

## 5

# Resultados para o Modelo de Hubbard Estendido

### 5.1 Introdução

Embora não exista solução exata para o modelo de Hubbard estendido, é possível encontrar analiticamente, quando  $V_2 = 0$ , o diagrama de fases no limite de acoplamentos fracos, usando as técnicas conhecidas como *g-ology*<sup>18</sup>. A aproximação RPA convencional encontra que a linha que separa as fases é  $U = 2V$  mas aquelas técnicas revelam que esta linha se desloca para o interior da fase CDW. Quando  $V_2$  é levado em conta, Tomio *et al*<sup>19</sup>, para preenchimento  $1/4$ , usando campo médio, encontram que três estados fundamentais podem ser estabilizados. A instabilidade formadora da SDW é controlada por  $U$ , mas as interações entre os primeiros e segundos vizinhos são cruciais para o aparecimento da onda de densidade de carga.

Como citado na seção 4.1, os sais de transferência de carga<sup>16</sup> do *TCNQ* e *NMP – TCQN* são também materiais quasi-unidimensionais que apresentam fases isolantes SDW e CDW. A banda de condução nestes sais corresponde a preenchimento  $1/2$ .

Os condutores poliméricos<sup>17</sup>, tais como o poliacetileno  $(CH)_x$  dopado, constituem uma outra classe de materiais quasi-unidimensionais que também apresentam preenchimento  $1/2$ .

### 5.2 Resultados<sup>20</sup>

A seguir apresentaremos os resultados numéricos obtidos pelo método RPA renormalizado, para banda semi-cheia e  $V_2 = 0$  (a partir de agora, por comodidade, denotaremos  $V_1$  por  $V$ ). Inicialmente, avaliamos a influência do termo de interação intersítios,  $V$ , no intervalo entre 0 e 3, em  $q = k_F$ , para  $U = 3$ , de modo a compararmos com os resultados do Hubbard puro apresentado no capítulo 3. Depois apresentamos o critério para estabelecer que ocorre uma transição de fase e determinar a linha de transição, a qual separa as fases SDW e CDW, usando tanto a susceptibilidade livre quanto as susceptibilidades de carga e spin. Em seguida o diagrama de fases é apresentado.

### 5.2.1 Influência de $V$ em $q = k_F$

#### Parte Imaginária de $\chi^0$

Iniciaremos a nossa discussão sobre a RPA renormalizada aplicada ao modelo de Hubbard estendido em  $1D$ , analisando a influência do termo de interação entre primeiros vizinhos,  $V$ , na susceptibilidade livre  $\chi^0(q, w)$  renormalizada.

Na figura 5.1 mostramos o negativo da parte imaginária da susceptibilidade livre renormalizada,  $-Im\chi^0(q, w)$ , para a banda semi-cheia, com interação intrasítio  $U = 3$ , e  $V = 1, 2$  e  $3$  para  $q = k_F = \frac{\pi}{2}$  (as curvas para  $V = 0$  e  $1$  são indistinguíveis).

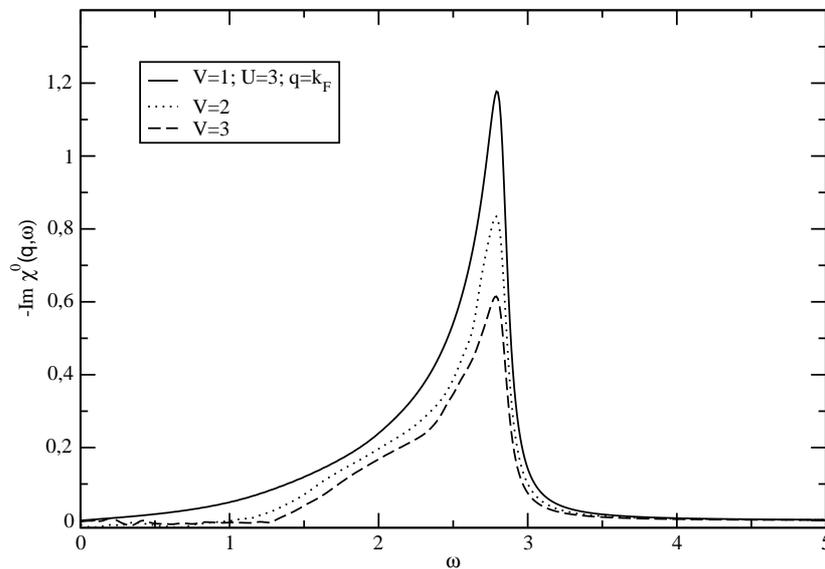


Figura 5.1: Negativo da parte imaginária da susceptibilidade livre renormalizada,  $-Im\chi^0(k_F, w)$ , para  $U = 3$  e diversos valores de  $V$ , para banda semi-cheia.

Nota-se que para todos os valores de  $V$ , na região acima do limite superior da região de excitação partícula-buraco,  $w > 2,8$ , qualitativamente, nenhuma alteração física acentuada acontece quando comparada com a curva correspondente a  $U = 3$  e  $V = 0$ . Mas note que o pico assume valores menores à medida que  $V$  cresce. Como o denominador de  $\chi^0$  é independente de  $V$ , a diminuição deste pico só pode vir do numerador de  $\chi^0$ .

No limite inferior da região de excitação partícula-buraco,  $w = 2$ , a descontinuidade observada na RPA pura, a qual é completamente removida na renormalizada (vide capítulo 3), também permanece suave e também sem nenhuma mudança física qualitativa.

### Parte real de $\chi^0$

Na parte real da susceptibilidade livre renormalizada, observamos que a divergência no limite superior da região de excitação permanece para  $V \neq 0$ . Da figura 5.2 vemos que o denominador da susceptibilidade de carga  $\chi^{ch}(q, w)$ ,  $1 - (U + 4F(q))\chi^0 \equiv 1 - U\chi^0$ , se anula a uma energia um pouco acima deste limite, onde novamente, um plasmon não amortecido é criado. Observando a figura 5.2, este fato pode ser evidenciado pela interseção da reta  $1/(U + 4F(q))$ , que é igual a  $1/U$ , com a parte real de  $\chi^0(q, w)$  que se dá em  $w \approx 3,3$  para  $V = 0$  e, para valores menores de energia à medida que  $V$  aumenta (as curvas para  $V = 0$  e 1 são indistingüíves). Em particular quando  $V = 3$ , a interseção ocorre em  $w \approx 3$ .

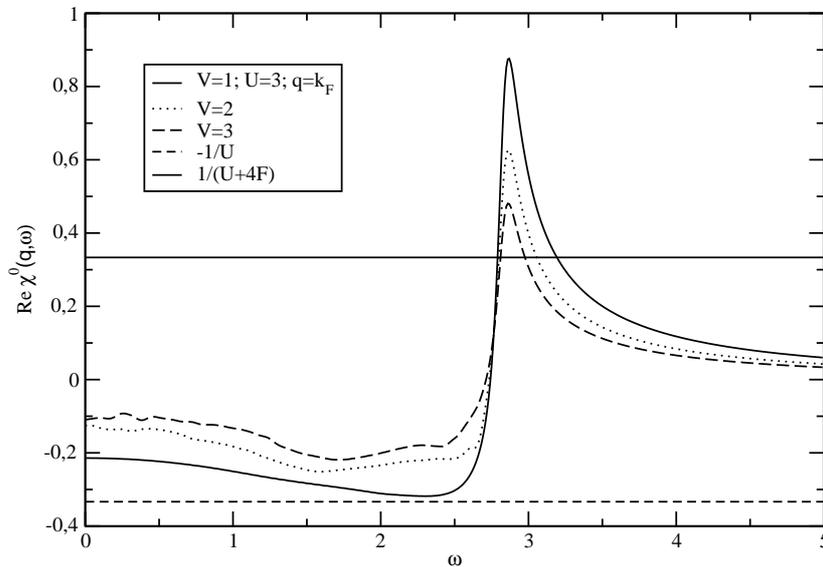


Figura 5.2: Parte real da susceptibilidade livre renormalizada,  $Re\chi^0(k_F, w)$ , para  $U = 3$  e diversos valores de  $V$ , para banda semi-cheia.  $F = 2V \cos k_F = 0$ .

