

3

Resultados e Discussão da RPA Renormalizada na Cadeia de Hubbard 1D

3.1 Introdução

Determinaremos auto-consistentemente a função de Green (FG), Eq.(2.19), na aproximação RPA renormalizada junto com o número de ocupação $n_{k\sigma}$. A FG e a susceptibilidade, $\mathcal{G}_{k\sigma}^0(q, \omega)$ e $\chi^0(q, \omega)$, respectivamente, do sistema não interagente, são formalmente idênticas àsquelas do RPA puro. Entretanto, devido à auto-consistência, elas ficam modificadas, uma vez que os números de ocupação são renormalizados.

3.2 O método numérico

Para se determinar a FG na aproximação RPA renormalizada, as equações (2.50), (2.53) e (2.54) devem ser resolvidas auto-consistentemente com o número de ocupação, Eq.(2.48). Inicia-se o processo considerando para o número de ocupação a distribuição de Fermi a $T = 0K$ e realiza-se o seguinte ciclo de iteração:

- i) determina-se a FG , $\mathcal{G}_{k\sigma}^0(q, \omega)$, Eq.(2.50), a partir do número de ocupação inicial;
- ii) calcula-se a susceptibilidade livre , $\chi^0(q, \omega)$, Eq.(2.53), integrando $\mathcal{G}_{k\sigma}^0(q, \omega)$ sobre os momentos k ;
- iii) a FG na aproximação RPA renormalizada, $\mathcal{G}_{k\sigma, p\sigma}^{RPA}(q, \omega)$, Eq. (2.54), é determinada então, a partir da $\mathcal{G}_{k\sigma}^0(q, \omega)$ e $\chi^0(q, \omega)$;
- iv) obtém-se um novo conjunto de números de ocupação pelo teorema espectral (Eq.(2.48));
- v) retorna-se ao início do ciclo até que a auto-consistência seja alcançada.

Começando com uma pequena interação, , por exemplo $U = 1$, as equações RPA são iteradas até a auto-consistência. Os $n(k)$ obtidos são

usados para iniciar um novo ciclo com uma interação ligeiramente maior. Deste modo, aumentando-se a interação de pequenas quantidades e iterando cada vez para a auto-consistência, o valor desejado para U é alcançado. Com este procedimento a resposta do spin permanece estável ao longo de todo cálculo, como apresentaremos mais adiante, o que não acontece com o RPA convencional.

A integração sobre os momentos é realizada pela soma sobre uma “grid” de 256 pontos, distribuídos uniformemente, na primeira zona de Brillouin.

A integração sobre a energia é realizada pela soma sobre uma “grid” de 2048 pontos satisfazendo uma distribuição de Lorentz com o máximo em $\omega = 0$, cuja meia-largura à metade da altura máxima fica em torno do dobro da largura de banda, ou seja, 8.

Para o processo computacional, introduz-se uma pequena e finita parte imaginária σ^+ no denominador da FG livre renormalizada, $\mathcal{G}_{k\sigma}^0(q, \omega)$, cujo valor típico é da ordem de $1/16$, que corresponde a $1/64$ da largura de banda.

3.3 Resultados⁴

3.3.1 Número de ocupação

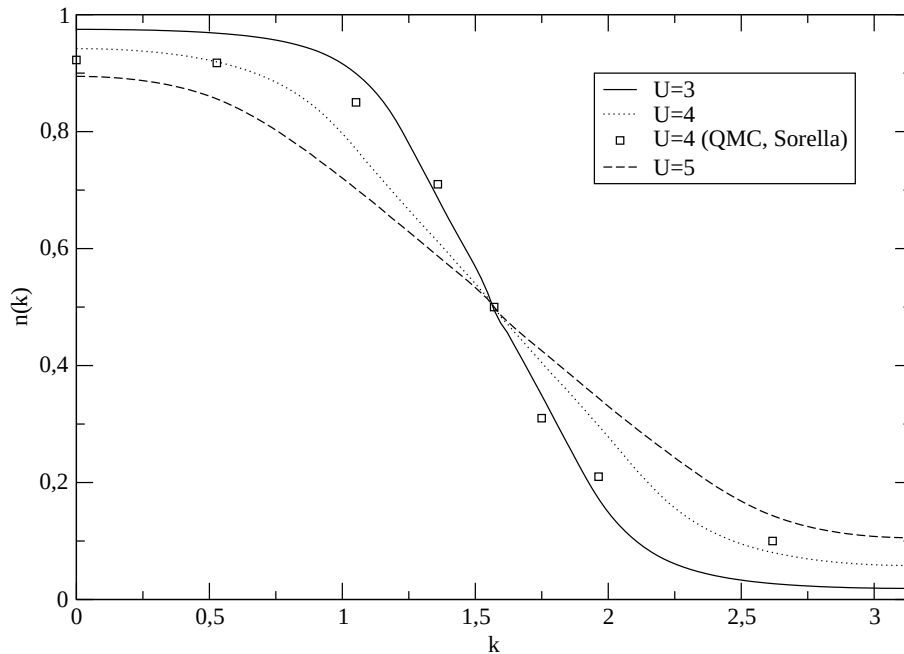


Figura 3.1: Função distribuição dos momentos para a cadeia de Hubbard semi-cheia usando o nosso método, para diversos valores de U . A figura mostra também o resultado obtido com o método Monte Carlo quântico de Sorella *et al*¹⁰ para $U = 4$. Para $U = 5$ ou maiores, a curva coincide com a obtida no limite grandes U da RPA renormalizada (ver seção 3.3.6).

O método encontra artificialmente uma transição metal isolante para interações $U \sim 3$, porém para $U \geq 3$ - que são os casos mostrados na fig. 3.1- a descontinuidade desaparece e se obtém um comportamento isolante (ou semiconductor). No limite grandes U , isto é, interações maiores que a largura de banda, que nesta teoria corresponde a $W = 4$, a distribuição tem um comportamento aproximado de uma cossenoide, $n_k \sim \cos k$ (ver 3.3.6).

Na fig. 3.1 , a função distribuição dos momentos é dada por

$$n_k = \frac{1}{2}(n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow}). \quad (3.1)$$

Esta figura mostra também o resultado obtido pelo método Monte Carlo (MCQ) para $U = 4$. Se pode observar que o nosso se compara bastante bem com o de MCQ.

