

MATERIAIS QUASI-UNIDIMENSIONAIS E A CADEIA DE HUBBARD: UMA REVISÃO QUALITATIVA

NUNO M. R. PERES

Universidade de Évora, Departamento de Física
Apartado 94, P-7001 Évora Codex, Portugal

Neste trabalho revêem-se algumas classes de materiais quasi-unidimensionais e suas propriedades electrónicas, à luz do modelo de Hubbard unidimensional. Argumenta-se que tal modelo, apesar da sua simplicidade, contém uma grande riqueza física e é apropriado para o entendimento, pelo menos qualitativo, das propriedades electrónicas dos materiais quasi-unidimensionais.

I. Introdução

Neste trabalho revêem-se algumas classes de materiais quasi-unidimensionais e suas propriedades electrónicas, à luz do modelo de Hubbard¹⁻³ unidimensional. Este modelo (em qualquer dimensão) descreve electrões correlacionados numa rede. (Para o leitor interessado em aspectos técnicos, é dada uma exposição dos passos necessários à derivação do modelo de Hubbard no Apêndice.) De acordo com Lieb⁴:

"The Hubbard model is to the problem of electron correlations as the Ising model is to the problem of spin-spin interactions; it is the simplest possible model displaying many "real world" features."

O modelo depende do parâmetro t , o integral de transferência, o qual caracteriza a energia cinética dos electrões ao propagarem-se entre sítios adjacentes da rede, e do parâmetro U , o integral de Coulomb local, o qual caracteriza a energia de Coulomb quando dois electrões ocupam o mesmo ponto da rede (ver Fig. 1).

Não existem, na realidade, materiais estritamente unidimensionais. Contudo são muitos os materiais ditos quasi-unidimensionais. Do ponto de vista teórico, um material quasi-unidimensional — a respectiva definição pode ser bastante lata⁵ — pode ser representado por um arranjo

tridimensional de cadeias unidimensionais, tal que os integrais de transferência são muito menores entre cadeias que ao longo destas⁶. A ligação com os materiais reais — para os quais t e U podem ser obtidos por medidas espectroscópicas no infravermelho⁷⁻⁹ — é feita por intermédio de cálculos de química quântica¹⁰. Nestes cálculos os integrais de transferência e a energia de Coulomb local são calculados usando as funções de onda atómicas (moleculares) dos átomos (moléculas) do sólido em estudo.

Obviamente que aproximar o comportamento de materiais reais pelo comportamento de um modelo unidimensional simples não permite, em geral, mais do que uma descrição qualitativa das propriedades do sólido. Apesar disto, a descrição de sólidos quasi-unidimensionais com base apenas nos parâmetros t e U apresenta "muitos aspectos do mundo real"^{7,8}. Por outro lado, efeitos devido à interacção electrão-fonão e a integrais de interacção mais gerais que o local, apenas para dar dois exemplos, são necessários para uma descrição mais quantitativa das propriedades dos materiais quasi-unidimensionais¹¹⁻¹⁷.

Os materiais aos quais o modelo de Hubbard 1D (e suas generalizações) é aplicado possuem bandas de energia estreitas e, portanto, é natural que a aproximação de tight-binding para electrões

Modelo de Hubbard

**Sistemas
Correlacionados**

**Materiais
Quasi-
-unidimensionais**

independentes possa ser aplicada¹⁸. Isto é, para além da energia de Coulomb local U , a modelação destes materiais apenas requer uma banda na aproximação de tight-binding.

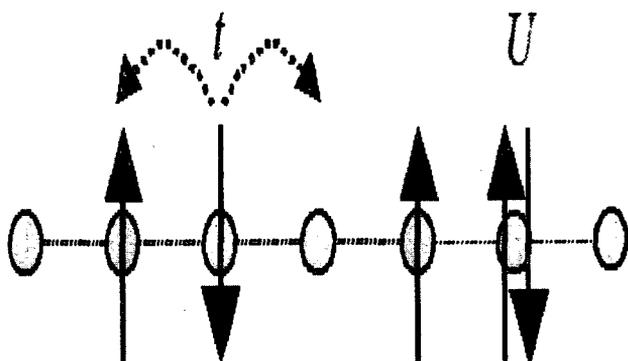


Fig. 1 — Apresentação pictórica do modelo de Hubbard numa rede unidimensional. Cada um dos pontos da rede representa uma orbital s , a qual pode acomodar dois electrões. Os electrões podem mover-se ao longo da cadeia, com uma amplitude de probabilidade t , dando origem a uma banda de energia da forma $\varepsilon(q) = -2t \cos q$, onde q é o momento dos electrões. Quando se encontram na mesma orbital os electrões interagem coulombianamente, com energia U . Esta energia de interacção dá origem a um problema de física de muitos corpos de grande complexidade.

II. Materiais

Existem várias classes de materiais quasi-unidimensionais aos quais o modelo de Hubbard 1D pode ser aplicado, sendo o exemplo mais simples a molécula de benzeno (C_6H_6). [Os seis átomos de carbono com as respectivas orbitais π podem ser considerados como uma rede (um anel) com seis sítios e seis electrões. Vários integrais de Coulomb foram calculados por Parr *et al.*¹⁰ e apresentam os valores $U = 16.93$ eV, para o integral de Coulomb local, e $V = 9.027$ eV, para o integral de Coulomb de primeiros vizinhos (ver Apêndice).]

