

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA  
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Giordano Paulo da Motta

**PSEUDOGAP E ENERGIA CINÉTICA DE SUPERCONDUTORES NÃO  
CONVENCIONAIS DESCRITOS POR UM MODELO DE HUBBARD EM  
DUAS DIMENSÕES**

Santa Maria, RS  
2020

**Giordano Paulo da Motta**

**PSEUDOGAP E ENERGIA CINÉTICA DE SUPERCONDUTORES NÃO  
CONVENCIONAIS DESCRITOS POR UM MODELO DE HUBBARD EM DUAS  
DIMENSÕES**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Física**.

ORIENTADOR: Prof. Eleonir João Calegari

Santa Maria, RS  
2020

Motta, Giordano Paulo da  
Pseudogap e energia cinética de supercondutores não  
convencionais descritos por um modelo de Hubbard em duas  
dimensões / Giordano Paulo da Motta.- 2020.  
66 p.; 30 cm

Orientador: Eleonir João Calegari  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa  
Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de  
Pós-Graduação em Física, RS, 2020

1. Pseudogap 2. Supercondutividade não convencional  
3. Modelo de Hubbard I. Calegari, Eleonir João II. Título.

Sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFSM. Dados fornecidos pelo autor(a). Sob supervisão da Direção da Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central. Bibliotecária responsável Paula Schoenfeldt Patta CRB 10/1728.

---

©2020

Todos os direitos autorais reservados a Giordano Paulo da Motta. A reprodução de partes ou do todo deste trabalho só poderá ser feita mediante a citação da fonte.

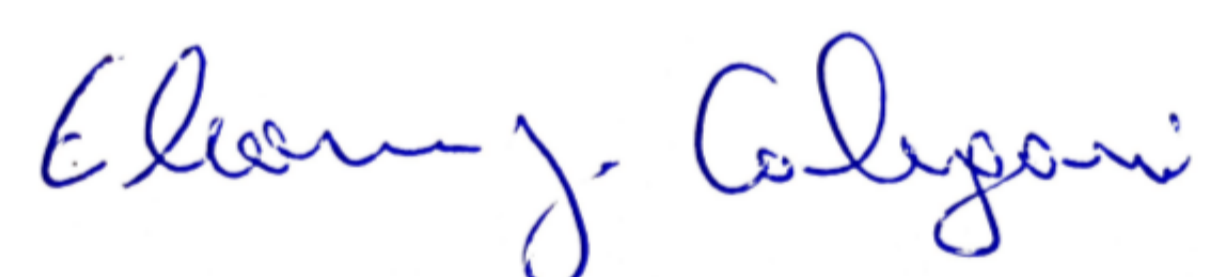
End. Eletr.: giordanopm@gmail.com

**Giordano Paulo da Motta**

**PSEUDOGAP E ENERGIA CINÉTICA DE SUPERCONDUTORES NÃO  
CONVENCIONAIS DESCRITOS POR UM MODELO DE HUBBARD EM DUAS  
DIMENSÕES**

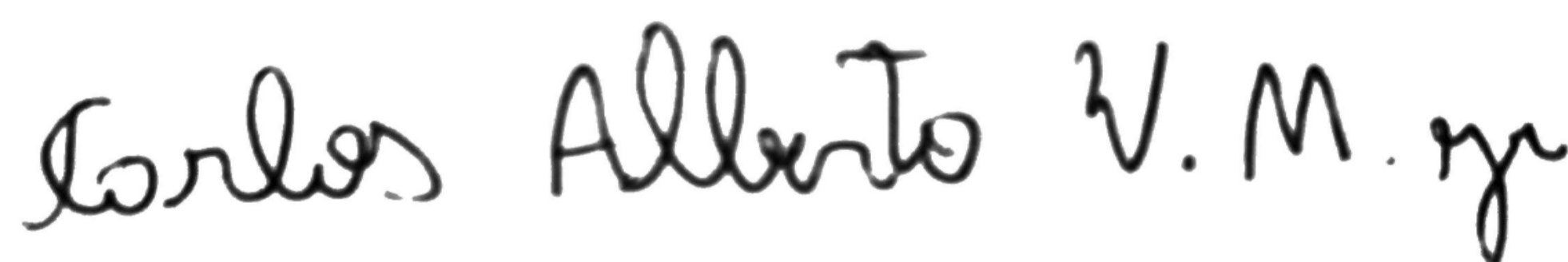
Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Física**.

**Aprovado em 30 de março de 2020:**



---

**Eleonir João Calegari, Dr. (UFSM)**-Videoconferência  
(Presidente/Orientador)



---

**Carlos Alberto Vaz de Moraes Júnior, Dr. (UFPEL)**-Videoconferência



---

**Lúcio Strazzabosco Dorneles, Dr. (UFSM)**-Videoconferência

Santa Maria, RS  
2020

## DEDICATÓRIA

*Aos meus avós, Paulo e Erica, e à minha mãe, Lorena (In memoriam).*

## **AGRADECIMENTOS**

*Agradeço às pessoas que, de uma forma ou de outra, contribuíram para a realização deste trabalho, e, em especial:*

- ao professor Eleonir João Calegari, pela sua orientação, paciência e dedicação;*
- aos colegas Leonardo Prauchner e Rafael Rossatto, pela ajuda inestimável;*
- ao Departamento de Física da UFSM e aos funcionários da pós-graduação;*
- ao professor Luiz Carlos da Silva Duarte, pelo incentivo à realização do mestrado;*
- à minha família e aos meus amigos, pelo apoio constante.*

## RESUMO

# PSEUDOGAP E ENERGIA CINÉTICA DE SUPERCONDUTORES NÃO CONVENCIONAIS DESCRITOS POR UM MODELO DE HUBBARD EM DUAS DIMENSÕES

AUTOR: Giordano Paulo da Motta  
ORIENTADOR: Eleonir João Calegari

Em supercondutores convencionais descritos pela Teoria de Bardeen-Schrieffer-Cooper (BCS), a transição do estado normal para o estado supercondutor é acompanhada por uma redução na energia potencial e um aumento na energia cinética. Em contrapartida, nos supercondutores de alta temperatura, as energias potencial e cinética apresentam um comportamento não convencional que pode estar fortemente relacionado com o fenômeno do pseudogap. No presente trabalho, são analisadas as energias potencial e cinética no estado supercondutor do modelo de Hubbard de duas dimensões. O modelo é investigado usando o método das funções de Green com uma aproximação de  $n$ -polos, que permite supercondutividade com paridade de onda  $d_{x^2-y^2}$ . No presente cenário, um pseudogap emerge próximo dos pontos antinodais na superfície de Fermi, quando o regime de forte correlação é atingido. Os resultados mostram que, em uma região de baixa dopagem, o sistema entra no regime de forte correlação e a abertura do pseudogap é seguida por uma diminuição na energia cinética e um aumento na energia potencial. Um diagrama de fase da interação coulombiana  $U$  versus a ocupação  $n_T$  também é apresentado. Esse diagrama de fase mostra claramente que o regime de pseudogap coincide com o regime de forte correlação no qual as energias potencial e cinética apresentam um comportamento não convencional. A análise da densidade de estados e do potencial químico mostra que o comportamento não convencional das energias potencial e cinética ocorre devido à manifestação do pseudogap na região de altas ocupações. Observa-se também que o surgimento do pseudogap, quando a ocupação aumenta, é precedido de uma mudança na topologia da superfície de Fermi, a qual caracteriza uma transição de Lifshitz. Tanto o pseudogap quanto a transição de Lifshitz são afetados pelo salto para segundos vizinhos  $t_2$  (do modelo de Hubbard). Esse resultado está de acordo com resultados teóricos e experimentais recentes para o modelo de Hubbard e para os cupratos.

**Palavras-chave:** Pseudogap. Supercondutividade não convencional. Modelo de Hubbard.

## ABSTRACT

# PSEUDOGAP AND KINETIC ENERGY OF UNCONVENTIONAL SUPERCONDUCTORS DESCRIBED BY A TWO-DIMENSIONAL HUBBARD MODEL

AUTHOR: Giordano Paulo da Motta

ADVISOR: Eleonir João Calegari

In conventional superconductors described by the Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) Theory, the transition from the normal to the superconducting state is accompanied by a reduction in the potential energy and an increase in the kinetic energy. On the other hand, in high-temperature superconductors the potential and the kinetic energies present an unconventional behavior that may be strongly related to the pseudogap phenomena. In this work, the kinetic and potential energies in the superconducting state of the two-dimensional Hubbard model were analyzed. The model is investigated using the Green's function method within a  $n$ -pole approximation, which allows superconductivity with  $d_{x^2-y^2}$ -wave pairing. In the present scenario, a pseudogap emerges near the anti-nodal points in the Fermi surface, when the strong coupling regime is reached. The results show that in the low doping region, the system enters the strong coupling regime and the opening of a pseudogap is followed by a decrease in the kinetic energy and an increase in the potential energy. A phase diagram of Coulomb interaction  $U$  versus the occupation  $n_T$  is also presented. This phase diagram shows clearly that the pseudogap regime coincides with the strong coupling regime in which the kinetic and potential energies present an unconventional behavior. The analysis of the density of states and the chemical potential showed that the unconventional behavior of the potential and kinetic energies occurs due to the pseudogap emergence in the high occupancy region. It was also observed that the pseudogap emergence, when the occupancy increases, is preceded by a change in the Fermi surface topology, which characterizes a Lifshitz transition. Both the pseudogap and the Lifshitz transition are affected by the next-nearest neighbor hopping  $t_2$  (of the Hubbard model). This result is in accordance with recent theoretical and experimental results for the Hubbard model and the cuprates.

**Keywords:** Pseudogap. Unconventional superconductivity. Hubbard model.



## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Linha do tempo de descobertas de materiais supercondutores de alta temperatura. ....	14
Figura 2.2 – Células unitárias de alguns cupratos. ....	16
Figura 2.3 – Estrutura dos planos de $\text{CuO}_2$ e reservatórios de cargas (CR) dos cupratos. ....	16
Figura 2.4 – Estrutura cristalina do NCCO. ....	17
Figura 2.5 – Estrutura cristalina do LSCO. ....	18
Figura 2.6 – Diagrama de fases dos cupratos. ....	19
Figura 2.7 – a) Densidade de estados do estado normal (de um metal). b) Gap supercondutor na densidade de estados. ....	22
Figura 2.8 – Simetrias de onda-s e onda- $d_{x^2-y^2}$ do parâmetro de ordem supercondutor	22
Figura 2.9 – Contribuição dos elétrons para o calor específico dividido pela temperatura. ....	23
Figura 2.10 – Visualização direta do pseudogap através de dados obtidos pela técnica experimental ARPES. ....	24
Figura 2.11 – Superfície de Fermi para o estado normal, estado supercondutor e pseudogap. ....	25
Figura 2.12 – Exemplo de transição topológica com alteração da topologia da superfície de Fermi. ....	26
Figura 2.13 – Outro exemplo de transição topológica no qual uma região separada da superfície principal aparece. ....	26
Figura 2.14 – Exemplo de transição de Lifshitz através da mudança da superfície de Fermi do tipo elétron para o tipo buraco. ....	27
Figura 3.1 – Contornos da forma integral da função descontínua. ....	34
Figura 4.1 – Parâmetro de ordem $\Delta_0$ em função da ocupação $n_T$ para diferentes valores de $t_2$ . ....	49
Figura 4.2 – Diferenças das energias cinética e potencial em função da ocupação para os mesmos parâmetros do modelo considerados na figura 4.1. ....	50
Figura 4.3 – Banda renormalizada $\omega_{1,\vec{k}\sigma}$ para $U = 8, 0 t_1 $ , $t_2 = 0, 2 t_1 $ e diferentes ocupações. ....	51
Figura 4.4 – Banda renormalizada para $n_T = 0, 83$ , $t_2 = 0, 2 t_1 $ e diferentes valores de $U$ . ....	52
Figura 4.5 – Banda renormalizada para diferentes valores de $t_2$ . ....	53
Figura 4.6 – Bandas do estado supercondutor para $U = 8, 0 t_1 $ , $t_2 = 0, 2 t_1 $ e diferentes ocupações. ....	53
Figura 4.7 – Densidade de estados para $U = 8, 0 t_1 $ , $t_2 = 0, 2 t_1 $ e diferentes ocupações. ....	54
Figura 4.8 – Potencial químico $\mu$ em função da ocupação $n_T$ , para $U = 8, 0 t_1 $ e $t_2 = 0, 2 t_1 $ . ....	54
Figura 4.9 – Comportamento das funções de correlação $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$ e $\langle n_{\sigma} n_{-\sigma} \rangle$ associadas às energias cinética e potencial. ....	55
Figura 4.10 – Função de correlação $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ em função de $n_T$ . ....	56
Figura 4.11 – Parâmetro de ordem $\Delta_0$ em função da interação $U$ para $t_2 = 0, 2 t_1 $ e diferentes ocupações. ....	56
Figura 4.12 – Energias cinética e potencial em função da interação $U$ para diferentes	

ocupações e $t_2 = 0, 2 t_1 $ . .....	57
Figura 4.13 – Comportamento da superfície de Fermi para $U = 8, 0 t_1 $ , $t_2 = 0, 2 t_1 $ e diferentes ocupações. ....	58
Figura 4.14 – Visualização da mudança na topologia da superfície de Fermi, a qual caracteriza uma transição de Lifshitz. No painel da esquerda, a mudança ocorre devido à variação de $U$ , enquanto que no painel da direita ela se deve à variação de $t_2$ . Ambos os resultados foram obtidos para $n_T = 0, 75$ . No painel da esquerda $t_2 = 0, 2 t_1 $ e no painel da direita $U = 8, 0 t_1 $ . ....	59
Figura 4.15 – Região do pseudogap (PG) em termos da interação coulombiana e da ocupação para diferentes valores de $t_2$ . As curvas que indicam a transição de Lifshitz (LT) e o cruzamento das energias (CR) também são mostradas. ....	60
Figura 4.16 – Comportamento da densidade de estados do estado normal no nível do potencial químico $\rho(\mu)$ , para $U = 8, 0 t_1 $ e $t_2 = 0, 2 t_1 $ . ....	61

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>SUPERCONDUTORES DE ALTAS TEMPERATURAS</b> .....	<b>14</b>
2.1	TIPOS E PROPRIEDADES .....	15
<b>2.1.1</b>	<b>Cupratos</b> .....	<b>15</b>
2.1.1.1	<i>Dopagem por Elétrons</i> .....	17
2.1.1.2	<i>Dopagem por Buracos</i> .....	18
2.1.1.3	<i>Diagrama de Fases dos Cupratos</i> .....	18
<b>2.1.2</b>	<b>Outros Materiais Supercondutores de Alta Temperatura</b> .....	<b>19</b>
2.2	ASPECTOS TEÓRICOS DA SUPERCONDUTIVIDADE DE ALTA TEMPERATURA.....	20
<b>2.2.1</b>	<b>Teoria BCS e os Supercondutores de Alta Temperatura</b> .....	<b>20</b>
<b>2.2.2</b>	<b>Gap Supercondutor</b> .....	<b>21</b>
<b>2.2.3</b>	<b>Superfície de Fermi e a Região do Pseudogap</b> .....	<b>22</b>
<b>2.2.4</b>	<b>Transição de Lifshitz</b> .....	<b>25</b>
<b>3</b>	<b>O FORMALISMO</b> .....	<b>28</b>
3.1	O MODELO .....	28
3.2	A TÉCNICA DAS FUNÇÕES DE GREEN .....	29
<b>3.2.1</b>	<b>Funções de Green Avançada e Retardada</b> .....	<b>29</b>
<b>3.2.2</b>	<b>Equação de Movimento das Funções de Green</b> .....	<b>30</b>
<b>3.2.3</b>	<b>Funções de Correlação</b> .....	<b>31</b>
<b>3.2.4</b>	<b>Representação Espectral</b> .....	<b>32</b>
3.2.4.1	<i>Representação Espectral para as Funções de Correlação Temporais</i> .....	32
3.2.4.2	<i>Representação Espectral para as Funções de Green Avançada e Retardada</i> ..	33
3.3	APROXIMAÇÃO DE N-POLOS .....	36
3.4	RESULTADOS ANALÍTICOS .....	37
<b>3.4.1</b>	<b>Estado Normal</b> .....	<b>38</b>
<b>3.4.2</b>	<b>Estado Supercondutor</b> .....	<b>42</b>
<b>3.4.3</b>	<b>Estudo Energético</b> .....	<b>48</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS</b> .....	<b>49</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO</b> .....	<b>62</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>64</b>

## 1 INTRODUÇÃO

O físico holandês Heike Kammerlingh Onnes, em 1911, ao descobrir que a resistência elétrica de amostras de mercúrio caía abruptamente para zero em temperaturas inferiores a 4,2 K (temperatura de liquefação do hélio) (ONNES, 1912), estava abrindo um novo campo de estudo na física que mais de um século depois, ainda mobiliza enormemente os esforços da comunidade científica especializada na área e continua sendo uma fronteira ativa de pesquisa. A descoberta do fenômeno que passou a ser conhecido como supercondutividade rendeu a Onnes o prêmio Nobel de física de 1913. Nas décadas subsequentes, o fenômeno da supercondutividade foi encontrado em outros materiais, tais como chumbo e nióbio, em temperaturas ligeiramente mais altas do que no caso do mercúrio. Nos anos 30, Walther Meissner e Robert Ochsenfeld detectam a expulsão das linhas de campo magnético do interior de amostras de certos materiais quando os mesmos eram resfriados até a temperatura de transição para o estado supercondutor (MEISSNER; OCHSENFELD, 1933). Tal fato, denominado efeito Meissner, representou uma evidência de que o fenômeno da supercondutividade não é a idealização do conceito clássico de condutividade perfeita, mas sim uma nova fase termodinâmica (ROSE-INNES; RODERICK, 1978).

Esses achados experimentais impulsionaram a busca por uma explicação teórica para o fenômeno da supercondutividade. Ainda em meados dos anos 30, os irmãos Fritz e Heinz London conceberam o primeiro modelo teórico (clássico) da supercondutividade, que foi bem-sucedido em explicar quantitativamente o efeito Meissner. Uma teoria fenomenológica da supercondutividade foi proposta no início dos anos 50 pelos físicos soviéticos Vitaly Ginzburg e Lev Landau, conhecida como Teoria Ginzburg-Landau, a qual descrevia com sucesso o comportamento de supercondutores do tipo I (aqueles com apenas um valor de campo magnético crítico, acima do qual a supercondutividade é destruída) sem adentrar em aspectos microscópicos (ROSE-INNES; RODERICK, 1978). Finalmente, em 1957, John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer publicam um artigo histórico através do qual expõem a primeira teoria microscópica da supercondutividade (que passa a ser conhecida como teoria BCS em função das iniciais dos nomes dos três autores), atribuindo às interações elétron-fônon a causa da formação de elétrons pareados, chamados pares de Cooper, quando tal atração é dominante em relação à repulsão coulombiana. Tais elétrons pareados, de acordo com a teoria BCS, são os responsáveis pela corrente supercondutora (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957).

A teoria BCS é bem-sucedida ao explicar a supercondutividade convencional, mas ela está baseada em correlações fracas, assim como a teoria de bandas eletrônicas (proposta para explicar as propriedades de metais e isolantes) que pressupõe a não-interação entre elétrons. Todavia, a teoria de bandas falha em casos onde há correlação forte, como

em certos óxidos de metais de transição. O fato de ser necessária a consideração das fortes interações coulombianas para descrever adequadamente certos sistemas despertou o interesse nos assim chamados sistemas de elétrons fortemente correlacionados (CALEGARI, 2006). Entre as décadas de 40 e 60, Nevil Mott deu grandes contribuições ao estudo desses sistemas, inclusive explicando o estado isolante de certos materiais que deveriam ser condutores de acordo com a teoria de bandas, ao levar em consideração as interações elétron-elétron (MOTT, 1961). Tais materiais passaram a ser conhecidos como isolantes de Mott. Em 1963, Hubbard propôs um modelo aproximado para descrever sistemas fortemente correlacionados envolvendo apenas dois termos: um deles cinético e outro associado à interação coulombiana (HUBBARD, 1963).