Sabemos da solução exata^{5,6} que em uma dimensão, um estado fundamental isolante é previsto para qualquer interação finita, $U \neq 0$, para banda semi-cheia. (Um estado fundamental metálico é previsto para os demais preenchimentos. Nestes últimos , o sistema se comporta como um líquido de Luttinger.)

O método RPA renormalizado não foi especialmente desenvolvido para sistemas 1D. Estes sistemas são mais tratáveis pois exigem um esforço computacional menor. Entretanto, como as flutuações quânticas são muito importantes em 1D, o método - que é uma forma de campo médio, ainda que melhorada - apresenta ai limitações . Estas limitações são mais decisivas no que se refere a transições de fase, inexistentes em 1D mas que tratamentos tipo campo médio encontram. Quando transições de fase não estão envolvidas, o método apresenta resultados bastante satisfatórios como para interações $U \geq 3$ para a banda semi-cheia.

3.3.2 A susceptibilidade livre renormalizada $\chi^0(q, \omega)$

Parte imaginária de $\chi^0(q, \omega)$

Convencionalmente se pode calcular $\chi^0(q, \omega)$, dada por (2.53), analiticamente quando os $n_{k\sigma}$ são dados pela distribuição de Fermi-Dirac a $T = 0$ (esta será chamada de susceptibilidade livre). Isto é feito no apêndice B. A parte imaginária desta susceptibilidade livre $\chi^0(q, \omega)$ só é diferente de zero quando ω estiver limitada entre os contornos da região de excitação partícula-buraco

$$|\omega| \leq \left| 4 \sin \frac{q}{2} \right|, \quad (3.2)$$

porque a função delta exige que $\omega = \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k$. Também, para que a diferença $(n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})$ não seja nula, uma segunda condição se aplica:

$$\begin{aligned}
 |\omega| &\geq 2|\cos(k_F) - \cos(k_F - |q|)| \\
 &\equiv 4\left|\sin\left(\frac{|q|}{2}\right)\sin\left(k_F - \frac{|q|}{2}\right)\right|,
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

onde $k_F = \frac{\pi}{2}n$, sendo n o número médio de elétrons por sítio.

Note que o denominador da FG livre, Eq.(2.50), não muda ao longo do processo de renormalização e portanto a (3.2) também se aplica para a parte imaginária da susceptibilidade livre renormalizada. Por outro lado, a segunda condição (3.3) é afetada pois os $n_{k\sigma}$ mudam a cada ciclo da iteração.

A fig. 3.2 mostra o negativo da parte imaginária de $\chi^0(q, \omega)$ versus ω para a cadeia de Hubbard semi-cheia para $U = 3$ e $q = \pi/2$. Por esta figura se verifica que a parte imaginária da susceptibilidade livre, da RPA convencional, solução analítica, é diferente de zero somente na região entre os contornos dados pelas condições (3.2) e (3.3).

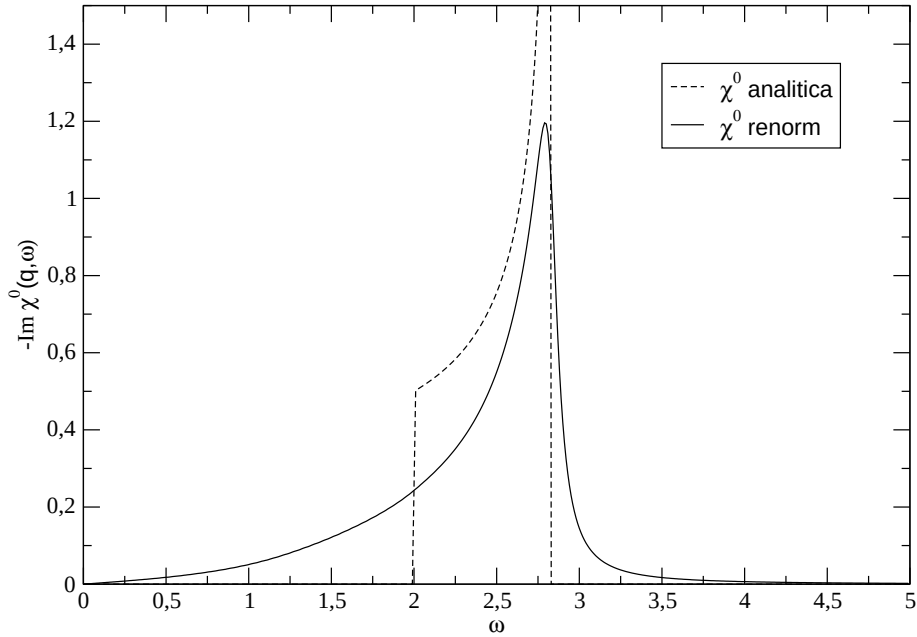


Figura 3.2: Negativo da parte imaginária das susceptibilidades livre renormalizada e convencional, $-Im\chi^0(q = \frac{\pi}{2}, \omega)$, para a cadeia de Hubbard semi-cheia e $U = 3$.

Da Fig.3.2 se observa que a parte imaginária da susceptibilidade livre renormalizada no limite superior das excitações partícula-buraco, $\omega \approx 2,8$ da Eq.(3.2) apresenta o mesmo comportamento da $Im\chi^0(q, \omega)$ livre, enquanto no limite inferior, Eq.(3.3), uma sensível diferença é observada devida à renormalização da distribuição dos momentos $n_{k\sigma}$.

Na fig. 3.3, para uma interação $U = 6$ e preenchimento meio, nota-se que os resultados para $Im\chi^0$ obtidas pela RPA pura e pela renormalizada, sobretudo no limite inferior da região de excitação, apresentam uma

sensível diferença. Aqui já nos encontramos no limite de grandes U , forte acoplamento, $U > 3$, o que torna a renormalização dos $n_{k\sigma}$ mais significativa.