Em seguida apresentam-se, brevemente, algumas características dos materiais quasi-unidimensionais mais típicos.

1.) Materiais Inorgânicos

1.a) Cianoplatinatos de Potássio: o exemplo típico é o $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$, o qual foi sintetizado ainda durante o século dezanove. As cadeias são formadas pela sobreposição das orbitais d dos átomos de Pt. O quociente entre a condutividade ao longo das cadeias (σ_{\parallel}) sobre a condutividade na direcção perpendicular (σ_{\perp}) é $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp} \sim 10^5$, e a densidade electrónica n — o quociente entre o número de electrões N e o número de sítios da rede N_s — é 0.85 ¹⁹. Os valores de σ_{\parallel} e de σ_{\perp} são uma medida da sobreposição das orbitais atómicas (ou moleculares) ao longo da e perpendicularmente à direcção da

cadeia, respectivamente²⁰. Portanto, $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp}$ é uma medida relativa dos valores dos integrais de transferência (tipicamente $t_{\parallel}/t_{\perp} \sim \sqrt{\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp}}$).

1.b) Calcogenetos de Metais de Transição: MX_3 e $(MX_4)_nY$, onde se tem os metais $M = Nb, Ta$, os calcogénios $X = S, Se$, e os halogenetos $Y = I, Br, Cl$. As unidades básicas das cadeias são os prismas triangulares MX_3 e MX_6 sobrepostos uns em cima dos outros; nos compostos de fórmula química $(MX_4)_2Y$ as unidades básicas são os octaedros de M_2X_4 . Os exemplos típicos são $NbSe_3$, TaS_3 , $(TaSe_4)_2I$, e $(NbSe_4)_2I$, com $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp} \sim (10 - 10^3)$ e $n \sim 1/4$ ¹⁹.

1.c) Bronzes de Metais de Transição: $A_{0.3}MoO_3$, com $A = K, Rb, Tl$. Estes materiais são designados por bronzes azuis em virtude dos reflexos azulados do seu brilho metálico. As cadeias são formadas por octaedros de MoO_6 e, nestes materiais, $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp} \sim (10 - 10^3)$ e $n \sim 3/4$ ¹⁹.

1.d) Compostos de Óxidos de Cobre: exemplos típicos são os antiferromagnetes unidimensionais Sr_2CuO_3 e $SrCuO_2$ ²¹. Estes materiais são bem caracterizados pelo modelo de Hubbard com $U \gg t$ e $n = 1$. A interacção de troca $J = 4t^2/U$ para estes dois compostos é $J = (2200 \pm \pm 200)$ K e $J = (2100 \pm 200)$ K, respectivamente. A interacção de troca entre as cadeias, J' , obedece ao quociente $J/J' \sim 10^5$ para o Sr_2CuO_3 e $J/J' \sim (5 \text{ a } 10)$ para o $SrCuO_2$. Intimamente relacionados com as cadeias de spin estão os compostos designados por escadas de spin. Estes últimos podem formar escadas de duas, três, ou mais cadeias ligadas entre si (estes materiais não são nem quasi-unidimensionais nem quasi-bidimensionais). Exemplos típicos são o $SrCu_2O_3$ (um sistema em escada com duas cadeias de spin $1/2$) e o $Sr_2Cu_2O_5$ (um sistema em escada com três cadeias de spin $1/2$)²². Um resultado muito interessante é o facto das escadas de spin $1/2$ com um número par de cadeias possuírem um hiato de energia no seu espectro de excitação, enquanto as escadas com um número ímpar de cadeias não apresentam o referido hiato. Mediante dopagem (isto é $n = 1/2 - \delta$, onde δ é geralmente pequeno quando comparado com $1/2$) estes materiais apresentam fases metálicas e superconductoras^{22,23}.

2.) Materiais Orgânicos

2.a) Polímeros: o exemplo de referência é o poliacetileno. Consiste numa cadeia de monómeros de $(CH)_x$ com ligações simples e duplas entre os átomos de carbono^{11,13,24}. Os valores do integral de transferência e da interacção de Coulomb local são $4t \sim 10$ eV e $U \sim 6.5$ eV, respectivamente, e a densidade electrónica é $n = 1$ ^{11,13,24}.

2.b) Camadas de Moléculas Orgânicas: estes materiais são constituídos por moléculas orgânicas empilhadas. Essas moléculas orgânicas possuem orbitais moleculares π perpendiculares ao plano da molécula. A sobreposição destes orbitais ao longo da direcção de empilhamento forma uma cadeia unidimensional. Um exemplo típico, com interesse histórico, é o material incomensurável (a densidade de electrões por átomo não é expressável em termos de um simples número racional) tetratiofulvaleno-tetracianoquinodimetano — TTF-TCNQ — com $4t \sim 0.61$ eV, $U \sim 1.1$ eV, e $n \sim 0.55$ ^{7,8}. Outros exemplos são os sais de transferência de carga M_2X , com $M = \text{TMTSF}, \text{TMTTF}$ (onde TMTSF significa tetrametil-tetrasetenofulvaleno e TMTTF significa tetrametil-tetratiofulvaleno) e $X = \text{Br}, \text{PF}_6, \text{ClO}_4$. Estes materiais correspondem a cadeias unidimensionais com uma densidade de vazios $n = 1/4$, e com t e U dados por $t \sim 0.25$ eV e $U \sim 1$ eV (t_b e t_c , os integrais de transferência intercadeias, são da ordem de 25 meV e 1 meV, respectivamente)²⁵. Estes materiais também apresentam fases superconductoras²⁶.