A descoberta dos supercondutores de alta temperatura em 1986 (BEDNORZ; MÜLLER, 1986) atraiu enorme interesse e tem sido um tema importante da física da matéria condensada desde então. O fato da supercondutividade de alta temperatura ter sido descoberta inicialmente em óxidos de metais de transição (cupratos) despertou uma renovada atenção para o estudo dos sistemas fortemente correlacionados. Devido às fortes correlações, a teoria BCS não consegue descrever a supercondutividade nos cupratos. Assim, esses sistemas são chamados de supercondutores não convencionais. Até hoje, não se chegou a um consenso a respeito da teoria microscópica que melhor descreve a supercondutividade não convencional, uma vez que a mesma apresenta um comportamento atípico e características anômalas que dificultam uma descrição em termos da teoria BCS, bem-sucedida na descrição da supercondutividade convencional. Entretanto, foram feitas inúmeras tentativas de concepção teórica do fenômeno da supercondutividade de alta temperatura desde sua descoberta, e atualmente, pode-se dizer que as visões sobre o tema coalesceram em torno de duas posições básicas: uma delas sustenta que, apesar das características anômalas, a supercondutividade deve ser entendida mais ou menos em termos da teoria BCS convencional como que emergindo a partir da troca de uma quasipartícula pareada, provavelmente de origem magnética; a outra, sustenta que a supercondutividade é uma propriedade intrínseca de um estado fortemente correlacionado da matéria, não podendo ser interpretada como uma troca de uma excitação bem-definida (GULL; MILLIS, 2012).

Os cupratos, óxidos de cobre com estrutura em camadas, são a principal classe de materiais supercondutores de alta temperatura, apresentando, além de supercondutividade com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$  com altas temperaturas de transição ( $T_C$ ), outras duas características notáveis: um estado isolante (de Mott) e um regime chamado de pseudogap em que a superfície de Fermi é fortemente suprimida em algumas partes da primeira zona de Brillouin, mas não em outras. O pseudogap é um gap parcial que surge na densidade de estados do estado normal dos cupratos. Existem várias teorias propostas para descrever os mecanismos que dão origem ao pseudogap. Neste trabalho, será adotado um cenário onde correlações antiferromagnéticas de curto alcance são responsáveis pelo pseudogap

(HARRISON; MCDONALD; SINGLETON, 2007; MORINARI, 2018; MORINARI, 2019).

O pseudogap observado em cupratos de alta  $T_C$  ocorre no regime subdopado em que fortes correlações estão presentes (TIMUSK; STATT, 1999). As correlações fortes em cupratos de alta  $T_C$  tornam o modelo de Hubbard adequado para investigações teóricas desses sistemas, incluindo a anomalia do pseudogap. Acredita-se que o entendimento dos mecanismos do regime de pseudogap possa ser a chave para esclarecer a física por trás da supercondutividade não convencional. Em um trabalho recente, Gull e Millis (2012) propuseram que o diagrama de fase dos supercondutores de alta temperatura (HTSC) pode ser separado em dois regimes: um regime de fraca correlação e um regime de forte correlação. Nesse caso, o regime de fraca correlação é descrito em termos da supercondutividade BCS convencional. Por outro lado, o regime de forte correlação é associado à supercondutividade não convencional. Nesse contexto, o pseudogap é relacionado ao regime de forte correlação. A investigação das energias potencial e cinética em ambos os regimes revela um comportamento interessante das mesmas: na supercondutividade não convencional, indo do estado normal para o estado supercondutor, a energia cinética é diminuída enquanto que a energia potencial aumenta; esse comportamento é invertido quando o sistema entra no regime de fraca correlação.

Trabalhos recentes mostram uma forte relação entre a topologia da superfície de Fermi e o surgimento do pseudogap nos cupratos (CHEN et al., 2012; DOIRON-LEYRAUD et al., 2017; BRAGANÇA et al., 2018). Particularmente, quando o sistema é dopado por buracos, observa-se uma transição de Lifshitz definida por uma mudança abrupta na topologia da superfície de Fermi, em dopagens superiores à dopagem onde ocorre o fechamento do pseudogap (CHEN et al., 2012; BRAGANÇA et al., 2018). Assim, acredita-se que a manifestação do pseudogap e a transição de Lifshitz estão intimamente ligados. Outro trabalho interessante (DOIRON-LEYRAUD et al., 2017) mostra resultados experimentais sobre os efeitos de pressão hidrostática na topologia da superfície de Fermi (transição de Lifshitz) e no comportamento do pseudogap. Tanto a dopagem onde o pseudogap se manifesta quanto a dopagem onde ocorre a transição de Lifshitz dependem da pressão hidrostática. Portanto, esse estudo revela uma nova possibilidade para investigações sobre as origens do pseudogap nos cupratos, na área experimental. Na área teórica, o salto (de um elétron ou buraco) para segundos vizinhos ( $t_2$ ) mais próximos de um sítio  $i$  da rede é um parâmetro sensível à variação de pressão hidrostática (DOIRON-LEYRAUD et al., 2017) e portanto pode ser utilizado para simular efeitos de variação de pressão. Dessa forma, neste trabalho desenvolve-se um estudo sistemático das relações entre pseudogap, transição de Lifshitz e comportamento energético das propriedades normais e supercondutoras de um modelo de Hubbard bidimensional que considera o salto para segundos vizinhos  $t_2$ , o qual permite investigar efeitos de pressão nessas propriedades do modelo.

No capítulo 2 do presente trabalho, faz-se uma revisão da literatura concernente aos supercondutores de alta temperatura, com ênfase especial aos cupratos. O capítulo 3

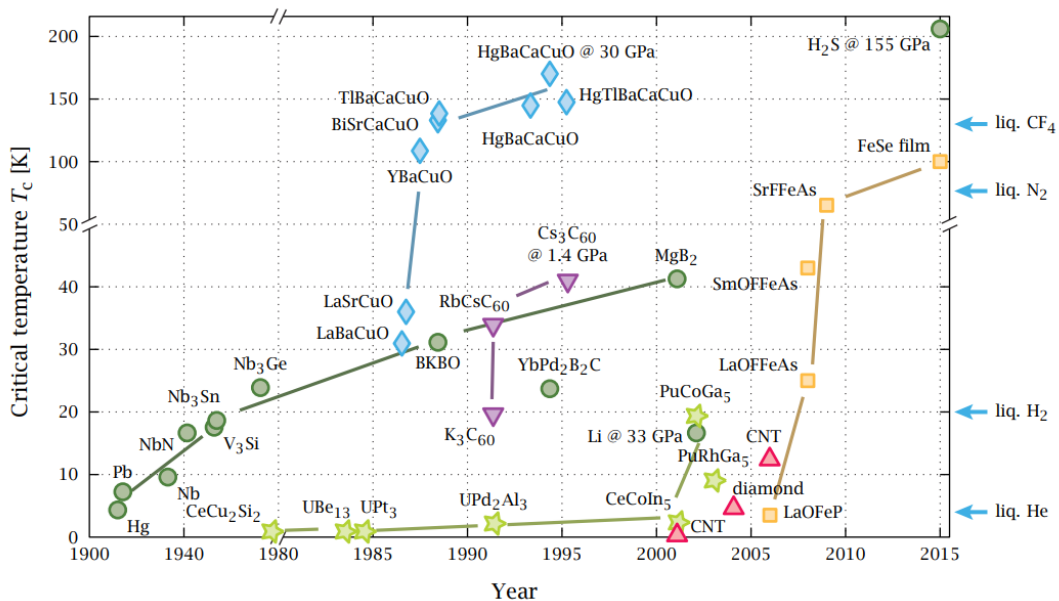
mostra todo o formalismo empregado neste trabalho, iniciando pela apresentação do modelo de Hubbard de uma banda e, na sequência, apresentando em detalhe a técnica das funções de Green. Em seguida, apresenta-se a aproximação de  $n$ -polos, necessária para desacoplar a cadeia infinita de equações de movimento das funções de Green. Finalizando o capítulo 3, tem-se a apresentação dos resultados analíticos obtidos através do emprego do formalismo até então apresentado. No capítulo 4, são apresentados os resultados numéricos obtidos para o modelo de Hubbard bidimensional. O capítulo seguinte é reservado para as considerações finais a respeito do presente trabalho.

## 2 SUPERCONDUTORES DE ALTAS TEMPERATURAS

Durante muito tempo, acreditou-se que o fenômeno da supercondutividade não poderia ocorrer acima dos 30 K. A teoria BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) não permite a formação de pares de Cooper (mecanismo explicativo da supercondutividade convencional) acima de tal temperatura, uma vez que em altas temperaturas as flutuações térmicas destroem as ligações através dos fônons.

A investigação de certos óxidos supercondutores em meados dos anos 80 levou à descoberta do primeiro material supercondutor de alta temperatura (BEDNORZ; MÜLLER, 1986) e desde então uma miríade de materiais dessa classe tem sido descobertos. O estudo de Bednorz e Müller descobriu que o material cerâmico  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}$ , frequentemente referido simplesmente como sistema LBCO, atingia a transição para a supercondutividade a uma temperatura de 35 K, muito acima do recorde anterior de 23 K do  $\text{Nb}_3\text{Ge}$ , de 1973, e acima do limite teórico permitido pela teoria BCS da supercondutividade convencional. A partir de então, muitos supercondutores de alta temperatura foram descobertos, tanto baseados em óxido de cobre quanto em outros materiais, e a temperatura de transição recorde foi se tornando cada vez mais elevada. A figura 2.1 ilustra a evolução na descoberta de materiais supercondutores de alta temperatura nas últimas três décadas, a categorização dos mesmos em diferentes classes e suas respectivas temperaturas de transição.

Figura 2.1 – Linha do tempo de descobertas de materiais supercondutores de alta temperatura.



Fonte: Ray (2015).



Na figura 2.1, os supercondutores convencionais de baixas temperaturas são representados como círculos verdes. Percebe-se que os supercondutores de altas temperaturas surgem em meados dos anos 80, estando alguns de seus exemplos mais conhecidos, como os sistemas LBCO, LSCO e YBCO, representados como losangos azuis. Os primeiros supercondutores de altas temperaturas descobertos, chamados cupratos, são também os primeiros a figurarem no gráfico com temperaturas críticas de transição superiores à temperatura de liquefação do nitrogênio, o que os torna alvissareiros do ponto de vista da exploração comercial. Os pnictídeos, supercondutores baseados em ferro, aparecem mais recentemente, representados como quadrados amarelos.

## 2.1 TIPOS E PROPRIEDADES

As duas grandes classes de supercondutores de altas temperaturas são os cupratos e os pnictídeos (descobertos mais recentemente, já nos anos 2000). A exposição que será feita doravante se concentrará em maiores detalhes nos cupratos.

### 2.1.1 Cupratos

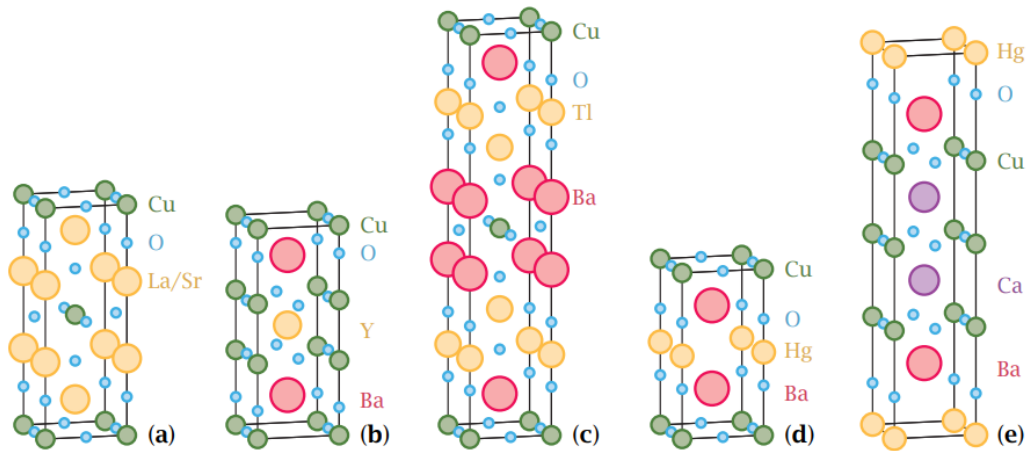
Os óxidos de metais de transição chamados cupratos constituíram a primeira classe de materiais supercondutores de alta temperatura encontrada. A descoberta, em 1986, de que o sistema LBCO atingia a transição para o estado supercondutor a uma temperatura de 35 K catapultou o interesse no estudo dos cupratos pelos anos subseqüentes (BEDNORZ; MÜLLER, 1986). Até então, o recorde de temperatura de transição para a supercondutividade era de 23 K.

Esses materiais são compostos de camadas de óxido de cobre,  $\text{CuO}_2$ , fracamente acopladas, separadas por outros átomos que formam os chamados reservatórios de carga. Esses reservatórios de carga que separam os planos de óxido de cobre, ajudam a estabilizar a estrutura e podem ainda exercer uma forte influência sobre as propriedades de condução do sistema através da dopagem das camadas de  $\text{CuO}_2$  com elétrons extras ou com buracos (RAY, 2015).

Os reservatórios de carga contém outros átomos, tais como lantânio (La), ítrio (Y), bário (Ba), estrôncio (Sr), neodímio (Nd), etc. A figura 2.2 mostra as células unitárias de alguns cupratos, a título de exemplo.

Os cupratos diferem fortemente dos supercondutores tradicionais devido ao fato de que não são metais, mas sim óxidos dopados. Os cupratos não dopados se comportam como isolantes de Mott antiferromagnéticos e, após a dopagem, a supercondutividade emerge. O pareamento que causa a supercondutividade nem sempre acontece com elé-

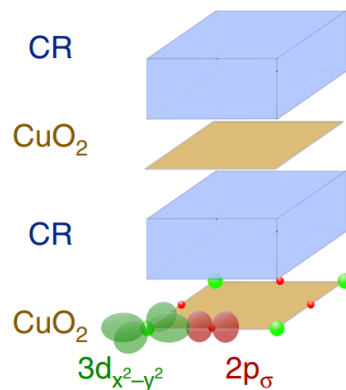
Figura 2.2 – Células unitárias de alguns cupratos.



Fonte: Ray (2015).

trons, podendo acontecer também com buracos, dependendo do tipo de dopagem existente. Buracos pareados se comportam exatamente como um par de Cooper com carga oposta.

Figura 2.3 – Estrutura dos planos de  $\text{CuO}_2$  e reservatórios de cargas (CR) dos cupratos.



Fonte: Rybicki et al. (2016).

A figura 2.3 ilustra a estrutura geral em camadas dos cupratos, nos quais os planos de  $\text{CuO}_2$  estão separados pelos reservatórios de carga. Os planos de óxido de cobre são comuns a todos os sistemas cupratos, mas a constituição química dos reservatórios de carga varia (RYBICKI et al., 2016). Esse plano de  $\text{CuO}_2$ , com geometria quase quadrada, é constituído de um orbital  $d_{x^2-y^2}$  de Cu ligado a quatro orbitais  $p_{\sigma}$  de O. Devido ao fato de que a distância intraplana entre os átomos de cobre e oxigênio é muito menor do que a distância destes para os átomos dos reservatórios de carga, a probabilidade de que o movimento dos elétrons se dê dentro do plano é muito maior do que entre planos. Dessa forma, acredita-se que a supercondutividade nos cupratos seja compreendida em função

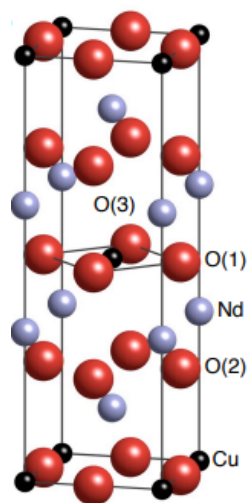
de processos acontecendo nos planos de  $\text{CuO}_2$ . Além disso, a temperatura crítica de transição também parece fortemente dependente, e em direta proporção, do número de planos de óxido de cobre próximos entre si na estrutura (DAGOTTO, 1994).

A substituição de átomos dos reservatórios de carga por outros em um estado de ionização diferente é capaz de doar ou remover elétrons dos planos de  $\text{CuO}_2$ , em um processo denominado dopagem. No caso de doação de elétrons para os planos de óxido de cobre, fala-se em dopagem por elétrons. No caso oposto, de remoção de elétrons dos planos de óxido de cobre, fala-se em dopagem por buracos.

### 2.1.1.1 Dopagem por Elétrons

Um exemplo típico de cuprato dopado por elétrons é o caso do  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ , também conhecido por sistema NCCO, cuja estrutura cristalina é ilustrada pela figura 2.4. Nesse sistema, antes do processo de dopagem, os átomos de oxigênio se encontram no estado de ionização  $\text{O}^{2-}$ , tendo recebido dois elétrons na subcamada 2p, que fica então completamente preenchida. Os átomos de cobre se encontram no estado de ionização  $\text{Cu}^{2+}$ , tendo cedido dois elétrons, um da subcamada 4s e outro da subcamada 3d. Os átomos de neodímio se encontram em um estado de ionização  $\text{Nd}^{3+}$ , tendo cedido três elétrons. Durante o processo de dopagem, a substituição de átomos de neodímio no estado  $\text{Nd}^{3+}$  por átomos de cério no estado  $\text{Ce}^{4+}$  adiciona elétrons aos planos de  $\text{CuO}_2$ , os quais, acredita-se, ocupam os buracos existentes na subcamada 3d do cobre (DAGOTTO, 1994).

Figura 2.4 – Estrutura cristalina do NCCO.

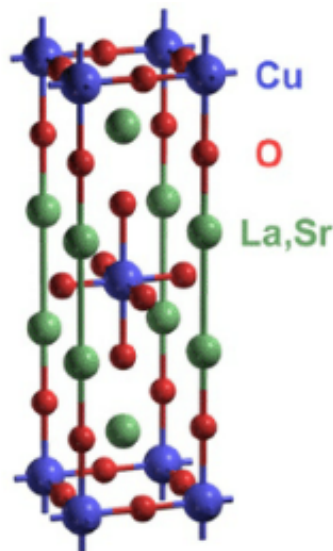


Fonte: Motoyama (2009).

### 2.1.1.2 Dopagem por Buracos

Um exemplo típico de cuprato dopado por buracos é o caso do  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , também conhecido por sistema LSCO, cuja estrutura cristalina é ilustrada pela figura 2.5. Nesse sistema, os átomos de cobre são circundados por seis átomos de oxigênio, quatro deles pertencentes ao plano de  $\text{CuO}_2$  e dois deles fora do plano, um acima e outro abaixo (chamados de oxigênios apicais). Antes da dopagem com estrôncio, os átomos de oxigênio estão em um estado  $\text{O}^{2-}$ , tendo recebido dois elétrons na subcamada 2p, que fica completa. Os átomos de cobre estão em um estado  $\text{Cu}^{2+}$ , tendo perdido dois elétrons, um da subcamada 4s e outro da subcamada 3d. Os átomos de lantânio estão em um estado  $\text{La}^{3+}$ , tendo perdido três elétrons. Durante o processo de dopagem, a substituição de átomos de lantânio no estado  $\text{La}^{3+}$  por átomos de estrôncio no estado  $\text{Sr}^{2+}$ , retira elétrons dos planos de  $\text{CuO}_2$ , criando buracos nos mesmos (DAGOTTO, 1994).

Figura 2.5 – Estrutura cristalina do LSCO.



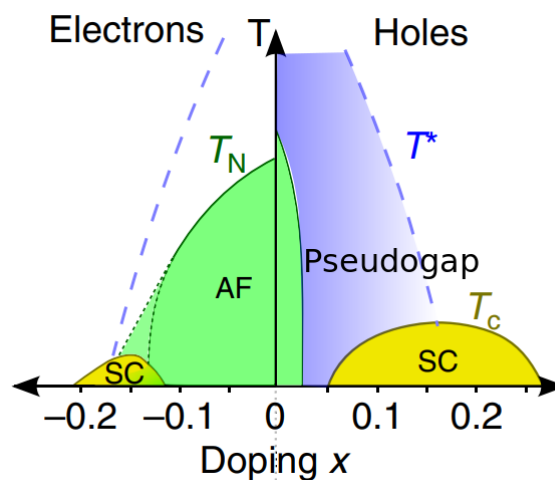
Fonte: Barisic et al. (2013).

### 2.1.1.3 Diagrama de Fases dos Cupratos

O diagrama de fases dos cupratos é conhecido por ser bastante rico em características e detalhes, alguns dos quais ainda não bem compreendidos. A figura 2.6 mostra um diagrama de fases genérico e esquemático para os cupratos, no qual a temperatura  $T$  é representada no eixo vertical e a dopagem  $x$  é representada no eixo horizontal. A metade direita desse diagrama ilustra o caso de dopagem por buracos e a metade esquerda ilustra o caso de dopagem por elétrons.

