Pontifícia Universidade Católica
do Rio de Janeiro

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

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

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

Lourival Manoel da Silva Filho

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

Lista de Figuras