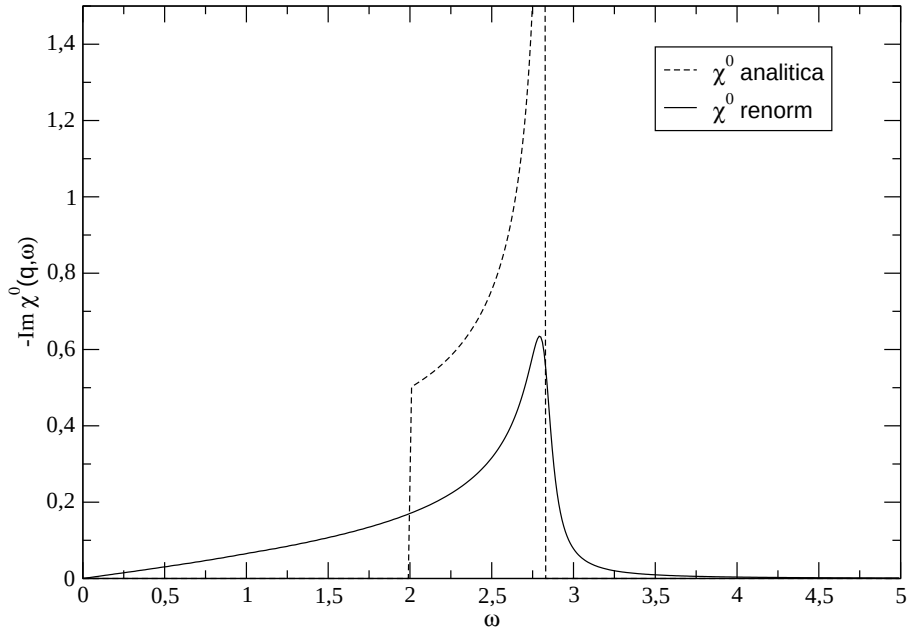


Figura 3.3: Negativo da parte imaginária das susceptibilidades livre renormalizada e convencional, $-Im\chi^0(q = \frac{\pi}{2}, \omega)$, para a cadeia de Hubbard semi-cheia e $U = 6$.

Parte real de $\chi^0(q, \omega)$

Da expressão analítica para a parte real da susceptibilidade livre, $Re \chi^0(q, \omega)$ (vide apêndice B) segue que ela diverge nos dois contornos que demarcam o contínuo partícula-buraco: singularidades tipo função delta na parte imaginária correspondem a pólos na parte real da susceptibilidade. Esta divergência acarreta necessariamente a anulação, em algum ponto, do denominador $1 - U\chi^0$ da susceptibilidade de carga (2.57), indicando o aparecimento de um plasmon com a frequência e o vetor de onda correspondentes.

A fig. 3.4 mostra a divergência de $Re \chi^0(q, \omega)$ livre no contorno superior, Eq.(3.2), dando origem à interseção com a linha horizontal $+1/U$, correspondendo a um plasmon com $q = \frac{\pi}{2}$ e $\omega \cong 3,3$. A susceptibilidade renormalizada também intercepta esta linha. Como as interseções estão fora do contínuo partícula-buraco o plasmon não é amortecido em ambas aproximações. Da figura se vê também que quanto maior a interação U , maior será a energia deste plasmon.

Para a resposta longitudinal de spin (2.58), a anulação do seu

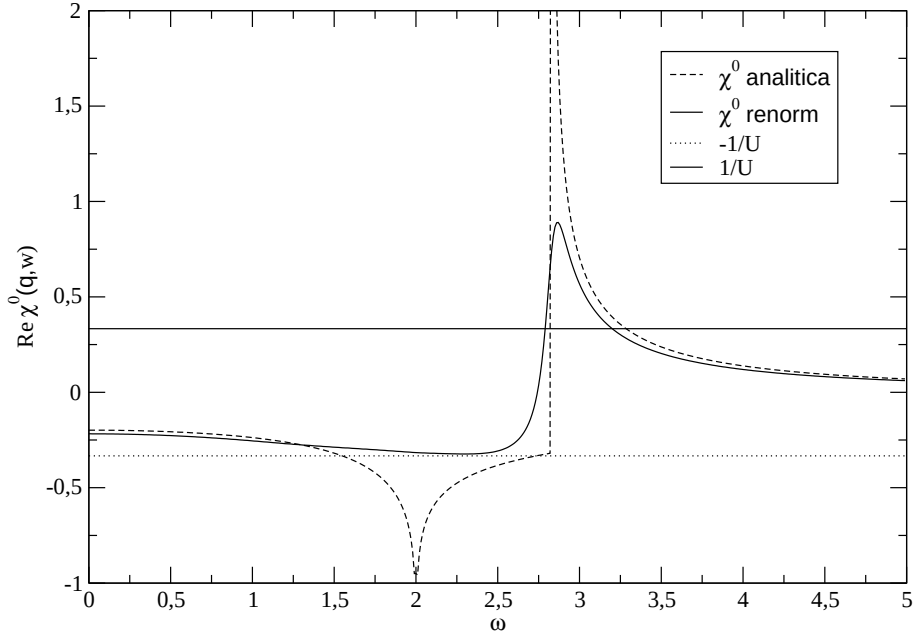


Figura 3.4: Parte real das susceptibilidades livre e renormalizada $\chi^0(q = \pi/2, \omega)$ para a cadeia de Hubbard semi-cheia a $U = 3$. Note que a susceptibilidade renormalizada não intercepta a linha $-1/U$.

denominador, $1 + U\chi^0(q, \omega)$, indica a existência de um magnon. Se sua energia estiver fora da região do contínuo partícula-buraco, ele é estável, isto é, não-amortecido. Aqui, a linha horizontal, $-1/U$, intercepta a curva $\text{Re } \chi^0$ livre em $\omega \approx 1,6$. Quando a interação cresce, a interseção ocorre para valores menores de ω ; eventualmente se alcançar $\omega = 0$ (para $q \neq 0$), sinaliza que o sistema tornou-se instável para este valor de U . Mas note da figura 3.4 que a susceptibilidade renormalizada não intercepta a linha horizontal $-1/U$, significando que não existem magnons nesta aproximação. O mesmo ocorre para outros valores de U .

As relações de dispersão dos plasmons e dos magnons, no plano (q, ω) , são mostradas para $U = 3$ na figura 3.5, para um preenchimento meio. Destas, observamos que os plasmons, tanto na RPA pura como na renormalizada, ficam acima da região de excitação partícula-buraco enquanto os magnons, que só existem na aproximação convencional, ficam abaixo. À medida que o contorno inferior tende a zero quando $q \rightarrow 2k_F$, a frequência do magnon tende também a zero, produzindo a instabilidade de Peierls.