Nas regiões de baixa dopagem e abaixo da temperatura de Néel  $T_N$ , os cupratos apresentam uma fase de isolante de Mott com ordem antiferromagnética de longo alcance, representada em verde na figura. Abaixo da temperatura crítica de transição  $T_C$ , e para as faixas de dopagens mostradas na figura, os cupratos entram na fase supercondutora. Tal fase apresenta um formato de cúpula ou domo no diagrama de fases. É interessante notar a assimetria entre os casos de dopagem por elétrons e por buracos tanto da fase antiferromagnética quanto da fase supercondutora, apesar de que para a fase supercondutora, a dopagem ótima ocorre com o mesmo valor para os dois casos, quando  $x = 0,15$ .

Figura 2.6 – Diagrama de fases dos cupratos.



Fonte: Rybicki et al. (2016).

Entre as fases antiferromagnética e supercondutora, abaixo da temperatura  $T^*$  (temperatura de pseudogap), existe a chamada região do pseudogap, delimitada pelas linhas tracejadas na figura. Esse pseudogap é um gap parcial que aparece nas regiões de baixa dopagem ainda na fase normal dos cupratos e será discutido mais detalhadamente em uma seção vindoura. Apesar de não haver consenso a respeito de sua origem, acredita-se que uma compreensão mais aprofundada acerca da região do pseudogap é um passo imprescindível para o entendimento do mecanismo que atua para gerar o fenômeno da supercondutividade de altas temperaturas.

### 2.1.2 Outros Materiais Supercondutores de Alta Temperatura

Além dos mais famosos e mais exhaustivamente estudados cupratos, existem alguns outros tipos de supercondutores não convencionais. Dentre estes, cabe destacar o grupo dos pnictídeos (JANDKE, 2019), que consiste em materiais compostos de camadas de ferro e pnictogênios ou calcogênios. São sistemas que apresentam várias semelhanças

com os cupratos, como presença de correlações fortes e pseudogap, mas não serão objeto de estudo nesse trabalho .

## 2.2 ASPECTOS TEÓRICOS DA SUPERCONDUTIVIDADE DE ALTA TEMPERATURA

Desde a descoberta da supercondutividade por Heike Kammerlingh Onnes em 1911, buscou-se uma explicação microscópica para o fenômeno. Ela veio em 1957, com a concepção da Teoria BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957). A ideia principal da teoria BCS é de que, em temperaturas suficientemente baixas, um potencial atrativo entre elétrons vai desestabilizar o mar de Fermi, resultando em um estado no qual elétrons de spins opostos irão formar pares de Cooper bosônicos. Esse estado tem energia inferior à energia de Fermi, criando um pequeno gap de energia e prevenindo o espalhamento de elétrons em estados de condução normais quando a energia térmica  $k_B T$  é muito menor que a energia desse gap. O potencial atrativo entre os elétrons é atribuído aos fônons, que são vibrações da rede cristalina (GEHL et al., 2016).

### 2.2.1 Teoria BCS e os Supercondutores de Alta Temperatura

Apesar de que o mecanismo usado para explicar a supercondutividade convencional até a descoberta dos supercondutores de alta temperatura tenha sido a interação elétron-elétron mediada por fônons, a teoria BCS não requer que o mecanismo seja necessariamente esse (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957). Alguma outra excitação que forneça uma interação atrativa entre elétrons na superfície de Fermi poderia, em princípio, substituir o mecanismo de fônons. Na teoria BCS, o potencial de interação aproximado entre os elétrons é representado pela equação

$$V_{eff} = |g_{eff}|^2 \frac{1}{\omega - \omega_D} \quad (2.1)$$

em que  $\omega$  é a energia dos elétrons considerados,  $\omega_D$  é a frequência de Debye e  $g_{eff}$  é o vértice da interação elétron-fônon. Valores negativos de  $V_{eff}$  representam uma interação atrativa entre elétrons que trocam um fônon virtual. Apenas elétrons dentro de uma faixa  $\pm k_B T$  da superfície de Fermi são considerados, o que define um limite superior para  $|\omega|$ . A baixas temperaturas,  $k_B T \ll \omega_D$ , de modo que  $V_{eff}$  seja sempre negativo e assim favorecendo a formação de pares de Cooper. A equação BCS para o cálculo do parâmetro de gap tem a forma

$$|\Delta| = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (2.2)$$

onde  $\lambda = g_{eff}N(E_F)$  e  $N(E_F)$  é a densidade de estados eletrônicos no nível de Fermi (JANDKE, 2019).

Uma das ideias que levou à formulação da teoria BCS foi a instabilidade da superfície de Fermi a interações atrativas. Em princípio,  $\omega_D$  poderia ser substituída por algum outro tipo de excitação e  $g_{eff}$  poderia ser substituído por um termo descrevendo a interação de elétrons com outro tipo de excitação, que foi a abordagem inicialmente usada para tentar explicar a supercondutividade nos cupratos. A dificuldade dessa abordagem é a definição de  $N(E_F)$ . As extensões da teoria BCS que invocam algum outro tipo de bóson para mediar a interação entre elétrons dependem da presença da superfície de Fermi no estado normal (ANDERSON, 1987). Nos cupratos, logo acima da temperatura de transição  $T_C$  não se tem uma superfície de Fermi fechada como nos metais, mas sim a presença do pseudogap (BUCHANAN, 2001).

Atualmente, existem duas visões principais a respeito do mecanismo explicativo da supercondutividade de alta temperatura. Uma delas é de que, apesar das características anômalas apresentadas por esses materiais, eles ainda podem ser compreendidos em termos da teoria BCS como emergindo da troca de uma partícula de pareamento, como o fônon, cuja origem é provavelmente magnética. A visão alternativa sustenta que a supercondutividade é uma propriedade intrínseca de um estado fortemente correlacionado da matéria que não pode ser interpretado como emergindo da troca de uma excitação bem-definida (GULL; MILLIS, 2012).

### 2.2.2 Gap Supercondutor

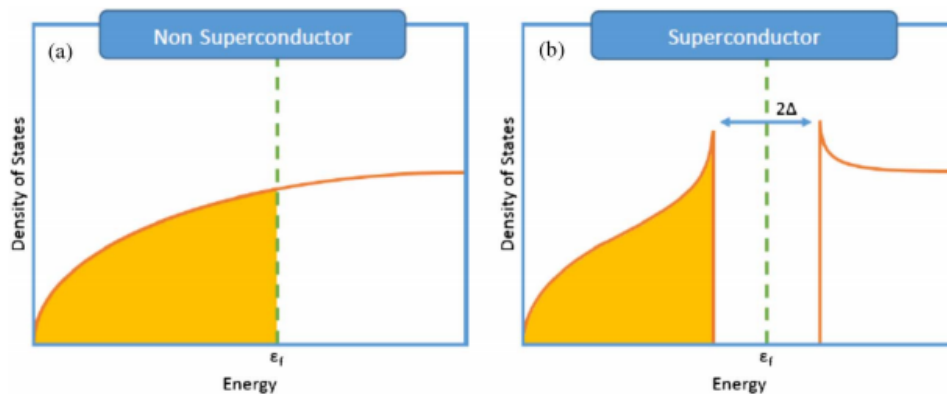
O gap supercondutor,  $2\Delta$ , pode ser entendido como a energia necessária para romper um par de Cooper. O processo de pareamento indica que não existem excitações de partícula única com energias menores do que  $\Delta$  no estado supercondutor, e daí vem o termo gap (B. Battlog and C. M. Varma, 2000).

O gap de energia supercondutor pode ser visto claramente em um gráfico que apresente a densidade de estados ocupados (número de estados eletrônicos com determinada energia) por partículas únicas em função da energia, como mostra a figura 2.7. O gráfico da esquerda da figura 2.7 mostra a densidade de estados de um material não-supercondutor com seu nível de Fermi na banda de condução. O gráfico da direita apresenta a densidade de estados para um supercondutor com um gap na região do nível de Fermi, exagerado para fins ilustrativos.

A simetria da função de onda dos pares de Cooper no espaço dos momentos, relacionada com o parâmetro de ordem supercondutor, pode ser de diferentes tipos. A figura 2.8 ilustra dois tipos de simetria, a simetria de onda-s e a simetria de onda-d $_{x^2-y^2}$ .

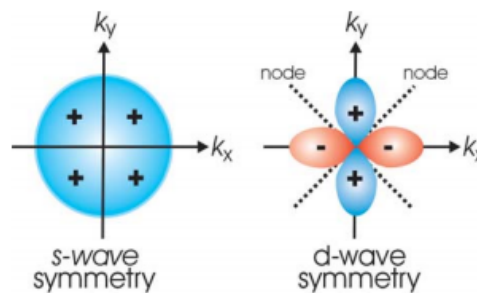
Na maioria dos supercondutores convencionais, de baixas temperaturas, os pares

Figura 2.7 – a) Densidade de estados do estado normal (de um metal). b) Gap supercondutor na densidade de estados.



Fonte: Gehl et al. (2016).

Figura 2.8 – Simetrias de onda-s e onda- $d_{x^2-y^2}$  do parâmetro de ordem supercondutor



Fonte: Santoso (2008).

de Cooper são formados por interações elétron-elétron mediadas por fônons. Esses pares de Cooper possuem momento angular total nulo e simetria de onda-s, ou seja, isotrópica em todas as direções. Por outro lado, nos supercondutores de altas temperaturas, como os cupratos, os pares de Cooper possuem momento angular total não-nulo e há um consenso fortemente corroborado por evidências experimentais de que os mesmos possuem simetria de onda- $d_{x^2-y^2}$ . Dessa forma, a função gap supercondutora, relacionada ao parâmetro de ordem, segue uma função cosseno com nós em  $k_x = \pm k_y$ , onde o gap supercondutor se anula (SANTOSO, 2008).

### 2.2.3 Superfície de Fermi e a Região do Pseudogap

A superfície de Fermi é aquela que separa os estados eletrônicos ocupados dos estados eletrônicos não-ocupados no espaço recíproco. O estudo da configuração da superfície de Fermi, seu formato e tamanho, por vezes chamado de fermiologia, é importante por fornecer informações a respeito de propriedades de transporte do material em ques-



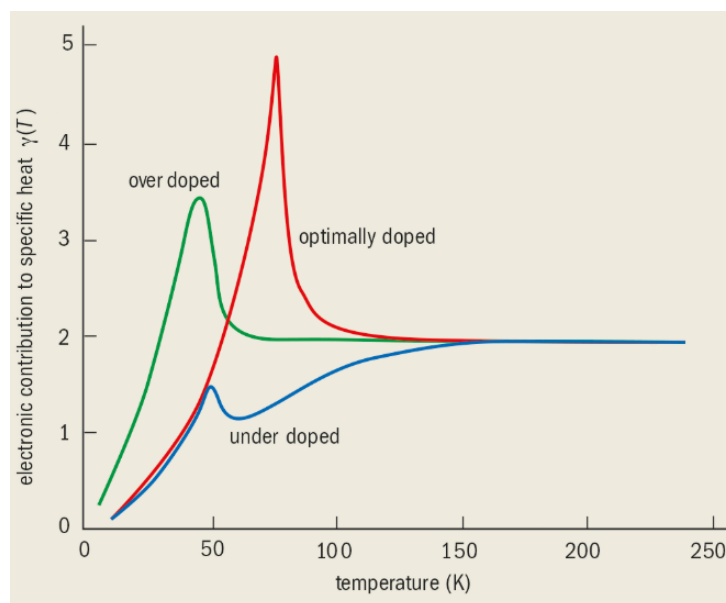
tão, principalmente no que tange à condutividade elétrica, uma vez que são os elétrons próximos ao nível de Fermi os responsáveis pela condução.

O pseudogap é um estado no qual há um gap parcial na superfície de Fermi. Um exemplo disso seria um caso em que, dentro da aproximação da teoria de bandas, um gap aparece em algumas regiões da superfície de Fermi enquanto outras regiões mantêm suas propriedades condutoras, e, à medida que a dopagem vai aumentando, a região com gap vai, por sua vez, diminuindo, de modo que o material se torne mais metálico. Dessa forma, o pseudogap é uma propriedade fundamental dos óxidos de cobre subdopados (TIMUSK; STATT, 1999).

Portanto, o pseudogap surge no estado normal quando há dopagem. Compreender o mecanismo por trás das instabilidades do estado normal que irão, em última análise, causar a formação dos pares de Cooper da corrente supercondutora é, dessa forma, fundamental.

Algumas evidências indiretas da existência do pseudogap podem ser apontadas. Por exemplo, a contribuição eletrônica para o calor específico dividido pela temperatura  $\gamma(T)$ , nas regiões de superdopagem e de dopagem ótima permanece constante à medida que a temperatura é reduzida, tem um pico na transição para a supercondutividade e decresce rapidamente até zero com a continuação do resfriamento após se atingir a fase supercondutora, como ilustra a figura 2.9. Nas regiões subdopadas,  $\gamma(T)$  começa a cair ainda acima da temperatura de transição  $T_C$ . Isso pode ser compreendido como um indicativo da existência de um pseudogap entre as temperaturas de transição,  $T_C$ , e uma temperatura de pseudogap,  $T^*$  (B. Battlog and C. M. Varma, 2000).

Figura 2.9 – Contribuição dos elétrons para o calor específico dividido pela temperatura.



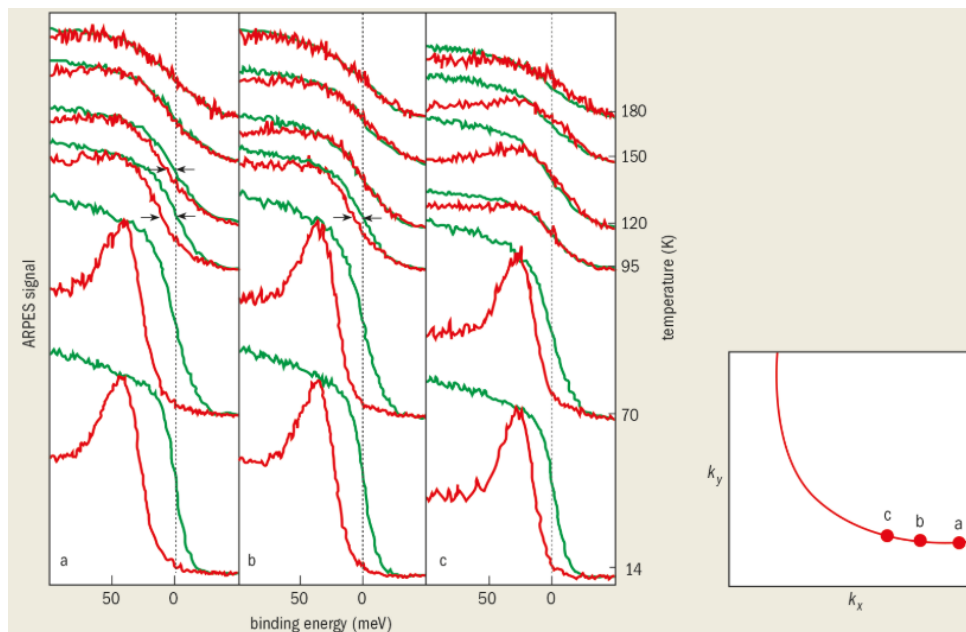
Fonte: B. Battlog and C. M. Varma (2000).

Além disso, desvios no comportamento esperado para a região de não-líquido de

Fermi de diversas propriedades termodinâmicas, magnéticas e de transporte (tais como entropia eletrônica, susceptibilidade magnética e resistividade) constituem evidências indiretas adicionais da supressão parcial das densidades de estados de uma partícula, ou seja, da existência do pseudogap (B. Battlog and C. M. Varma, 2000).

Uma forma de obter evidência direta da existência do pseudogap é medir diretamente a densidade de estados de uma amostra. Isso pode ser feito através de uma técnica experimental denominada ARPES (angle-resolved photoemission spectroscopy), que consiste basicamente em bombardear determinada amostra com radiação cujos fótons tenham energia suficiente para extrair elétrons do material. Através da medição da direção e da energia dos elétrons extraídos, é possível inferir a densidade de estados de partícula única dependente do momento abaixo da energia de Fermi (DAMASCELLI; HUSSAIN; SHEN, 2003).

Figura 2.10 – Visualização direta do pseudogap através de dados obtidos pela técnica experimental ARPES.

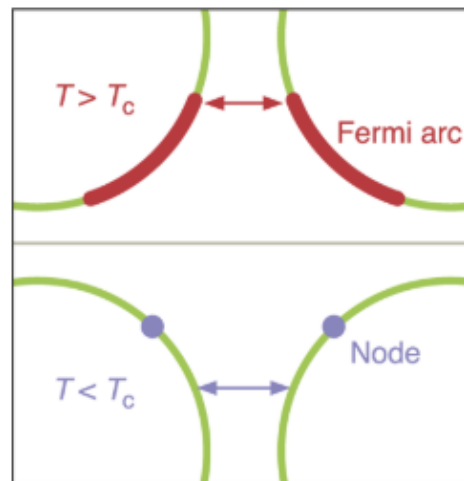


Fonte: B. Battlog and C. M. Varma (2000).

A figura 2.10 mostra o pseudogap como uma diferença no espectro de energia de um cuprato em relação a um metal convencional, por meio de dados obtidos pelo experimento ARPES. Na imagem, as linhas vermelhas representam o espectro do cuprato subdopado  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  sendo comparado com o espectro de um metal de referência, representado pelas linhas verdes. A temperatura de transição para a supercondutividade desse material é de 85 K. Abaixo de tal temperatura, o gap superconductor é facilmente identificável pelo desvio para a esquerda do espectro do cuprato em relação ao metal de referência. Acima da temperatura de transição, o gap de energia persiste como um pseudogap, até a chamada temperatura de pseudogap,  $T^*$ , desaparecendo a partir de então

com a continuação do aumento de temperatura. As medições apresentadas na figura são retratos de três pontos distintos, a, b e c, tomados sobre a superfície de Fermi, indicados na ilustração da primeira zona de Brillouin no canto inferior direito. O pseudogap desaparece nas quatro direções em que  $k_x = \pm k_y$ , chamadas de direções nodais, e tem valor máximo nas regiões antinodais. Essa característica faz com que a superfície de Fermi, que tem a forma fechada mostrada na figura 2.10 no estado normal, acabe se transformando nos chamados arcos de Fermi quando aparece o pseudogap. O comprimento desses arcos de Fermi vai progressivamente diminuindo com a redução da temperatura. O fato do espectro ser dependente do ângulo dessa forma é consistente com uma supercondutividade com simetria de onda-d $_{x^2-y^2}$ .

Figura 2.11 – Superfície de Fermi para o estado normal, estado supercondutor e pseudo-gap.



Fonte: Norman (2004).

A figura 2.11 ilustra as variações da superfície de Fermi de acordo com a variação da temperatura. Para  $T > T_c$ , a superfície de Fermi é fechada, como denota a linha verde. As linhas vermelhas, que representam os arcos de Fermi, existem quando a temperatura  $T$ , superior à temperatura crítica  $T_c$ , ainda é inferior à temperatura  $T^*$ , o que acontece em função da abertura do pseudogap nas regiões antinodais. E para o caso em que  $T < T_c$ , a superfície de Fermi se reduz a um nó, representado pelo ponto azul, o que caracteriza o estado supercondutor.

#### 2.2.4 Transição de Lifshitz

A transição de Lifshitz, apesar de proposta inicialmente por Lifshitz (1960) para sistemas de férmions não-interagentes, recentemente tem sido considerada como uma transição de fase quântica em sistemas de elétrons fortemente correlacionados, como os

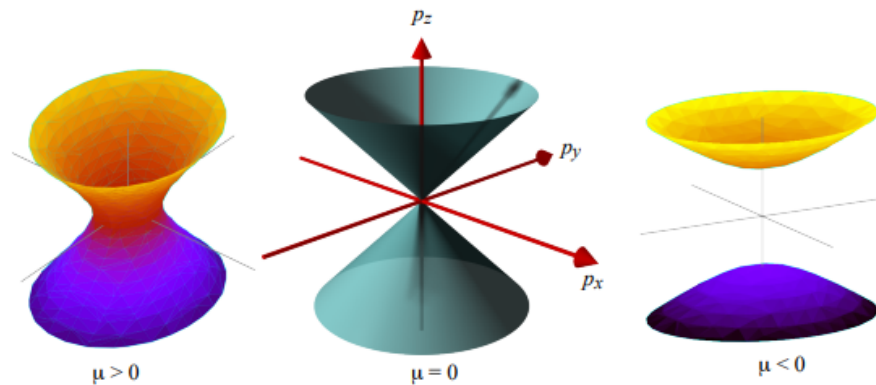
supercondutores cupratos de alta temperatura (CHEN et al., 2012).