Há ainda outras realizações de materiais quasi-unidimensionais como as heteroestructuras (um exemplo é o material composto por AlGaAs-GaAs-AlGaAs) e os nanotubos (um exemplo é o $B_{1-\delta}C_{2+\delta}N$)²⁷⁻²⁹.

Muitos dos materiais atrás descritos não são metais a temperaturas próximas do zero absoluto. Normalmente eles exibem comportamento metálico a temperaturas moderadas mas sofrem uma transição de fase quando a temperatura baixa. Dependendo do material e dos valores dos parâmetros externos (como a quantidade de dopagem, campos externos, pressão e taxa de arrefecimento) eles podem apresentar, por exemplo, transições de fase do tipo estrutural, do tipo metal-isolador, do tipo onda de densidade de spin, ou do tipo superconductoras^{26,19,30-33}.

Quando, usando o modelo de Hubbard (ou outro qualquer), se fazem cálculos a temperatura zero não é de esperar mais do que uma concordância qualitativa na comparação desses resultados com as medidas feitas a temperatura finita. Contudo os cálculos de algumas propriedades a $T = 0$, como por exemplo a condutividade óptica, têm sido usados com algum sucesso na interpretação dessas propriedades medidas a temperaturas finitas em alguns materiais quasi-unidimensionais^{7,8,17}. Por outro lado, devido ao seu carácter quasi-unidimensional, estes materiais só são bem descritos por modelos unidimensionais a temperaturas acima das quais $t_{\perp} \ll k_B T$ (onde k_B representa a constante de Boltzmann). A baixas temperaturas efeitos de coerência na direcção perpendicular às cadeias começam a desempenhar um papel importante e o material passa a ter um comportamento tridimensional, embora fortemente dependente da anisotropia. Estes efeitos conduzem, em geral, o material para uma transição de fase, com as indicadas acima.

III. Resultados Teóricos

Sendo o modelo de Hubbard o mais simples para descrever electrões correlacionados numa rede, o seu estudo teórico é de interesse fundamental⁴. Nesta secção são revistos alguns dos resultados teóricos obtidos no estudo da cadeia de Hubbard.

O modelo de Hubbard 1D é exactamente solúvel pela técnica do Bethe ansatz, primeiramente introduzida por Hans Bethe³⁴ na solução da cadeia de Heisenberg isotrópica de spin 1/2. O modelo apresenta excitações de carga e de spin (¹) — usualmente designadas por holões e spinões — as quais estão desacopladas. Esta propriedade é considerada como uma característica dos modelos electrónicos correlacionados unidimensionais. O relato da observação de holões e spinões no material 1D SrCuO_2 foi recentemente publicado por Kim *et al.* (contudo este tipo de excitações não foi observado no cuprato bidimensional $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, cuja composição e estrutura químicas são muito semelhantes às do SrCuO_2). Mais ainda, estes autores verificaram que a cadeia de Hubbard no limite em que $U \gg 4t$ (os parâmetros usados foram $t = 0.60$ eV e $U = 7.2$ eV) concorda “maravilhosamente” com os dados experimentais.

Usando o mesmo método que Yang para o modelo unidimensional de multi-componentes no contínuo³⁶, Lieb e Wu³⁷ calcularam a energia do estado fundamental, para o caso de banda meia cheia ($n = 1$) e magnetização nula ($m = 0$). Calcularam, também, que o espectro de excitações de carga possui um hiato de energia — o hiato de Mott-Hubbard Δ_{MH} — para a densidade $n = 1$, independentemente do valor da interacção U (exceptuando o caso não correlacionado). Isto significa que o modelo de Hubbard é um isolador a temperatura nula e para uma densidade de electrões de banda meia cheia. Esta propriedade é importante e é típica de sistemas electrónicos com interacções de curto alcance, contrariando considerações elementares de física do estado sólido com base nas quais seria de esperar que o sistema se comportasse como um metal para esta densidade ($n = 1$). Nos compostos orgânicos HMTSF-TCNQF₄, HMTTF-TCNQF₄ e

(¹) Nos sistemas electrónicos interactivos unidimensionais o conceito de quasipartícula — electrão renormalizado — não é apropriado para descrever as excitações elementares destes sistemas. O tratamento teórico de tais sistemas mostra que o electrão se *fracciona* em duas novas partículas, as quais só têm existência dentro do sistema de muitos corpos. Uma dessas novas partículas transporta apenas a carga do electrão e a outra apenas o spin. Estas duas partículas representam a existência, no sistema, de dois tipos de excitação colectivas — ondas de densidade de carga e de spin — as quais se propagam com velocidades diferentes, justificando a designação de separação de carga e spin. (Sobre este assunto ver o artigo: Philip W. Anderson, *Physics Today*, Outubro, pp. 43-47, 1997.)

