

Cálculo de propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard usando teoria de perturbação

Calculation of thermodynamic properties of the Hubbard model using perturbation theory

T. X. R. Souza & C. A. Macedo

¹Departamento de física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão-Se, Brasil

t.x.r.souza@gmail.com

cmacedo@ufs.br

Sistemas magnéticos de elétrons fortemente correlacionados estão presentes em muitos materiais tecnologicamente relevantes. Modelos desses sistemas têm sido estudados de inúmeras diferentes abordagens teóricas. A teoria de perturbação vem sendo utilizada com sucesso na investigação de propriedades termodinâmicas de modelos desses sistemas em redes unidimensionais. Neste trabalho, estendemos a abordagem de teoria de perturbação de Beni e Pincus, aplicada originalmente para redes unidimensionais, para redes de diferentes geometrias. Determinamos o calor específico e a susceptibilidade magnética do modelo de Hubbard para as redes quadrada, tipo *ladder* (escada) e unidimensional dimerizada. Nossos resultados, nos limites de validade dos parâmetros utilizados para realizar a abordagem perturbativa, são coerentes com os disponíveis na literatura, obtidos por outras técnicas. Além disso, mostramos que a nossa abordagem de teoria de perturbação é viável de ser aplicada a diversos outros tipos de rede, inclusive tridimensionais. Concluímos que na forma apresentada nesse trabalho, a teoria de perturbação torna-se uma importante ferramenta de investigação de propriedades termodinâmicas de modelos de sistemas magnéticos de elétrons fortemente correlacionados.

Palavras-chave: Modelo de Hubbard; teoria da perturbação; propriedades termodinâmicas

Magnetic systems of strongly correlated electrons are present in many technologically relevant materials. Models of these systems have been studied using many theoretical approaches. The perturbation theory has been used successfully in one-dimensional systems. In this paper, we extend the perturbation theory developed by Beni and Pincus, originally applied to one-dimensional lattices, for lattices with different geometries. We calculate the specific heat and the magnetic susceptibility of the Hubbard model for the square, ladder and one-dimensional dimerized lattices. Our results, within the limits of validity of the parameters used to perform the perturbative approach, are consistent with those available in the literature, obtained by other techniques. Furthermore, we show that our approach to perturbation theory is feasible to be applied to various other types of lattice, including three-dimensional. We conclude that in the form given in this work, the perturbation theory becomes an important tool for investigating the thermodynamic properties of magnetic systems of strongly correlated electrons.

Keywords: Hubbard model; perturbation theory; thermodynamic properties

1. INTRODUÇÃO

O modelo de Hubbard [1], proposto por Hubbard, Gutzwiller [2] e Kanamori [3] em artigos independentes, inicialmente foi utilizado na descrição dos efeitos de correlação dos elétrons da banda $3d$ nos metais de transição. Em sua versão mais simples, o modelo é caracterizado por dois parâmetros, o primeiro, t_{ij} , caracteriza a itinerância ou *hopping* dos elétrons entre os sítios atômicos e o outro, U , descreve a repulsão coulombiana entre elétrons no mesmo sítio.

Uma quantidade considerável de trabalho foi feita na tentativa de desenvolver soluções para o modelo de Hubbard. Devido a sua complexidade, as soluções exatas são raras e praticamente restritas ao caso unidimensional [4-8]. Entretanto, muitos métodos de aproximação foram desenvolvidos para obter informações de sistemas simplificados tais como a aproximação de Gutzwiller [9], a teoria de perturbação [10,11], a técnica de Monte Carlo [12-14] e a diagonalização numérica exata [15].

É esperado que o modelo de Hubbard seja capaz de descrever as principais características de materiais que apresentam magnetismo itinerante e transição metal-isolante (transição de Mott). Com a descoberta dos supercondutores de altas temperaturas cresceu o interesse no estudo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados, tornando o modelo de Hubbard um interessante método de estudo para esses sistemas. A existência de sistemas unidimensionais reais que apresentam transição de Mott [16] e de polímeros com cadeias unidimensionais que apresentam propriedades magnéticas [17-20] motivou o desenvolvimento de um método que simulasse não apenas uma rede unidimensional, mas também redes quase-unidimensionais do tipo *ladder* [17-20], como também outros tipos de redes poliméricas [20].

Neste trabalho, foram estudadas estruturas criadas com diferentes geometrias, considerando que o *hopping* de elétrons entre sítios primeiros vizinhos pode ser tratado como uma perturbação [10]. As estruturas estudadas foram as rede tipo *ladder*, rede quadrada e rede unidimensional dimerizada. O estudo dos *ladders* é interessante, pois, como já foi dito, existem polímeros com esse tipo de estrutura cujas propriedades podem vir a ser explicadas pelo modelo de Hubbard. No caso de redes quadrada já existe um vasto estudo na literatura [22], o que serve de material de comparação entre as técnicas utilizadas.

2. METODOLOGIA

O modelo de Hubbard foi simplificado neste trabalho transformando o termo de hopping em uma perturbação como foi feito na referência [10].

Assim, o hamiltoniano de Hubbard foi escrito na forma

$$H = H_0 + H' . \quad (1)$$

Sendo H_0 o hamiltoniano não perturbado,

$$H_0 = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} , \quad (2)$$

e H' a perturbação,

$$H' = - \sum_{i,j} t \left(c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\uparrow} + c_{j,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow} \right) . \quad (3)$$

Em (2) e (3) a soma é feita sobre todos os sítios da rede, $n_{i\sigma}$ é o operador número de elétrons σ no sítio i , $c_{i,\sigma}^\dagger$ ($c_{i,\sigma}$) é o operador de criação (destruição) de elétrons σ no sítio i . Foi assumido que o *hopping* ocorre apenas entre sítios primeiros vizinhos com intensidade t .