Quando a interação aumenta, a região de instabilidade em q aumenta e quando U excede um valor crítico, U^{stoner} , onde

$$U^{\text{stoner}} = 2\pi \sin \frac{n\pi}{2}, \quad (3.4)$$

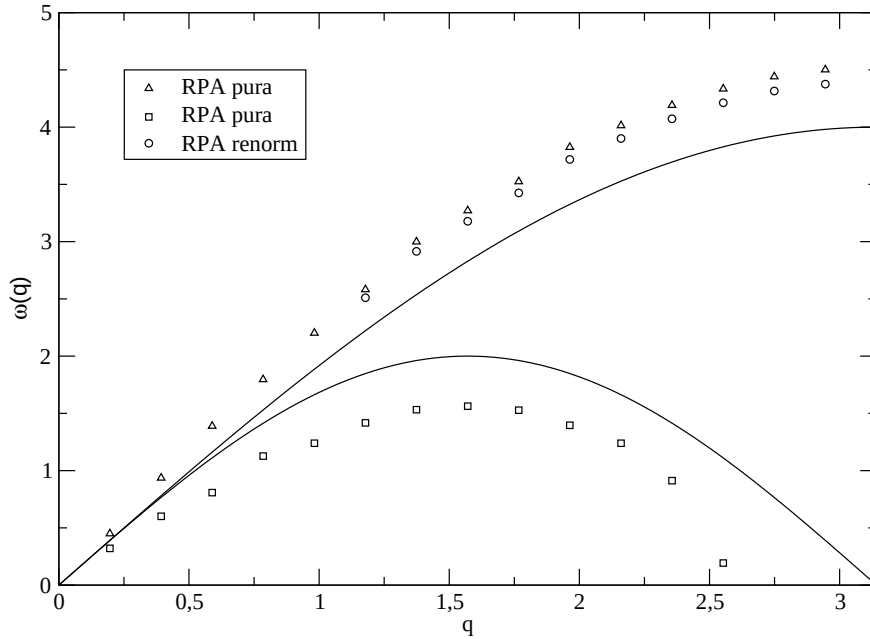


Figura 3.5: Relação de dispersão dos magnons e plasmons para a cadeia de Hubbard semi cheia, $U = 3$, RPA pura e renormalizada. A região entre as linhas corresponde ao contínuo partícula-buraco.

sendo n o número médio de elétrons por sítio, a região de instabilidade se estende a todo eixo dos momentos¹¹.

Como já comentamos anteriormente, em uma dimensão a RPA só produzirá resultados razoáveis na região onde não ocorrem instabilidades. É um mérito da aproximação RPA renormalizada que esta instabilidade seja eliminada.

Por outro lado, sabemos da solução exata que a cadeia de Hubbard admite magnons¹² mas não sofre instabilidades ; nossa aproximação falha ao não encontrar magnons em $d = 1$.

Acima do limite superior do contínuo a parte real da susceptibilidade livre na aproximação RPA renormalizada comporta-se qualitativamente como a correspondente RPA pura, mas os plasmons são formados a energias ligeiramente mais baixas. Para U maiores, entretanto os efeitos da renormalização são mais significativos.

Note que tanto a parte real como a imaginária de χ^0 sofrem muito pouca renormalização fora do contínuo partícula-buraco.

3.3.3 A susceptibilidade de carga $\chi^{ch}(q, \omega)$

A parte imaginária de $\chi^{ch}(q, \omega)$ na aproximação RPA pura, analítica, para interações intermediárias é formada por um contínuo arredondado limitado à região de excitação partícula-buraco e um plasmon não amortecido

acima do contorno superior como é observado na fig. 3.6 para $U = 3$ e preenchimento semi-cheio.

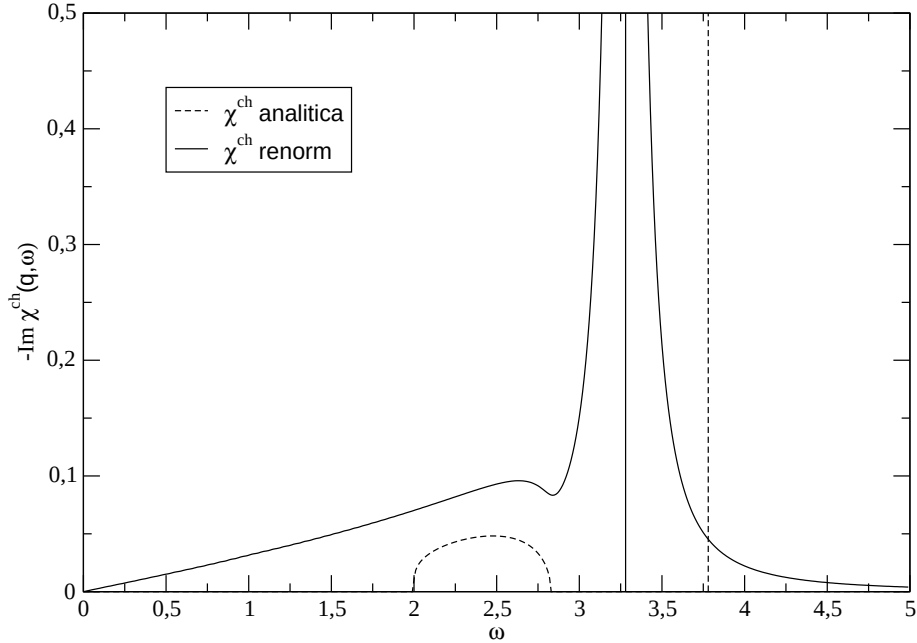


Figura 3.6: Negativo da parte imaginária de $\chi^{\text{ch}}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para cadeia de Hubbard semi-cheia a $U = 3$. A linha vertical indica o pico de plasmon.