Para energias menores do que a correspondente ao limite superior da região de excitação, o mínimo alcançado por  $Re\chi^0(q, w)$  torna-se maior, quando  $V$  cresce. Para  $V = 3$ ,  $Re\chi^0(q, w)$  está um pouco abaixo de  $-0,2$  em  $w \approx 1,7$ .

Isto significa que  $V$  dificulta ainda mais a existência de um pólo na susceptibilidade longitudinal de spin, caracterizando a não formação de magnons não amortecidos, como no caso Hubbard puro.

Temos assim que na superfície de Fermi,  $q = k_F = \frac{\pi}{2}$  para a cadeia semicheia, o termo de interação entre os elétrons em sítios primeiros vizinhos promove algum efeito apenas devido à renormalização dos  $n_k$ 's pois, neste limite,  $F(q) = V \cos k_F = 0$  e qualitativamente, nenhum grande efeito é observado.

### Susceptibilidade de carga $\chi^{ch}(q, w)$

Como abordamos anteriormente, a influência da interação  $V$ , na resposta de carga não é tão acentuada na superfície de Fermi, posto que apenas desloca o pólo de plasmon para uma região mais próxima, mas ainda um pouco acima, do limite superior da região da excitação partícula-buraco. Na Fig.5.3, exibimos a parte imaginária de  $\chi^{ch}(q, w)$  para  $U = 3$  e  $V = 0, 1$  e  $q = k_F = \pi/2$ , onde também pode-se observar o pico de plasmon.

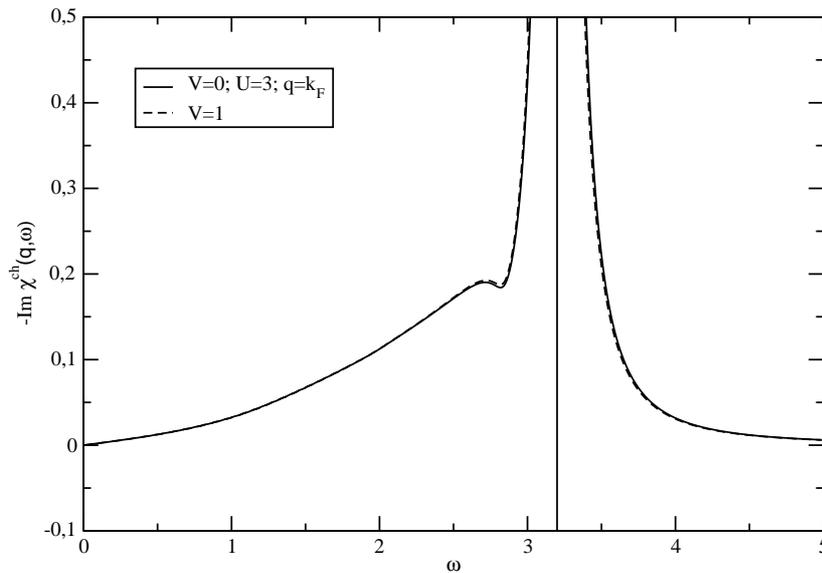


Figura 5.3: Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de carga,  $-Im\chi^{ch}(k_F, w)$  para  $U = 3$  e  $V = 0$  e  $1$ . A reta vertical indica o valor de  $w$  em que ocorre o pico de plasmon, que é praticamente o mesmo para  $V = 0$  e  $V = 1$ .

Na figura 5.4, verifica-se que para  $V = 2$  e  $V = 3$ , acima do limite superior da região de excitação,  $w = 3$ , qualitativamente, nenhuma alteração é observada em relação à figura 5.3.

Para pequenos valores de  $V$ , Fig. 5.3, temos que  $Im\chi^{ch}(q = \pi/2, w)$  cresce monotonicamente a partir de  $w = 0$ . Para valores maiores de  $V$ , Fig. 5.4, a função fica mais ou menos constante mas para valores de energia na faixa  $0 < w < 0,5$ ,  $V$  causa uma ligeira oscilação em  $Im\chi^{ch}(q = \pi/2, w)$ , que se acentua quando  $V = U = 3$ .

Na região acima do limite superior do contínuo partícula-buraco os plasmons são deslocados para valores mais próximos deste limite quando  $V$  cresce, como visto na seção anterior, quando analisamos  $Re\chi^0(q = \pi/2, w)$ .

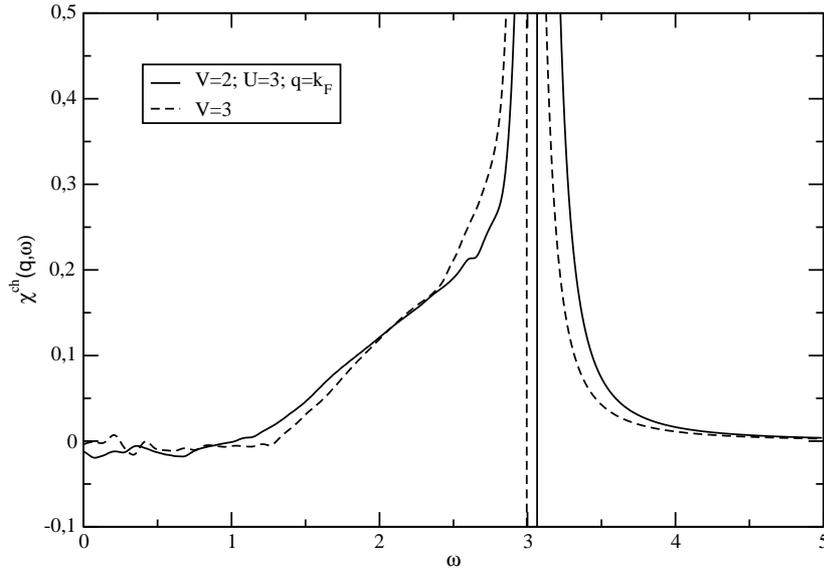


Figura 5.4: Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de carga,  $-Im\chi^{ch}(k_F, w)$  para  $U = 3$  e  $V = 2$  e  $3$ . As retas verticais indicam o valor de  $w$  em que ocorre o pico de plásmão para cada  $V$ .

### Susceptibilidade longitudinal de spin $\chi^{sp}(q, w)$

Para a susceptibilidade longitudinal de spin, Fig. 5.5 para  $U = 3$  e em  $q = k_F = \pi/2$ , qualitativamente, nenhuma mudança ocorre entre os casos  $V = 1$  e  $V = 0$ . Entretanto, nota-se que para  $V = 2$  e  $V = 3$ , Fig. 5.6, o máximo da parte imaginária de  $\chi^{sp}(k_F, w)$  atinge valores menores sempre a uma energia abaixo do limite inferior da região de excitação e, em particular, para  $V = 3$ , o máximo de  $Im\chi^{sp}$  tem um valor próximo à metade do alcançado quando  $U = 3$  e  $V = 0$  (Fig. 5.5). Assim, o termo de interação  $V$ , dificulta a formação de magnons não amortecidos.