Pode-se mostrar que a expansão da função de grande partição de um sistema caracterizado por uma perturbação H' pode ser escrita como [10,19,21]

$$Z = e^{-\beta\Omega_0} \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\tau d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \langle H'(\tau_1) H'(\tau_2) \dots H'(\tau_n) \rangle_0 \right) , \quad (4)$$

Em que Ω_0 é o potencial termodinâmico do sistema não-perturbado.

Neste trabalho, simplificamos (4), tomando até o termo quadrático $(\beta t)^2$. Sendo assim, nossa aproximação só é válida no limite $\beta t \ll 1$. Com isso, a função de grande partição pode ser escrita como:

$$Z = e^{-\beta\Omega_0} \left(1 + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\tau d\tau_2 \langle H'(\tau_1) H'(\tau_2) \rangle_0 \right) .$$

Definindo $Z = Z_0 + \delta Z = Z_0 \left(1 + \frac{\delta Z}{Z_0} \right)$ e resolvendo a integral da equação (4) chegamos a

$$\frac{\delta Z}{Z_0} = \sum_{\substack{i,f \\ \tilde{E}_i^0 \neq \tilde{E}_f^0}} \left\{ \frac{\beta}{\tilde{E}_i^0 - \tilde{E}_f^0} \langle f | H' | i \rangle \right\}^2 \frac{e^{-\beta\tilde{E}_f^0}}{Z_0} + \sum_{\substack{i,f \\ \tilde{E}_i^0 = \tilde{E}_f^0}} \left\{ \frac{\beta^2}{2} \langle f | H' | i \rangle \right\}^2 \frac{e^{-\beta\tilde{E}_f^0}}{Z_0} . \quad (5)$$

Fazendo então

$$A_{i,f} = \begin{cases} \frac{\beta^2}{2} & , \text{ se } \tilde{E}_i^0 = \tilde{E}_f^0 \\ \frac{\beta}{\tilde{E}_i^0 - \tilde{E}_f^0} & , \text{ se } \tilde{E}_i^0 \neq \tilde{E}_f^0 \end{cases} \quad (6)$$

Obtemos

$$\frac{\delta Z}{Z_0} = \sum_{i,f} \left\{ A_{i,f} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \frac{e^{-\beta \tilde{E}_f^0}}{Z_0} \right\} \quad (7)$$

Note que o termo $\langle f | H' | i \rangle$ é dependente do estado de todos os sítios do sistema o que torna inviável a sua solução. Tendo isso em conta, esse termo foi simplificado de forma que $H' = H'_1 + H'_2 + \dots + H'_N = \sum_i H'_i$, em que H'_i depende do tipo de geometria do sistema que se quer estudar. Deve-se levar em conta que o H'_i afete apenas os sítios que formam uma unidade de repetição de uma estrutura periódica como mostra a figura 1 (rede tipo ladder).

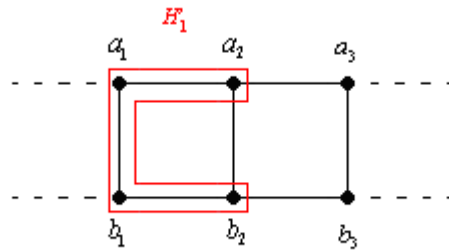


Figura 1: Fragmento de uma rede tipo ladder.

No caso citado acima H'_i seria

$$H'_i = -\sum_{i,\sigma} t (a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+1,\sigma} + a_{i+1,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger b_{i+1,\sigma} + b_{i+1,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + a_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}), \quad (8)$$

em que $a_{i,\sigma}^\dagger$ e $b_{i,\sigma}^\dagger$ ($a_{i,\sigma}$ e $b_{i,\sigma}$) são operadores de criação (destruição) de elétrons σ no sítio a_i ou b_i .

Fazendo uma análise da rede citada acima H'_i alteraria apenas o estado de 4 sítios da rede (a_i, b_i, a_{i+1} e b_{i+1}). Abaixo segue um esquema que mostra quais estados são alterados por H'_i

$$H'_i |f\rangle = H'_i \underbrace{|a_i\rangle |b_1\rangle |a_2\rangle |b_2\rangle \dots |a_i\rangle |b_i\rangle |a_{i+1}\rangle |b_{i+1}\rangle}_{\text{Estados não alterados}} \underbrace{\dots |a_i\rangle |b_i\rangle |a_{i+1}\rangle |b_{i+1}\rangle}_{\text{Estados alterados}} \underbrace{\dots |a_{N'-1}\rangle |b_{N'-1}\rangle |a_{N'}\rangle |b_{N'}\rangle}_{\text{Estados não alterados}}, \quad (9)$$

em que $|f\rangle$ é a função de onda que do sistema em certo estado, $|a_i\rangle$ e $|b_i\rangle$ representam os estados dos sítios a_i e b_i respectivamente e N' é o numero de pares a_i, b_i do sistema, no caso $N' = N/2$, sendo N o numero de sítios do sistema.