Inicialmente, as transições de Lifshitz estavam relacionadas com transições de elétrons em  $T = 0$  em metais, nas quais a topologia da superfície de Fermi do metal mudava abruptamente. A figura 2.12 apresenta um exemplo em que, durante uma mudança contínua de um parâmetro do sistema, o potencial químico  $\mu$  na equação

$$\epsilon_p = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} - \mu, \quad (2.3)$$

ocorre uma disrupção na superfície de Fermi em  $\mu = 0$ .

Figura 2.12 – Exemplo de transição topológica com alteração da topologia da superfície de Fermi.



Fonte: Volovik (2016).

Outro exemplo de transição de Lifshitz é apresentado na figura 2.13, em que uma nova região, separada da superfície principal, aparece.

Figura 2.13 – Outro exemplo de transição topológica no qual uma região separada da superfície principal aparece.



Fonte: Lifshitz (1960).

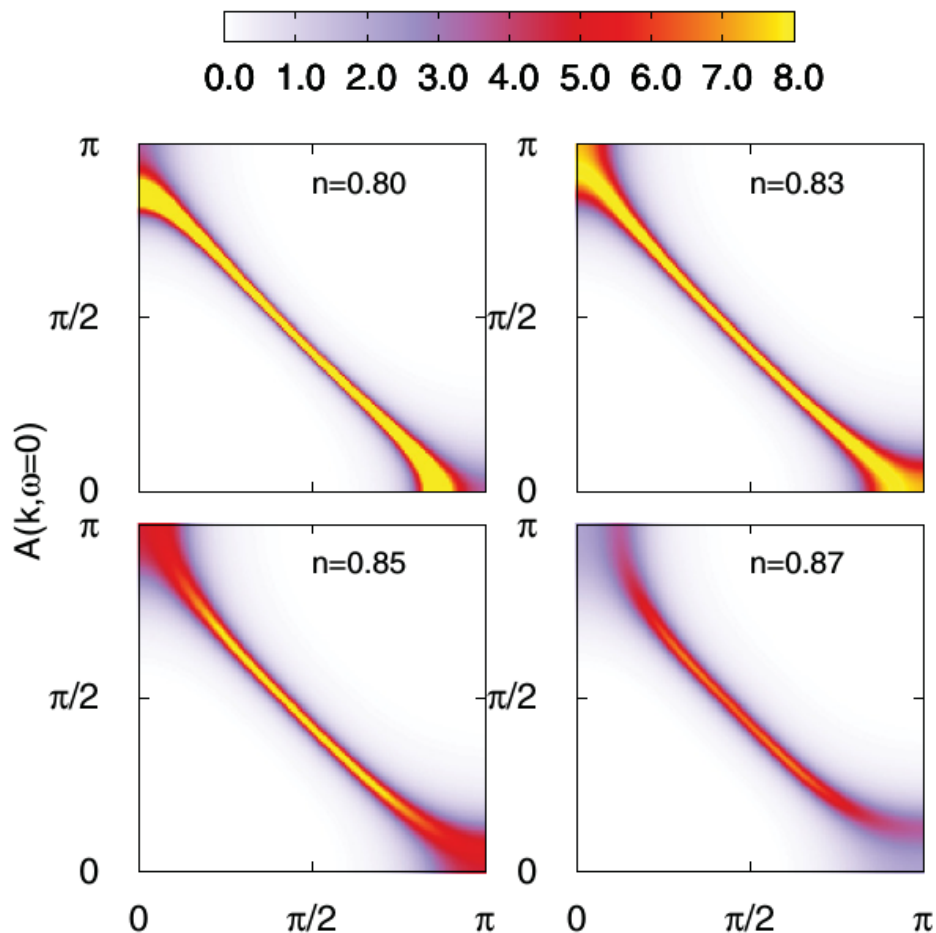
Essas discontinuidades nas transições de Lifshitz dão origem a anomalias nas características eletrônicas dos metais (VOLOVIK, 2016). A densidade de estados dos elétrons de condução está conectada com a forma das superfícies de energia constante no espaço dos momentos,  $\epsilon(p) = \epsilon$ . Aqueles valores de energia  $\epsilon = \epsilon_k$  para os quais a topologia dessas superfícies se altera, correspondem a peculiaridades na densidade da

superfície. Ao mesmo tempo, a superfície crítica  $\epsilon(p) = \epsilon_k$  contém singularidades perto das quais a dinâmica dos elétrons tem um comportamento não usual (LIFSHITZ, 1960).

Em geral, o valor de  $\epsilon_k$  é localizado suficientemente longe do potencial químico  $\mu$  dos elétrons. Contudo, se existir um parâmetro se alterando continuamente cuja variação faz com que a diferença  $\mu - \epsilon_k$  passe pelo zero (ou seja, muda a topologia da superfície de Fermi), então as peculiaridades da densidade da superfície e a dinâmica dos elétrons próximos à superfície crítica  $\epsilon(p) = \epsilon_k$  dão origem a anomalias das propriedades cinéticas e termodinâmicas do gás de elétrons no metal (LIFSHITZ, 1960).

Recentemente, tem-se discutido a relação entre uma transição de Lifshitz e o surgimento do pseudogap nos supercondutores cupratos (CHEN et al., 2012; BRAGANÇA et al., 2018). Nesse caso, a transição de Lifshitz ocorre quando a superfície de Fermi muda do tipo elétron em baixas ocupações para o tipo buraco em altas ocupações, onde o pseudogap ocorre. A figura 2.14 mostra um exemplo de transição de Lifshitz desse tipo, onde a ocupação é responsável pela transição.

Figura 2.14 – Exemplo de transição de Lifshitz através da mudança da superfície de Fermi do tipo elétron para o tipo buraco.



### 3 O FORMALISMO

Neste capítulo será apresentado o formalismo a ser implementado na abordagem do problema da análise do pseudogap e do comportamento energético no fenômeno da supercondutividade não convencional. O modelo a ser utilizado é o de Hubbard em duas dimensões. Este será tratado através da técnica das funções de Green, utilizada amplamente em problemas de muitos corpos (ZUBAREV, 1960). Além disso, a equação de movimento das funções de Green será tratada por uma aproximação de n-polos, e, na última seção, são apresentados os resultados analíticos obtidos.

#### 3.1 O MODELO

O modelo de Hubbard foi introduzido em 1963 para descrever a transição entre sistemas condutores e isolantes (HUBBARD, 1963), particularmente os chamados isolantes de Mott (IMADA; FUJIMORI; TOKURA, 1998).

O modelo de Hubbard de uma banda é descrito pelo Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \quad (3.1)$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) é o operador de criação (aniquilação) fermiônico no sítio  $i$  com spin  $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$  e  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  é o operador número. A grandeza  $t_{ij}$  representa o *hopping*<sup>1</sup> entre os sítios  $i$  e  $j$  e o símbolo  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  indica a soma sobre os primeiros e segundos vizinhos mais próximos do sítio  $i$ .  $U$  representa o potencial coulombiano repulsivo entre elétrons localizados em um mesmo sítio  $i$ .

O primeiro termo do hamiltoniano acima está associado à energia cinética, permitindo o tunelamento de elétrons entre diferentes sítios,  $i$  e  $j$ . Já o segundo termo se refere à energia potencial e só existe quando há dois elétrons de spins opostos em um mesmo sítio  $i$ .

Os operadores de criação e destruição obedecem às seguintes relações de anticomutação:

$$[c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (3.2)$$

e

$$[c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}]_+ = [c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ = 0. \quad (3.3)$$

---

<sup>1</sup>Energia necessária para um elétron saltar de um sítio  $i$  para um sítio  $j$  da rede.

### 3.2 A TÉCNICA DAS FUNÇÕES DE GREEN

A técnica das funções de Green é uma ferramenta muito empregada para a análise de sistemas de muitos corpos. Por meio dela, é possível extrair informações importantes do sistema sob estudo, tais como as excitações elementares, a densidade média de partículas por sítio da rede e a energia total (NAZARENO, 1986).

Surgindo no século XIX, através do trabalho seminal de George Green, como um método matemático poderoso para a resolução de equações diferenciais lineares, as funções de Green foram introduzidas na teoria quântica de campos a partir dos anos 40 (SCHWINGER, 1993). A similaridade na formulação do problema básico da teoria quântica de campos (interação entre partícula e campo quantizado ou interação entre campos) e o da mecânica estatística (interação entre partículas) em termos de hamiltonianos expressos na linguagem da segunda quantização inspirou a aplicação da técnica das funções de Green em problemas de física da matéria condensada.

A descrição doravante apresentada é baseada no trabalho de Zubarev (ZUBAREV, 1960), que apresenta um formalismo de mecânica estatística para as funções de Green, no qual estas funções são dependentes da temperatura.

#### 3.2.1 Funções de Green Avançada e Retardada

As funções de Green aplicadas em mecânica estatística são obtidas ao se extrair a média termodinâmica sobre um ensemble estatístico. Dessa forma, essas funções serão dependentes do tempo e da temperatura. Na maior parte dos casos, é suficiente levar em consideração funções de Green que dependem de dois valores de tempo, e assim serão definidas as versões retardada e avançada da função de Green (NAZARENO, 1986).

Seja  $X$  um operador qualquer. Define-se

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ X e^{-\beta(H - \mu N)} \} \quad (3.4)$$

onde  $H$  é o hamiltoniano,  $\mu$  é o potencial químico,  $N$  é o operador número total,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , com  $k_B$  sendo a constante de Boltzmann e  $T$  sendo a temperatura absoluta.  $Z$  é a função de partição do ensemble grande-canônico, podendo ser escrita como

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N)}. \quad (3.5)$$

A dependência temporal dos operadores advém do fato de se utilizar a representação de Heisenberg (em unidades nas quais  $\hbar = 1$ ). Assim,

$$A(t) = e^{iHt} A(0) e^{-iHt}. \quad (3.6)$$

Levando em consideração um segundo operador  $B(t')$ , definem-se as funções de Green retardada,  $G_r(t, t')$  e avançada,  $G_a(t, t')$ , como

$$G_r(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r = -i\theta(t - t')\langle[A(t), B(t')]\rangle \quad (3.7)$$

e

$$G_a(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_a = i\theta(t' - t)\langle[A(t), B(t')]\rangle, \quad (3.8)$$

onde  $\theta(\tau)$  é a função degrau, que assume os valores

$$\theta(\tau) = \begin{cases} 1 & \text{se } \tau > 0 \\ 0 & \text{se } \tau < 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

e a expressão  $[A, B]_\eta$  representa o comutador (ou anticomutador, dependendo do valor que  $\eta$  assume), que tem a forma

$$[A, B]_\eta = AB - \eta BA, \quad (3.10)$$

sendo que

$$\eta = \begin{cases} +1 & \text{se os operadores A e B obedecem à estatística de Bose-Einstein} \\ -1 & \text{se os operadores A e B obedecem à estatística de Fermi-Dirac.} \end{cases} \quad (3.11)$$

### 3.2.2 Equação de Movimento das Funções de Green

Os operadores  $A(t)$  e  $B(t)$  satisfazem equações de movimento que possuem a seguinte forma (na representação de Heisenberg):

$$i\frac{dA}{dt} = AH - HA. \quad (3.12)$$

Usando as relações de comutação para os operadores, é possível escrever o segundo membro da equação acima em mais detalhes. Diferenciando as funções de Green 3.7 e 3.8 em relação ao tempo, obtém-se a equação

$$i\frac{dG}{dt} = i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = \frac{d\theta(t - t')}{dt}\langle[A(t), B(t')]\rangle + \left\langle\left\langle i\frac{dA(t)}{dt}; B(t') \right\rangle\right\rangle, \quad (3.13)$$

que é idêntica tanto para a função de Green retardada quanto para a função de Green avançada, o que permite obliterar os índices  $r$  e  $a$ . Levando em consideração a relação



entre a função degrau  $\theta(t)$  e a função delta de Dirac  $\delta(t)$

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t') dt', \quad (3.14)$$

juntamente com a equação de movimento 3.13 para o operador  $A(t)$ , pode-se reescrever a equação de movimento para a função de Green  $G$  da seguinte forma:

$$i \frac{dG}{dt} = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle \langle [A(t), H]; B(t') \rangle \rangle. \quad (3.15)$$

As funções de Green de duplo tempo do segundo membro da equação 3.15 são, em geral, de ordens superiores à ordem da função de Green original  $G$ . Pode-se construir, na sequência, a equação de movimento para  $\langle \langle [A(t), H]; B(t') \rangle \rangle$  e assim por diante, gerando uma cadeia infinita de equações acopladas.

### 3.2.3 Funções de Correlação

A média termodinâmica de um produto de operadores (na representação de Heisenberg) sobre um ensemble estatístico (grande-canônico, neste caso) é chamada de função de correlação. Essas funções de correlação podem ser escritas da seguinte forma:

$$\mathcal{F}_{BA}(t, t') = \langle B(t') A(t) \rangle \quad (3.16)$$

e

$$\mathcal{F}_{AB}(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle. \quad (3.17)$$

No caso de equilíbrio estatístico, as funções  $\mathcal{F}_{BA}$  e  $\mathcal{F}_{AB}$ , assim como as funções de Green, dependem unicamente da diferença  $t - t'$  (NAZARENO, 1986):

$$\mathcal{F}_{BA}(t, t') = \mathcal{F}_{BA}(t - t') \quad (3.18)$$

e

$$\mathcal{F}_{AB}(t, t') = \mathcal{F}_{AB}(t - t'). \quad (3.19)$$

Diferentemente das funções de Green, as funções de correlação não contém o fator descontínuo  $\theta(t - t')$  e são definidas mesmo para  $t = t'$ . Elas fornecem, portanto, os valores médios dos produtos de operadores

$$\mathcal{F}_{BA}(0) = \langle B(t) A(t) \rangle = \langle B(0) A(0) \rangle \quad (3.20)$$

e

$$\mathcal{F}_{AB}(0) = \langle A(t)B(t) \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle, \quad (3.21)$$

ou seja, as funções de correlação usuais permitem calcular os valores médios de grandezas dinâmicas.

### 3.2.4 Representação Espectral

De modo a resolver as equações para as funções de Green, é importante ter uma representação espectral que forneça condições de contorno. Nesta seção, serão obtidas essas representações espectrais para as funções de correlação e para as funções de Green.

#### 3.2.4.1 Representação Espectral para as Funções de Correlação Temporais

Sejam  $\mathcal{H}$  o hamiltoniano  $\mathcal{H} = H - \mu N$  e  $\Psi_\nu$  e  $E_\nu$  suas autofunções e autovalores, respectivamente. Então, tem-se

$$\mathcal{H}\Psi_\nu = E_\nu\Psi_\nu. \quad (3.22)$$

Em seguida, escreve-se explicitamente a operação de média estatística da definição das funções de correlação

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{\nu} \langle \Psi_\nu | B(t')A(t) | \Psi_\nu \rangle e^{-\frac{E_\nu}{\theta}}. \quad (3.23)$$

Usando a relação de completeza ( $\sum_{\mu} |\Psi_\mu\rangle\langle\Psi_\mu| = 1$ ) do conjunto de funções  $\Psi_\nu$ , pode-se reescrever a expressão anterior como:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{\nu\mu} \langle \Psi_\nu | B(t') | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | A(t) | \Psi_\nu \rangle e^{-\frac{E_\nu}{\theta}}. \quad (3.24)$$

Considerando que  $e^{-i\mathcal{H}t}|\Psi_\nu\rangle = e^{-iE_\nu t}|\Psi_\nu\rangle$  e  $\langle\Psi_\mu|e^{i\mathcal{H}t} = \langle\Psi_\mu|e^{iE_\mu t}$ , a equação acima pode ser reescrita como

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{\nu\mu} \langle \Psi_\nu | B(0) | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | A(0) | \Psi_\nu \rangle e^{-\frac{E_\nu}{\theta}} e^{-i(E_\nu - E_\mu)(t-t')}. \quad (3.25)$$

Repetindo o mesmo procedimento para a função de correlação  $\langle A(t), B(t') \rangle$ , tem-se

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} \sum_{\nu\mu} \langle \Psi_\nu | A(0) | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | B(0) | \Psi_\nu \rangle e^{-\frac{E_\nu}{\theta}} e^{-i(E_\nu - E_\mu)(t-t')}. \quad (3.26)$$

Introduzindo a grandeza  $J(\omega)$ , que será chamada de intensidade espectral da função de correlação  $\mathcal{F}_{BA}(t)$ ,

$$J(\omega) = Z^{-1} \sum_{\nu\mu} \langle \Psi_\nu | B(0) | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | A(0) | \Psi_\nu \rangle e^{-\frac{E_\nu}{\theta}} \delta(E_\mu - E_\nu - \omega), \quad (3.27)$$

pode-se escrever as funções de correlação temporais como representações espectrais:

$$\mathcal{F}_{BA}(t, t') = \langle B(t') A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (3.28)$$

e

$$\mathcal{F}_{AB}(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\frac{\omega}{\theta}} e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (3.29)$$

### 3.2.4.2 Representação Espectral para as Funções de Green Avançada e Retardada

As representações espectrais das funções de Green avançada,  $G_a(t)$ , e retardada,  $G_r(t)$ , podem ser obtidas a partir das representações espectrais das funções de correlação temporais, obtidas na seção anterior.

Seja  $G_r(E)$  a componente de Fourier da função de Green  $G_r(t - t')$ , de modo que

$$G_r(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E) e^{-iE(t-t')} dE \quad (3.30)$$

e

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(t) e^{iEt} dt. \quad (3.31)$$

Substituindo em 3.31 a expressão para a função de Green retardada dada por 3.7, obtém-se

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')} \theta(t-t') \{ \langle A(t) B(t') \rangle - \eta \langle B(t') A(t) \rangle \} dt. \quad (3.32)$$

Usando as respectivas representações espectrais para as funções de correlação temporais, tem-se

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega)t} \theta(t) dt. \quad (3.33)$$

A função descontínua  $\theta(t)$  pode ser escrita como

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t e^{\epsilon t'} \delta(t') dt', \quad \epsilon \rightarrow 0^+, \quad (3.34)$$

ou, lembrando que

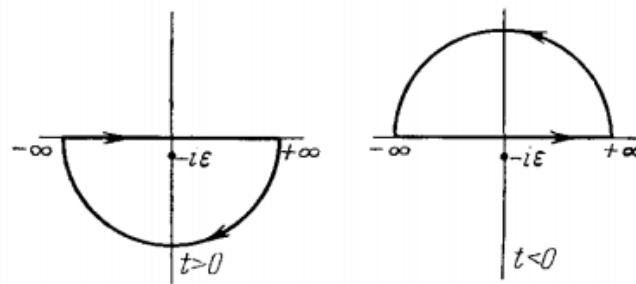
$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} dx, \quad (3.35)$$

tem-se:

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x + i\epsilon} dx. \quad (3.36)$$

É possível verificar que a equação 3.36 tem as propriedades da função descontínua  $\theta(t)$ . Considera-se  $x$  como uma variável complexa e efetua-se a integral sobre os contornos indicados na figura 3.1. O integrando possui um polo no semi-plano inferior, para  $x = -i\epsilon$ . Quando  $t > 0$ , o contorno é fechado no semi-plano inferior e a integral é igual à unidade. Quando  $t < 0$ , o contorno é fechado no semi-plano superior e a integral é nula.

Figura 3.1 – Contornos da forma integral da função descontínua.



Fonte: Zubarev (1960).

Usando 3.35 e 3.36, obtém-se:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)t} \theta(t) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{E - \omega + i\epsilon}. \quad (3.37)$$

A componente de Fourier  $G_r(E)$  da função de Green  $G_r(t)$  é igual a

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\epsilon}. \quad (3.38)$$

Da mesma forma, obtém-se a componente de Fourier  $G_a(E)$  da função de Green  $G_a(t)$ :

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\epsilon}. \quad (3.39)$$

As equações 3.38 e 3.39 podem ser unificadas da seguinte forma:

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\epsilon}, \quad (3.40)$$

onde o índice  $r$  corresponde ao sinal positivo e o índice  $a$  corresponde ao sinal negativo do termo  $i\epsilon$ . Esta função pode ser continuada no plano  $E$  complexo. Assumindo a grandeza

$E$  como complexa, tem-se:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} = \begin{cases} G_r(E) & \text{Im}E > 0 \\ G_a(E) & \text{Im}E < 0. \end{cases} \quad (3.41)$$

Logo, a função  $G_{r,a}(E)$  pode ser considerada uma função analítica no plano complexo com uma singularidade no eixo real.