Na figura 5.6, verifica-se a persistência das oscilações em  $Im\chi^{sp}(q, w)$ , como acontecia com  $Im\chi^{ch}(q, w)$ , Fig. 5.4, na mesma faixa de energia  $0 < w < 0,5$ , tornando-se mais acentuada para  $V = 3$ . Entendemos que esta oscilação na superfície de Fermi é um indicador da existência de distintas fases no estado fundamental, como argumentaremos na seção seguinte: existe uma transição de fase SDW-CDW e usaremos o método da RPA renormalizada para, numericamente, determinar a linha de transição de fase para interações intrasítios  $U$  maiores que 3, e  $V$  variando na faixa  $0 < V < U$ , em  $q = 2k_F = \pi$  para cadeia de Hubbard semi-cheia. O momento  $q = 2k_F = \pi$  é escolhido porque tanto a SDW quanto a CDW tem periodicidade igual a duas constantes da rede. Neste vetor de onda, veremos que estas oscilações se desenvolvem em divergência em  $w = 0$ .

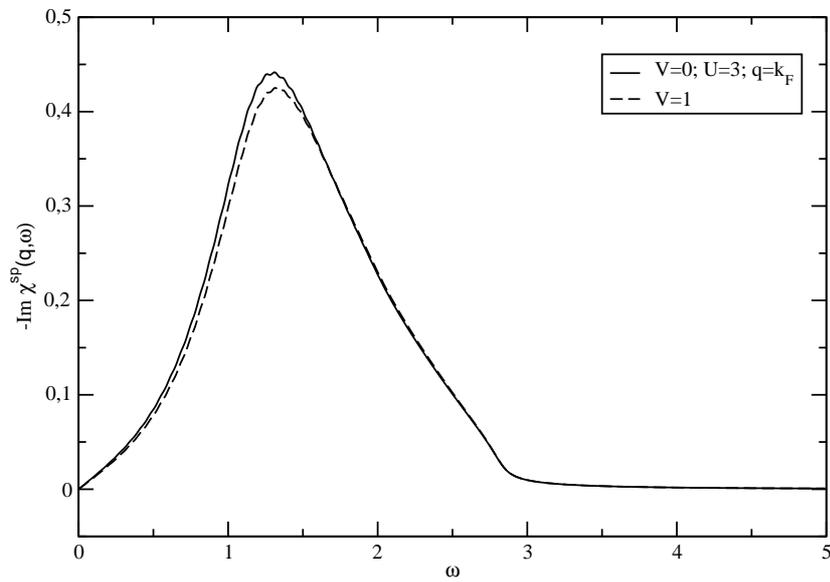


Figura 5.5: Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de spin,  $-Im\chi^{sp}(k_F, \omega)$ , para  $U = 3$  e  $V = 0$  e 1.

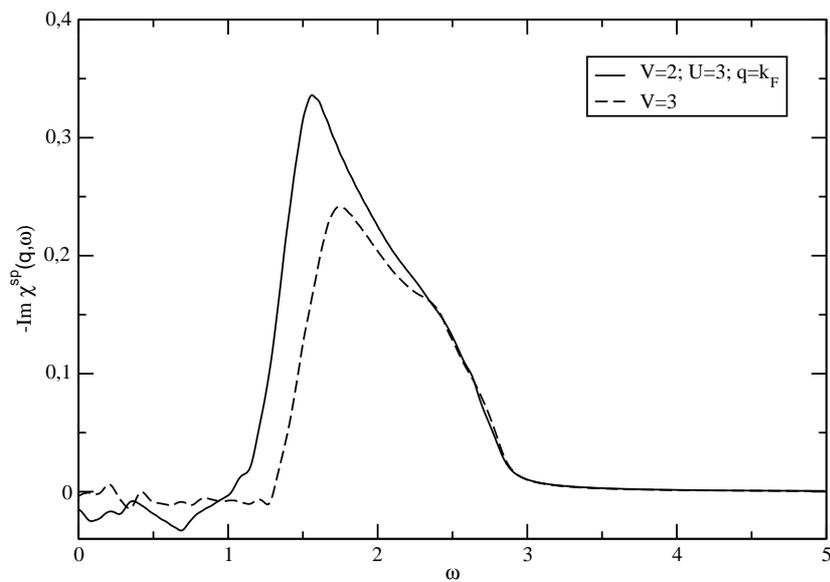


Figura 5.6: Negativo da parte imaginária da susceptibilidade de spin,  $-Im\chi^{sp}(k_F, \omega)$ , para  $U = 3$  e  $V = 2$  e 3.

### 5.2.2 O Diagrama de Fase

É previsto pela aproximação Hartree-Fock<sup>21</sup> que o modelo de Hubbard com interação entre primeiros vizinhos apresenta uma transição de primeira ordem de um estado de onda de densidade de spin (SDW) a um de onda de densidade de carga (CDW), ambos com  $2k_F$ , em  $U = 2V$ . Para este vetor de onda, a SDW é o estado antiferromagnético.

Fourcade *et al.* usando o método do grupo de renormalização no espaço real<sup>22</sup> confirmaram a existência da transição SDW-CDW mas discordaram quanto à sua natureza: encontraram uma transição contínua para todos os valores de  $U$  e  $V$  e uma curva de fronteira ligeiramente deslocada para a região CDW. Posteriormente, usando o método "finite-size scaling", confirmaram<sup>23</sup> os resultados anteriores quanto à transição e sua natureza, mas a fronteira encontrada foi  $U \approx 2V$ .

O método de diagonalização de Lanczos<sup>24</sup> também fornece uma fronteira deslocada para a região CDW.

Usando simulações de Monte Carlo quântico<sup>25</sup>, Hirsch confirmou os resultados obtidos pelo método *g-ology*<sup>18</sup> mas encontrou que a natureza da transição muda de segunda para primeira ordem, à medida que os acoplamentos vão de fracos a fortes.

Voit, usando técnicas de bosonização para o modelo de Luttinger e grupo de renormalização<sup>26</sup>, confirmou alguns dos resultados de Hirsch mas obtém um diagrama de fases mais rico, que inclui também transições do tipo Kosterlitz-Thouless<sup>27</sup> para pequenos  $U$ .

Recentemente, foi detetado uma nova fase para o modelo estendido: uma onda associada às ligações e conhecida pelas suas iniciais em inglês (BOW). Entretanto a sua localização e natureza ainda estão sujeitas a debates. O trabalho precursor foi de Nakamura<sup>28</sup>; usando o método de cruzamento de níveis do espectro de excitação, obtidos por diagonalização exata de aglomerados, cujos resultados são extrapolados para sistemas infinitos, esclareceu e sistematizou as novas transições encontradas por Voit.

Sangupta *et al.*, usando uma versão mais eficiente do método de Monte Carlo quântico<sup>29</sup>, encontram também a fase BOW. Em ambos os trabalhos, a nova fase ocupa uma pequena e estreita região do diagrama de fase em torno de uma parte da linha  $U \approx 2V$ , na região correspondente sobretudo a acoplamentos fracos. O encontro desta região com a linha  $U \approx 2V$  é o ponto tricrítico  $U_t \approx 4,7 \pm 0,1$  e  $V_t \approx 2,51 \pm 0,01$ , a partir do qual a transição CDW-SDW se torna de primeira ordem.

Por outro lado, Jeckelmann<sup>30</sup> encontra que a BOW está confinada a apenas um segmento da linha de separação CDW-SDW, a partir de- e não

até - o ponto tricrítico, que no seu método ocorre em  $U_t \approx 3,7$  e  $V_t = 2$ . Jeckelmann usa o método do grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG em inglês).

Sobre a discussão entre os dois últimos métodos ver as referências [31] e [32].