DBTSF-TCNQF₄^{8,38} (todos estes materiais têm $n = 1$, e HMTSF, HMTTF e TCNQF₄ significa hexametileno-tetra-selenofulvaleno, hexametileno-tetratiofulvaleno e tetra-fluoro-tetraciano-*p*-quinodimetano, respectivamente) foi encontrada evidência experimental para a existência do hiato de Mott-Hubbard.

Para densidades menores que banda meia cheia, trabalho numérico efectuado por Shiba³⁹ permitiu determinar a energia do estado fundamental bem como a susceptibilidade magnética. No limite em que $U \gg 4t$, foi também possível determinar analiticamente a energia do estado fundamental para densidades electrónicas $n \leq 1$ ⁴⁰. A termodinâmica do modelo de Hubbard foi descrita por Minorou Takahashi⁴¹, que para o efeito obteve a solução analítica completa da equações de Lieb e Wu³⁷.

O espectro e o momento das excitações de baixa energia foram determinados por Ovchinnikov⁴² para o caso de banda meia cheia e por Corneliuss Coll para um preenchimento de banda arbitrário⁴³. Ovchinnikov⁴² sublinhou, ainda, que para $U \gg 4t$ o espectro de excitações de spin é o mesmo que para a cadeia antiferromagnética de Heisenberg⁴⁴. Esta propriedade é uma manifestação da factorização da função de onda de Bethe num determinante de Slater de fermiões sem spin e na função de onda da cadeia antiferromagnética de Heisenberg³⁴, como foi mais tarde analisado em mais detalhe por Ogata e Shiba⁴⁵. No caso em que é considerada a solução geral obtida por Takahashi, a função de onda do modelo de Hubbard, no limite $U \rightarrow \infty$, possui não uma dupla mas sim uma tripla factorização, a qual foi estudada em detalhe muito recentemente⁴⁶.

Na presença de um termo de Zeeman as excitações de carga e de spin transformam-se em outras mais complexas designadas *c* e *s*, tendo o seu espectro e momento, bem como a termodinâmica de baixa temperatura e as propriedades estáticas sido calculadas analiticamente⁴⁷⁻⁴⁹ para as densidades electrónicas e de magnetização $n \leq 1$ e $m \leq n$, respectivamente. As entidades quânticas associadas a estas excitações designam-se por pseudopartículas. O estudo das excitações de carácter *topológico* num sistema finito foi realizado por Carmelo e Peres^{50,51}. Para o caso em que $U \rightarrow \infty$, o estudo deste último tipo de excitações foi feito por Dias e Lopes dos Santos⁵².

Para além dos modos de excitação de baixa energia *c* e *s*, o modelo de Hubbard unidimensional também possui excitações de carga (*c*, γ) e de spin (*s*, γ) de energia finita, as quais foram consideradas primeiramente por Woyrnarovich^{53,54}. Estas excitações de carga e de spin podem ser consideradas como estados ligados pseudo-partículas *c* e *s*. Os operadores geradores destas excitações e os respectivos espectros e momentos de excitação foram calculados por Carmelo e Peres⁵⁵.

Devido à sua forma complexa, a função de onda que resulta do Bethe ansatz não é conveniente para o cálculo de funções de correlação. Estas últimas quantidades podem ser obtidas combinando os resultados da diagonalização pelo Bethe ansatz com técnicas de teoria conforme^{56,57}. Estes cálculos requerem uma representação simples dos estados próprios do modelo. Em particular, a possibilidade de encontrar um conjunto de operadores que diagonalizem o Hamiltoniano é um passo importante nessa direcção. Um exemplo desta ideia bastante geral é a técnica da bosonização^{58,59}, onde os Hamiltonianos do tipo *g*-ology⁶⁰ podem ser diagonalizados por operadores bosónicos. As funções de correlação de baixa energia podem, então, ser calculadas expressando os operadores de campo originais assim como os estados próprios do modelos à custa dos referidos operadores bosónicos.

Um problema central no modelo de Hubbard é o cálculo da suas propriedades de transporte. Isto significa a determinação quer das correntes de carga e de spin quer das respectivas condutividades ópticas⁶¹⁻⁶⁴. As propriedades de baixa frequência foram estudadas por Schulz⁵⁹ usando bosonização e também por Carmelo *et al.* usando a representação de pseudopartículas^{65,66}. Contudo as propriedades de transporte a frequências finitas requer a introdução de uma representação operacional de todos os estados próprios do Hamiltoniano.

Usando resultados derivados para o sub-espaco de Hilbert de baixa energia^{67,68}, Carmelo e Peres⁵⁵ conseguiram escrever o Hamiltoniano, o operador momento e os geradores de todos os 4^{N_s} estados próprios do modelo de Hubbard usando operadores em segunda quantização. Estes operadores são representados por $a_{q,u,\beta}^\dagger$ e por $b_{q,u,\gamma}^\dagger$, e são designados operadores de pseudovazio e de pseudo-partícula pesada, respectivamente. Usando este conjunto de operadores os estados próprios da cadeia de Hubbard adquirem a forma de um determinante de Slater. Após diagonalizado o Hamiltoniano tem forma de uma soma infinita de termos, os quais envolvem apenas colisões de momento de troca nulo entre as pseudopartículas, independentemente da escala de energia.

Esta representação operacional permitiu a determinação das correntes de carga e de spin e das respectivas massas de transporte^{69,70}. Além disso, combinando esta representação operacional com técnicas de teoria conforme⁷¹, foi possível obter informação sobre a absorpção de luz em torno de certas frequências finitas ω_0 ⁷².