Na fig. 3.6 verifica-se que a parte imaginária de $\chi^{\text{ch}}(q, \omega)$ na RPA renormalizada é semelhante às previsões da RPA pura mas o plasmon é transladado para energias mais baixas e a cauda da função decai a $\omega = 0$ de forma aproximadamente linear. A posição do plasmon é indicada pela linha vertical contínua no centro do pólo que, por razões numéricas, tem largura finita.

Para a cadeia semi-cheia e $U = 6$, fig. 3.7, o deslocamento da energia do plasmon para valores mais baixos é bem mais acentuado do que no limite de acoplamentos fracos.

3.3.4 A susceptibilidade de spin $\chi^{\text{sp}}(q, \omega)$

Da discussão realizada anteriormente sobre os magnons e a instabilidade de Peierls na aproximação RPA pura (ver 3.3.2), espera-se que χ^{sp} seja bem diferente nas duas aproximação, tanto para acoplamentos fracos como para fortes. A fig. 3.8 confirma isto para $q = \pi/2$. Desta figura verifica-se também que o magnon fica abaixo do limite inferior do contínuo partícula-buraco, como visto anteriormente (ver fig. 3.4).

Como o pólo de magnons desaparece por renormalização, $-Im\chi^{\text{sp}}(q =$

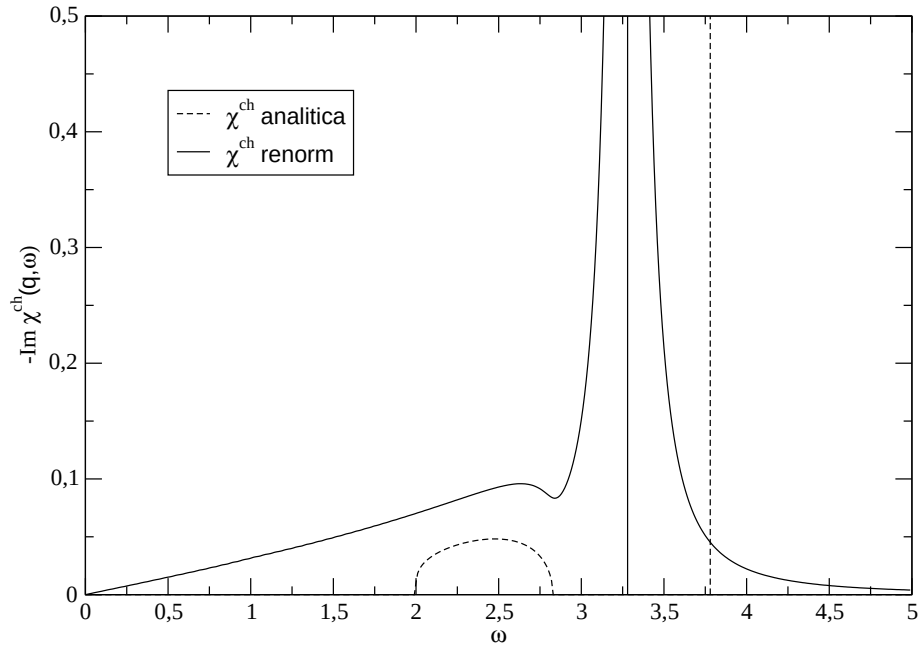


Figura 3.7: Negativo da parte imaginária de $\chi^{\text{ch}}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para preenchimento meio e $U = 6$. A linha vertical indica o pico de plasmon.

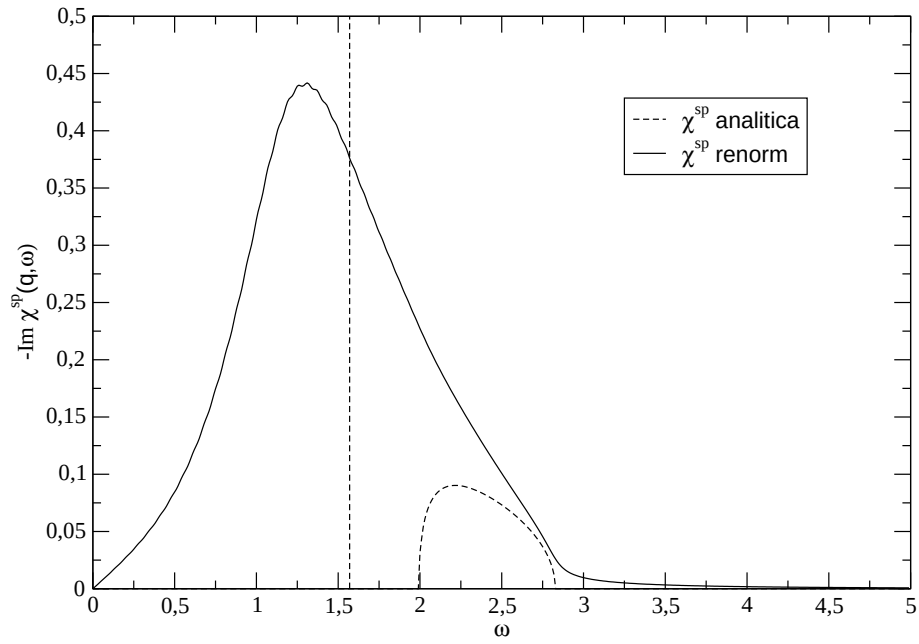


Figura 3.8: Negativo da parte imaginária de $\chi^{\text{sp}}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard semi-cheia com $U = 3$. A linha vertical indica o pico de magnon na aproximação RPA pura.

$\pi/2, \omega$) neste método forma um contínuo apresentando um máximo alargado (linha cheia na fig. 3.8). A curva de spin sai de $\omega = 0$ e é apreciável só até o limite superior da região de excitação.

Para U grande, fig. 3.9, o pico de magnon é praticamente inexistente na RPA pura pois, como vimos anteriormente (ver seção 3.3.2), ai estamos muito próximos da instabilidade.

Comparando as figuras 3.8 e 3.9, se vê que o contínuo alargado da resposta de spin na RPA renormalizada se desloca para $\omega = 0$ à medida que U cresce. Mas não ocorre uma excitação coletiva pois o denominador $1 + U\chi^0$ é finito. Na seção 3.3.6 exibimos a expressão analítica para $Im\chi^{sp}$ que nosso método permite encontrar neste limite (ver eq. (3.13)).

