Figura 2. Suscetibilidade magnética versus temperatura.  $U = 1$  e  $J = 0$  e diferentes valores de número orbitais

A dependência do número de orbitais é analisada na figura 2. Apresentamos a suscetibilidade magnética em função da temperatura para  $U = 1$  e  $J = 0$ . Observa-se uma independência para diferentes números de orbitais, o modelo apresenta uma transição de curto alcance para cerca de temperaturas iguais a  $2k_B T / t$ .

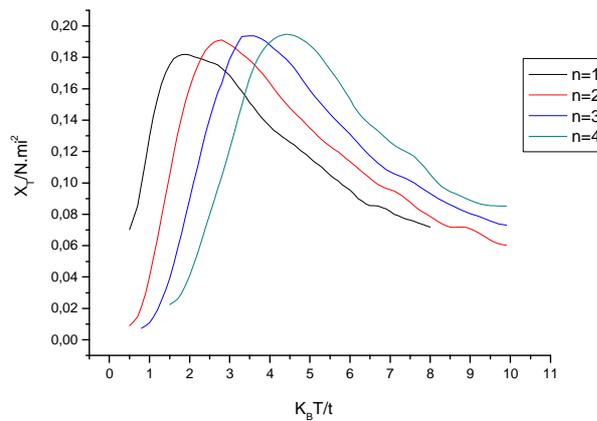


Figura 3. Suscetibilidade magnética versus temperatura.  $U = 8$  e  $J = 4$  e diferentes valores de número orbitais.

Na figura 3 percebemos que a suscetibilidade magnética em função da temperatura para  $U = 8$  e  $J = 4$  possui uma dependência para diferentes números de orbitais, o modelo apresenta uma transição de curto alcance em diferentes intervalos de temperatura para cada número de orbitais, em torno da temperatura  $1,5k_B T / t$  para  $n = 1$ , em torno de  $3k_B T / t$  para  $n = 2$ , em torno de  $4k_B T / t$  para  $n = 3$ , e em torno de  $5k_B T / t$  para  $n = 4$ .

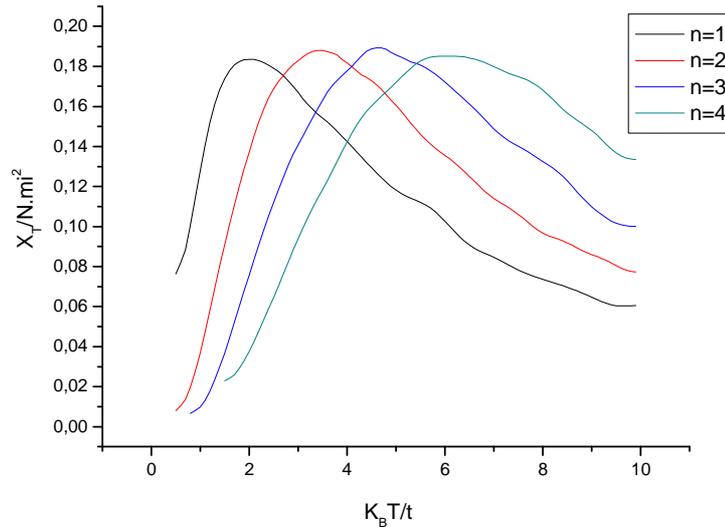


Figura 4. Suscetibilidade magnética versus temperatura.  $U = 8$  e  $J = 8$  e diferentes valores de número orbitais.

Na figura 4 podemos ver que a suscetibilidade magnética em função da temperatura para  $U = 8$  e  $J = 8$  possui uma dependência para diferentes números de orbitais, o modelo apresenta uma transição de curto alcance em diferentes intervalos de temperatura para cada número de orbitais, em torno da temperatura  $2k_B T/t$  para  $n = 1$ , em torno de  $3k_B T/t$  para  $n = 2$ , em torno de  $5k_B T/t$  para  $n = 3$  e em torno de  $6k_B T/t$  para  $n = 4$ .