Após aplicarmos o bra $\langle f|$, teremos os autovalores de H'_i aplicado no i-ésimo e i-ésimo + 1 pares de sítios ($|a_i\rangle |b_i\rangle |a_{i+1}\rangle |b_{i+1}\rangle$). Porém cada sítio pode ter até 4 possíveis estados $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$, assim devemos levar em conta todas as combinações de estados possíveis ($4 \times 4 \times 4 \times 4 = 64$ combinações). Com isso cada H'_i seguinte terá a mesma coleção de autovalores, pois possui os mesmos possíveis estados assim terá as mesmas combinações de estados, e assim sucessivamente.

Escolhendo uma possível configuração para os sítios $|a_i\rangle$, $|b_i\rangle$, $|a_{i+1}\rangle$ e $|b_{i+1}\rangle$, e resolvendo apenas os termos com H'_i da expressão de $\frac{\delta Z}{Z_0}$, temos que

$A_{i,f} |\langle f | H'_i | i \rangle|^2 e^{-\beta \tilde{E}_i^0} e^{-\beta \tilde{E}_{i+1}^0}$ será constante.

Então se variássemos em todos os estados de um sítio j teríamos:

$$\sum_f A_{i,f} |\langle f | H'_i | 1 \rangle \langle 2 \rangle \dots | i \rangle | i+1 \rangle \dots | N \rangle|^2 \frac{e^{-\beta(\tilde{E}_1^0 + \dots + \tilde{E}_{j-1}^0 + \tilde{E}_{j+1}^0 + \dots + \tilde{E}_N^0)}}{Z_0} \sum_p e^{-\beta \tilde{E}_{j,p}^0}. \quad (10)$$

Como $z_0 = \sum_p e^{-\beta \tilde{E}_{j,p}^0}$ e $Z_0 = z_0^N$, então:

$$\sum_f A_{i,f} |\langle f | H'_i | 1 \rangle \langle 2 \rangle \dots | i \rangle | i+1 \rangle \dots | N \rangle|^2 \frac{e^{-\beta(\tilde{E}_1^0 + \dots + \tilde{E}_{j-1}^0 + \tilde{E}_{j+1}^0 + \dots + \tilde{E}_N^0)}}{z_0^{N-1}}. \quad (11)$$

Agora, variando todos os estados dos sítios que não sejam o i e o $i+1$ teremos:

$$\sum_{\substack{f, f+1 \\ i, i+1}} A_{i,f} |\langle f+1 | \langle f | H'_i | i \rangle | i+1 \rangle|^2 \frac{e^{-\beta(\tilde{E}_i^0 + \tilde{E}_{i+1}^0)}}{z_0^2}. \quad (12)$$

Repetindo esse processo para os outros H'_i , encontraremos os mesmos valores. Com isso:

$$\frac{\delta Z}{Z_0} = \frac{N_s}{N_c} \sum_{\substack{i, f \\ \tilde{E}_i^0 \neq \tilde{E}_f^0}} \left\{ \frac{\beta}{\tilde{E}_i^0 - \tilde{E}_f^0} |\langle f | H'_i | i \rangle|^2 \frac{e^{-\beta \tilde{E}_f^0}}{z_0^K} \right\} + \frac{N_s}{N_c} \sum_{\substack{i, f \\ \tilde{E}_i^0 = \tilde{E}_f^0}} \left\{ \frac{\beta^2}{2} |\langle f | H'_i | i \rangle|^2 \frac{e^{-\beta \tilde{E}_f^0}}{z_0^K} \right\}. \quad (13)$$

N_s é o número de sítios do sistema, N_c é o número de sítios que formam um *cluster* e K é o número de sítios afetados por um H'_i , e, agora, $|i\rangle$ e $\langle f|$ são dependentes apenas de K sítios, como mostra a figura 2.

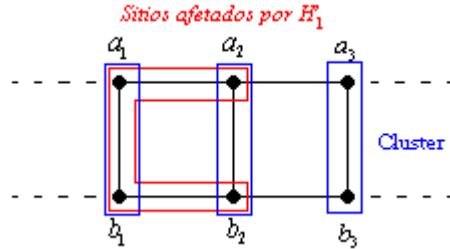


Figura 2: Sítios afetados por H'_i .

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Cadeia de Dímeros

Bernstein e Pincus [11] modelaram um conjunto de dímeros ligados por uma perturbação. Esses dímeros foram ligados na forma de uma linha unidimensional. Foi criado um sistema, a partir de sítios considerando o *hopping* intradímero t (linha tracejada azul) e o *hopping* interdímeros t' (linha tracejada vermelha) como perturbação (figura 3).

Assim sendo a principal diferença entre os métodos será a quantidade de estados possíveis em cada sistema. Os dímeros têm 16 possíveis estados e um sítio tem apenas 4.

O hamiltoniano não-perturbado é dado por

$$H_0 = U \sum_{i,\sigma} (n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}). \quad (14)$$

A perturbação nesse caso é dada por

$$H' = -t \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}) - t' \sum_{i,\sigma} (a_{i+1,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger a_{i+1,\sigma}). \quad (15)$$

No que se segue tomamos $t' = t/2$.



Figura 3: Linha tracejada azul caracteriza o hopping intradímero e a linha tracejada vermelha o hopping interdímero.

Determinamos o calor específico (gráficos 1 a 3) e a susceptibilidade magnética (gráficos 4 a 6) considerando um sistema meio-cheio, isto é, um sistema em que o número de elétrons é igual ao número de sítios. Nesses cálculos utilizamos a nossa abordagem e as expressões determinadas na referência [11] para obtenção do calor específico da susceptibilidade a partir da equação (13). Denominamos nossa abordagem de *perturbação por sítios*. Também apresentamos os resultados utilizando a técnica de Bernstein e Pincus, aqui identificada como *perturbação por dímeros*.

