

Lourival Manoel da Silva Filho

**Método RPA Renormalizado para o Modelo de
Hubbard Estendido**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós Graduação em Física do
Departamento de Física da PUC-Rio como parte dos requisitos
parciais para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Carlos Maurício Chaves

Rio de Janeiro
Setembro de 2003



Lourival Manoel da Silva Filho

**Método RPA Renormalizado para o Modelo de
Hubbard Estendido**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutorado pelo programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Carlos Maurício Giesbrecht Ferreira Chaves

Orientador

Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. Enrique Victoriano Anda

Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. Maria Augusta Martins Davidovich

Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Instituto de Física – UFRJ

Prof. Marcos Sergio Figueira da Silva

Instituto de Física – UFF

Prof. Ney Augusto Dumont

Coordenador Setorial de Pós-Graduação

Centro Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 2 de setembro 2003

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Lourival Manoel da Silva Filho

Graduou-se em Física na Universidade Federal da Bahia em 1985. Courseou o Mestrado na área de Teoria de Campo Super Clássico – Física com conclusão em 1996. É professor de Física na Universidade Estadual da Bahia.

Ficha Catalográfica

da Silva Filho, Lourival Manoel

Método RPA Renormalizado para o modelo de Hubbard estendido / Lourival Manoel da Silva Filho; orientador: Carlos Maurício G.F. Chaves. – Rio de Janeiro: PUC, Departamento de Física, 2003 .

80 f.:il. ; 30 cm

1. Tese (Doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.

Inclui referências bibliográficas.

1. Física - Teses. 2. RPA. 3. RPA renormalizado. 4. Modelo de Hubbard estendido I. Chaves, Carlos Maurício. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física. III. Título.

CDD: 530

Aos meus pais
Lourival Manoel da Silva *in memoriam*
Odilta Pereira da Silva

Agradecimentos

- Ao Prof. Carlos Maurício Chaves pela orientação deste trabalho.
- Aos professores Enrique Anda e Maria Augusta Davidovich pelo apoio técnico e proveitosas discussões.
- Aos professores Hortencio Borges, Paulo Costa Ribeiro e Welles A.M. Morgado pelos ricos “papos” nos corredores do Departamento de Física.
- Aos colegas Jaime F. Vento Flores, Edson Vernek, Andre da Cunha Lima, Luiz A. Peche, Marcel Apel pelo incentivo.
- Ao corpo técnico e administrativo: Majo, Giza, Nelia, Julio e especialmente a Marcia pelo apoio.
- Ao Departamento de Física da PUC-Rio que me recebera.
- À CAPES e a UNEB pelo Apoio financeiro.

Resumo

da Silva Filho, Lourival Manoel; Chaves, Carlos Maurício G.F. **Método RPA Renormalizado para o modelo de Hubbard estendido.** Rio de Janeiro, 80p. Tese de Doutorado – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Neste trabalho aplicamos o método RPA renormalizada ao modelo de Hubbard estendido para a cadeia unidimensional com preenchimento meio. Inicialmente verificamos a influencia do termo de interação entre primeiros vizinhos, V , nas susceptibilidades de carga e longitudinal de spin e comparamos com os resultados de Hubbard puro. Para pequenas interações entre os primeiros vizinhos, a influência de V é muito pequena. À medida que V cresce, seu efeito é de diminuir a frequência dos plasmons e dificultar o aparecimento de magnons. Em seguida determinamos as susceptibilidades de spin e de carga, numericamente, para $U = 3,4$ e 5 com V entre 0 e próximo de U . Partindo da fase de onda de densidade de spin (SDW) e quando V cresce, o pico de plasmon na susceptibilidade de cargas em $2k_F$ se aproxima de $\omega = 0$, indicando uma instabilidade para formação de uma onda de densidade de carga (CDW). Isto permite determinar a fronteira de separação entre as duas fases. De acordo com a RPA convencional, esta transição ocorre em $U = 2V$ mas o processo de renormalização desloca esta fronteira ligeiramente para o interior da região da fase CDW, em conformidade com outros métodos que não fazem a aproximação de campo médio.

Palavras-chave

RPA, RPA renormalizado; Modelo de Hubbard Estendido

Abstract

da Silva Filho, Lourival Manoel; Chaves, Carlos Maurício G.F. (Advisor).
Renormalized RPA Method for the Extended Hubbard Model.
Rio de Janeiro, 80p. Doctoral Thesis – Departamento de Física, Pontifícia
Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In this work we apply the Random Phase Approximation (RPA) to the Extended Hubbard Model in one dimension. Initially we investigate the effect of the first neighbor interaction term, V , on the spin and charge susceptibilities. When V is small, its influence is also very small but as it grows, it tends to lower the plasmon frequency and to inhibit the condition for the existence of magnons. We also have calculated numerically both the spin and the charge susceptibilities for $U = 3, 4$ and 5 with V in the region $(0, U)$. Starting from the SDW region and increasing V we found that the plasmon peak in the charge susceptibility for $2k_F$ tends to $\omega = 0$, indicating an instability against the formation of a CDW ground state. This allows us to determine the phase separation line between the two phases. According to the conventional RPA, this transition occurs for $U = 2V$ but due to the renormalization process, we find that this frontier shifts slightly to the interior of the CDW region, in agreement with methods not using the mean field approximation.