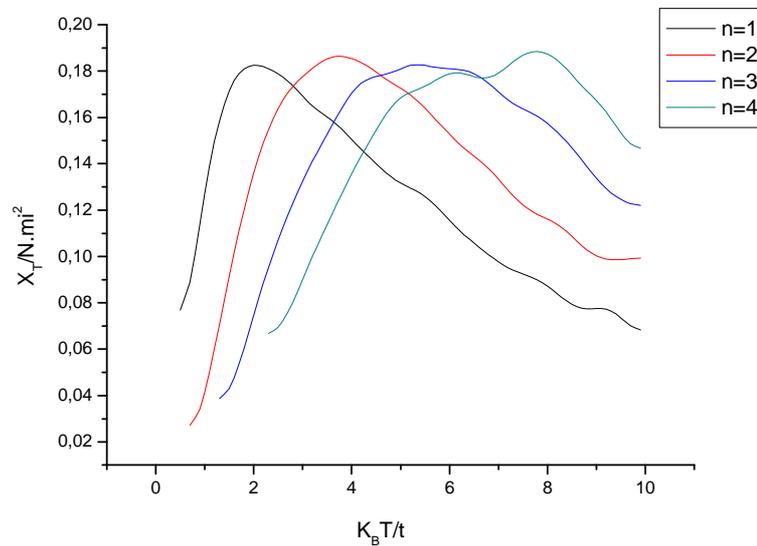


Figura 5. Suscetibilidade magnética versus temperatura.  $U = 20$  e  $J = 10$  e diferentes valores de número orbitais.

Na figura 5 podemos ver que a suscetibilidade magnética em função da temperatura para  $U = 20$  e  $J = 10$  possui uma dependência para diferentes números de orbitais, o modelo apresenta uma transição de curto alcance em diferentes intervalos de temperatura para cada

número de orbitais, em torno da temperatura  $2k_B T/t$  para  $n=1$ , em torno de  $3k_B T/t$  para  $n=2$ , em torno de  $6k_B T/t$  para  $n=3$  e em torno de  $8k_B T/t$  para  $n=4$ .

#### 4. CONCLUSÕES

A partir da técnica de matriz transferência obtivemos a dependência da susceptibilidade magnética com relação à temperatura do modelo de Hubbard degenerado clássico para a rede unidimensional. No caso de um orbital reobtivemos os resultados previamente obtidos na referência [1]. Vimos que as transições são de curto alcance.

Observamos que apenas na figura 2, quando temos  $U=1$  e  $J=0$  a transição de curto alcance acontece sob a mesma temperatura para diferentes números de orbitais, nos demais gráficos vimos que existe uma dependência para diferentes números de orbitais, o modelo apresenta uma transição de curto alcance em diferentes intervalos de temperatura para cada número de orbitais. Isso se deve ao aumento dos valores de  $J$  e  $U$ , que favorecem o ferromagnetismo.

- 
1. SOUZA, A. M. C. **Physica A** **375**, 221 (2007).
  2. YEOMANS, J. M. **Statistical Mechanics of Transitions**. Ed. Oxford University Press (1993).
  3. ALONSO, M. ; FINN, E. J. **Física um curso universitário II**. Editora Edgar Blücher Ltda (1972).
  4. MONTORSI, A., **The Hubbard Model**. Editora World Scientific (1992).
  5. MACEDO, C. A.; A. SOUZA, M. C. **IEEE Transactions on Magnetism** **38**, 2875 (2002).
  6. SOUZA, M. C.; MACEDO, C. A.; MOREIRA, M. L. **Physica B** **354**, 293 (2004).
  7. MACEDO, C. A.; SOUZA, A. M. C. **Physica B** **354**, 290 (2004).
  8. SOUZA, M. C.; OLIVEIRA NETO, S. R.; MACEDO, C. A. **J. Mag. Mag. Mat.** **272**, 521(2004).
  9. MACEDO, C. A.; SOUZA, M. C.; **J. Mag. Mag. Mat.** **272**, 964 (2004).