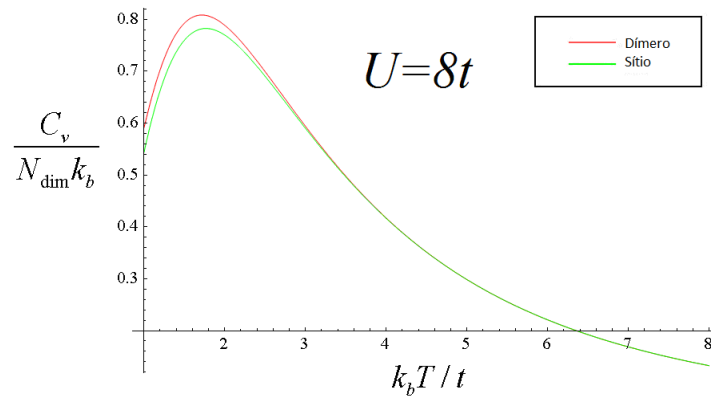


Gráfico 1: Calor específico de uma cadeia de dimeros, com $t' = t/2$ e $U = 8t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

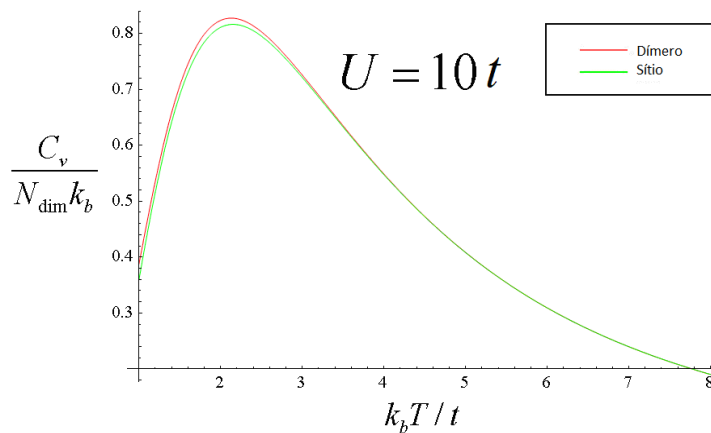


Gráfico 2: Calor específico de uma cadeia de dimeros, com $t' = t/2$ e $U = 10t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

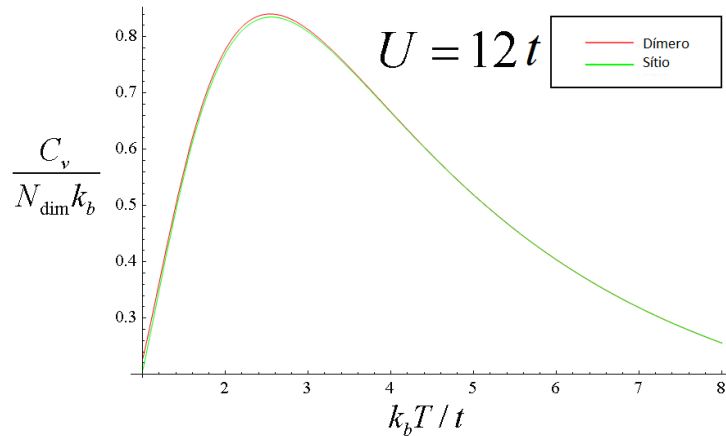


Grafico 3: Calor específico de uma cadeia de dímeros, com $t' = t/2$ e $U = 12t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

Os resultados obtidos mostram que para valores de temperatura pequenos, ainda existe uma diferença entre as duas técnicas. Isso já era esperado visto que na teoria de perturbação de dímeros o termo de energia U e o hopping t entram no cálculo de obtenção de 16 auto-estados e somente o termo t' é perturbativo enquanto que na perturbação por sítios apenas o termo U entra no cálculo de obtenção de 4 auto-estados enquanto que os termos t e t' são perturbações no sistema. Apesar dessa pequena diferença a necessidade de cálculos diminui muito, tornando a teoria de perturbação por sítios uma técnica boa para esse tipo de sistema.

Os resultados para a susceptibilidade magnética mostraram um resultado ainda melhor. Praticamente não se nota diferença entre as duas técnicas.

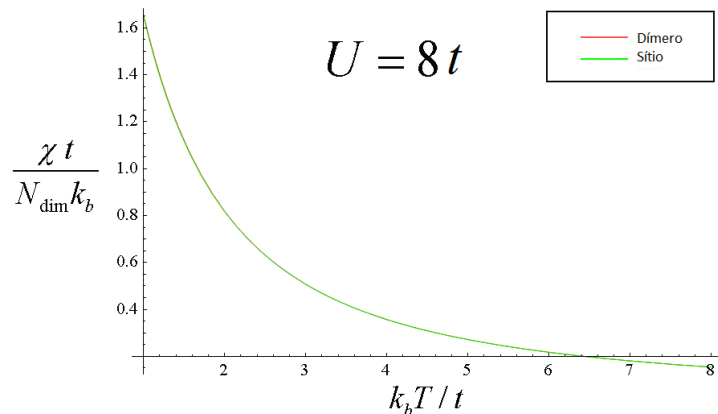


Grafico 4: Susceptibilidade magnética de uma cadeia de dímeros, com $t' = t/2$ e $U = 8t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

