

1 Introdução

O advento da supercondutividade de alta temperatura, que até o presente momento permanece ainda teoricamente inexplicada em sua essência, tem impulsionado uma intensa busca por métodos que descrevam sistemas fermiônicos fortemente correlacionados.

Os fermions fortemente correlacionados são também o ingrediente central de muitos outros sistemas de interesse físico, como os compostos de fermions pesados (“heavy” fermions) e uma variedade de metais orgânicos, que apresentam propriedades supercondutoras e isolantes¹.

Neste trabalho apresentamos o método da RPA auto-consistente e o da RPA renormalizada, que é uma versão mais simples do primeiro. Esses métodos podem descrever bastante bem sistemas fortemente correlacionados e representam uma melhora considerável em relação aos tradicionais, embora, em contrapartida, exijam um esforço computacional considerável. Ambos, em última análise, correspondem a uma aproximação tipo campo médio baseado na equação de Dyson, que descreve formalmente a equação de movimento para as funções de Green de um sistema de muitos corpos.

A RPA renormalizada é uma generalização da RPA², que foi muito usada nas décadas de 60 e 70, e se tornara uma das principais técnicas teóricas de muitos corpos para descrever sistemas magnéticos localizados ou itinerantes e também sistemas não magnéticos.

Na RPA renormalizada apenas a parte instantânea do operador de massa é considerado enquanto que na RPA auto-consistente a parte dinâmica daquele operador é também levada em conta.

O método da RPA renormalizada conduz a um sistema de equações não lineares completamente fechado para as funções de correlação a *dois corpos*, cujas soluções auto-consistentes serão obtidas numericamente.

Embora não seja uma teoria desenvolvida especialmente para uma dimensão ($1D$), a RPA renormalizada foi capaz de reproduzir de forma exata o espectro de excitação das ondas de spin, $\omega_k = (\pi/2)|\text{sen } k|$, conhecido do “ansatz” de Bethe, para a cadeia antiferromagnética de Heisenberg³ (ver também mais adiante).

No capítulo 2 apresentamos o método da RPA autoconsistente e o da renormalizada⁴. Introduzimos as susceptibilidades de carga e longitudinal de spin, das quais faremos muito uso nesta tese. Apresentamos uma regra

de soma que é obedecida por nossas aproximações, mas não pela RPA convencional. Veremos que neste método, a autoconsistência se implementa usando valores médios cumulantes.

No capítulo 3 aplicamos o método ao modelo de Hubbard (puro) $1D$. A implementação numérica é apresentada bem como resultados para vários valores do parâmetro U . Sabemos da solução exata para este sistema^{5,6} que para preenchimento meio o estado fundamental é isolante para qualquer $U \neq 0$; para os demais preenchimentos se obtém um estado fundamental metálico com comportamento de líquido de Luttinger. Nosso método, entretanto apresenta, para a função distribuição dos momentos n_k , artificialmente, uma transição metal-isolante. À medida que U cresce, para preenchimento meio, o estado isolante é obtido e os resultados são confiáveis. Para outros preenchimentos, o comportamento de líquido de Luttinger não ocorre.

Neste capítulo verificamos ainda que no limite acoplamentos fortes e preenchimento meio podemos obter analiticamente a solução para n_k e esta difere da solução exata⁷ apenas por um pre-fator.

No capítulo 4 aplicamos nosso método ao modelo de Hubbard estendido com interações até segundos vizinhos. Veremos que formalmente as equações para este caso ficam pouco modificadas em relação ao caso Hubbard puro mas as consequências físicas- discutidas no capítulo 5- são muito importantes, permitindo a existência, por exemplo, de um estado fundamental de onda de densidade de carga (CDW, em inglês).

Os capítulos 4 e 5 contém nossa contribuição ao assunto.

Finalmente no capítulo 6 apresentamos as conclusões.