Neste trabalho nos limitaremos às fases SDW e CDW. Veremos que ambos os pontos tricríticos acima estão muito próximos da linha que encontramos como fronteira de separação entre estas fases. Ou seja, nossa fronteira se compara muito bem com as obtidas por estes métodos.

Embora a RPA seja uma teoria do tipo campo médio, mostraremos nesta seção que com a renormalização dos  $n_k$ , obtemos a linha de transição de fase deslocada para região CDW, com resultados bastante satisfatórios quando comparados com os métodos mais gerais dos parágrafos anteriores.

Na aproximação RPA pura, onde  $\chi^0$  é independente de  $U$  e  $V$ , podemos encontrar a condição de coexistência das duas fases da seguinte maneira: em (4.25) e (4.26),

$$\chi^{ch} = \frac{2\chi^0}{1 - (U + 4F)\chi^0},$$

$$\chi^{sp} = \frac{\frac{1}{2}\chi^0}{1 + U\chi^0}$$

os zeros dos denominadores ficam iguais em  $2k_F$ :  $U + 4F(2k_F) \equiv U - 4V = -U$ , o que fornece a linha  $U = 2V$  citada acima.

No caso da RPA renormalizada  $\chi^0$  depende de  $U$  e  $V$  e os zeros dos denominadores não têm a forma tão explícita com na RPA pura e devem ser encontrados numericamente. Veremos que ocorrem para valores de  $V$  um pouco acima de  $U/2$ .

Usaremos o seguinte método para determinar a condição de coexistência de fases: consideramos inicialmente a situação com  $V = 0$ , que sabemos corresponder a um estado fundamental de SDW. Então introduzimos  $V$ 's cada vez maiores e observamos o pólo de plasmon em  $\chi^{ch}$ . Quando este pólo ocorrer em  $w = 0$  para  $q = 2k_F$ , indica uma instabilidade para formação de uma CDW.

### A susceptibilidade livre $\chi^0$

A parte real de  $\chi^0$  não muda apreciavelmente para pequenos valores de  $V$ , como mostrado na figura 5.7 para  $V = 1$ , em relação ao seu comportamento em  $V = 0$ . A reta  $-1/U$ , intercepta a função  $Re\chi^0$  em  $w = 0$  e para todos os valores de energia, a função não apresenta nenhuma mudança significativa.

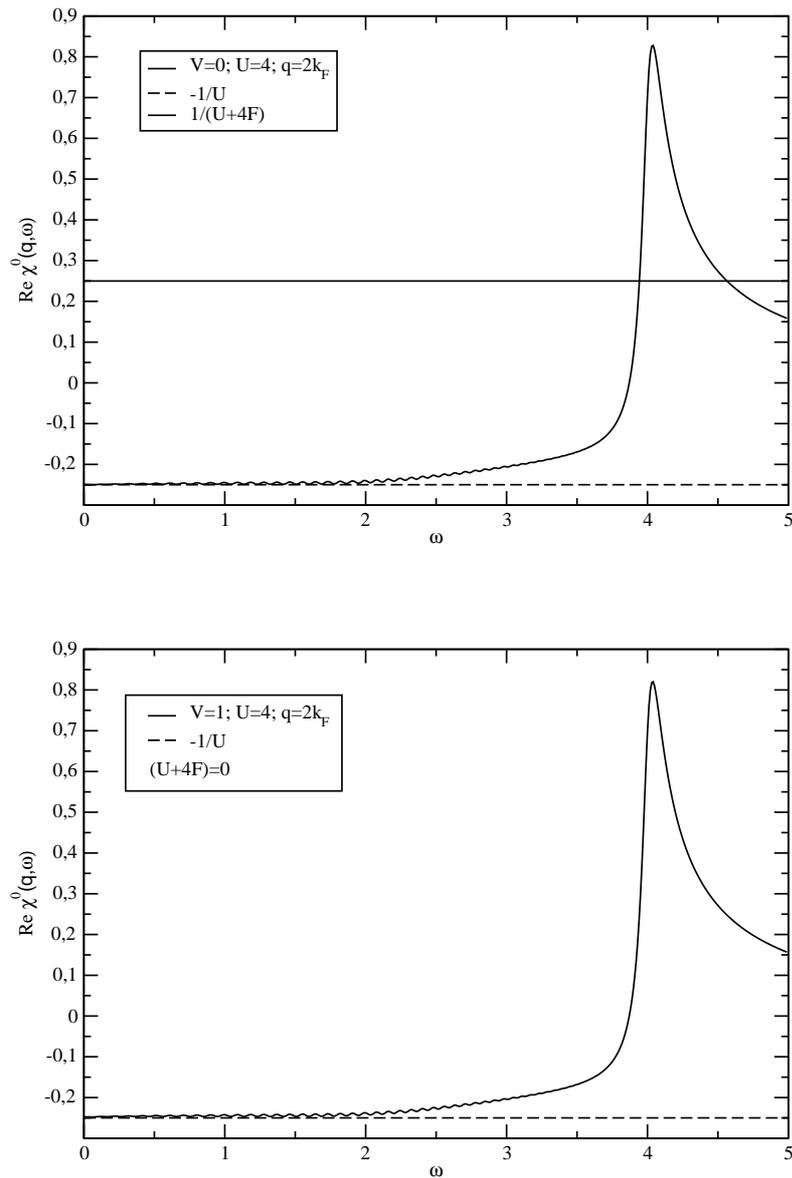


Figura 5.7:  $Re\chi^0$  em  $q = 2k_F$  em  $U = 4$  para  $V = 0$  e 1. As retas  $-1/U$  e  $1/(U+4F)$  são também mostradas, mas para  $V = 1$ ,  $U + 4F = 0$ .

Para  $V$  igual ou maiores que  $U/2 = 2$ , uma mudança é observada para valores de energia no intervalo  $0 \leq \omega < 4$ . Para  $U = 4$  nas figuras 5.8, 5.9 e 5.10 para  $V = 2$ ,  $V = 2,19$  e  $V = 2,25$ , respectivamente, podemos observar que a parte real de  $\chi^0$  apresenta um mínimo em  $\omega \approx 1,8$ .

Para  $V = 2$  as retas  $-1/U$  e  $1/(U+4F)$ , cujas interseções com  $Re\chi^0$  são pólos das susceptibilidades de spin e de carga, respectivamente, se superpõem. Da Fig. 5.8, se vê que essas retas não interceptam  $Re\chi^0$  e portanto a transição de fase não ocorre para estes valores de  $U$  e  $V$ . O valor mais baixo de  $V$  para o qual ocorre a interseção com  $1/(U + 4F)$  é  $V = 2,19$ , o que é mostrado na Fig. 5.9.

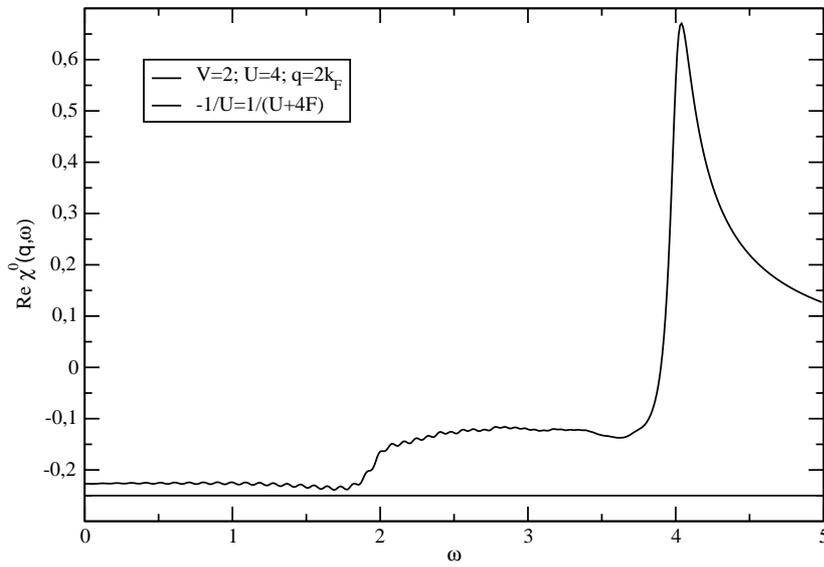


Figura 5.8:  $Re\chi^0$  em  $q = 2k_F$  e  $U = 4$  para  $V = 2$ . As retas  $-1/U$  e  $1/(U + 4F)$  agora coincidem mas não interceptam  $Re\chi^0$ .