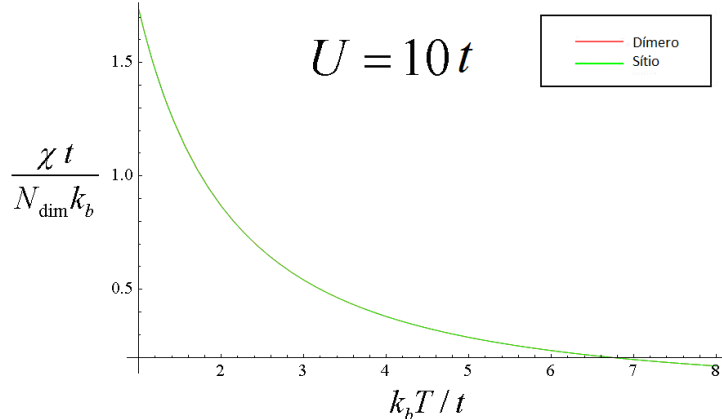


Grafico 5: Susceptibilidade magnética de uma cadeia de dímeros, com $t' = t/2$ e $U = 10t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

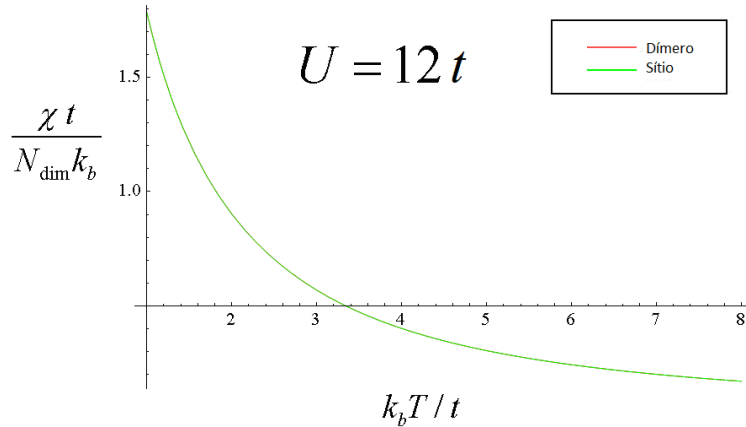


Gráfico 6: Susceptibilidade magnética de uma cadeia de dímeros, com $t' = t/2$ e $U = 12t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

3.2 Rede Tipo Ladder

Foi utilizado por A. Ricardo [19] a teoria de perturbação usada por U. Bernstein e P. Pincus [11] para criar uma estrutura tipo *ladder*. Similarmente ao sistema anterior, na nossa técnica, o hamiltoniano não perturbado é dado pela equação (14) e a perturbação é dividida em dois termos, o *hopping* intradímero t (linha tracejada azul) e o *hopping* interdímeros t' (linha tracejada vermelha). A figura 4 mostra uma ilustração esquemática da ação da perturbação. Também nesse caso usamos $t' = t/2$.

$$H' = -t \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}) - t' \sum_{i,\sigma} (a_{i+1,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} + a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+1,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger b_{i+1,\sigma} + b_{i+1,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma}). \quad (16)$$

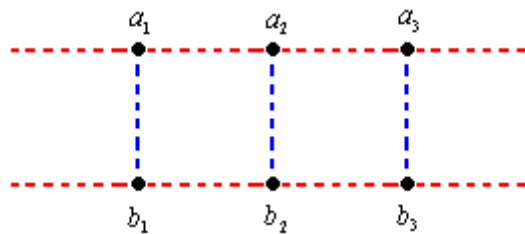


Figura 4: Ilustração esquemática do efeito das diferentes intensidades de hopping t (linha tracejada azul) e t' (linha tracejada vermelha).

Calculamos o calor específico (gráficos 7-9) e a susceptibilidade magnética (gráficos 10-12) da rede tipo *ladder* para vários valores de U , considerando o sistema como meio-cheio e utilizando ambas as técnicas: perturbação por dímeros e perturbação por sítios.

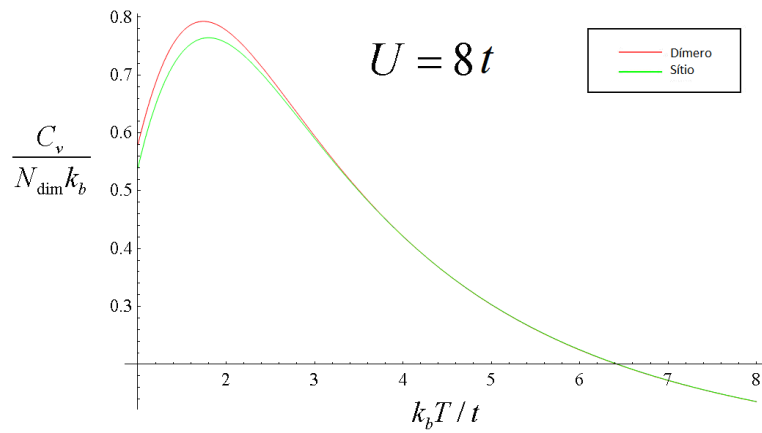


Grafico 7: Calor específico de uma rede tipo ladder, com $t' = t/2$ e $U = 8t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

