6
Conclusões

Nesta tese apresentamos os métodos da RPA auto-consistente e da renormalizada . Este último foi apresentado de modo mais detalhado, pois, devido à sua relativa simplicidade computacional, o utilizamos em nossos cálculos.

No capítulo 2, depois da apresentação dos métodos, aplicamos a RPA renormalizada ao modelo de Hubbard puro e também verificamos que uma certa regra de soma é obedecida, a qual liga a integral de χ^{ch} ou χ^{sp}, ponderada pela energia, à energia cinética média por sítio.

No capítulo 3, vimos que χ^0 depende de U através dos $n_k^{\prime}s$, devido à auto-consistência. Esta auto-consistência, por sua vez, melhora consideravelmente os resultados em relação à RPA convencional, inclusive eliminando a instabilidade presente nesta. Dai que numericamente se pode verificar que a regra de soma referida acima é obedecida no nosso método mas não na RPA convencional.

O método, que é uma forma de campo médio e não foi desenvolvido especificamente para 1D, introduz artificialmente uma transição metal-isolante e falha em detetar comportamento líquido de Luttinger para preenchimento 1/4.

No caso de acoplamentos fortes o método admite uma solução analítica, a qual difere do correspondente limite do “ansatz” de Bethe apenas por um pré-fator.

No capítulo 4 aplicamos o método ao modelo de Hubbard estendido com interações até segundos vizinhos, para interações U, V_1, V_2 repulsivas. Geramos a hamiltoniana efetiva $\mathcal{H}^{SC}$, que é uma expressão bastante complicada mas na RPA renormalizada há simplificação , apenas agregando-se um termo em relação ao Hubbard puro. Isto permite encontrar, nesta aproximação , as funções de Green e as susceptibilidades de carga e de spin, analiticamente. A expressão para χ^{sp} tem a mesma forma que a de Hubbard puro mas χ^0 depende agora de V_1 e V_2, além de U.

No capítulo 5 resolvemos numericamente as equações e expressões encontradas no capítulo 4, para banda semi-cheia, na ausência de interação V_2 entre segundos vizinhos. Aí verificamos que V_1 (que agora denotamos por V) tende a reduzir a frequência dos plasmons, o que indica que- pelos menos para valores relativamente pequenos que consideramos ($V < U$)- é mais fácil criá-los. Para valores grandes, V inibe a ocupação de sítios vizinhos estimulando a dupla ocupação , provavelmente dificultando as oscilações de densidade que são os plasmons.

Com relação aos magnons, à medida que V cresce dificulta sua criação, ao aumentar $Re\chi^0$, afastando-a mais ainda da reta $-1/U$. Entendemos, outra vez, que isto se deve à diminuição dos pares de primeiros vizinhos, os quais tendem a ajudar na ordem magnética.

A introdução de V permite a existência de uma ordem de densidade de carga(CDW) e o método pode ser usado para determinar a linha que separa as duas fases. Usamos como critério para a transição, o aparecimento de um pico de plasmon em χ^{ch} em $w = 0$ e em $q = 2k_F$. Devido à renormalização, este pico ocorre, para um dado U, para valores de V um pouco maiores que os previstos na RPA convencional e em acordo com as predições de métodos que não usam as aproximações de campo médio (ver por exemplo, referências [24], [29] e [30]).

A fase BOW não foi considerada neste trabalho; temos a intenção de usar posteriormente o presente método para determinar sua disposição no diagrama de fase do modelo estendido.

Para banda um quarto cheia, a presença de V_2 introduz inúmeros efeitos novos, os quais servem para descrever os sais de Bechgaard[15], como é discutido na referência [19]. Pretendemos também usar nosso método para descrever estes sistemas, como continuação do presente trabalho.