Keywords

RPA; Renormalized RPA ; Extended Hubbard Model

Sumário

1	Introdução	13
2	Método da Equação de Dyson para Funções de Green de Muitos Corpos	15
2.1	Introdução	15
2.2	Approach da equação de Dyson para funções de Green de muitos corpos ⁴	15
2.3	RPA auto-consistente	17
2.4	Aplicação ao modelo de Hubbard	18
2.5	RPA renormalizada	22
2.6	Regra de soma	26
3	Resultados e Discussão da RPA Renormalizada na Cadeia de Hubbard 1D	28
3.1	Introdução	28
3.2	O método numérico	28
3.3	Resultados ⁴	29
3.3.1	Número de ocupação	29
3.3.2	A susceptibilidade livre renormalizada $\chi^0(q, \omega)$	30
	Parte imaginária de $\chi^0(q, \omega)$	30
	Parte real de $\chi^0(q, \omega)$	32
3.3.3	A susceptibilidade de carga $\chi^{ch}(q, \omega)$	34
3.3.4	A susceptibilidade de spin $\chi^{sp}(q, \omega)$	35
3.3.5	Regra de soma	37
3.3.6	O limite de acoplamentos fortes	39
4	Aplicação ao Modelo de Hubbard Estendido	43
4.1	Introdução	43
4.2	A hamiltoniana de Hubbard estendida	44
4.3	RPA renormalizada	47
5	Resultados para o Modelo de Hubbard Estendido	49
5.1	Introdução	49
5.2	Resultados ²⁰	49
5.2.1	Influência de V em $q = k_F$	50
	Parte Imaginária de χ^0	50
	Parte real de χ^0	51

Susceptibilidade de carga $\chi^{ch}(q, w)$	52
Susceptibilidade longitudinal de spin $\chi^{sp}(q, w)$	53
5.2.2 O Diagrama de Fase	55
A susceptibilidade livre χ^0	56
A susceptibilidade de carga $\chi^{ch}(q, w)$	61
A susceptibilidade de spin $\chi^{sp}(q, w)$	64
6 Conclusões	67
Referências	69
A Teorema Espectral	71
B Cálculo da susceptibilidade livre, $\chi^0(q, \omega)$	73
C Teorema de Hellmann-Feynman	77

Lista de Figuras

- 3.1 Função distribuição dos momentos para a cadeia de Hubbard semi-cheia usando o nosso método, para diversos valores de U . A figura mostra também o resultado obtido com o método Monte Carlo quântico de Sorella *et al*¹⁰ para $U = 4$. Para $U = 5$ ou maiores, a curva coincide com a obtida no limite grandes U da RPA renormalizada (ver seção 3.3.6). 29
- 3.2 Negativo da parte imaginária das susceptibilidades livre renormalizada e convencional, $-Im\chi^0(q = \frac{\pi}{2}, \omega)$, para a cadeia de Hubbard semi-cheia e $U = 3$. 31
- 3.3 Negativo da parte imaginária das susceptibilidades livre renormalizada e convencional, $-Im\chi^0(q = \frac{\pi}{2}, \omega)$, para a cadeia de Hubbard semi-cheia e $U = 6$. 32
- 3.4 Parte real das susceptibilidades livre e renormalizada $\chi^0(q = \pi/2, \omega)$ para a cadeia de Hubbard semi-cheia a $U = 3$. Note que a susceptibilidade renormalizada não intercepta a linha $-1/U$ 33
- 3.5 Relação de dispersão dos magnons e plasmons para a cadeia de Hubbard semi cheia, $U = 3$, RPA pura e renormalizada. A região entre as linhas corresponde ao contínuo partícula-buraco. 34
- 3.6 Negativo da parte imaginária de $\chi^{ch}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para cadeia de Hubbard semi-cheia a $U = 3$. A linha vertical indica o pico de plasmon. 35
- 3.7 Negativo da parte imaginária de $\chi^{ch}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para preenchimento meio e $U = 6$. A linha vertical indica o pico de plasmon. 36
- 3.8 Negativo da parte imaginária de $\chi^{sp}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard semi-cheia com $U = 3$. A linha vertical indica o pico de magnon na aproximação RPA pura. 36
- 3.9 Negativo da parte imaginária de $\chi^{sp}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard semi-cheia a $U = 6$. 37
- 3.10 Regra de soma para a susceptibilidade de carga na RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard meio cheia com $U = 3$. A linha de referência que denota S_1^{ch} , que é o lado esquerdo da equação (3.5a), coincide com a integral no lado direito. Ambas as aproximações satisfazem a regra de soma. 38
- 3.11 Regra de soma para a susceptibilidade longitudinal de spin nas