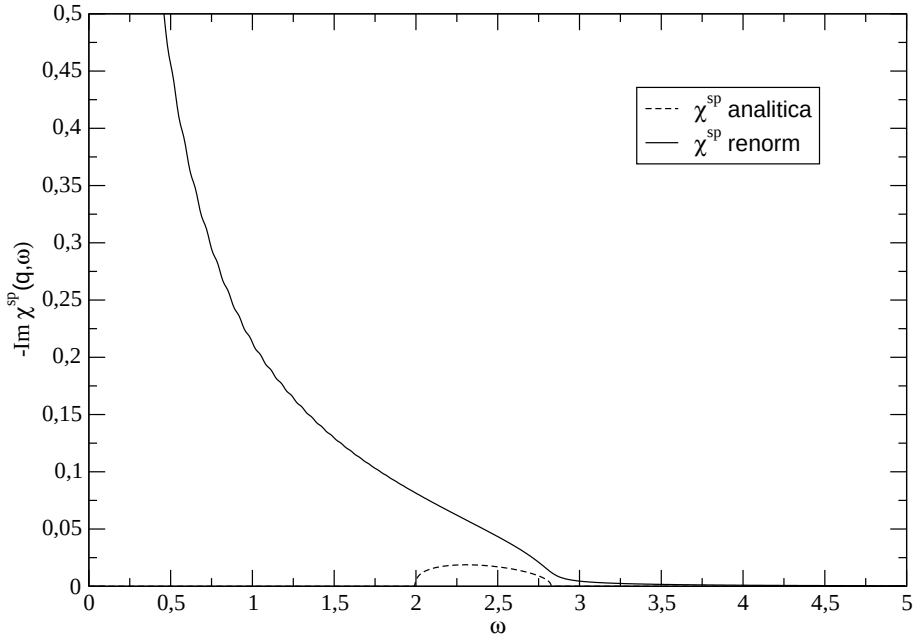


Figura 3.9: Negativo da parte imaginária de $\chi^{sp}(q = \pi/2, \omega)$ nas aproximações RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard semi-cheia a $U = 6$.

3.3.5 Regra de soma

Como foi visto na seção 2.6 o modelo de Hubbard em uma dimensão obedece a uma regra de soma que conecta a integral da susceptibilidade de carga (2.61a) ou a de spin (2.61b), ponderada pela energia, à energia cinética média por sítio, $\langle \varepsilon_c \rangle$, vezes um fator de forma:

$$S_1^{ch}(q) : -2\langle \varepsilon_c \rangle (1 - \cos q) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dw w Im\chi^{ch}(q, w); \quad (3.5a)$$

$$S_1^{sp}(q) : -\frac{1}{2}\langle \varepsilon_c \rangle (1 - \cos q) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dw w Im\chi^{sp}(q, w). \quad (3.5b)$$

Para verificar esta regra graficamente será conveniente referirmos ao lado esquerdo das equações ; estes então serão designados por S_1^{ch} e S_1^{sp} respectivamente. Calculamos numericamente e plotamos, para cada aproximação , S_1^{ch} ou S_1^{sp} ; fazemos o mesmo para o lado direito das equações, o que nos permitirá verificar se a regra é obedecida ou não. A energia cinética média por sítio, $\langle \varepsilon_c \rangle$, na RPA renormalizada é menos negativa do que em Hartree-Fock pois a distribuição dos momentos é menos abrupta. Segue-se então que as curvas do lado esquerdo para a RPA renormalizada ficam abaixo das do RPA puro.

Nas figuras 3.10 e 3.11 mostramos os resultados em $U = 3$ para cadeias com preenchimento meio.

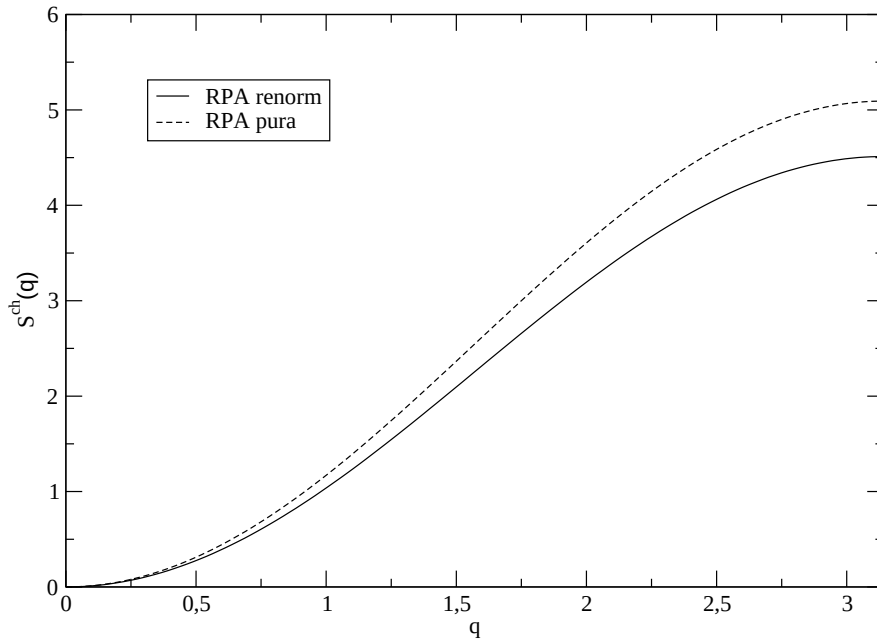


Figura 3.10: Regra de soma para a susceptibilidade de carga na RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard meio cheia com $U = 3$. A linha de referência que denota S_1^{ch} , que é o lado esquerdo da equação (3.5a), coincide com a integral no lado direito. Ambas as aproximações satisfazem a regra de soma.

Para as susceptibilidades, tanto de carga como de spin, na RPA renormalizada, as linhas de referência nas figuras não podem ser resolvidas dos correspondentes termos à direita das eqs.(3.5). Então, a RPA renormalizada obedece à regra de soma. O mesmo ocorre com a susceptibilidade de carga na RPA pura.