AGRADECIMENTOS

O autor agradece a João Lopes dos Santos, José Carmelo, Luís Miguel Martelo, Miguel Araújo, Pedro Sacramento e Ricardo Dias as inúmeras discussões sobre o tema. Este trabalho foi financiado por PRAXIS/2/2.1/FIS/302/94.

APÊNDICE: O MODELO DE HUBBARD

O estudo teórico das correlações electrónicas nos sólidos requer a introdução de um Hamiltoniano apropriado que, de algum modo, inclua a interacção de Coulomb entre os electrões relevantes (os que pertencem às camadas mais exteriores). Se se está interessado em estudar quer a termodinâmica quer as propriedades de transporte é necessário incluir os necessários campos externos no Hamiltoniano. A resposta a um campo eléctrico requer a introdução do potencial vector. Em primeira quantização, o Hamiltoniano pode ser escrito como

$$\hat{H} = \sum_i \left[\frac{\hbar^2}{2m} (-i\vec{\nabla}_i - \frac{e\vec{A}_i}{\hbar})^2 + V(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (1)$$

onde m é a massa do electrão, e é a carga do electrão ($e < 0$), e $V(\vec{r})$ é o potencial da rede (considerado estático), e o qual tem a simetria apropriada (os efeitos devido à desordem não são considerados). O estudo do Hamiltoniano (1) é feito mais convenientemente em segunda quantização. Para isso escrevem-se os campos electrónicos $\Psi_{\sigma,l}^{\dagger}(\vec{r})$ (σ e l são os índices de spin e de banda, respectivamente) em termos das funções de Wannier, as quais preservam a simetria da rede (em muitos cálculos práticos são usados orbitais atômicos). Estes campos estão localizados no sítio da rede \vec{R}_i e são da forma

$$\Psi_{\sigma,l}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_i \phi(\vec{r} - \vec{R}_i) e^{-i\frac{e}{\hbar c} \int_{\vec{R}_i}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{x}) \cdot d\vec{x}} c_{i,\sigma,l}^{\dagger},$$

onde $c_{i,\sigma,l}^{\dagger}$ cria um electrão de spin σ na banda l e no sítio da rede \vec{R}_i . Os operadores $c_{i,\sigma,l}^{\dagger}$ e $c_{i,\sigma,l}$ obedecem às relações de anticomutação usuais e o termo exponencial na definição do campo é necessário para manter a invariância de gauge. Como primeira aproximação podemos considerar apenas uma banda, ignorando assim toda a estrutura de bandas do sólido. Assim o índice de banda é omitido no que se segue. Na representação de Wannier o Hamiltoniano (1) é dado por

$$\hat{H} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} e^{-i\frac{e}{\hbar c} \vec{A} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + \sum_{i,j,l,m,\sigma,\sigma'} U_{i,j,l,m} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma'}^{\dagger} c_{i,\sigma'} c_{m,\sigma}, \quad (2)$$

onde o integral de transferência $t_{i,j}$ e o integral Coulomb $U_{i,j,l,m}$ são dados, respectivamente, por

$$t_{i,j} = - \int d\vec{r} \phi^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r} - \vec{R}_j), \quad (3)$$

e

$$U_{i,j,l,m} = \iint d\vec{r} d\vec{r}' \phi^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \phi^*(\vec{r}' - \vec{R}_j) \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \phi(\vec{r}' - \vec{R}_l) \phi(\vec{r} - \vec{R}_m). \quad (4)$$

O integral de transferência (3) dá a amplitude de probabilidade de um electrão saltar de uma orbital atômica centrada no sítio da rede \vec{R}_i para a orbital atômica centrada no sítio da rede \vec{R}_j . O integral de Coulomb contabiliza a interacção Coulombiana entre os electrões situados em diferentes orbitais. Hubbard estimou¹ que a contribuição mais importante para o integral de Coulomb é devida ao termo no qual os dois electrões se encontram na mesma orbital atômica, isto é $U_{i,i,i,i} \equiv U$ (a ordem de grandeza de U é de cerca de 10-20 eV, não contabilizando efeitos de blindagem). A segunda contribuição para a energia de interacção, $U_{i,j,i,j}$, vem da interacção de dois electrões localizados em dois sítios primeiros vizinhos na rede (a ordem de grandeza é de cerca de 2 a 3 eV). Se os electrões pertencem a bandas energeticamente estreitas, a contribuição mais importante para a energia cinética vem do integral de transferência entre sítios primeiros vizinhos na rede; esta é a análise usual de *tight-binding*. Em vista disto, o Hamiltoniano mais simples em que se pode pensar para descrever electrões correlacionados numa rede é o modelo de Hubbard. Este consiste em considerar apenas o integral de transferência t entre sítios primeiros vizinhos na rede e a interacção local de Coulomb U . Assim o Hamiltoniano de Hubbard escreve-se como¹⁻³

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} e^{-i\frac{e}{\hbar c} \vec{A} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}, \quad (5)$$

onde $\langle i,j \rangle$ significa que a soma em i e j está restringida apenas a sítios primeiros vizinhos, N_s é o número de sítios da rede, e $\hat{n}_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$ é o operador número no sítio da rede i para os electrões σ . Para o índice de spin, σ , temos $\sigma = \uparrow, \downarrow$ quando usado como índice apenas e $\sigma = \pm 1$ nos restantes casos. Este Hamiltoniano contém apenas dois parâmetros, t e U , e portanto a única escala de energia é U/t . Este quociente está presente em todas as grandezas físicas calculadas com o presente modelo.