- aproximações RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard meio cheia com $U = 3$. A linha de referência corresponde a $S_1^{sp}(q)$, que é o lado esquerdo da eq.(3.5b) mostrada para a RPA pura. A referência renormalizada coincide com a integral no lado direito. A RPA pura viola a regra de soma perto de $2k_F = \pi$. 39
- 3.12 Energia de estado fundamental por sítio para cadeia de Hubbard semi-cheia versus U nas várias aproximações indicadas. 42
- 3.13 Fração de sítios duplamente ocupados para cadeia de Hubbard semi-cheia versus U nas diversas aproximações indicadas. 42
- 5.1 Negativo da parte imaginária da susceptibilidade livre renormalizada, $-Im\chi^0(k_F, w)$, para $U = 3$ e diversos valores de V , para banda semi-cheia. 50
- 5.2 Parte real da susceptibilidade livre renormalizada, $Re\chi^0(k_F, w)$, para $U = 3$ e diversos valores de V , para banda semi-cheia. $F = 2V\cos k_F = 0$. 51
- 5.3 Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de carga, $-Im\chi^{ch}(k_F, w)$ para $U = 3$ e $V = 0$ e 1 . A reta vertical indica o valor de w em que ocorre o pico de plasmon, que é praticamente o mesmo para $V = 0$ e $V = 1$. 52
- 5.4 Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de carga, $-Im\chi^{ch}(k_F, w)$ para $U = 3$ e $V = 2$ e 3 . As retas verticais indicam o valor de w em que ocorre o pico de plasmon para cada V . 53
- 5.5 Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de spin, $-Im\chi^{sp}(k_F, w)$, para $U = 3$ e $V = 0$ e 1 . 54
- 5.6 Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de spin, $-Im\chi^{sp}(k_F, w)$, para $U = 3$ e $V = 2$ e 3 . 54
- 5.7 $Re\chi^0$ em $q = 2k_F$ em $U = 4$ para $V = 0$ e 1 . As retas $-1/U$ e $1/(U + 4F)$ são também mostradas, mas para $V = 1$, $U + 4F = 0$. 57
- 5.8 $Re\chi^0$ em $q = 2k_F$ e $U = 4$ para $V = 2$. As retas $-1/U$ e $1/(U + 4F)$ agora coincidem mas não interceptam $Re\chi^0$. 58
- 5.9 $Re\chi^0$ em $q = 2k_F$ e $U = 4$ para $V = 2, 19$. As retas $-1/U$ e $1/(U + 4F)$ são também mostradas. Note a interseção em $w = 0$, o que assinala o aparecimento de uma ordem CDW. 58
- 5.10 $Re\chi^0$ em $q = 2k_F$ e $U = 4$ para $V = 2, 25$. As retas $-1/U$ e $1/(U + 4F)$ são também mostradas. 59
- 5.11 $Re\chi^0$ em $q = 2k_F$ e $U = 3$ para $V = 1, 64$. As retas $-1/U$ e $1/(U + 4F)$ são também mostradas. 59

5.12 $Re\chi^0$ em $q = 2k_F$ em $U = 5$ para $V = 2,74$. As retas $-1/U$ e $1/(U + 4F)$ são também mostradas.	60
5.13 $-Im\chi^0$ renormalizada em função de w em $q = 2k_F$, $U = 4$ para $V = 0$ e 1.	60
5.14 $-Im\chi^0$ renormalizada em função de w em $q = 2k_F$, $U = 4$ para $V = 2$, 2,19 e 2,25.	61
5.15 $-Im\chi^{ch}$ renormalizada em função de w em $q = 2k_F$, $U = 4$ para $V = 0$ e 1. As retas verticais indicam os respectivos picos de plasmons.	62
5.16 $-Im\chi^{ch}$ renormalizada em função de w em $q = 2k_F$, $U = 4$ para $V = 2$, 2,19 e 2,25.	62
5.17 $-Im\chi^{ch}$ renormalizada em função de w em $q = 2k_F$, $U = 3$ para $V = 1,5$, 1,64 e 2.	63
5.18 $-Im\chi^{ch}$ renormalizada em função de w em $q = 2k_F$, $U = 5$ para $V = 2,5$, 2,74 e 3.	63
5.19 $-Im\chi^{sp}$ em $q = 2k_F$, $U = 4$ e $V = 0$ e 1.	64
5.20 $-Im\chi^{sp}$ em $q = 2k_F$, $U = 4$ e $V = 2$; 2,19 e 2,25.	65
5.21 $-Im\chi^{sp}$ em $q = 2k_F$, $U = 3$ e $V = 1,5$; 1,64 e 2.	65
5.22 $-Im\chi^{sp}$ em $q = 2k_F$, $U = 5$ e $V = 2,5$; 2,74 e 3.	66
5.23 Diagrama de fase obtido na aproximação RPA renormalizada para o hamiltoniano de Hubbard estendido, para banda semi-cheia. A equação da reta é $U \approx 1,82V$	66