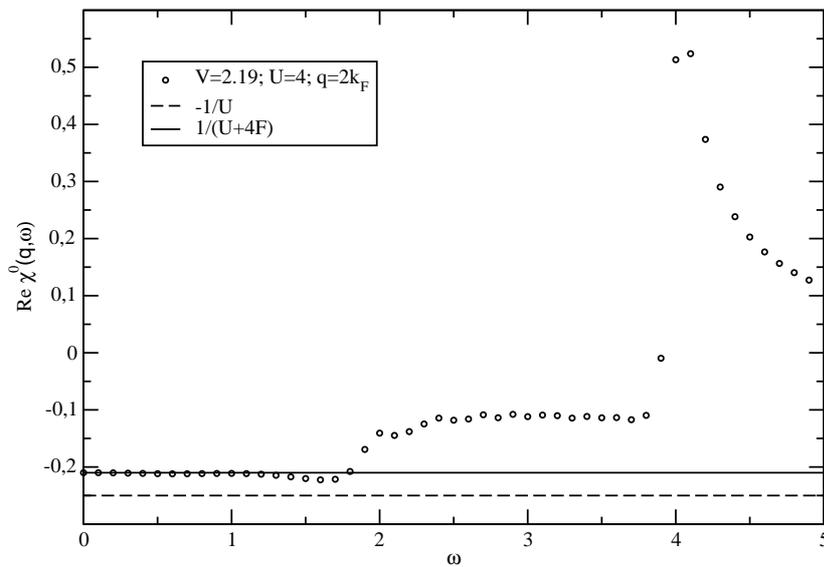


Figura 5.9:  $Re\chi^0$  em  $q = 2k_F$  e  $U = 4$  para  $V = 2, 19$ . As retas  $-1/U$  e  $1/(U + 4F)$  são também mostradas. Note a interseção em  $w = 0$ , o que assinala o aparecimento de uma ordem CDW.

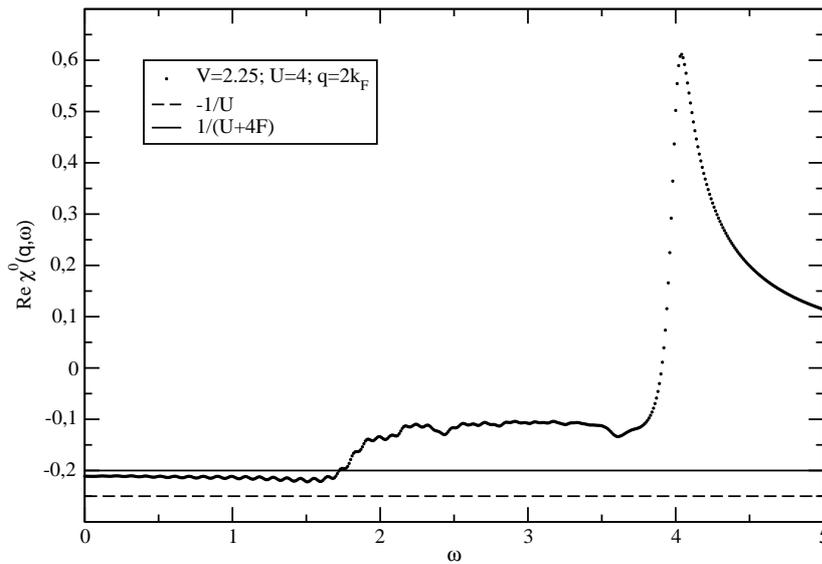


Figura 5.10:  $Re\chi^0$  em  $q = 2k_F$  e  $U = 4$  para  $V = 2, 25$ . As retas  $-1/U$  e  $1/(U+4F)$  são também mostradas.

Resultados análogos podem ser observados para  $U = 3$  e  $U = 5$  sendo  $V = 1,64$  e  $V = 2,74$ , respectivamente, os pontos de transição, como se verifica das figuras 5.11 e 5.12. Note que para todos esses casos  $V \approx 0,55U$ .

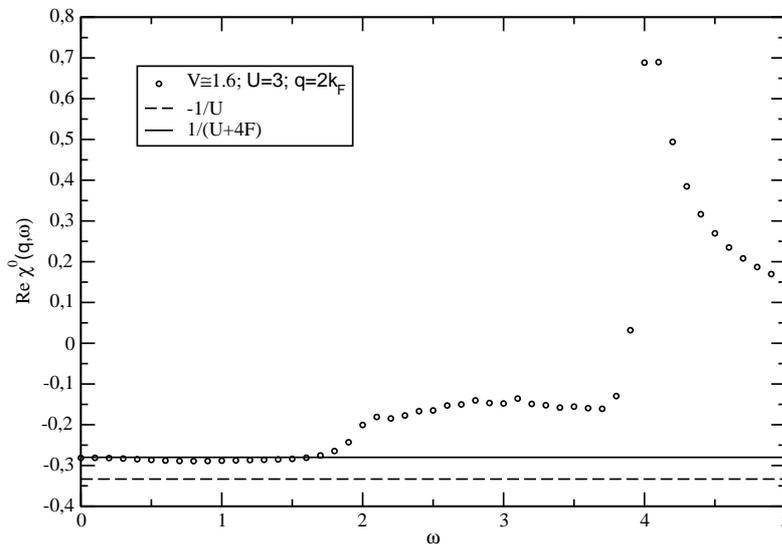


Figura 5.11:  $Re\chi^0$  em  $q = 2k_F$  e  $U = 3$  para  $V = 1,64$ . As retas  $-1/U$  e  $1/(U+4F)$  são também mostradas.

Na figura 5.13 mostramos o negativo da parte imaginária da susceptibilidade livre renormalizada em  $q = 2k_F$  para  $U = 4, V = 0$  e  $1$ . Para estes valores de  $V$ , elas apresentam, basicamente, o mesmo comportamento.