Conhecendo a função  $G(E)$ , é possível encontrar a intensidade espectral  $J(\omega)$  a partir da relação

$$G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon) = -i(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta)J(\omega). \quad (3.42)$$

De fato, tomando a diferença entre as equações 3.41,

$$G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{E}{\theta}} - \eta) J(E) \left\{ \frac{1}{\omega - E + i\epsilon} - \frac{1}{\omega - E - i\epsilon} \right\} dE, \quad (3.43)$$

e representando a função delta como

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1}{x - i\epsilon} - \frac{1}{x + i\epsilon} \right\}, \quad (3.44)$$

chega-se à relação 3.42.

Agora, as funções de correlação podem ser escritas em termos das componentes de Fourier das funções de Green:

$$\mathcal{F}_{BA}(t - t') = \langle B(t')A(t) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (3.45)$$

Usando a identidade

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\epsilon} = P \frac{1}{E - \omega} \mp i\pi\delta(E - \omega), \quad (3.46)$$

onde  $\epsilon \rightarrow 0$ ,  $\epsilon > 0$ ,  $P$  representa o valor principal da integral e  $E - \omega$  é considerada uma quantidade real, pode-se representar as funções de Green do seguinte modo:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{E}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} - \frac{i}{2} (e^{\frac{E}{\theta}} - \eta) J(E) \quad (3.47)$$

e

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{E}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} + \frac{i}{2} (e^{\frac{E}{\theta}} - \eta) J(E), \quad (3.48)$$

de onde se segue uma conexão entre as partes real e imaginária das funções de Green:

$$\text{Re}G_r(E) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G_r(\omega)}{\omega - E} d\omega \quad (3.49)$$

e

$$ReG_a(E) = -\frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ImG_a(\omega)}{\omega - E} d\omega. \quad (3.50)$$

### 3.3 APROXIMAÇÃO DE N-POLOS

Nesta seção será apresentada a aproximação de n-polos para a equação de movimento das funções de Green. A transformada de Fourier no tempo da equação 3.15 resulta na equação de movimento

$$\omega \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega} = \langle [A, B]_{+} \rangle + \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_{\omega}, \quad (3.51)$$

onde o operador  $B$  é o conjugado hermitiano do operador  $A$ , ou seja,  $B = A^{\dagger}$ . Nota-se que a equação de movimento da função de Green  $\langle \langle A; B \rangle \rangle$  depende de uma nova função de Green de ordem superior <sup>2</sup>  $\langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_{\omega}$ . A nova função de Green  $\langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_{\omega}$ , por sua vez, tem a seguinte equação de movimento:

$$\omega \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle [[A, H], B]_{+} \rangle \rangle + \langle \langle [[A, H], H]; B \rangle \rangle_{\omega}, \quad (3.52)$$

dependendo de uma função de Green de ordem ainda maior, o que deixa claro o padrão de uma cadeia infinita de equações acopladas.

Para tratar essa cadeia infinita de equações, será utilizada neste trabalho uma aproximação de n-polos, conforme proposto por Roth (1969). Partir-se-á de um conjunto finito de operadores  $\{A_n\}$ , os quais serão utilizados para linearizar a equação de movimento do operador  $A_n$  da seguinte forma:

$$[A_n, H] = \sum_m K_{nm} A_m. \quad (3.53)$$

Assim, pode-se reescrever a equação de movimento da função de Green  $\langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega}$  como

$$\omega \langle \langle A_n; B \rangle \rangle_{\omega} = \langle [A_n, B]_{+} \rangle + \sum_m K_{nm} \langle \langle A_m; B \rangle \rangle_{\omega}, \quad (3.54)$$

onde o operador  $B$  é o conjugado hermitiano do operador  $A_m$ , ou seja,  $B = A_m^{\dagger}$ . Pode-se reescrever a equação 3.54 em notação matricial, chamando os termos  $\langle [A_n, B]_{+} \rangle$  e  $\langle \langle A_m; B \rangle \rangle_{\omega}$  de matrizes normalização  $\mathbf{N}$  e função de Green  $\mathbf{G}$ , respectivamente. Dessa forma, tem-se:

$$\omega \mathbf{G} = \mathbf{N} + \mathbf{K} \mathbf{G}. \quad (3.55)$$

---

<sup>2</sup>Depende de um número de operadores maior do que a primeira.

O problema agora consiste na obtenção da matriz  $\mathbf{K}$ . É possível obtê-la anticomutando ambos os membros da equação 3.53 com operadores do conjunto  $\{A_n\}$  e simultaneamente tomando a média termodinâmica:

$$\langle [[A_n, H]_-, A_p^\dagger]_+ \rangle = \sum_m K_{nm} \langle [A_m, A_p^\dagger]_+ \rangle, \quad (3.56)$$

onde  $A_p^\dagger$  é o conjugado hermitiano de  $A_p$  que, por sua vez, pertence ao conjunto de operadores  $\{A_n\}$ . Define-se a matriz energia  $\mathbf{E}$  com elementos:

$$E_{np} = \langle [[A_n, H]_-, A_p^\dagger]_+ \rangle \quad (3.57)$$

e a matriz normalização  $\mathbf{N}$  com elementos:

$$N_{np} = \langle [A_m, A_p^\dagger]_+ \rangle \quad (3.58)$$

e dessa forma, pode-se reescrever a equação 3.56 na forma matricial:

$$\mathbf{E} = \mathbf{KN}. \quad (3.59)$$

Assim,

$$\mathbf{K} = \mathbf{EN}^{-1}, \quad (3.60)$$

onde a matriz normalização  $\mathbf{N}$  deve ser inversível. Substituindo 3.60 em 3.55 e com um pouco de álgebra, chega-se à expressão para a matriz das funções de Green em termos das matrizes normalização  $\mathbf{N}$  e energia  $\mathbf{E}$ :

$$\mathbf{G} = \mathbf{N}(\omega\mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1}\mathbf{N}. \quad (3.61)$$

As matrizes  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{E}$  dependem apenas do hamiltoniano e do conjunto de operadores  $\{A_n\}$ . Portanto, conhecendo o hamiltoniano, obtém-se  $\mathbf{G}$ .

### 3.4 RESULTADOS ANALÍTICOS

Conforme visto na seção anterior sobre a aproximação de n-polos, é possível obter a matriz das funções de Green a partir das matrizes normalização e energia. Logo, o primeiro passo a ser dado é obter os elementos dessas matrizes.

### 3.4.1 Estado Normal

Para o estado normal do modelo de Hubbard de uma banda (equação 3.1), o conjunto de operadores  $\{A_n\}$  a ser utilizado será  $\{c_{i\sigma}, n_{i-\sigma}c_{i\sigma}\}$ . A escolha do operador  $c_{i\sigma}$  é trivial porque está associado ao *hopping* de uma partícula entre os sítios  $i$  e  $j$ , ou seja,  $c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  está associado ao movimento dos elétrons pela rede. A equação de movimento de  $c_{i\sigma}$  para o modelo de Hubbard é

$$[c_{i\sigma}, H] = \sum_j t_{ij} c_{j\sigma} + U c_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \quad (3.62)$$

onde o operador  $d_{i\sigma} = c_{i\sigma} n_{i-\sigma}$  está relacionado ao termo de interação  $U$ . Assim, a escolha óbvia do conjunto de operadores é  $\{c_{i\sigma}, n_{i-\sigma}c_{i\sigma}\}$ .

Como  $A_n$  são os operadores do conjunto  $\{A_n\}$  e  $A_p^\dagger$  são seus respectivos conjugados hermitianos, a matriz normalização  $\mathbf{N}$ , calculada através da equação 3.58, vai ter a seguinte forma:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \langle [c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle & \langle [c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ \rangle \\ \langle [n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle & \langle [n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ \rangle \end{bmatrix}. \quad (3.63)$$

Os anticomutadores presentes na matriz acima fornecem os seguintes resultados:

$$[c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger]_+ = \delta_{ij}, \quad (3.64)$$

$$[c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ = n_{j-\sigma} \delta_{ij}, \quad (3.65)$$

$$[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger]_+ = n_{i-\sigma} \delta_{ij}, \quad (3.66)$$

e

$$[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ = n_{i-\sigma} \delta_{ij}, \quad (3.67)$$

de modo que a matriz normalização  $\mathbf{N}$  vai ser:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \delta_{ij} & \langle n_{j-\sigma} \rangle \delta_{ij} \\ \langle n_{i-\sigma} \rangle \delta_{ij} & \langle n_{i-\sigma} \rangle \delta_{ij} \end{bmatrix}. \quad (3.68)$$

A matriz energia  $\mathbf{E}$ , cujos elementos são calculados a partir da equação 3.57, vai ter a seguinte forma:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \langle [[c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle & \langle [[c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ \rangle \\ \langle [[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle & \langle [[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ \rangle \end{bmatrix}. \quad (3.69)$$

Os comutadores dos operadores com o hamiltoniano presentes na matriz acima



forneem os seguintes resultados:

$$[c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_- = \sum_j t_{ij} c_{j\sigma} + U c_{i\sigma} n_{i-\sigma} \quad (3.70)$$

e

$$[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_- = \sum_j t_{ij} (n_{i-\sigma} c_{j\sigma} + c_{i-\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{i\sigma} - c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{i\sigma}) + U n_{i-\sigma} c_{i\sigma}. \quad (3.71)$$

Com os resultados 3.70 e 3.71, os elementos da matriz energia são:

$$\langle [[c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle = t_{ij} + U \langle n_{i-\sigma} \rangle \delta_{ij}, \quad (3.72)$$

$$\langle [[c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ \rangle = t_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle + U \langle n_{i-\sigma} \rangle \delta_{ij}, \quad (3.73)$$

$$\langle [[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle = t_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle + U \langle n_{i-\sigma} \rangle \delta_{ij} \quad (3.74)$$

e

$$\begin{aligned} \langle [[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ \rangle &= \sum_l t_{il} [(c_{j\sigma}^\dagger c_{j-\sigma}^\dagger c_{l-\sigma} c_{i\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{l-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma} c_{i\sigma} + c_{i-\sigma}^\dagger c_{l-\sigma} n_{j-\sigma} - c_{l-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} n_{j-\sigma}) \delta_{ij} \\ &\quad - (c_{j\sigma}^\dagger c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{i\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma} c_{i\sigma}) \delta_{jl}] + U \langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger \rangle \delta_{ij} + t_{ij} \langle n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Este último termo (equação 3.75), que representa o elemento  $E_{22}$  da matriz energia, pode ser escrito de modo mais compacto da seguinte forma:

$$\langle [[n_{i-\sigma} c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-, c_{j\sigma}^\dagger n_{j-\sigma}]_+ \rangle = U \langle n_{i-\sigma} \rangle \delta_{ij} + t_{ij} \langle n_{-\sigma} \rangle^2 + \langle n_{i-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle) W_{ij\sigma}, \quad (3.76)$$

onde  $W_{ij\sigma}$  representa o deslocamento de banda e sua transformada de Fourier no espaço é:

$$\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) W_{\vec{k}\sigma} = S + \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} t_{ij} \{ S_{ij\sigma}^{(1)} + S_{ij\sigma}^{(2)} + S_{ij\sigma}^{(3)} \}, \quad (3.77)$$

em que

$$S = - \sum_{j \neq i} t_{ij} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{i-\sigma} - n_{j-\sigma}) \rangle, \quad (3.78)$$

$$S_{ij\sigma}^{(1)} = \frac{1}{4} \sum_{j \neq i} t_{ij} (\langle N_j N_i \rangle - \langle N_j \rangle \langle N_i \rangle), \quad (3.79)$$

$$S_{ij\sigma}^{(2)} = \sum_{j \neq i} t_{ij} \langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle, \quad (3.80)$$

e

$$S_{ij\sigma}^{(3)} = \sum_{j \neq i} t_{ij} \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \rangle. \quad (3.81)$$

$N_i = \langle n_{i\sigma} \rangle + \langle n_{i-\sigma} \rangle$  é o operador número total de ocupação por sítio e  $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$  é a função de correlação spin-spin associada às correlações antiferromagnéticas do sistema. Considerou-se que o sistema possui invariância translacional, logo  $\langle n_{i-\sigma} \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle$ .

Considerando a transformada de Fourier inversa das funções de correlação  $S^{(n)}$ ,

$$S_{ij\sigma}^{(n)} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} S_{\vec{q}\sigma}^{(n)}, \quad (3.82)$$

e substituindo 3.82 em 3.77, obtém-se

$$\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) W_{\vec{k}\sigma} = S + \sum_{\vec{q}} \frac{1}{L} \sum_{j \neq i} e^{i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \{ S_{\vec{q}\sigma}^{(1)} + S_{\vec{q}\sigma}^{(2)} + S_{\vec{q}\sigma}^{(3)} \}. \quad (3.83)$$

Definindo a relação de dispersão

$$\epsilon(\vec{k} - \vec{q}) = \frac{1}{L} \sum_{j \neq i} e^{i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \quad (3.84)$$

e

$$F_{\vec{q}\sigma} = S_{\vec{q}\sigma}^{(1)} + S_{\vec{q}\sigma}^{(2)} + S_{\vec{q}\sigma}^{(3)}, \quad (3.85)$$

pode-se escrever o deslocamento de banda de forma mais compacta como

$$\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) W_{\vec{k}\sigma} = S + \sum_{\vec{q}} \epsilon(\vec{k} - \vec{q}) F_{\vec{q}\sigma}. \quad (3.86)$$

A função  $F_{\vec{q}\sigma}$  possui uma estrutura na primeira zona de Brillouin. Essa estrutura é fundamental para dar origem a um pseudogap com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$  na densidade de estados e nas bandas renormalizadas.

As transformadas de Fourier dos elementos das matrizes normalização e energia são, respectivamente:

$$N_{\vec{k}} = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} N_{ij} \quad (3.87)$$

e

$$E_{\vec{k}} = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} E_{ij}, \quad (3.88)$$

onde  $L$  é o número de sítios do sistema.

Efetuada-se a transformada de Fourier dos elementos da matriz normalização  $\mathbf{N}$ ,

obtém-se o seguinte resultado:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 & \langle n_{-\sigma} \rangle \\ \langle n_{-\sigma} \rangle & \langle n_{-\sigma} \rangle \end{bmatrix}. \quad (3.89)$$

Efetuada-se a transformada de Fourier dos elementos da matriz energia  $\mathbf{E}$ , obtém-se:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \epsilon_k + U \langle n_{-\sigma} \rangle & (\epsilon_k + U) \langle n_{-\sigma} \rangle \\ (\epsilon_k + U) \langle n_{-\sigma} \rangle & U \langle n_{-\sigma} \rangle + \epsilon_k \langle n_{-\sigma} \rangle^2 + \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) W_{k\sigma} \end{bmatrix}, \quad (3.90)$$

em que a relação de dispersão,  $\epsilon_k$ , é a transformada de Fourier do *hopping*:

$$\epsilon_k = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} t_{ij}. \quad (3.91)$$

Agora, para chegar à matriz das funções de Green para o estado normal, basta substituir na equação 3.61 as matrizes obtidas. Chamando de  $\mathbf{X}$  a expressão entre parênteses em 3.61, chega-se à seguinte matriz:

$$\mathbf{X} = \omega \mathbf{N} - \mathbf{E} = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega N_{11} - E_{11} & \omega N_{12} - E_{12} \\ \omega N_{21} - E_{21} & \omega N_{22} - E_{22} \end{bmatrix} \quad (3.92)$$

ou

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \omega - \epsilon_k - U \langle n_{-\sigma} \rangle & \omega \langle n_{-\sigma} \rangle - (\epsilon_k + U) \langle n_{-\sigma} \rangle \\ \omega \langle n_{-\sigma} \rangle (\epsilon_k + U) \langle n_{-\sigma} \rangle & \omega \langle n_{-\sigma} \rangle - U \langle n_{-\sigma} \rangle - \epsilon_k \langle n_{-\sigma} \rangle^2 - \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) W_{k\sigma} \end{bmatrix}. \quad (3.93)$$

Logo, a inversa da matriz  $\mathbf{X}$  é:

$$\mathbf{X}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{X}|} \begin{bmatrix} X_{22} & -X_{12} \\ -X_{21} & X_{11} \end{bmatrix} = \frac{1}{X_{11}X_{22} - X_{12}X_{21}} \begin{bmatrix} X_{22} & -X_{12} \\ -X_{21} & X_{11} \end{bmatrix}. \quad (3.94)$$

Substituindo 3.94 em 3.61, tem-se:

$$\mathbf{G} = \frac{1}{|\mathbf{X}|} \begin{bmatrix} 1 & \langle n_{-\sigma} \rangle \\ \langle n_{-\sigma} \rangle & \langle n_{-\sigma} \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_{22} & -X_{12} \\ -X_{21} & X_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \langle n_{-\sigma} \rangle \\ \langle n_{-\sigma} \rangle & \langle n_{-\sigma} \rangle \end{bmatrix}. \quad (3.95)$$

A matriz das funções de Green, cuja forma é

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} G_{k\sigma}^{11} & G_{k\sigma}^{12} \\ G_{k\sigma}^{21} & G_{k\sigma}^{22} \end{bmatrix} \quad (3.96)$$

terá, portanto, os seguintes elementos:

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \frac{X_{22} - (X_{21} + X_{12})\langle n_{-\sigma} \rangle + X_{11}\langle n_{-\sigma} \rangle^2}{|\mathbf{X}|} & \frac{(X_{22} - X_{12})\langle n_{-\sigma} \rangle + (X_{11} - X_{21})\langle n_{-\sigma} \rangle^2}{|\mathbf{X}|} \\ \frac{(X_{22} - X_{21})\langle n_{-\sigma} \rangle + (X_{11} - X_{12})\langle n_{-\sigma} \rangle^2}{|\mathbf{X}|} & \frac{(X_{22} - X_{21} + X_{11} - X_{12})\langle n_{-\sigma} \rangle^2}{|\mathbf{X}|} \end{bmatrix}. \quad (3.97)$$

O determinante da matriz  $\mathbf{X}$  terá a forma de um polinômio de segundo grau:

$$|\mathbf{X}| = a\omega^2 + b\omega + c, \quad (3.98)$$

em que

$$a = \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle), \quad (3.99)$$

$$b = -U\langle n_{-\sigma} \rangle - \epsilon_k \langle n_{-\sigma} \rangle^2 - (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)W_{k\sigma} - (\epsilon_k + U\langle n_{-\sigma} \rangle)\langle n_{-\sigma} \rangle - 2(\epsilon_k + U)\langle n_{-\sigma} \rangle^2 \quad (3.100)$$

e

$$c = \epsilon_k - U\langle n_{-\sigma} \rangle U\langle n_{-\sigma} \rangle + \epsilon_k \langle n_{-\sigma} \rangle^2 + \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)W_{k\sigma}. \quad (3.101)$$

As raízes do polinômio acima satisfazem a condição  $|\mathbf{X}| = 0$ , representando as bandas renormalizadas e sendo dadas pelas seguintes expressões:

$$\omega_{1k} = \frac{U + \epsilon_k + W_{k\sigma}}{2} - \frac{X_{k\sigma}}{2} \quad (3.102)$$

e

$$\omega_{2k} = \frac{U + \epsilon_k + W_{k\sigma}}{2} + \frac{X_{k\sigma}}{2}, \quad (3.103)$$

onde:

$$X_{k\sigma} = \sqrt{(U + \epsilon_k + W_{k\sigma})^2 + 4\langle n_{-\sigma} \rangle(\epsilon_k - W_{k\sigma})}. \quad (3.104)$$

### 3.4.2 Estado Supercondutor

Na presente seção, será calculada a matriz das funções de Green para o caso do estado supercondutor. Para tal, é necessário utilizar um conjunto de quatro operadores, adicionando dois operadores buraco aos operadores elétron usados para o estado normal, de modo a gerar funções de correlação anômalas associadas à supercondutividade (BEENEN; EDWARDS, 1995). Dessa forma, o conjunto dos operadores  $\{A_n\}$  será  $\{c_{i\sigma}, n_{i-\sigma}c_{i\sigma}, c_{i-\sigma}^\dagger, n_{i\sigma}c_{i-\sigma}^\dagger\}$ .