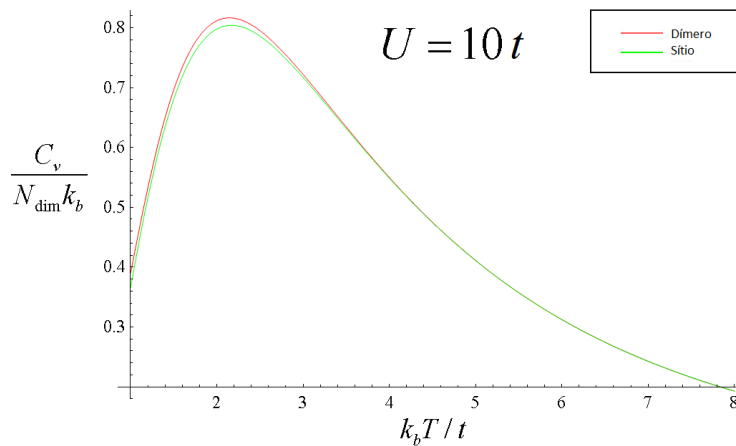


Grafico 8: Calor específico de uma rede tipo ladder, com $t' = t/2$ e $U = 10t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

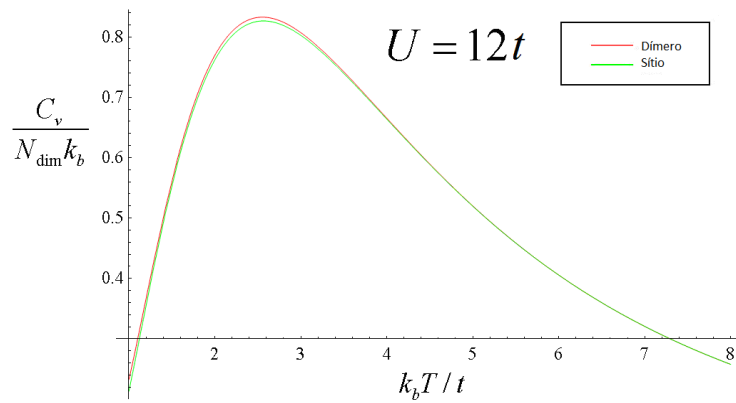


Grafico 9: Calor específico de uma rede tipo ladder, com $t' = t/2$ e $U = 12t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

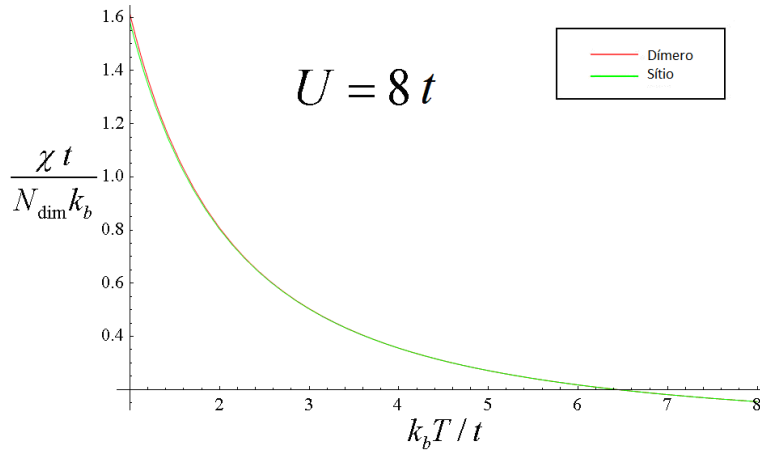


Grafico 10: Susceptibilidade magnética de uma rede tipo ladder, com $t' = t/2$ e $U = 8t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

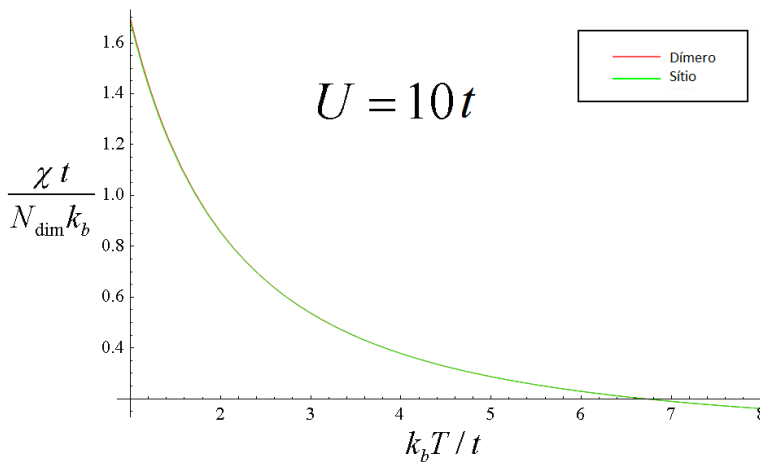


Grafico 11: Susceptibilidade magnética de uma rede tipo ladder, com $t' = t/2$ e $U = 10t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

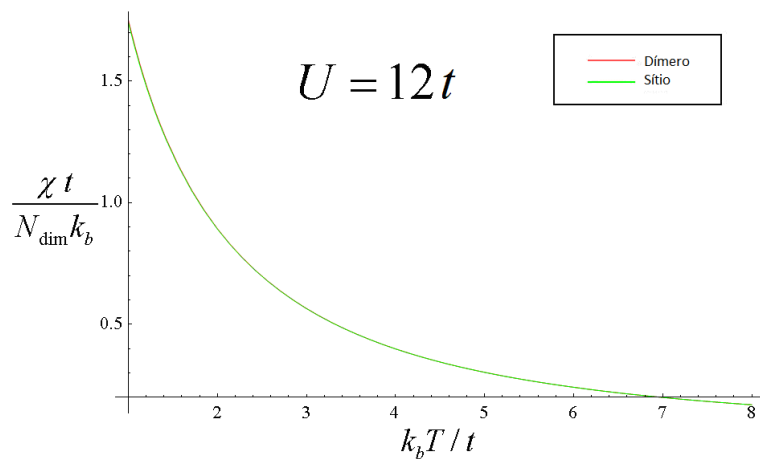


Grafico 12: Susceptibilidade magnética de uma rede tipo ladder, com $t' = t/2$ e $U = 12t$. A linha vermelha identifica a perturbação por dímeros e a linha verde denota a perturbação por sítios.