Na figura 3.11 se vê que a susceptibilidade de spin na RPA pura não obedece à regra de soma em uma faixa de q em torno de $2k_F$. Esta faixa corresponde àquela onde a relação de dispersão dos magnons, figura 3.5,

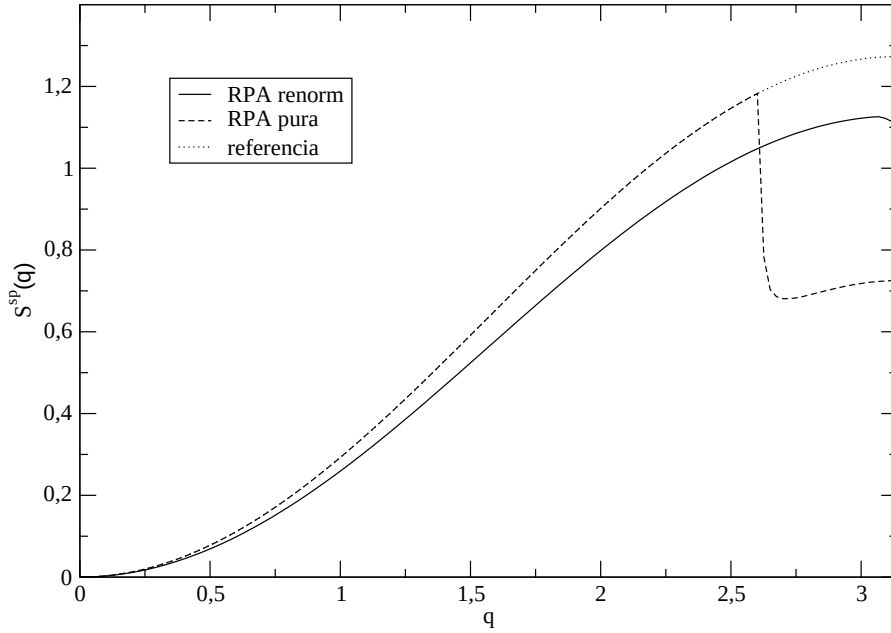


Figura 3.11: Regra de soma para a susceptibilidade longitudinal de spin nas aproximações RPA pura e renormalizada para a cadeia de Hubbard meio cheia com $U = 3$. A linha de referência corresponde a $S_1^{sp}(q)$, que é o lado esquerdo da eq.(3.5b) mostrada para a RPA pura. A referentèa renormalizada coincide com a integral no lado direito. A RPA pura viola a regra de soma perto de $2k_F = \pi$.

tende a $w = 0$. Portanto, a regra de soma para a susceptibilidade de spin na aproximação RPA pura é válida somente na região onde ela é estável.

3.3.6 O limite de acoplamentos fortes

O número de ocupação, na aproximação RPA renormalizada, para acoplamentos fortes e preenchimento meio, pode ser fitado por

$$n_{k\sigma} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{4}{U} \cos k \right), \quad (3.6)$$

resultado bastante próximo do obtido com o *ansatz* de Bethe⁷,

$$n_{k\sigma} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{8 \ln 2}{U} \cos k \right). \quad (3.7)$$

Como mostrado na figura 3.1, para $U = 5$, a eq.(3.6) já apresenta um resultado bem próximo dos obtidos numericamente para n_k .

A partir da eq. (3.6), pode-se deduzir uma expressão para as susceptibilidades χ^0 , χ^{ch} e χ^{sp} . A eq. (3.3) não se aplica pois os $n_{k\sigma}$ são muito diferentes da função de Fermi-Dirac; a única energia característica provém da (3.2), $|w| \leq |4 \sin \frac{q}{2}|$, limite superior da região de excitação; assim, a susceptibilidade livre

$$\chi_{\sigma}^0(q, w) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{(n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})}{w - [\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k] + i0^+}, \quad (3.8)$$

não mais depende de q e w separadamente mas apenas da combinação

$$\xi \equiv \frac{w}{|4 \sin \frac{q}{2}|}, \quad (3.9)$$

que é a energia em unidades do limite superior do contínuo.

Integrando o lado direito de (3.8) com os números de ocupação dados por (3.6), tem-se

$$\chi^0(\xi) = -\frac{1}{U} \begin{cases} 1 + i \frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} & \text{para } |\xi| < 1, \\ 1 - \frac{|\xi|}{\sqrt{\xi^2-1}} & \text{para } |\xi| > 1. \end{cases} \quad (3.10)$$

Substituindo a equação (3.10) na equação (2.57) obtém-se para $\chi^{ch}(\xi)$

$$Im\chi^{ch}(\xi) = -\frac{2}{U} \frac{\xi \sqrt{1-\xi^2}}{4-3\xi^2}, \quad (3.11)$$

que apresenta um pólo em $\xi = 2/\sqrt{3}$, descrevendo um plasmon não amortecido obedecendo a relação de dispersão

$$\omega_q = \frac{8}{\sqrt{3}} \left| \sin \frac{q}{2} \right|, \quad (3.12)$$

que não depende explicitamente da interação U .

Pela substituição de $\chi^0(\xi)$ em (2.58), tem-se

$$Im\chi^{sp}(\xi) = -\frac{1}{2U} \frac{\sqrt{1-\xi^2}}{\xi}, \quad (3.13)$$

para $|\xi| < 1$ e zero fora desta região. Note a divergência em $\omega = 0$.

A fração de sítios duplamente ocupados é dada por

$$D = \frac{1}{N} \sum_i \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle = \frac{\langle \varepsilon_p \rangle}{U}, \quad (3.14)$$

onde $\langle \varepsilon_p \rangle$ é o valor médio da energia potencial por sítio (ver (2.13)):

$$\langle \varepsilon_p \rangle = \frac{U}{N^2} \sum_{kpq} \langle a_{k\uparrow}^+ a_{k+q\uparrow} a_{p\downarrow}^+ a_{p-q\downarrow} \rangle. \quad (3.15)$$

Por outro lado, a dependência de $Im\chi^{sp}$ em $1/w$ perto da origem faz com que $\langle \varepsilon_p \rangle$ divirja logaritmicamente neste limite. Para contornar este problema vamos usar o teorema de Hellmann-Feynman (ver apêndice C) o qual permite calcular a energia por sítio do estado fundamental $E(U)$ a partir da energia

cinética por sítio $T(U) \equiv \langle \varepsilon_c \rangle$, eq. (2.62), o que então nos dará a energia potencial e a fração de sítios duplamente ocupados:

$$E(U) = U \int_U^\infty dy \frac{T(y)}{y^2}, \quad (3.16)$$

Levando (3.6) em (2.62) obtemos

$$T(U) = -\frac{4}{U}; \quad (3.17)$$

que difere do resultado exato⁷,

$$T^{\text{exata}}(U) = -\frac{8 \ln 2}{U}, \quad (3.18)$$

apenas por um prefator.