Para  $V \geq 2$ , figura 5.14, continuamos a observar o pico em  $\omega \cong 4$ , limite superior da região de excitação, e acima deste limite, a parte imaginária não

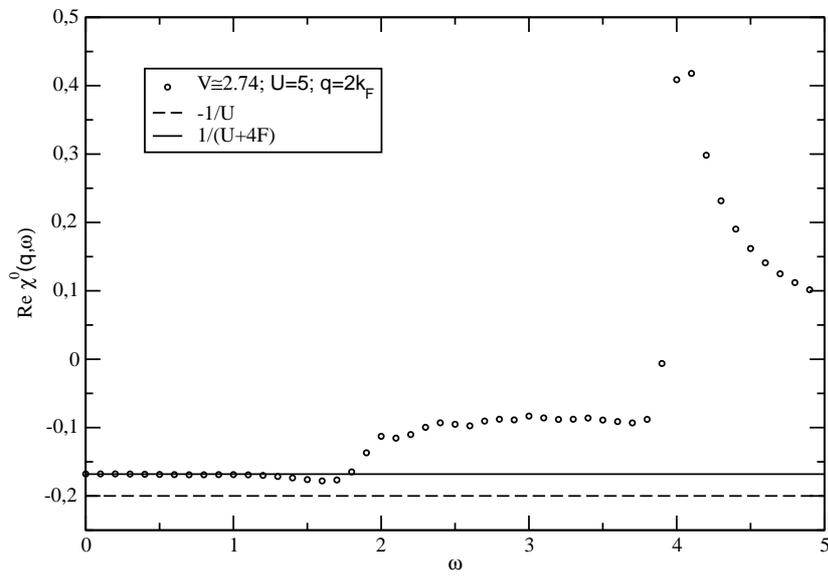


Figura 5.12:  $Re\chi^0$  em  $q = 2k_F$  em  $U = 5$  para  $V = 2,74$ . As retas  $-1/U$  e  $1/(U + 4F)$  são também mostradas.

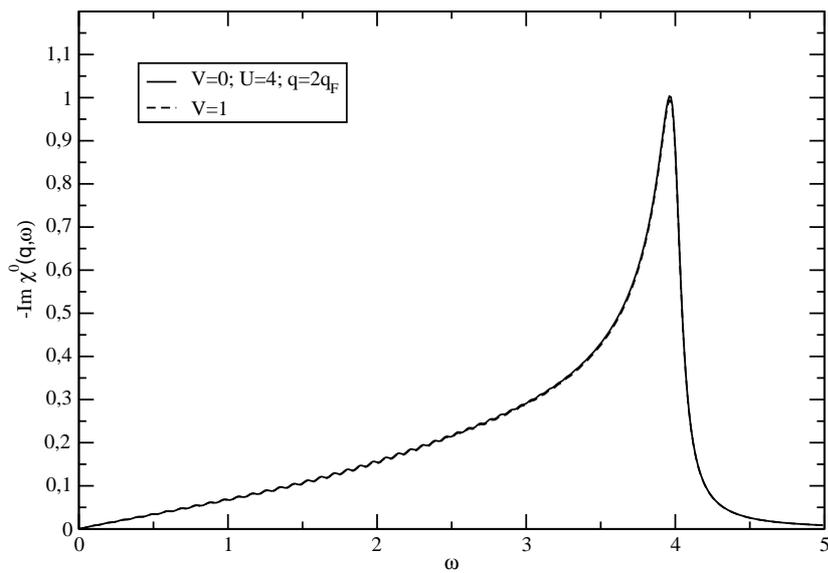


Figura 5.13:  $-Im\chi^0$  renormalizada em função de  $w$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 4$  para  $V = 0$  e  $1$ .

apresenta nenhuma mudança em relação a mesma quando  $U = 4$  e  $V = 0,1$ . Para energias na faixa  $0 \leq w < 4$ , por outro lado,  $-Im\chi^0$  apresenta um

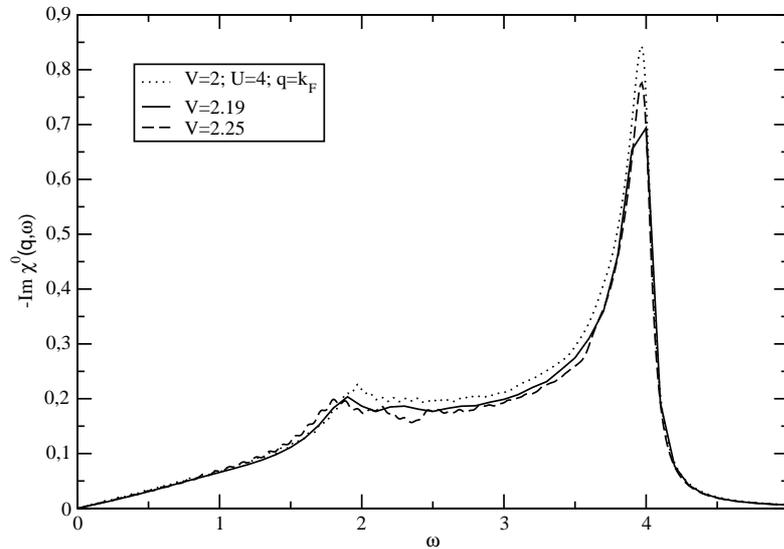


Figura 5.14:  $-Im\chi^0$  renormalizada em função de  $w$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 4$  para  $V = 2, 2,19$  e  $2,25$ .

pequeno pico a uma energia em torno de  $w \approx 1,8$ .

### A susceptibilidade de carga $\chi^{ch}(q, w)$

A figura 5.15 corresponde a  $-Im\chi^{ch}$  para  $U = 4$ ,  $V = 0$  e  $V = 1$ . Verifica-se que para  $V = 0$ , ela diverge em  $w \approx 4,7$ , acima da região de excitação, o que corresponde a um plasmon em  $q = 2k_F = \pi$ ; para  $V = 1$  esta divergência já se desloca para o interior da região de excitação.

Quando  $U = 4$  e  $V = 2,19$ , ver Fig. 5.16, uma divergência é apresentada em  $w = 0$ , correspondente à transição de fase SDW-CDW vista anteriormente. Ainda pela mesma figura, vemos que para os valores  $V = 2$  e  $V = 2,25$ , essa divergência desaparece e as funções apresentam apenas máximos em valores finitos de energia.

Em particular para  $V = 2$ , a parte imaginária de susceptibilidade de carga tem uma aparência idêntica à da susceptibilidade de spin, posto que para este valor, os seus denominadores se igualam, a diferença sendo que o máximo da susceptibilidade de carga se apresenta bem acima do da susceptibilidade de spin:  $-Im\chi^{ch} \approx 2,5$  e  $-Im\chi^{sp} \approx 0,64$  (ver Fig. 5.20 para esta última)

Nas figuras 5.17 e 5.18, apresentaremos os gráficos das susceptibilidades de carga para  $U = 3$  e  $U = 5$ , para valores de interação  $V$  nos correspondentes pontos de transição e valores próximo a este. Observam-se as mesmas

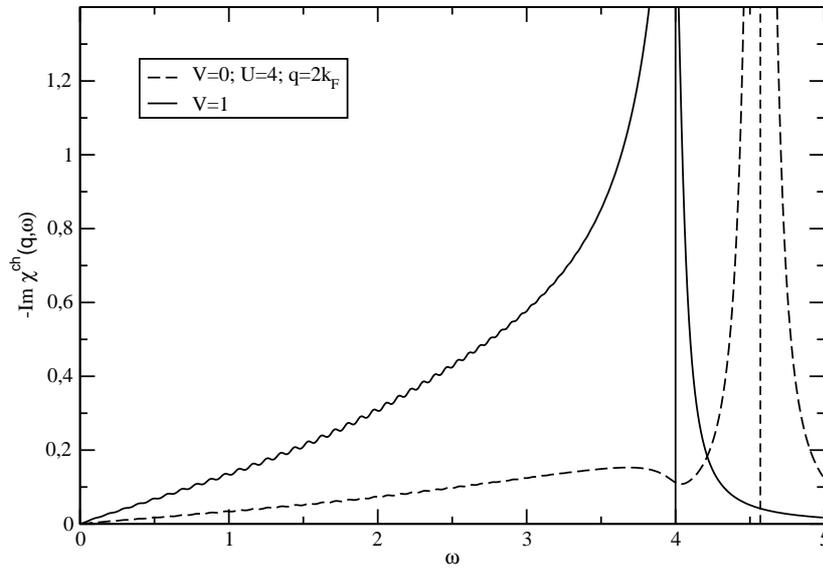


Figura 5.15:  $-Im\chi^{ch}$  renormalizada em função de  $w$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 4$  para  $V = 0$  e 1. As retas verticais indicam os respectivos picos de plasmons.