Os resultados mostram-se similares ao caso anterior, os gráficos indicam que para valores de temperatura pequenos, ainda existe uma diferença entre as duas técnicas, essa diferença diminui quanto maior for o valor de U .

3.3 Rede Quadrada

Foi estudado, por Dyffy e Moreo [22], um *cluster* de rede quadrada (6X6) através do método Monte Carlo. Esse trabalho nos motivou a calcular as propriedades termodinâmicas de uma rede quadrada a partir de teoria de perturbação.

A parte não-perturbada do hamiltoniano é dada pela equação (14) e a perturbação é expressa por

$$H' = -t \sum_{i,j,\sigma} (a_{i+1,j,\sigma}^\dagger a_{i,j,\sigma} + a_{i,j,\sigma}^\dagger a_{i+1,j,\sigma}) - t \sum_{i,j,\sigma} (a_{i,j+1,\sigma}^\dagger a_{i,j,\sigma} + a_{i,j,\sigma}^\dagger a_{i,j+1,\sigma}). \quad (17)$$

Os dois termos de H' representam o *hopping* em cada uma das direções da rede como mostra a figura 5.



Figura 5: Ilustração esquemática da perturbação na rede quadrada. As linhas tracejadas de ambas as cores representam intensidades de hopping iguais a t .

Calculamos o calor específico para uma rede quadrada no caso meio-cheio, usando a teoria de perturbação por sítios e comparamos com os resultados obtidos por Dyffy e Moreo. Os resultados para $U = 8t$, $U = 10t$ e $U = 12t$ (gráficos 13, 14 e 15) foram:

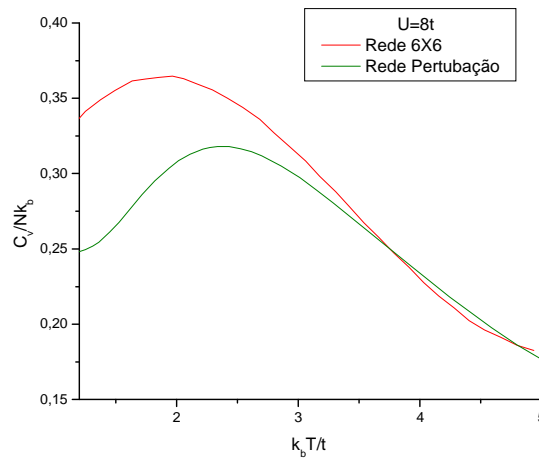


Gráfico 13: Calor específico de uma rede quadrada, com $U = 8t$. A linha vermelha identifica o resultado de Dyffy e Moreo para um cluster de 6×6 e a linha verde denota o obtido com a perturbação por sítios.

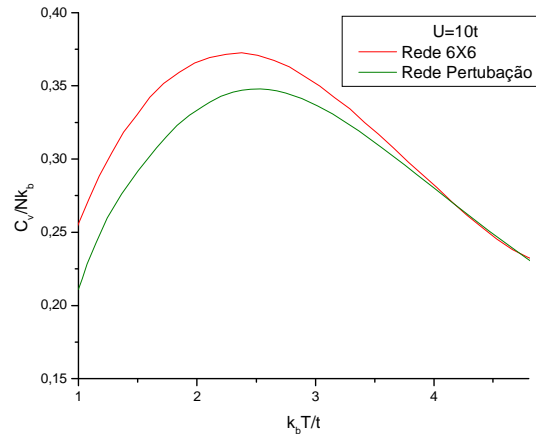


Grafico 14: Calor específico de uma rede quadrada, com $U = 10t$. A linha vermelha identifica o resultado de Dyffy e Moreo para um cluster de 6×6 e a linha verde denota o obtido com a perturbação por sítios.

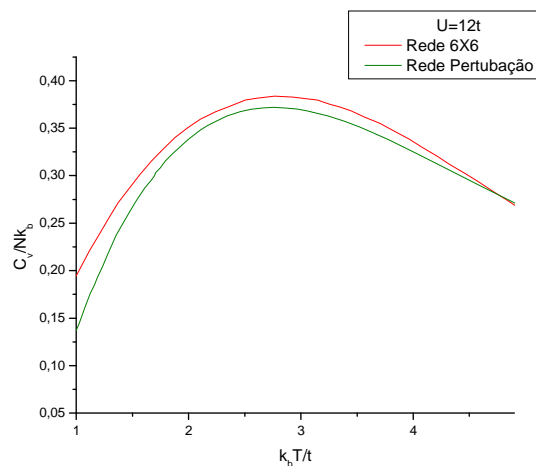


Grafico 15: Calor específico de uma rede quadrada, com $U = 12t$. A linha vermelha identifica o resultado de Dyffy e Moreo para um cluster de 6×6 e a linha verde denota o obtido com a perturbação por sítios.