Bibliografia

- 1 J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, Proc. R. Soc. London A **276**, 238 (1963).
- 2 M. C. Gutzwiller, *Effect of Correlations on the Ferromagnetism of Transition Metals*, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- 3 J. Kanamori, *Electron Correlations and Ferromagnetism of Transition Metals*, Prog. Theor. Phys. **30**, 273 (1963).
- 4 E. Lieb in *The Hubbard Model: its Physics and Mathematical Physics*, ed. D. Baeriswyl, D. K. Campbell, J. M. P. Carmelo, F. Guinea, and E. Louis, (Plenum/Ney-York, 1995).
- 5 W. Little in *Organic Conductors: fundamentals and applications*, ed. J.-P. Farges, (Marcel Dekker, New-York, 1994).
- 6 For a review see, for exemple, C. Bourbonnais in "Les Houches", *Ecole d'Eté de Physique Théorique, Highly Correlated Fermion Systems and High- T_c Superconductors*, ed. B. Douçot and R. Rammal, (Elsevier, 1991).
- 7 C. S. Jacobsen, *Trends in the Infrared and Near Infrared Properties of Organic Conductors*, J. Phys. C **19**, 5643 (1986).
- 8 C. S. Jacobsen, *Organic Conductors Studied by Infrared Spectroscopy*, (The Technical University of Denmark, København, 1986).