As novas matrizes  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{N}$  serão calculadas usando as equações 3.57 e 3.58, respectivamente. Essas novas matrizes serão de ordem  $4 \times 4$ , podendo ser divididas em quatro matrizes  $2 \times 2$ . As matrizes  $2 \times 2$  da parte superior esquerda e da parte inferior direita

da nova matriz normalização serão idênticas àquela matriz normalização calculada para o estado normal e apresentada na equação 3.68. Os elementos nos blocos fora da diagonal principal serão:

$$N_{13} = N_{24} = N_{31} = N_{42} = 0 \quad (3.105)$$

e

$$N_{14} = -N_{23} = N_{41}^* = -N_{32}^* = \langle c_{i\sigma} c_{i-\sigma} \rangle. \quad (3.106)$$

A matriz 2 x 2 da parte superior esquerda da nova matriz energia será idêntica àquela matriz energia calculada para o estado normal e apresentada na equação 3.69. Já a matriz 2 x 2 da parte inferior direita será simplesmente essa matriz energia do estado normal, porém com o sinal trocado. Os elementos nos blocos fora da diagonal principal serão:

$$E_{13} = E_{31}^* = U \langle c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \rangle, \quad (3.107)$$

$$E_{14} = E_{32}^* = t_{ij} \langle c_{i\sigma} c_{i-\sigma} \rangle, \quad (3.108)$$

$$E_{23} = E_{41}^* = (U - t_{ij}) \langle c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \rangle + \sum_l t_{ij} \langle c_{i-\sigma} c_{l\sigma} + c_{l-\sigma} c_{i\sigma} \rangle, \quad (3.109)$$

$$E_{24} = t_{il} \langle n_{i-\sigma} c_{l\sigma} c_{l-\sigma} + n_{l\sigma} c_{i\sigma} c_{i-\sigma} \rangle + \sum_l t_{il} \langle n_{i\sigma} c_{i-\sigma} c_{l\sigma} - n_{i-\sigma} c_{i\sigma} c_{l-\sigma} \rangle \quad (3.110)$$

e

$$E_{42} = t_{il} \langle n_{i\sigma} c_{l-\sigma}^\dagger c_{l\sigma}^\dagger + n_{l-\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger c_{i\sigma}^\dagger \rangle + \sum_l t_{il} \langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{l-\sigma}^\dagger - n_{i\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger c_{l\sigma}^\dagger \rangle. \quad (3.111)$$

O parâmetro de ordem supercondutor considerado nesse estudo possui simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ , de maneira que  $\langle c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \rangle = 0$  e que as somas sobre os sítios  $l$  (primeiros vizinhos de  $i$ ) de  $\langle c_{i-\sigma} c_{l\sigma} \rangle$  e de  $\langle n_{i\sigma} c_{i-\sigma} c_{l\sigma} \rangle$  também se anulam. Dessa forma, tem-se:

$$E_{13} = E_{14} = E_{23} = E_{31}^* = E_{41}^* = E_{32}^* = 0 \quad (3.112)$$

e, similarmente, os blocos fora da diagonal principal da matriz  $\mathbf{N}$  se anularão.

Representa-se a função de correlação que aparece no primeiro termo de  $E_{24}$  como:

$$\gamma_{il} = \langle n_{i-\sigma} c_{l\sigma} c_{l-\sigma} + n_{l\sigma} c_{i\sigma} c_{i-\sigma} \rangle. \quad (3.113)$$

Fazendo a transformada de Fourier para representar  $\gamma_{il}$  no espaço dos momentos, tem-se que:

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{L} t_{il} \sum_{il} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_i)} \gamma_{il}, \quad (3.114)$$

onde, para a simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ ,  $\gamma_{il} = \gamma$  se  $\vec{R}_i - \vec{R}_l = (\pm a, 0)$  e  $\gamma_{il} = -\gamma$  se  $\vec{R}_i - \vec{R}_l = (0, \pm a)$ , sendo  $a$  a constante da rede. Com essas condições, tem-se que

$$\gamma_{\vec{k}} = 2\Delta_0[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)], \quad (3.115)$$

com  $\Delta_0 = t\gamma$ . A quantidade  $\gamma_{\vec{k}}$  é a função gap e  $2\Delta_0$  é a amplitude da função gap.

No espaço dos momentos, a matriz energia  $\mathbf{E}$  do estado supercondutor vai ter a seguinte forma:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{22} & 0 & \gamma_{\vec{k}} \\ 0 & 0 & -E_{11} & -E_{12} \\ 0 & \gamma_{\vec{k}}^* & -E_{21} & -E_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.116)$$

e a matriz normalização  $\mathbf{N}$  do estado supercondutor vai ter a seguinte forma:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_{11} & N_{12} & 0 & 0 \\ N_{21} & N_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N_{11} & N_{12} \\ 0 & 0 & N_{21} & N_{22} \end{bmatrix}. \quad (3.117)$$

Tem-se um estado supercondutor quando a função gap for diferente de zero, ou seja,  $\gamma_{\vec{k}} \neq 0$ .

A matriz das funções de Green, da mesma forma como no caso do estado normal, pode então ser calculada através da equação 3.61 da seguinte forma:

$$\mathbf{G}_{SC} = \mathbf{N}_{SC}(\omega \mathbf{N}_{SC} - \mathbf{E}_{SC})^{-1} \mathbf{N}_{SC}. \quad (3.118)$$

Chamando a expressão entre parênteses da equação acima de  $\mathbf{X}_{SC}$ , chega-se à seguinte matriz:

$$\mathbf{X}_{SC} = \begin{bmatrix} \omega N_{11} - E_{11} & \omega N_{12} - E_{12} & 0 & 0 \\ \omega N_{21} - E_{21} & \omega N_{22} - E_{22} & 0 & -\gamma_{\vec{k}} \\ 0 & 0 & \omega N_{11} + E_{11} & \omega N_{12} + E_{12} \\ 0 & -\gamma_{\vec{k}}^* & \omega N_{21} + E_{21} & \omega N_{22} + E_{22} \end{bmatrix}. \quad (3.119)$$

Separando a matriz  $\mathbf{X}_{SC}$  em quatro matrizes  $2 \times 2$ , como é conveniente, tem-se:

$$\mathbf{X}_{SC} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_2 \\ \mathbf{X}_3 & \mathbf{X}_4 \end{bmatrix}, \quad (3.120)$$

sendo que:

$$\mathbf{X}_1 = \begin{bmatrix} \omega N_{11} - E_{11} & \omega N_{12} - E_{12} \\ \omega N_{21} - E_{21} & \omega N_{22} - E_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.121)$$

$$\mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_{\vec{k}} \end{bmatrix}, \quad (3.122)$$

$$\mathbf{X}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_{\vec{k}}^* \end{bmatrix} \quad (3.123)$$

e

$$\mathbf{X}_4 = \begin{bmatrix} \omega N_{11} + E_{11} & \omega N_{12} + E_{12} \\ \omega N_{21} + E_{21} & \omega N_{22} + E_{22} \end{bmatrix}. \quad (3.124)$$

Dessa forma, o cálculo da inversa da matriz  $\mathbf{X}_{SC}$  fica:

$$\mathbf{X}_{SC}^{-1} = \frac{1}{X_1 X_4 - X_2 X_3} \begin{bmatrix} X_4 & -X_2 \\ -X_3 & X_1 \end{bmatrix}. \quad (3.125)$$

Chamando de  $\mathbf{N}$  a matriz normalização do estado normal e compactando a matriz normalização do estado supercondutor em quatro matrizes  $2 \times 2$ , o cálculo da matriz das funções de Green fica:

$$\mathbf{G}_{SC} = \begin{bmatrix} \mathbf{N} & 0 \\ 0 & \mathbf{N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2 \mathbf{X}_4^{-1} \mathbf{X}_3)^{-1} & -\mathbf{X}_1^{-1} \mathbf{X}_2 (\mathbf{X}_4 - \mathbf{X}_3 \mathbf{X}_1^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \\ -\mathbf{X}_4^{-1} \mathbf{X}_3 (\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2 \mathbf{X}_4^{-1} \mathbf{X}_3)^{-1} & (\mathbf{X}_4 - \mathbf{X}_3 \mathbf{X}_1^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{N} & 0 \\ 0 & \mathbf{N} \end{bmatrix}. \quad (3.126)$$

Ao efetuar a multiplicação matricial acima, chega-se finalmente à matriz das funções de Green:

$$\mathbf{G}_{SC} = \begin{bmatrix} G_{ij\sigma}^{11} & G_{ij\sigma}^{12} & G_{ij\sigma}^{13} & G_{ij\sigma}^{14} \\ G_{ij\sigma}^{21} & G_{ij\sigma}^{22} & G_{ij\sigma}^{23} & G_{ij\sigma}^{24} \\ G_{ij\sigma}^{31} & G_{ij\sigma}^{32} & G_{ij\sigma}^{33} & G_{ij\sigma}^{34} \\ G_{ij\sigma}^{41} & G_{ij\sigma}^{42} & G_{ij\sigma}^{43} & G_{ij\sigma}^{44} \end{bmatrix}. \quad (3.127)$$

A combinação em pares dos elementos do conjunto de operadores  $\{A_n\}$  resultará na seguinte matriz de funções de Green para o estado supercondutor no espaço real:

$$\mathbf{G}_{SC} = \begin{bmatrix} \langle\langle c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{i\sigma}; n_{j-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{i\sigma}; c_{j-\sigma} \rangle\rangle & \langle\langle c_{i\sigma}; n_{i\sigma} c_{j-\sigma} \rangle\rangle \\ \langle\langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}; n_{j-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}; c_{j-\sigma} \rangle\rangle & \langle\langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}; n_{i\sigma} c_{j-\sigma} \rangle\rangle \\ \langle\langle c_{i-\sigma}^\dagger; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{i-\sigma}^\dagger; n_{j-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{i-\sigma}^\dagger; c_{j-\sigma} \rangle\rangle & \langle\langle c_{i-\sigma}^\dagger; n_{i\sigma} c_{j-\sigma} \rangle\rangle \\ \langle\langle n_{i\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle n_{i\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger; n_{j-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle n_{i\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger; c_{j-\sigma} \rangle\rangle & \langle\langle n_{i\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger; n_{i\sigma} c_{j-\sigma} \rangle\rangle \end{bmatrix}. \quad (3.128)$$

De posse da função de Green relevante para o cálculo da grandeza física em questão, relaciona-se a mesma com a função de correlação através da seguinte expressão:

$$\langle BA \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint f(\omega) \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega} d\omega, \quad (3.129)$$

onde

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (3.130)$$

é a função distribuição de Fermi-Dirac, com  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ .

Nesse trabalho, uma das funções de Green mais importantes e de fundamental interesse é  $G_{k\sigma}^{13} = \langle \langle c_{i\sigma}; c_{j-\sigma} \rangle \rangle$ , através da qual se obtém a função gap  $\gamma_{\vec{k}}$  e o parâmetro de ordem  $\gamma$ . Essa função de Green tem a seguinte forma:

$$G_{k\sigma}^{13} = \frac{-\gamma_{\vec{k}}(E_{12} - \langle n_{-\sigma} \rangle E_{11})^2}{|\mathbf{X}_{SC}|}, \quad (3.131)$$

onde  $|\mathbf{X}_{SC}|$  é o determinante da matriz  $\mathbf{X}_{SC}$ . Substituindo os resultados desse determinante e dos elementos da matriz energia na equação 3.131, pode-se reescrever a função de Green  $G_{k\sigma}^{13}$  como:

$$G_{k\sigma}^{13} = \frac{-\gamma_{\vec{k}}[\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) U]^2}{|\mathbf{X}_{SC}|}. \quad (3.132)$$

No caso da simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ , o gap é determinado pela função gap  $\gamma_{\vec{k}}$  definida na equação 3.115. Esse gap não depende de uma simples função de correlação  $\langle c_{i\sigma} c_{j-\sigma} \rangle$ , mas sim da função de correlação  $\gamma_{il}$ , dada pela equação 3.113, que pode ser reescrita como:

$$\gamma_{il} = \langle (c_{i-\sigma}^{\dagger} c_{l-\sigma} + c_{l\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) c_{i-\sigma} c_{l\sigma} \rangle. \quad (3.133)$$

Esta quantidade  $\gamma_{il}$  não pode ser diretamente expressa em termos das funções de Green obtidas na matriz  $\mathbf{G}_{SC}$  porque essa matriz não contém as funções de Green associadas diretamente às funções de correlação que aparecem em 3.133. Uma forma de obter tais funções de Green é usar operadores auxiliares como no procedimento proposto por Roth (1969) e Beenen e Edwards (1995). Uma forma mais simples de obter uma expressão para o parâmetro de ordem é usar o procedimento de fatorização (BEENEN; EDWARDS, 1995) que desacopla as funções de correlação através de um procedimento de campo médio, permitindo calcular as novas funções de correlação com as funções de Green presentes na matriz  $\mathbf{G}_{SC}$ . Esse procedimento é válido para valores intermediários de  $U$  onde  $\frac{U}{|t_1|} \lesssim 16, 0$ . Assim, para contornar tal situação, nesse trabalho será utilizado o procedimento de fatorização proposto por Beenen e Edwards (1995), que, apesar de superestimar o valor do gap e falhar para  $U \rightarrow \infty$ , é bastante útil ao fornecer uma estimativa do limite superior do gap e de  $T_C$  para valores finitos e intermediários de  $U$ .



Assim sendo, aproxima-se a equação 3.133 como

$$\gamma_{il} = (\langle c_{i-\sigma}^\dagger c_{l-\sigma} \rangle + \langle c_{l\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle) \langle c_{i-\sigma} c_{l\sigma} \rangle. \quad (3.134)$$

A simetria  $\gamma_{il} = \gamma_{li}$  é preservada e as funções de correlação presentes em  $\gamma_{il}$  podem ser obtidas a partir das funções de Green presentes na matriz das funções de Green  $\mathbf{G}_{SC}$ . Assumindo que as correlações  $\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$  entre sítios vizinhos  $l$  mais próximos do sítio  $i$  sejam iguais para todos os sítios  $l$ , pode-se reescrever 3.134 como:

$$\gamma_{il} = 2n_1 \langle c_{i-\sigma} c_{l\sigma} \rangle, \quad (3.135)$$

onde

$$n_1 = \langle c_{i-\sigma}^\dagger c_{l-\sigma} \rangle = \langle c_{l\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle. \quad (3.136)$$

As transformadas de Fourier das funções de correlação presentes em 3.135 são, respectivamente

$$n_1 t_1 = \frac{1}{zL} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \quad (3.137)$$

e

$$\langle c_{k-\sigma} c_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \langle c_{i-\sigma} c_{l\sigma} \rangle, \quad (3.138)$$

onde  $z$  é o número de primeiros vizinhos, sendo  $z = 4$  para uma rede quadrada bidimensional. A partir das equações 3.115 e 3.135, obtém-se

$$\gamma_{\vec{k}} = 2n_1 t_1 \sum_{il} \cos[\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_l)] \langle c_{i-\sigma} c_{l\sigma} \rangle. \quad (3.139)$$

A função de correlação presente na equação acima pode ser calculada a partir da função de Green  $G_{k\sigma}^{13} = \langle \langle c_{k\sigma} c_{k-\sigma} \rangle \rangle$  usando a relação

$$\frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \langle c_{k\sigma} c_{k-\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi i L} \sum_{\vec{k}} \oint f(\omega) G_{k\sigma}^{13}(\omega) d\omega, \quad (3.140)$$

que resulta na seguinte expressão:

$$\gamma_{\vec{k}} = -\frac{2n_1 t_1 U^2}{L} \sum_{il} \cos[\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_l)] \sum_{\vec{q}} \gamma_{\vec{q}} \cos[\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_l)] F(E_{1,\vec{q}}, E_{2,\vec{q}}). \quad (3.141)$$

As energias das quasipartículas  $E_{1,\vec{q}}$  e  $E_{2,\vec{q}}$  são simétricas em  $q_x$  e  $q_y$ , uma vez que satisfazem o determinante  $|\mathbf{X}_{SC}| = 0$  e  $|\gamma_{\vec{k}}|^2$  e a matriz  $\mathbf{E}$  possuem essa simetria. Substituindo

a equação 3.115 em 3.142, obtém-se

$$\gamma_{\vec{k}} = -\gamma_{\vec{k}} \frac{2n_1 t_1 U^2}{L} \sum_{\vec{q}} (\cos q_x a - \cos q_y a)^2 F(E_{1,\vec{q}}, E_{2,\vec{q}}). \quad (3.142)$$

Dessa forma, para uma solução não-nula,  $\gamma_{\vec{k}}$  deve satisfazer a equação de gap

$$1 = -\frac{2n_1 t_1 U^2}{L} \sum_{\vec{k}} (\cos k_x a - \cos k_y a)^2 F(E_{1\vec{k}}, E_{2\vec{k}}), \quad (3.143)$$

onde

$$F(E_{1\vec{k}}, E_{2\vec{k}}) = \frac{1}{2(E_{2\vec{k}}^2 - E_{1\vec{k}}^2)} \left[ \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta E_{1\vec{k}})}{E_{1\vec{k}}} - \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta E_{2\vec{k}})}{E_{2\vec{k}}} \right]. \quad (3.144)$$

As bandas renormalizadas devem satisfazer a condição  $|\mathbf{X}_{SC}| = 0$ . Quando  $|\gamma_{\vec{k}}| / \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \ll \sqrt{\omega_{2\vec{k}}^2 - \omega_{1\vec{k}}^2}$ , tem-se:

$$E_{i,\vec{k}\sigma} = (-1)^{(i+1)} \sqrt{\omega_{j,\vec{k}\sigma}^2 + \frac{(-1)^{(j+1)} |\gamma_{\vec{k}}|^2 [(\epsilon_{\vec{k}} + U \langle n_{-\sigma} \rangle)^2 - \omega_{j,\vec{k}\sigma}^2]}{\langle n_{-\sigma}^2 \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)^2 (\omega_{2,\vec{k}\sigma}^2 - \omega_{1,\vec{k}\sigma}^2)}} \quad (3.145)$$

onde  $i = 1, 2, 3$  e  $4$  representa as quatro bandas do estado supercondutor, com  $j = 1$  se  $i = 1$  ou  $2$  e  $j = 2$  se  $i = 3$  ou  $4$ . As bandas do estado normal  $\omega_{1k\sigma}$  e  $\omega_{2k\sigma}$  estão definidas nas equações 3.102 e 3.103.

### 3.4.3 Estudo Energético

A energia eletrônica  $E = \langle H \rangle$  pode ser separada nos termos cinético  $K$  e potencial  $V$ . Dessa forma,

$$E = K + V, \quad (3.146)$$

sendo que

$$K = \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle\sigma} t_{ij} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle \quad (3.147)$$

e

$$V = \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle. \quad (3.148)$$

A função de correlação  $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$  é obtida da função de Green  $G_{ij\sigma}^{11}$  da matriz 3.127. A função de correlação  $\langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle$  representa a dupla ocupação e é obtida seguindo o procedimento proposto por Roth (1969).

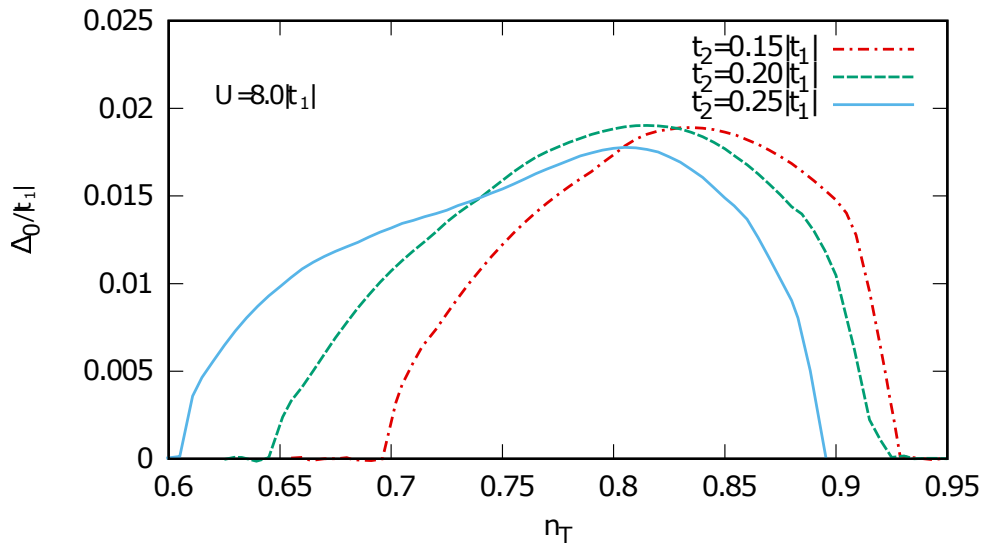
## 4 RESULTADOS NUMÉRICOS

O presente capítulo mostra os resultados numéricos obtidos por meio de um programa escrito em linguagem Fortran 95. Para obtenção da maioria dos resultados numéricos apresentados aqui, é necessário realizar uma soma sobre as componentes  $k_x$  e  $k_y$  do vetor de onda  $\vec{k}$ , sobre a primeira zona de Brillouin. Para que isso seja possível, deve-se escolher uma rede no espaço real que descreva da forma mais adequada possível o sistema que se deseja estudar. Sendo assim, escolheu-se uma relação de dispersão de uma rede quadrada, a qual é adequada para descrever sistemas cupratos que apresentam supercondutividade, principalmente nos planos de  $\text{CuO}_2$ . Essa relação de dispersão é dada por

$$\epsilon_k = 2t_1[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a) \quad (4.1)$$

sendo que  $t_1$  representa a amplitude do salto para os primeiros vizinhos do sítio  $i$  da rede,  $t_2$  representa a amplitude do salto para os segundos vizinhos do sítio  $i$  da rede e  $a$  é a constante da rede. Todos os resultados foram calculados em temperatura  $T = 0,0$  K e  $t_1 = -1,0$  eV, sendo  $|t_1|$  a unidade de energia considerada neste trabalho.