Apesar da divergência entre os resultados devemos notar que no caso das figuras 13, 14 e 15 temos uma comparação entre resultados para uma rede quadrada infinita e um *cluster* de rede quadrada (6X6). É importante observar que com o aumento do U os resultados tornam-se cada vez mais próximos.

4. CONCLUSÃO

Neste trabalho, foram estudadas algumas propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard aplicado a estruturas de diferentes geometrias utilizando a teoria de perturbação. Essas estruturas foram simuladas considerando que o *hopping* de elétrons entre sítios primeiros vizinhos pode ser tratado como uma perturbação. Foram estudadas as redes tipo ladder, quadrada e unidimensional dimerizada.

A técnica utilizada é uma extensão para redes de diferentes geometrias da teoria de perturbação de Beni e Pincus [10]. Nossos resultados são coerentes com os disponíveis na literatura, obtidos por outras técnicas. Além disso, ficou evidenciado que a nossa abordagem de teoria de perturbação é viável de ser aplicada a diversos outros tipos de rede, inclusive tridimensionais. Concluimos que na forma apresentada nesse trabalho, a referida abordagem torna-se uma importante ferramenta de investigação de sistemas magnéticos de elétrons

fortemente correlacionados, competitiva com outras abordagens, como, por exemplo, o método do campo médio. Além disso, acreditamos que essa técnica pode ser aplicada em sistemas poliméricos quase-unidimensionais, visto que, nesses materiais, os elétrons têm pequena itinerância o que justifica uma abordagem perturbativa para o *hopping*.

-
1. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A* 1963 276, 238-257. Electron Correlations in Narrow Energy Bands.
 2. M.C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* 10, 159 (1963). Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals.
 3. KANAMORI, J. *Prog. Theor. Phys.* V.30, n.3, pp.275-205, 1963. Electron correlation and ferromagnetism of the transition metals.
 4. E.H. Lieb and F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* 20, 1445 (1968). Absence to Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range One-Band Model in One Dimension.
 5. B.S Shastry, *Phys. Rev. Lett.* 56, 2453 (1986). Exact Integrability of the One-Dimensional Hubbard Model.
 6. A.A Ovchinnikov, *Sov. Phy. JETP* 30, 1160 (1970). Excitation Spectrum in the One-Dimensional Hubbard Model.
 7. H. Shiba, *Phys. Rev.* B6, 930 (1972). Magnetic Susceptibility at Zero Temperature for the One-Dimensional Hubbard Model.
 8. M. Takahashi, *Prog. Theor. Phys.* 52, 103 (1974). Low-Temperature Specific-Heat of One-Dimension Hubbard Model.
 9. M.C. Gutzwiller, *Phys. Rev.* 137, 1726 (1965). Correlation of Electrons in Narrow s Band.
 10. G. Beni, P. Pincus and Daniel Hone, *Phys. Rev.* B8, 3389 (1973). High-Temperature Thermodynamics of the Strongly Correlated Hubbard Model at Arbitrary Electron Density.
 11. U. Bernstein and P. Pincus, *Phys. Rev.* B10, 3626 (1974). Thermodynamics proprieties of the dimerized half-filled-band Hubbard chain.
 12. J.E. Hirsch, *Phys. Rev.* B31, 4403 (1985). Two-Dimensional Hubbard Model: numerical Simulation Study.
 13. S.R Write, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, E.Y. Loh, J.E. Gubernatis, and R.T. Scalettar, *Phys. Rev.* B40, 506 (1989). Numerical Study of the Two-Dimensional Hubbard Model.
 14. H. Yokoyama and H. Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn.* 56, 3582 (1987). Variational Monte-Carlo Studies of Hubbard Model. II
 15. Hiroyuki Shiba, *Prog. Theo. Phys.* Vol 48. No 6B. 2121 (1972). Thermodynamic Properties of the One Dimensional Half-Filled-Band Hubbard Model. II.
 16. Masatsune Kato, Kazunori Shiota and Yoji Koike, *Physica C: Superconductivity*, V 258, Issues 3-4, 285 (1996). Metal-insulator transition and spin gap in the spin-1/2 ladder system $\text{Sr}_{14-x}\text{A}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (A = Ba and Ca).
 17. Dagotto, Elbio; Rice, T. M. *Science*, V 271, Issue 5249, pp. 618-623. Surprises on the Way from One- to Two-Dimensional Quantum Magnets: The Ladder Materials
 18. D. C. Johnston, J. W. Johnson, D. P. Goshorn, and A. J. Jacobson. *Phys. Rev.* B 35, 219–222 (1987). Magnetic susceptibility of $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$: A one-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with a ladder spin configuration and a singlet ground state.
 19. Carvalho, André R. A. *Propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard em redes tipo escada*. Monografia de graduação em física bacharelado (2009)
 20. A. M. S. Macêdo, M. C. dos Santos, M. D. Coutinho-Filho, and C. A. Macedo. *Phys. Rev. Lett.* 74, 1851–1854 (1995). Magnetism and Phase Separation in Polymeric Hubbard Chains.
 21. Carvalho, André R. A. *Propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard em redes tipo escada*. Monografia de graduação em física bacharelado (2009).
 22. Duffy, D. Moreo, A. *Phys. Rev.* B 55, 12928 (1997). Specific heat of the two-dimensional Hubbard model.