Da eq. (3.16)

$$E(U) = -\frac{2}{U},$$

quando $U \rightarrow \infty$, enquanto que a energia potencial por sítio, $\langle \varepsilon_p \rangle$, é :

$$\langle \varepsilon_p \rangle = E(U) - T(U) = \frac{2}{U} \quad (3.19)$$

e a fração de sítios duplamente ocupados é

$$D = \frac{1}{N} \sum_i \langle \langle n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \rangle \rangle = \frac{2}{U^2} \quad (3.20)$$

Na Fig.3.12 apresentamos a energia do estado fundamental da cadeia de Hubbard semi-cheia para várias aproximações. Comparando estas curvas com as obtidas usando o *ansatz* de Bethe, consideramos um excelente resultado para a nossa teoria, que nem foi especialmente desenvolvida para sistemas de uma dimensão. Da fig. 3.13 também se vê que D é muito bem descrito pelo método, principalmente para acoplamentos fortes.

Novamente, mesmo não sendo um método desenvolvido para sistemas unidimensionais, a aproximação RPA renormalizada, como mostrado neste capítulo, apresenta resultados bastante satisfatórios para o modelo de Hubbard, tais como a distribuição dos momentos n_k para interações maiores de que 3 para a banda semi-cheia. A instabilidade apresentada na aproximação RPA pura fica eliminada pelo processo de renormalização, fazendo com que a regra de soma seja satisfeita para todos os valores dos momentos q .

Estimulados por tais resultados, nos capítulos seguintes aplicaremos este método ao modelo de Hubbard estendido, com interações entre primeiros e segundos vizinhos, V_1 e V_2 , respectivamente, e discutiremos depois os resultados obtidos.

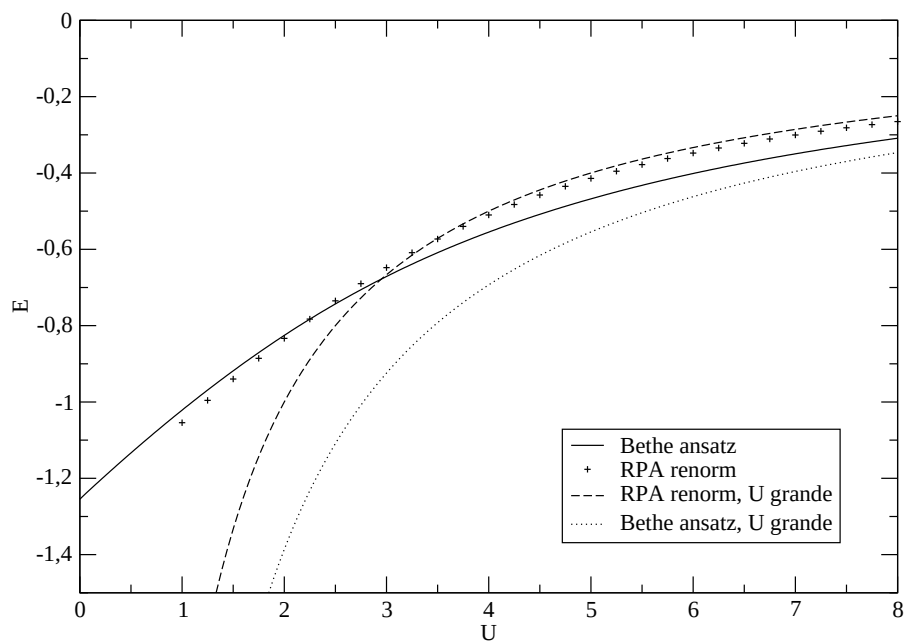


Figura 3.12: Energia de estado fundamental por sítio para cadeia de Hubbard semi-cheia versus U nas várias aproximações indicadas.

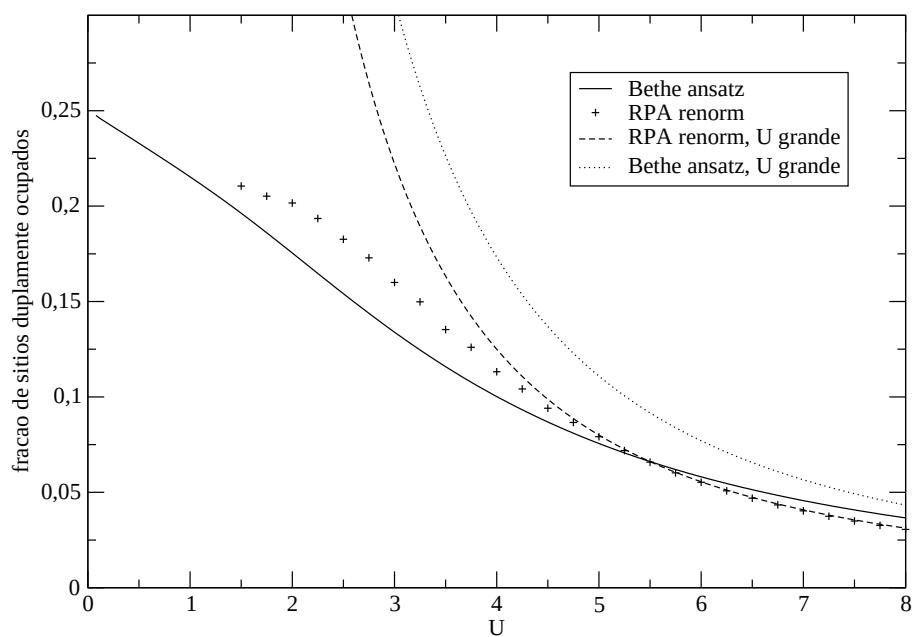


Figura 3.13: Fração de sítios duplamente ocupados para cadeia de Hubbard semi-cheia versus U nas diversas aproximações indicadas.