Figura 4.1 – Parâmetro de ordem  $\Delta_0$  em função da ocupação  $n_T$  para diferentes valores de  $t_2$ .



Fonte: Autor.

A figura 4.1 mostra a variação do parâmetro de ordem  $\Delta_0$  (equação 3.115) em função da ocupação  $n_T$  ( $= \langle n_\sigma \rangle + \langle n_{-\sigma} \rangle$ ) para  $U = 8,0|t_1|$  e diferentes valores de  $t_2$ . Na faixa de ocupação onde  $\Delta_0 \neq 0$ , o sistema se encontra no estado supercondutor. Em geral,  $\Delta_0$  versus  $n_T$  apresenta a forma aproximada de um domo, ou seja, existe uma ocupação  $n_T$  ótima para a qual  $\Delta_0$  é máximo. A faixa de dopagem onde a supercondutividade ocorre ( $\Delta_0 \neq 0$ ), depende da intensidade do salto para segundos vizinhos  $t_2$ . A ocupação

ótima, onde  $\Delta_0$  é máximo, também depende de  $t_2$ . Essa dependência está relacionada com a forma como  $t_2$  afeta as bandas renormalizadas (pela interação coulombiana  $U$ ). O comportamento das bandas renormalizadas será discutido mais adiante.

A figura 4.2 apresenta as curvas das diferenças da energia cinética e potencial em função da ocupação total  $n_T^1$ , sendo que

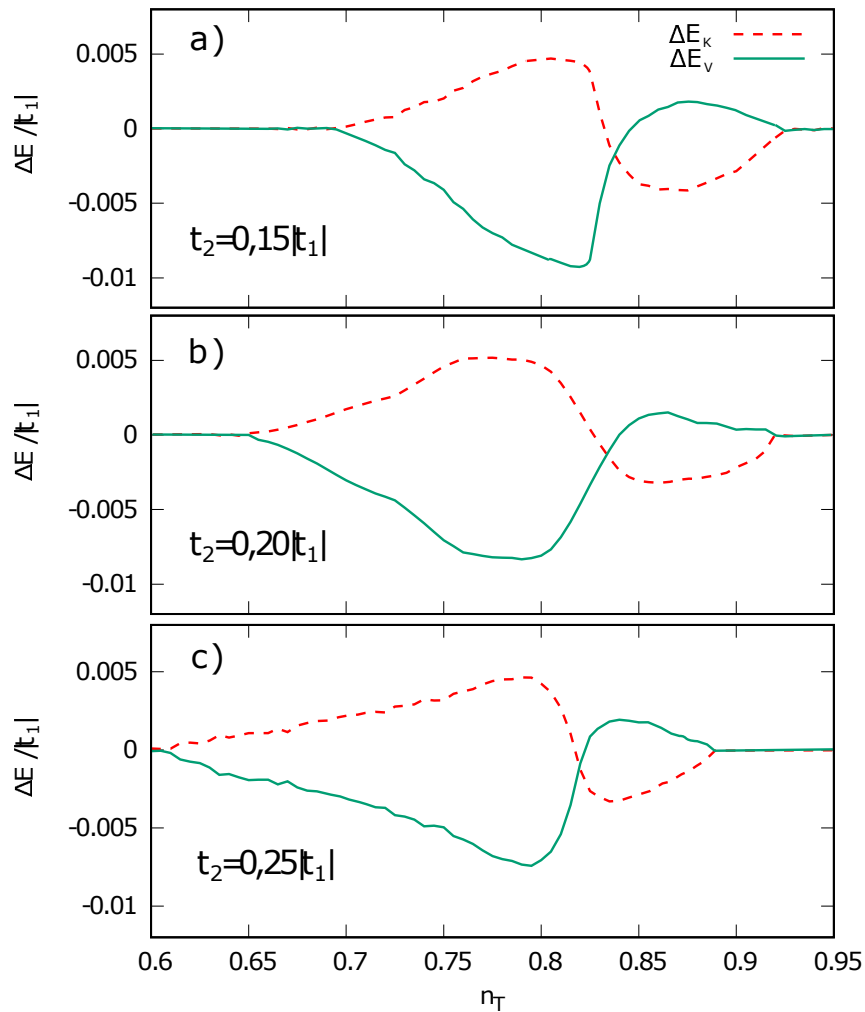
$$\Delta E_K = K_S - K_N \quad (4.2)$$

e

$$\Delta E_V = V_S - V_N \quad (4.3)$$

onde os índices  $N$  e  $S$  se referem aos estados normal e supercondutor, respectivamente. As energias cinética e potencial estão definidas nas equações 3.147 e 3.148, respectivamente.

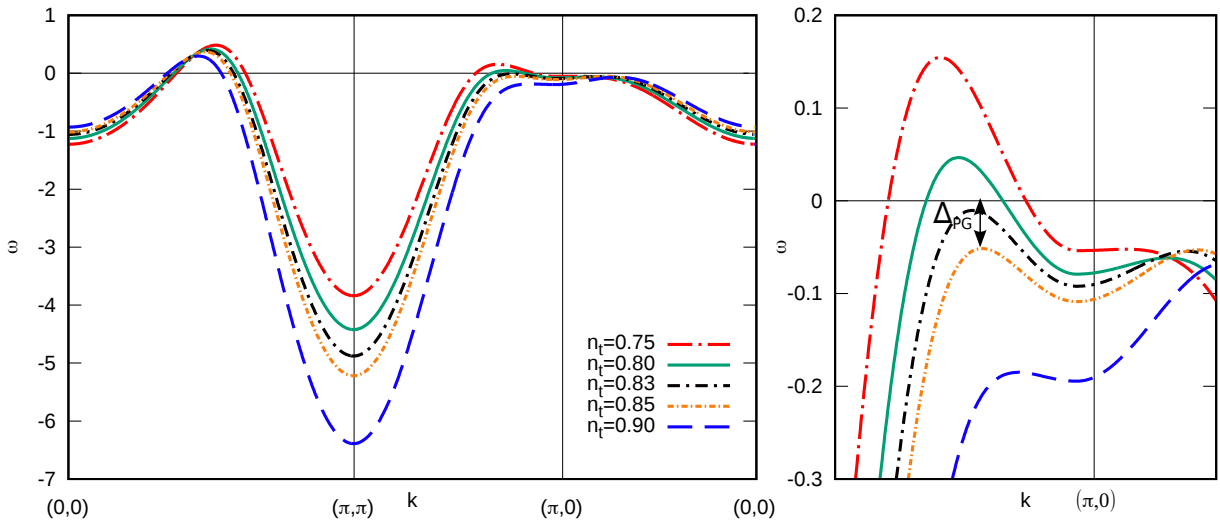
Figura 4.2 – Diferenças das energias cinética e potencial em função da ocupação para os mesmos parâmetros do modelo considerados na figura 4.1.



Fonte: Autor.

<sup>1</sup>Ocupação e dopagem são complementares (à medida que a dopagem aumenta a ocupação diminui).

Figura 4.3 – Banda renormalizada  $\omega_{1,\vec{k}\sigma}$  para  $U = 8, 0|t_1|, t_2 = 0, 2|t_1|$  e diferentes ocupações.



Fonte: Autor.

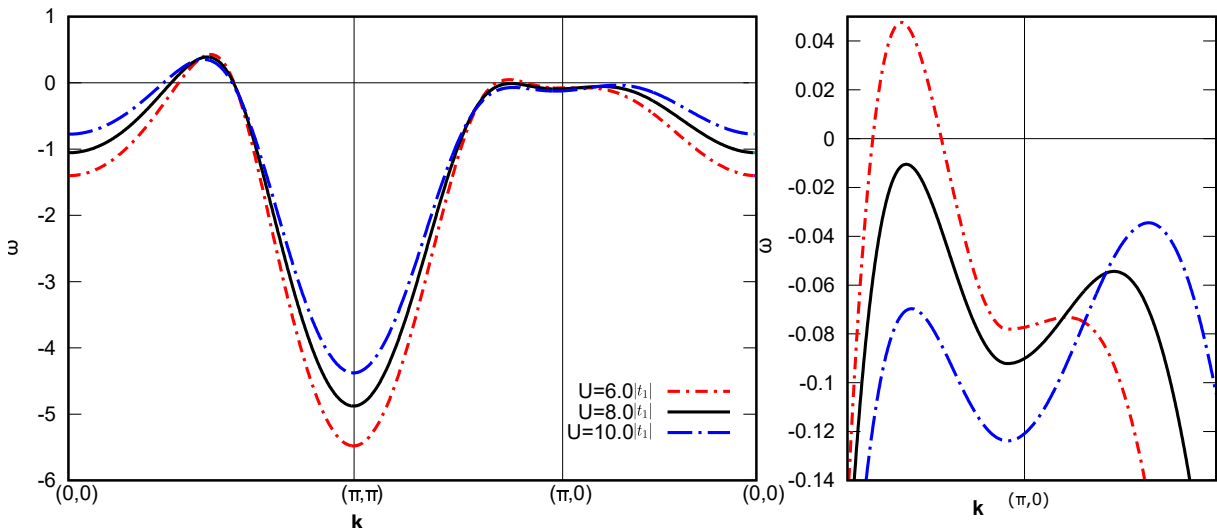
De modo geral, para valores baixos de ocupação, nota-se um aumento da diferença da energia cinética  $\Delta E_K$  e uma redução da diferença da energia potencial  $\Delta E_V$ . Esse comportamento se verifica até um certo valor de ocupação  $n_{Tm}$ , onde  $\Delta E_K$  tem um máximo e  $\Delta E_V$  tem um mínimo. Nota-se que  $n_{Tm}$  depende significativamente de  $t_2$ . A partir de  $n_{Tm}$ , à medida que a ocupação aumenta, há uma inversão de tendência para as diferenças de energia, com  $\Delta E_V$  passando a crescer e  $\Delta E_K$  passando a decrescer até que as curvas se cruzam para uma dada ocupação que depende do salto para os segundos vizinhos, sendo que quanto maior é o  $t_2$ , menor é a ocupação para a qual as curvas se cruzam. O cruzamento das curvas  $\Delta E_K$  e  $\Delta E_V$  tem sido observado em outros estudos teóricos utilizando diferentes técnicas para tratar o modelo de Hubbard (OGATA et al., 2006; GULL; MILLIS, 2012; YOKOYAMA et al., 2013; BAERISWYL, 2019). Acredita-se que o valor de ocupação onde as curvas de energia se cruzam esteja diretamente associado ao aparecimento de um pseudogap na densidade de estados (GULL; MILLIS, 2012). Mais adiante, serão apresentados outros resultados que corroboram esse cenário.

A Figura 4.3 mostra a banda renormalizada do estado normal  $\omega_{1,\vec{k}\sigma}$  ao longo das direções  $(0,0) - (\pi,\pi) - (\pi,0) - (0,0)$ . A linha horizontal em  $\omega = 0$  indica a posição do potencial químico  $\mu$ . É interessante notar que, para ocupações  $n_T < 0,83$ , a banda intercepta o nível do potencial químico  $\mu$  tanto na direção  $(0,0) - (\pi,\pi)$  quanto na direção  $(\pi,\pi) - (\pi,0)$ . No entanto, para  $n_T \gtrsim 0,83$ , um gap aparece em torno do ponto  $(\pi,0)$ . Por outro lado, nenhum gap é observado no ponto  $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ . Devido a essas características, tal gap é, na verdade, um pseudogap como aquele observado em sistemas cupratos (TIMUSK; STATT, 1999). O painel direito da figura 4.3 mostra detalhes da região do ponto antinodal  $(\pi,0)$  onde o pseudogap  $\Delta_{PG}$  ocorre. O pseudogap surge para ocupações mais altas em um regime de correlações mais fortes caracterizado por altas ocupações e altos

valores de interação coulombiana  $U$ .

O efeito de  $U$  na estrutura das bandas renormalizadas e no pseudogap é mostrado na figura 4.4. No painel da direita, o qual mostra em detalhe a região do ponto antinodal  $(\pi, 0)$ , observa-se que o pseudogap ocorre para  $U = 8,0|t_1|$  e  $10,0|t_1|$ , confirmando que o mesmo é um fenômeno presente no regime de correlações fortes.

Figura 4.4 – Banda renormalizada para  $n_T = 0,83$ ,  $t_2 = 0,2|t_1|$  e diferentes valores de  $U$ .



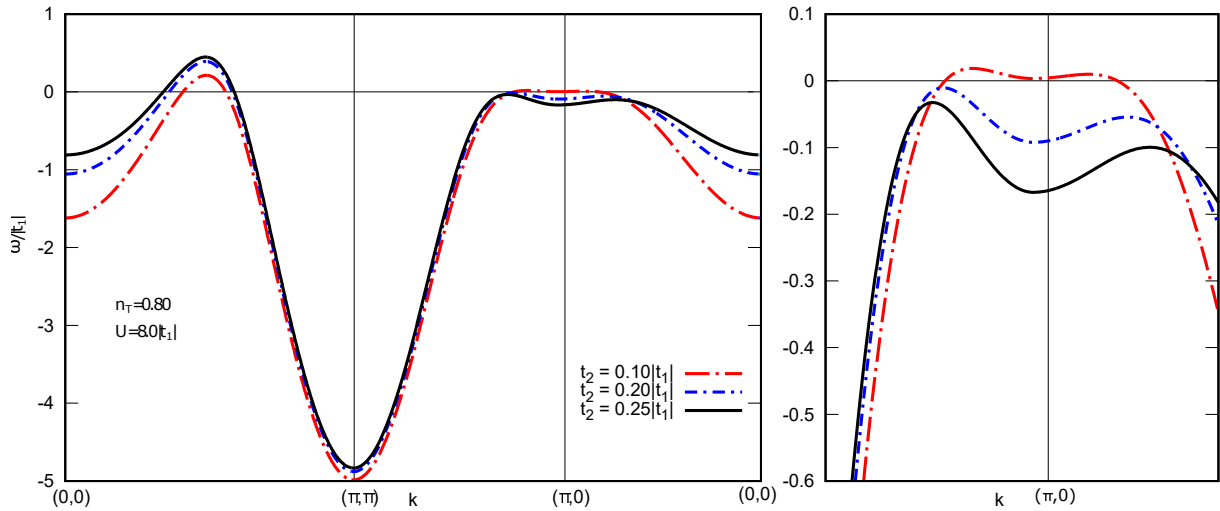
Fonte: Autor.

Outro parâmetro importante que afeta a estrutura das bandas renormalizadas e também o pseudogap é o salto para os segundos vizinhos  $t_2$ . Conforme pode ser observado na figura 4.5, o efeito de  $t_2$  é maior na região da origem, no ponto  $(0, 0)$ , mas também afeta a região do ponto antinodal  $(\pi, 0)$ , o que fica claro no painel direito da figura. Na verdade, o aumento de  $t_2$  favorece o surgimento do pseudogap, tendo um papel similar ao da ocupação e da interação coulombiana  $U$ .

As bandas renormalizadas para o estado supercondutor são mostradas na figura 4.6 para diferentes ocupações. No painel direito, o gap supercondutor  $\Delta_0$  para  $n_T = 0,85$  é indicado com uma seta dupla. Para  $n_T = 0,65$ , que corresponde a uma baixa ocupação, o gap  $\Delta_0$  é praticamente imperceptível.

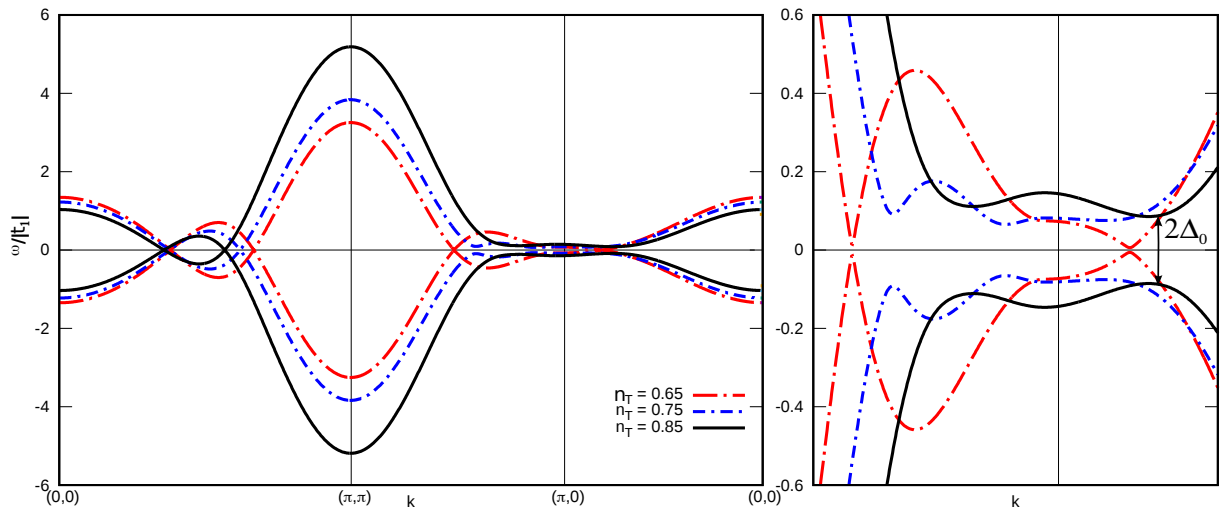
As densidades de estados para os estados normal e supercondutor são mostradas na figura 4.7 para diferentes ocupações. Apenas a região próxima do potencial químico, em  $\omega = 0$ , é mostrada. Para o estado normal, painel da esquerda, a densidade de estados no nível do potencial químico  $\mu$ ,  $\rho(\mu)$ , aumenta com a ocupação até  $n_T \approx 0,85$ . No entanto, para  $n_T = 0,90$ ,  $\rho(\mu)$  é menor devido à presença do pseudogap, que reduz  $\rho(\omega)$  na região próxima de  $\mu$ . Para o estado supercondutor mostrado no painel direito da figura 4.7, observa-se claramente o gap supercondutor com o formato de V, em  $\omega = 0$ . Esse formato é esperado para supercondutores com simetria do tipo de onda  $d_{x^2-y^2}$ . Para  $n_T = 0,65$ , o gap  $\Delta_0$  é muito pequeno, mas aumenta com a ocupação. Contudo,  $\Delta_0$  diminui novamente

Figura 4.5 – Banda renormalizada para diferentes valores de  $t_2$ .



Fonte: Autor.

Figura 4.6 – Bandas do estado supercondutor para  $U = 8, 0|t_1|$ ,  $t_2 = 0, 2|t_1|$  e diferentes ocupações.