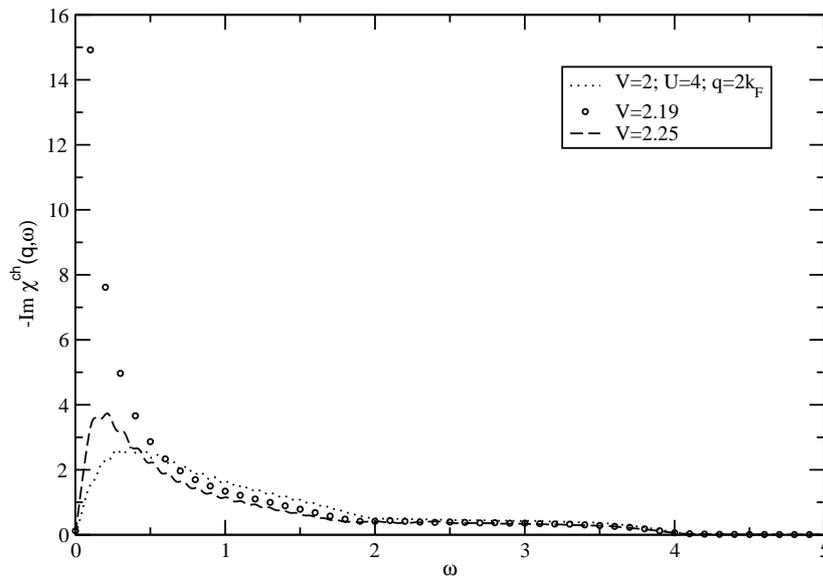


Figura 5.16:  $-Im\chi^{ch}$  renormalizada em função de  $w$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 4$  para  $V = 2$ , 2,19 e 2,25.

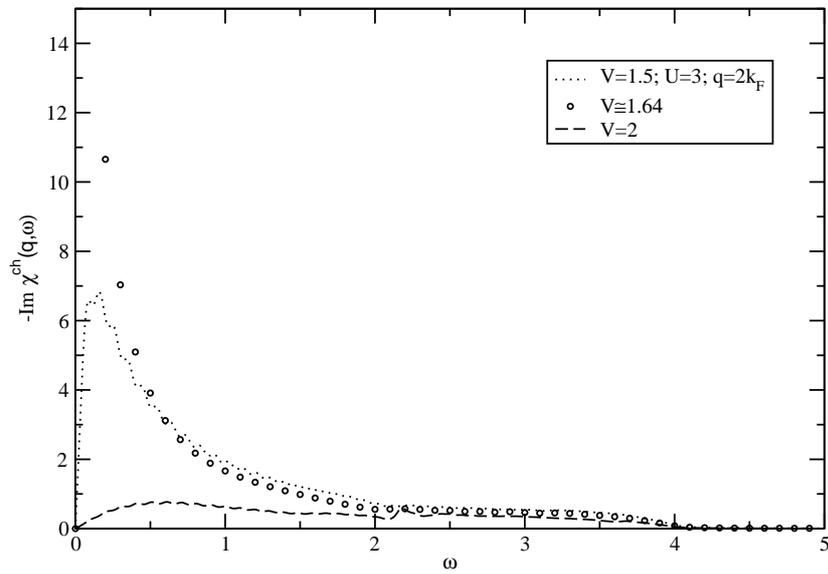


Figura 5.17:  $-Im\chi^{ch}$  renormalizada em função de  $w$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 3$  para  $V = 1, 5$ ,  $1, 64$  e  $2$ .

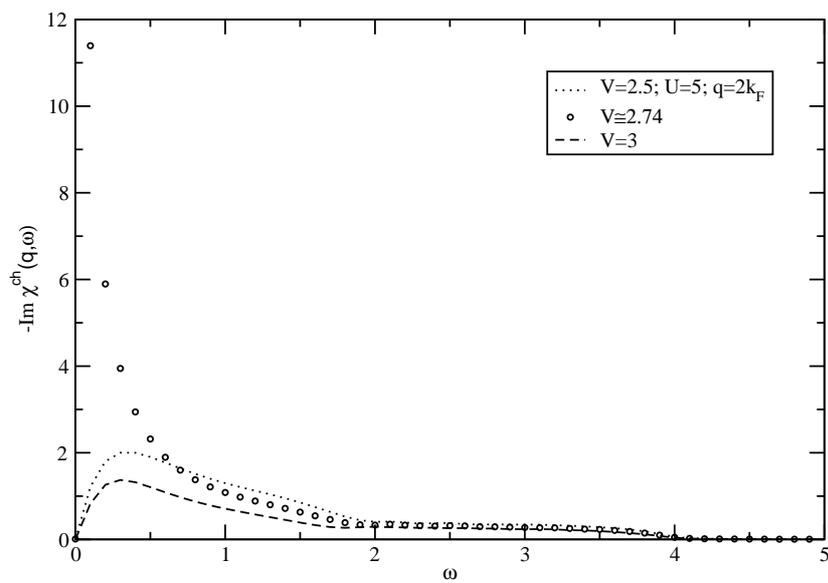


Figura 5.18:  $-Im\chi^{ch}$  renormalizada em função de  $w$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 5$  para  $V = 2, 5$ ,  $2, 74$  e  $3$ .

características que no caso anterior.

### A susceptibilidade de spin $\chi^{sp}(q, w)$

Para a susceptibilidade de spin, temos que para pequenos valores de  $V$  ( $V = 0$  e  $V = 1$ ), uma divergência é observada em  $w = 0$ , o que caracteriza uma região de SDW (Fig.5.19). Quando  $V$  assume o valor de transição,  $-Im\chi^{sp}$  fica completamente bem definida em  $w = 0$  com um máximo em  $w \neq 0$ , finito ( Fig.5.20), enquanto a susceptibilidade de carga ( $-Im\chi^{ch}$ ) diverge em  $w = 0$ . Note que para  $V = 2$ , a susceptibilidade de spin tem a mes

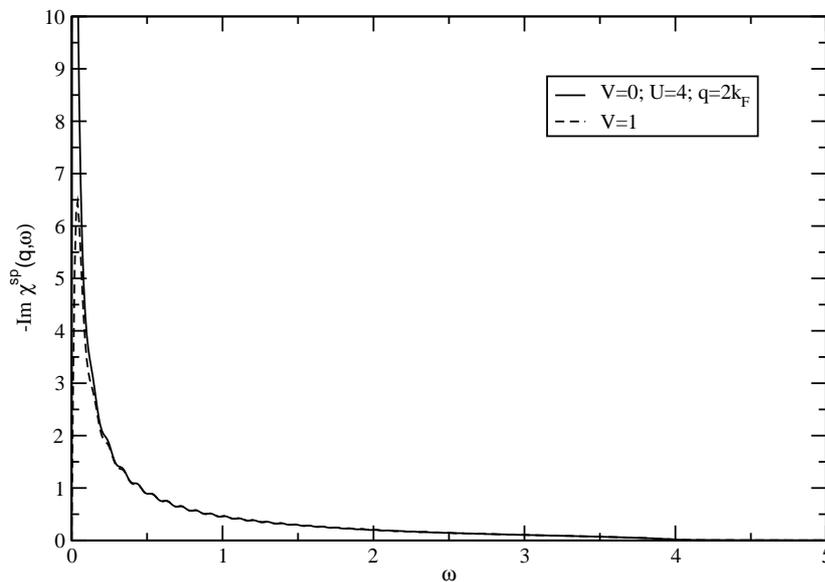


Figura 5.19:  $-Im\chi^{sp}$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 4$  e  $V = 0$  e  $1$ .