- ⁹ F. Mila, *Deducing Correlation Parameters from Optical Conductivity in the Bechgaard Salts*, Phys. Rev. B **52**, 4788 (1995).
- ¹⁰ R. G. Parr, D. P. Craig, and I.G. Ross, *Molecular Orbital Calculations of the Lower Excited Levels of Benzene, Configuration Interaction Included*, J. Chem. Phys. **18**, 1561 (1950).
- ¹¹ W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Soliton Excitations in Polyacetylene*, Phys. Rev. B **22**, 2099 (1980).
- ¹² S. Mazumdar and A. N. Bloch, *Systematic Trends in Short-Range Coulomb Effects among Nearly One-Dimensional Organic Conductors*, Phys. Rev. Lett. **50**, 207 (1983).
- ¹³ D. Baeriswyl in *Theoretical Aspects of Band Structures and Electronic Properties of Pseudo-one-Dimensional Solids*, ed. H. Kanimura, (Reidel, 1985).
- ¹⁴ D. K. Campbell, J. T. Gammel, and E. Y. Loh, Jr., *Modeling Electron-Electron interactions in Reduced-Dimensional Materials: Bond-Charge Coulomb Repulsion and Dimerization in Peierls-Hubbard Models*, Phys. Rev. B **42**, 475 (1990).
- ¹⁵ D. Pedron, R. Bozio, M. Meneghetti, and C. Pecile, *Electronic Interactions in the Organic Conductors (TMTSF)₂X (X = ClO₄ and PF₆) and (TMTTF)₂X (X = Br and PF₆) from their Infrared Spectra*, Phys. Rev. B **49**, 10893 (1994).
- ¹⁶ K. Penc and F. Mila, *Charge Gap in the One-Dimensional Dimerized Hubbard Model at Quarter-Filling*, Phys. Rev. B **50**, 1994.
- ¹⁷ J. Favand and F. Mila, *Theory of the Optical Conductivity of (TMTSF)₂PF₆ in the midinfrared range*, Phys. Rev. B **54**, 10425 (1996).
- ¹⁸ N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, (Saunders, New-York, 1974).
- ¹⁹ G. Grüner, *Density Waves in Solids*, (Addison-Wesley, New-York, 1994).
- ²⁰ Frederick Wooten, *Optical Properties of Solids*, (Academic Press, New York, 1972).
- ²¹ N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida, *Magnetic Susceptibility of Ideal Spin 1/2 Heisenberg Antiferromagnetic Chains Systems, Sr₂CuO₃ and SrCuO₂*, Phys. Rev. Lett. **76**, 3212 (1996).
- ²² For a review see, for example, E. Dagotto and T. M. Rice, *Surprises on the Way from One- to Two-Dimensional Quantum Magnets: The Ladder Materials*, Science **271**, 618 (1996).
- ²³ S. Maekawa, *Superconductivity in Spin Ladders*, Science **273**, 1515 (1996).
- ²⁴ D. Baeriswyl, D. K. Campbell and S. Mazumdar, *Correlations and Defect Energies*, Phys. Rev. Lett. **56**, 1509 (1986).
- ²⁵ A. Schwartz, M. Dressel, G. Grüner, V. Vescoli, L. Degiorgi, T. Giamarchi, *On-chain electrostatics of metallic (TMTSF)₂X salts: Observation of Tomonaga-Luttinger liquid response*, preprint, cond-mat/9801198.
- ²⁶ For a review see, for example, D. Jerome and H. J. Schulz, *Organic Conductors and Superconductors*, Adv. Phys. **31**, 299 (1982).
- ²⁷ L. L. Chang and L. Esaki, *Semiconductors Quantum Heterostructures*, Physics Today, 36 (October, 1992).
- ²⁸ D. S. Schemla, *Optics of Nanostructures*, Physics Today, 22 (June, 1993).
- ²⁹ A. Rubio, *Nanocomposite tubules: a new class of materials from theory*, preprint (1997).
- ³⁰ F. J. Salvo, Jr. and T. M. Rice *Charge-Density Waves in transition-Metal Compounds*, Physics Today, 32 (April, 1979).
- ³¹ E. M. Conwell, *The Differences Between One-Dimensional and Three-Dimensional Semiconductors*, Physics Today, 46 (June, 1985).
- ³² P. M. Chaikin and R. L. Greene, *Superconductivity and Magnetism in Organic Metals*, Physics Today, 24 (May, 1986).
- ³³ E. Abrahams and G. Kotliar, *The Metal-Insulator Transition in Correlated Disordered Systems*, Science **274**, 1853 (1996).
- ³⁴ H. A. Bethe, *Theorie der Metalle. Erster Teil. Eigenwerte und Eigenfunktionen der Linearen Atomischen Kette*, Z. Phys. **71**, 205 (1931).
- ³⁵ C. Kim, A. Y. Matsuura, Z.-X. Shen, N. Motoyama, H. Eisaki, S. U. Uchida, T. Tohyama, and Maekawa, *Observation of Spin-Charge Separation in One-Dimensional SrCuO₂*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4054 (1996).
- ³⁶ C. N. Yang, *Some Exact Results for the Many-Body Problem in One Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction*, Phys. Rev. Lett. **19**, 1312 (1967).
- ³⁷ Elliott H. Lieb and F. Y. Wu, *Absence of Mott Transition in an Exact Solution of a the Short-Range, One-Band Model in One Dimension*, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- ³⁸ J. B. Torrance, J. J. Mayerle, K. Bechgaard, B. D. Silverman, and Y. Tomkiewicz, *Comparison of two Isostructural Organic Compounds, one Metallic and the other insulating*, Phys. Rev. B **22**, 4960 (1980).
- ³⁹ H. Shiba, *Magnetic Susceptibility at Zero Temperature for the one-Dimensional Hubbard Model*, Phys. Rev. B **6**, 930 (1972).
- ⁴⁰ J. Carmelo and D. Baeriswyl, *Solution of the one-Dimensional Hubbard Model for arbitrary electron density and large U*, Phys. Rev. B **37**, 7541 (1988).
- ⁴¹ M. Takahashi, *One-Dimensional Hubbard Model at Finite Temperature*, Prog. Theor. Phys. **47**, 69 (1972).
- ⁴² A. A. Ovchinnikov, *Excitation Spectrum in the One-Dimensional Hubbard Model*, Sov. Phys. JETP **30**, 1160 (1970).
- ⁴³ C. F. Coll, *Excitation Spectrum of the One-Dimensional Hubbard Model*, Phys. Rev. B **9**, 2150 (1974).
- ⁴⁴ L. D. Faddeev and L. A. Takhtajan, *What is the Spin of Spin-Wave?*, Phys. Lett. **85A**, 375 (1981).
- ⁴⁵ M. Ogata and H. Shiba, *Bethe-ansatz Wave Function Momentum Distribution, and Spin Correlation in the One-Dimensional Strongly Correlated Hubbard Model*, Phys. Rev. B **41**, 2326 (1990).
- ⁴⁶ R. G. Dias and J. M. Lopes dos Santos, *Triple factorization of the eigenstates of the U/t → ∞ Hubbard chain*, preprint (1998).
- ⁴⁷ J. Carmelo and A. A. Ovchinnikov, *Generalization of the Landau Liquid Concept: Example of the Luttinger Liquids*, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 757 (1991).
- ⁴⁸ J. Carmelo, P. Horsch, P.-A. Bares, and A. A. Ovchinnikov, *Renormalized Pseudoparticle Description of the One-Dimensional Hubbard-Model Thermodynamics*, Phys. Rev. B **44**, 9967 (1991).
- ⁴⁹ J. M. P. Carmelo, P. Horsch, and A. A. Ovchinnikov, *Static Properties of One-Dimensional Generalized Landau Liquids*, Phys. Rev. B **45**, 7899 (1992).
- ⁵⁰ J. M. P. Carmelo and N. M. R. Peres, *Ground States of Integrable Quantum Liquids*, Phys. Rev. B **51**, 7481 (1995).
- ⁵¹ J. M. P. Carmelo and N. M. R. Peres, *Topological Ground-States Excitations and Symmetry in the Many-Electron One-Dimensional Problem*, Nucl. Phys. B **458**, 579 (1996).
- ⁵² R.G. Dias and J.M.B. Lopes dos Santos, *Simple Representation of the Eigenstates of the U → ∞ One Dimensional Hubbard Model*, J. Phys. I **2**, 1889 (1992).
- ⁵³ F. Woynarovich, *Excitations with Complex Wavenumbers in a Hubbard Chain: I. States With one Pair of Complex Wavenumbers*, J. Phys. C **15**, 85 (1982).
- ⁵⁴ F. Woynarovich, *Excitations with Complex Wavenumbers in a Hubbard Chain: II. States With Several Pairs of Complex Wavenumbers*, J. Phys. C **15**, 97 (1982).

- 55 J. M. P. Carmelo and N. M. R. Peres, *Complete Pseudohole and Heavy-Pseudoparticle Operator Representation for the Hubbard Chain*, Phys. Rev. B **56**, 3717 (1997).
- 56 H. Frahm and V. E. Korepin, *Correlation Functions of the One-Dimensional Hubbard Model in a Magnetic Field*, Phys. Rev. B **42**, 10553 (1990).
- 57 H. Frahm and V. E. Korepin, *Critical Exponents for the One-Dimensional Hubbard Model*, Phys. Rev. B **43**, 5653 (1991).
- 58 F. D. M. Haldane, "Luttinger Liquid Theory" of one-Dimensional Quantum Fluids: I. Properties of the Luttinger model and their Extension to the General 1D Interacting Spinless Fermi Gas, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
- 59 For a review see, for example, H. J. Schulz, *Fermi Liquids and non-Fermi Liquids*, in Les Houches, Session LXI, 1994, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard, and J. Zinn-Justin (Elsevier, 1995), and references there in.
- 60 J. Sólyom, *The Fermi Gas Model of one-Dimensional Conductors*, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- 61 Pierre F. Maldague, *Optical Spectrum of a Hubbard Chain* Phys. Rev. B **16**, 2437 (1977).
- 62 E. Y. Loh and D. K. Campbell, *Optical Absorption in Extended Peierls-Hubbard Models*, Synth. Metals **27**, A499 (1988).
- 63 R. M. Fye, M. J. Martins, D. J. Scalapino, J. Wagner, and W. Hanke, *Drude Weight, Optical Conductivity, and Flux Properties of one-Dimensional Hubbard Rings*, Phys. Rev. B **44**, 6909 (1991).
- 64 P. Horsch and W. Stephan, *Frequency-dependent Conductivity of the one-Dimensional Hubbard Model at Strong Coupling*, Phys. Rev. B **48**, 10595 (1993).
- 65 J. M. P. Carmelo and P. Horsch, *Two-Particle Spectral Properties of Generalized Landau Liquids*, Phys. Rev. Lett. **68**, 871 (1992).
- 66 J. M. P. Carmelo, P. Horsch, and A. A. Ovchinnikov, *Two-Particle Fluctuations in One-Dimensional Generalized Landau Liquids*, Phys. Rev. B **46**, 14728 (1992).
- 67 J. M. P. Carmelo, A. H. Castro Neto, and D. K. Campbell, *Conservation Laws and Bosonization in Integrable Luttinger Liquids*, Phys. Rev. Lett. **73**, 926 (1994); *ibidem* **74** (E), 3089 (1995).
- 68 J. M. P. Carmelo, A. H. Castro Neto, and D. K. Campbell, *Perturbation Theory of Low-Dimensional Quantum Liquids. I. The Pseudoparticle-Operator Basis*, Phys. Rev. B **50**, 3667 (1994); *ibidem*, *Perturbation Theory of Low-Dimensional Quantum Liquids. II. Operator Description of the Virasoro Algebras in Integrable Systems*, 3683 (1994).
- 69 N. M. R. Peres, J. M. P. Carmelo, D. K. Campbell, and A. W. Sandvik, *Pseudoparticle Description of the 1D Hubbard Model Electronic Transport Properties*, Z. Phys. B **103**, 217 (1997).
- 70 N. M. R. Peres, P. D. Sacramento, and J. M. P. Carmelo, *Charge and Spin Currents of the 1D Hubbard Model at Finite Energy Scales*, submitted for publication in Phys. Rev. B (1998).
- 71 J. M. P. Carmelo, *Conformal Field Theories and Finite-Energy Correlation Functions for (1+1) Dimensional Electronic Quantum Liquids*, preprint (1997).
- 72 J. M. P. Carmelo, N. M. R. Peres, P. D. Sacramento, *Frequency-dependent conductivity in low-dimensional electronic systems*, preprint (1998).

Nuno M. R. Peres é Professor Auxiliar do Departamento de Física da Universidade de Évora. Investiga em Física Teórica, em particular sistemas electrónicos unidimensionais.

EPS-11: Trends in Physics 6 - 10 September 1999 London

The 11th General Conference of the European Physical Society will be held at Church House Conference Centre in the heart of London, under the local organization of the Institute of Physics.

The Conference will cover a broad range of topics addressing many of the exciting developments which will comprise the Physics of the 21st century.

Plenary and "highlight" talks given by internationally recognized experts will set the scene and specialist symposia will provide more in-depth consideration of specific topics.

* Scientific Themes (plenary/highlight talks)

- Basic Physics and Education
- Physics, the Environment and the EU
- "Young Physicists – it's all yours"
- Medical Physics and Physics in Industry
- General

* Parallel Symposia

- Coherent Matter Waves and cold Collisions
- Computation in Condensed Matter • Education - EUPEN • Imaging • Magnetic Multilayers • MHD in Toroidal Systems • Nuclei Far from Stability • Physics in Industry
- Physics of High Intensity Light Pulses • Synchrotron Radiation.

Inscrições: até 20 Junho 1999

Informações: Conferences Department, The Institute of Physics, 76 Portland Place, London W1N 3DH, U.K.