Nas figuras 5.21 e 5.22 apresentamos os gráficos para o negativo da parte imaginária da susceptibilidades de spin para  $U = 3$  e  $U = 5$  para valores de  $V$  próximos aos pontos de transição . Esses gráficos mostram um comportamento semelhante ao apresentado na figura 5.20.

Na figura 5.23 apresentamos o diagrama  $U \times V$  mostrando o deslocamento da linha de transição para a região CDW.

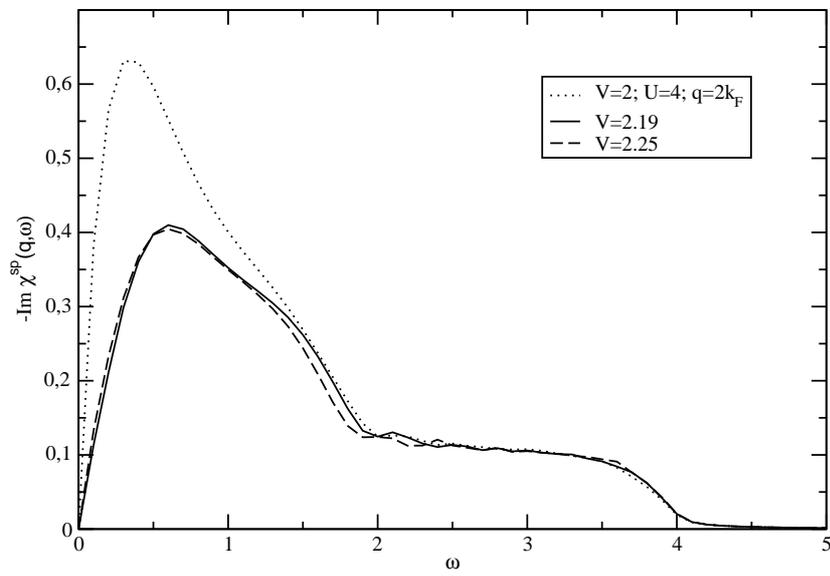


Figura 5.20:  $-Im\chi^{sp}$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 4$  e  $V = 2; 2,19$  e  $2,25$ .

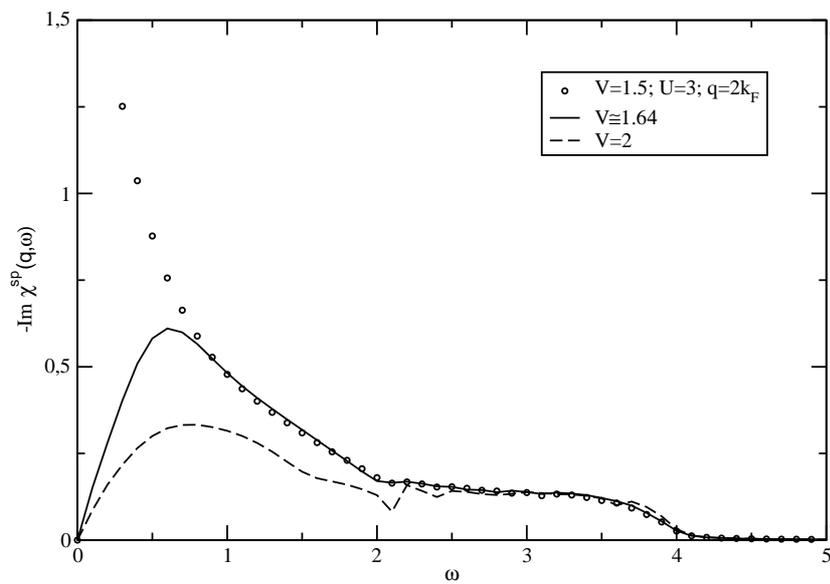


Figura 5.21:  $-Im\chi^{sp}$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 3$  e  $V = 1,5; 1,64$  e  $2$ .

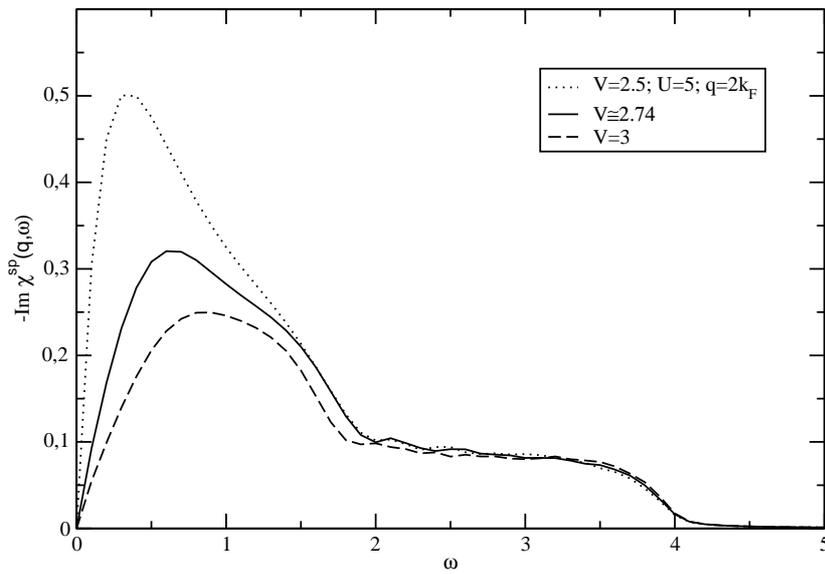


Figura 5.22:  $-Im\chi^{sp}$  em  $q = 2k_F$ ,  $U = 5$  e  $V = 2,5; 2,74$  e  $3$ .

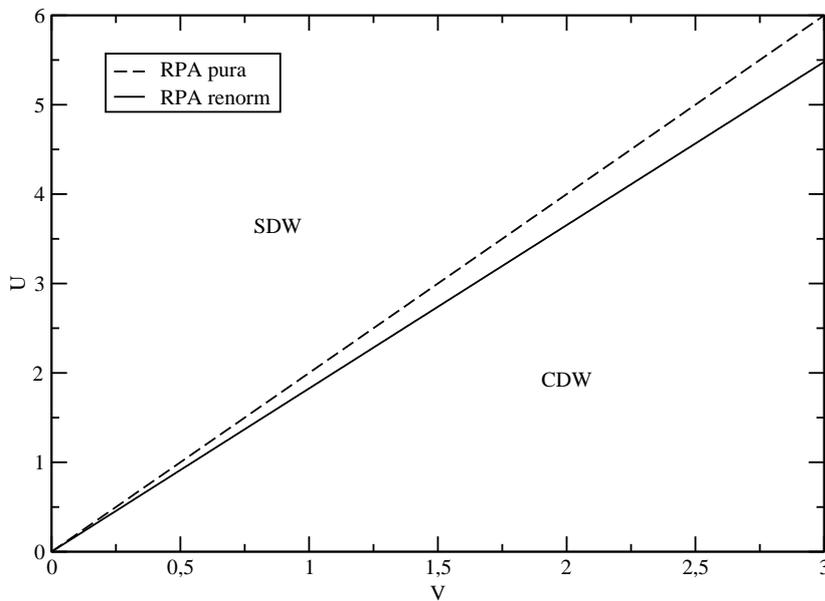


Figura 5.23: Diagrama de fase obtido na aproximação RPA renormalizada para o hamiltoniano de Hubbard estendido, para banda semi-cheia. A equação da reta é  $U \approx 1,82V$