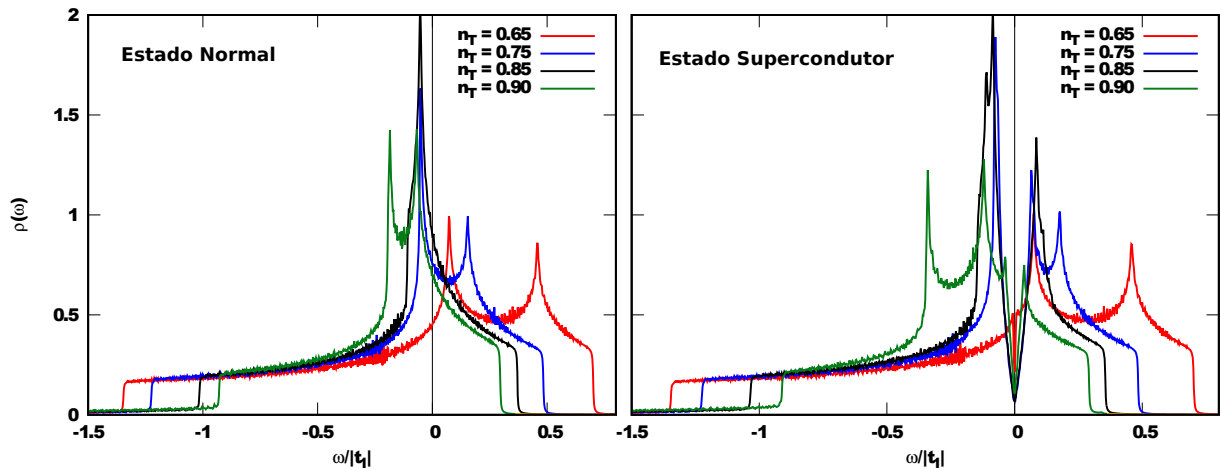


Fonte: Autor.

na região de altas ocupações, onde o sistema entra em regime de correlações muito fortes, as quais destroem o estado supercondutor. O comportamento das densidades de estados está de acordo com os resultados das figuras 4.1, 4.3 e 4.6 para o parâmetro de ordem  $\Delta_0$  e para as bandas renormalizadas.

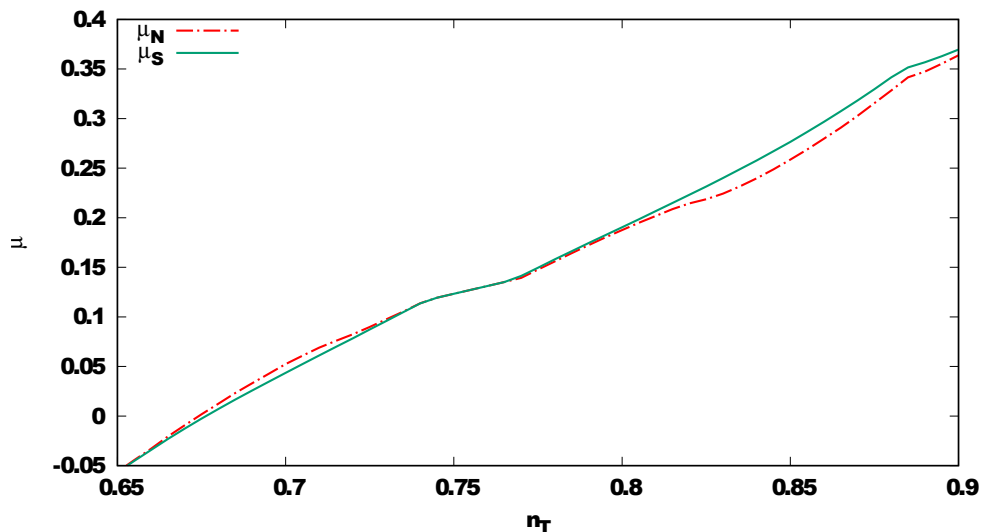
A figura 4.8 mostra o comportamento do potencial químico  $\mu$  em função da ocupação  $n_T$ .  $\mu_N$  é o potencial químico do estado normal e  $\mu_S$  é o potencial químico do estado supercondutor. Nota-se que, para valores baixos de ocupação, o potencial químico do estado normal,  $\mu_N$ , é maior que o potencial químico do estado supercondutor,  $\mu_S$ . Essa situação se inverte para ocupações mais altas. Pode-se entender esse comportamento analisando as densidades de estados dos estados normal e supercondutor. Com a aber-

Figura 4.7 – Densidade de estados para  $U = 8, 0|t_1|$ ,  $t_2 = 0, 2|t_1|$  e diferentes ocupações.



Fonte: Autor.

Figura 4.8 – Potencial químico  $\mu$  em função da ocupação  $n_T$ , para  $U = 8, 0|t_1|$  e  $t_2 = 0, 2|t_1|$ .



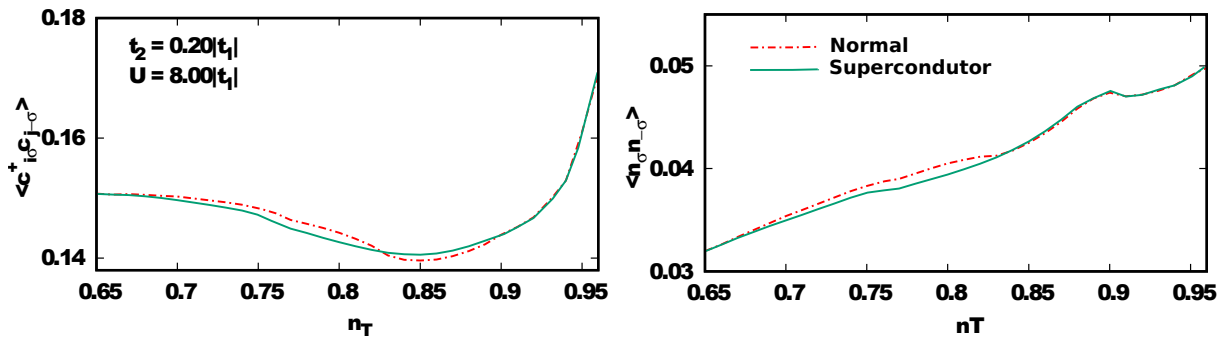
Fonte: Autor.

tura do gap supercondutor na densidade de estados, ocorre um empilhamento de estados nas bordas do gap, como pode ser visto na figura 4.7. Para compensar esse empilhamento de estados, o potencial químico do estado supercondutor  $\mu_S$  sofre um leve recuo em relação ao potencial químico do estado normal  $\mu_N$ , nesse caso  $\mu_S < \mu_N$ . Com o aumento da ocupação, ocorre a abertura do pseudogap, o qual também empilha estados na densidade de estados  $\rho(\omega)$  do estado normal. No entanto, diferentemente do caso supercondutor, o pseudogap empilha estados apenas em energias menores que  $\mu_N$ , obrigando  $\mu_N$  a recuar mais do que  $\mu_S$  para manter a ocupação constante. Logo, nessa região tem-se  $\mu_S > \mu_N$ .

Esse comportamento dos potenciais químicos se reflete no comportamento das energias cinética e potencial, conforme foi mostrado na figura 4.2, onde há um cruzamento entre  $\Delta E_K$  e  $\Delta E_V$  quando o pseudogap se manifesta. Na figura 4.9 estão presentes os



Figura 4.9 – Comportamento das funções de correlação  $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$  e  $\langle n_\sigma n_{-\sigma} \rangle$  associadas às energias cinética e potencial.



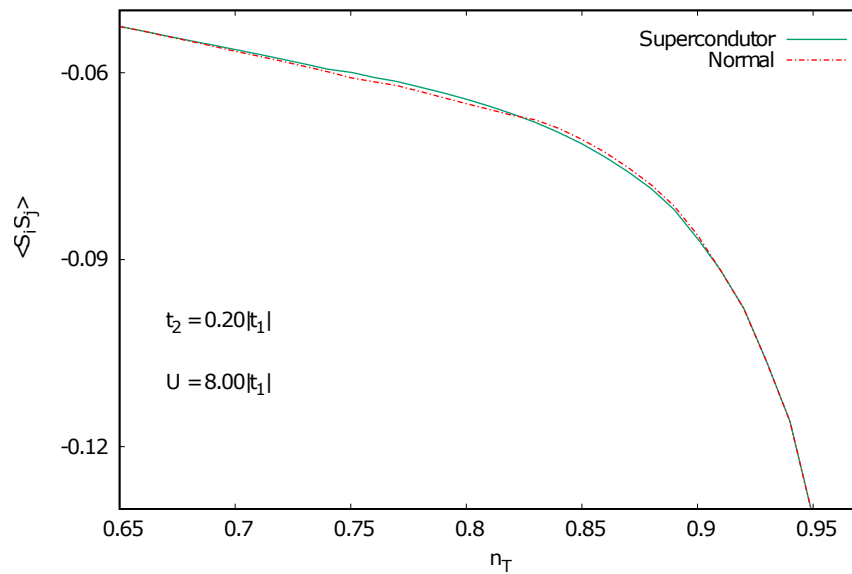
Fonte: Autor.

comportamentos das funções de correlação  $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$  e  $\langle n_\sigma n_{-\sigma} \rangle$ , que estão diretamente relacionadas às energias cinética e potencial, respectivamente (ver equações 3.147 e 3.148). O comportamento verificado nos potenciais químicos também é observado nessas quantidades, principalmente em  $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$ . No painel direito, observa-se também o aumento da dupla ocupação  $\langle n_\sigma n_{-\sigma} \rangle$  com  $n_T$ , conforme era esperado.

Neste trabalho, está sendo assumido um cenário onde as correlações antiferromagnéticas são responsáveis por dar origem ao pseudogap. Nesse caso, a função de correlação  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  desempenha um papel importante por estar associada às correlações antiferromagnéticas de curto alcance. A figura 4.10 mostra a dependência de  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  em relação à ocupação  $n_T$ . Observa-se que  $|\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle|$  aumenta com  $n_T$ , principalmente na região de altas ocupações. Esse aumento de  $|\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle|$  desloca a banda  $\omega_{1,\vec{k}\sigma}$  para energias mais baixas na região nodal  $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$  e também na região antinodal  $(\pi, 0)$ . Se esse deslocamento for grande o suficiente, um pseudogap surge na região do ponto antinodal, como pode ser visto na figura 4.3 para  $n_T \gtrsim 0,83$ . O cruzamento das curvas do estado superconductor e do estado normal também é observado em  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ .

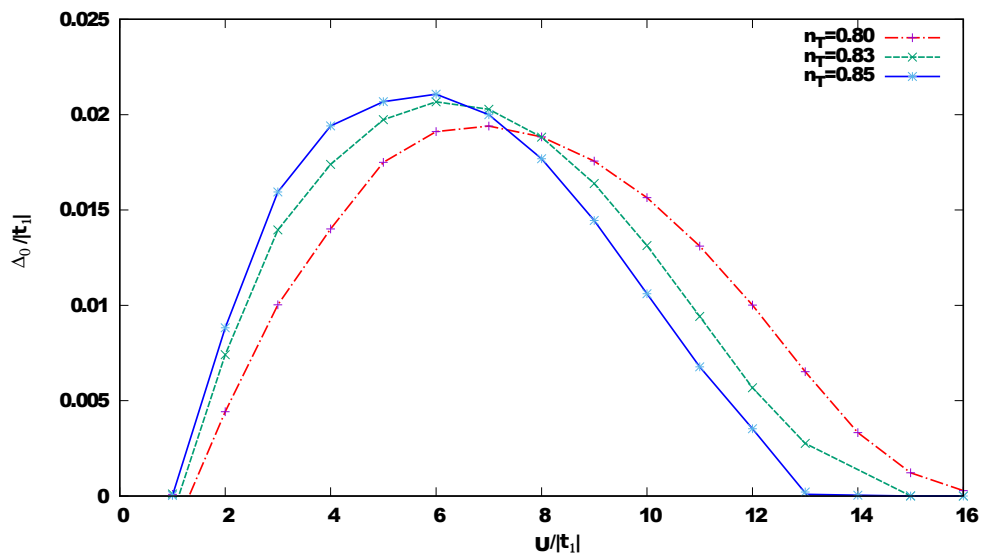
A figura 4.11 mostra a variação do parâmetro de ordem  $\Delta_0$  em função da interação  $U$ . Em geral, o comportamento das curvas de  $\Delta_0$  versus  $U$  é bastante parecido com o comportamento de  $\Delta_0$  versus  $n_T$  apresentado na figura 4.1. No caso da figura 4.11, a supercondutividade ocorre em apenas um intervalo de  $U$ , o qual depende da ocupação. Esse resultado mostra que as correlações são importantes para dar origem à supercondutividade em pelo menos alguns dos supercondutores não convencionais. O sistema se torna mais correlacionado quando a interação  $U$  ou a ocupação  $n_T$  aumentam, ou quando ambas aumentam simultaneamente. Assim, esse resultado mostra que em sistemas fortemente correlacionados, é necessário um certo nível de correlação para o surgimento da supercondutividade, ou seja, com pouca correlação a supercondutividade não ocorre, mas com muita correlação, também não. Isso fica evidente quando se observa que, para  $n_T = 0,80$ , é necessário um valor maior de  $U$  para surgir o estado superconductor, e esse valor diminui conforme  $n_T$  aumenta. Por outro lado, o estado superconductor sobrevive até

Figura 4.10 – Função de correlação  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  em função de  $n_T$ .



Fonte: Autor.

Figura 4.11 – Parâmetro de ordem  $\Delta_0$  em função da interação  $U$  para  $t_2 = 0,2|t_1|$  e diferentes ocupações.

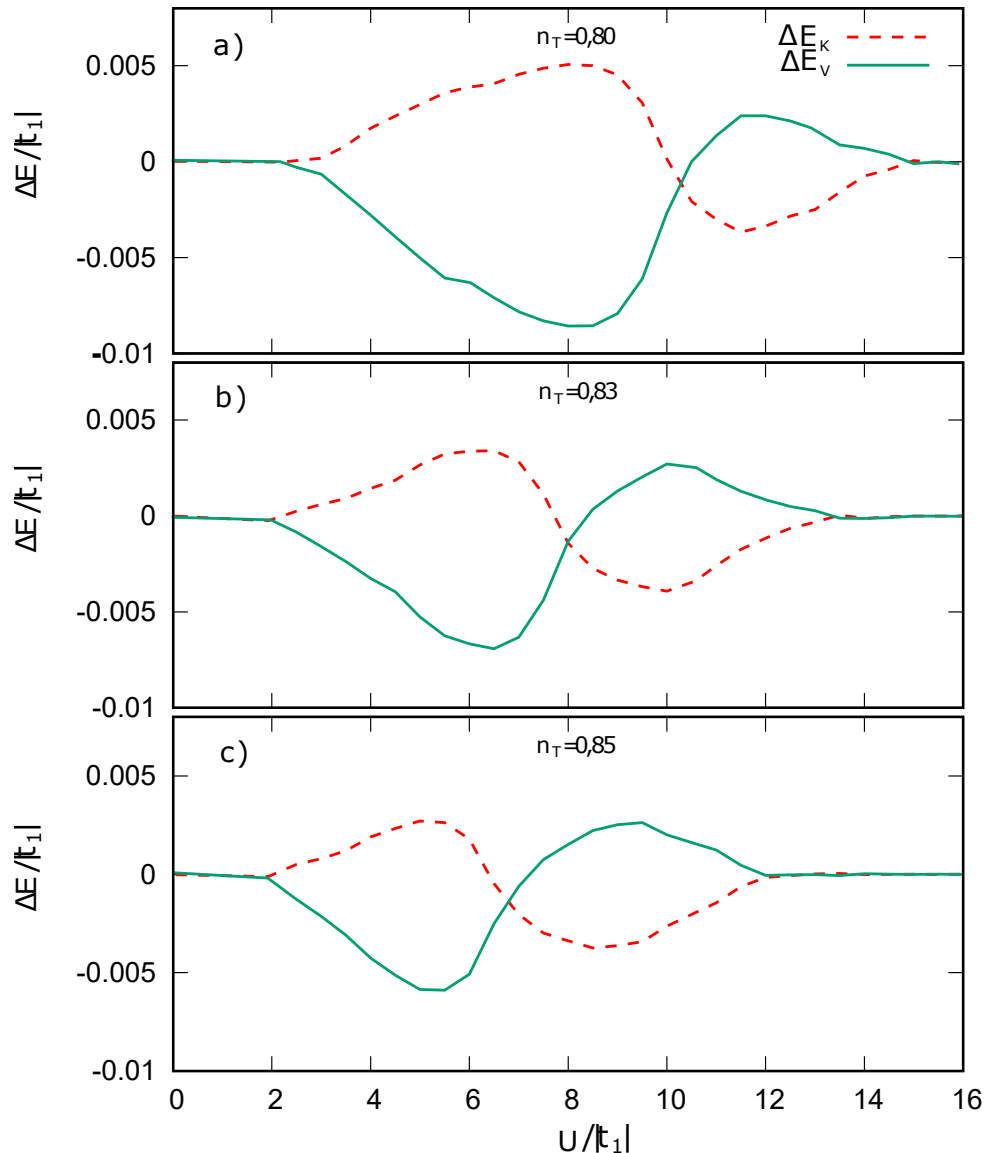


Fonte: Autor.

valores maiores de  $U$  para  $n_T = 0,80$  quando comparado com  $n_T = 0,83$  e  $n_T = 0,85$ . O nível ótimo de correlação definido por  $U$  e  $n_T$  faz com que o valor máximo do parâmetro de ordem aconteça para valores cada vez mais baixos da interação  $U$  à medida que a ocupação cresce.

Na figura 4.12, são mostradas as diferenças nas energias cinética e potencial (por sítio) em função da interação  $U$  entre os estados normal e supercondutor para números de ocupação  $n_T = 0,80$ ,  $n_T = 0,83$  e  $n_T = 0,85$ . O comportamento das energias é similar ao observado na figura 4.2 em que a ocupação total  $n_T$  é variada. De fato, para valores baixos

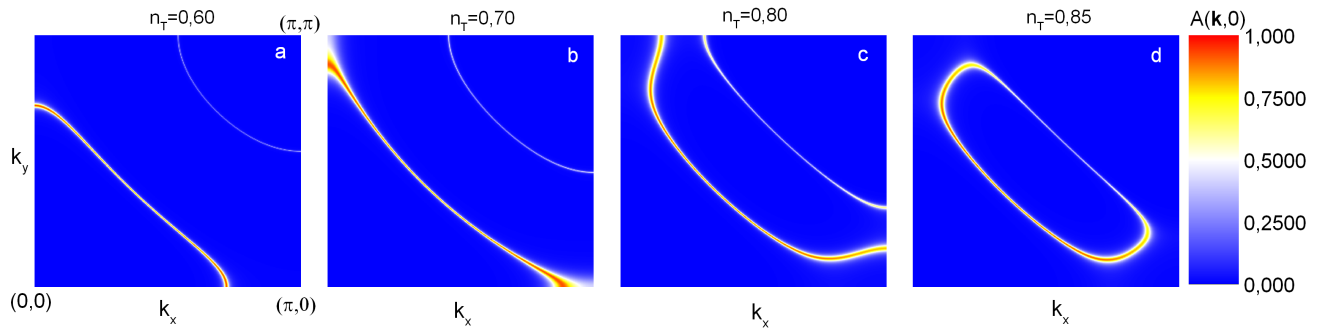
Figura 4.12 – Energias cinética e potencial em função da interação  $U$  para diferentes ocupações e  $t_2 = 0, 2|t_1|$ .



Fonte: Autor.

de  $U/|t_1|$ , a energia cinética aumenta e a energia potencial diminui. Quando o sistema chega ao regime de forte correlação, a energia cinética começa a diminuir enquanto a energia potencial aumenta. As energias cinética e potencial para o estado normal são obtidas das equações 3.147 e 3.148 mantendo o parâmetro de ordem supercondutor igual a zero ( $\Delta_0 = 0$ ). No regime superdopado, quando o sistema entra no estado supercondutor a partir do estado normal, a energia cinética aumenta enquanto que a energia potencial diminui. No entanto, quando o sistema atinge o regime de forte correlação, a situação é invertida, ou seja, a energia cinética diminui e a energia potencial aumenta. É interessante notar que a inversão dos valores das energias cinética e potencial ocorre para valores cada vez menores da interação  $U$  à medida que a ocupação aumenta. Para uma ocupação  $n_T = 0,80$ , a inversão das energias se dá para um valor de  $U$  pouco superior a  $10,0|t_1|$ .

Figura 4.13 – Comportamento da superfície de Fermi para  $U = 8,0|t_1|$ ,  $t_2 = 0,2|t_1|$  e diferentes ocupações.



Fonte: Autor.

Para uma ocupação  $n_T = 0,83$ , tal inversão ocorre para um valor de  $U$  próximo de  $8,0|t_1|$ . Quando a ocupação aumenta para  $n_T = 0,85$ , as curvas de energia se cruzam para um valor de  $U$  próximo de  $7,0|t_1|$ .

A evolução da superfície de Fermi para diferentes ocupações no primeiro quadrante da primeira zona de Brillouin é mostrada na figura 4.13 através do cálculo da função espectral  $A(\omega, \vec{k})$ , em  $\omega = 0$ . No painel *a* da figura, para uma ocupação  $n_T = 0,60$  (superdopagem) a superfície de Fermi é do tipo elétron, centrada em  $(0,0)$ . O mesmo ocorre para  $n_T = 0,70$  no painel *b*. No entanto, para  $n_T = 0,80$  (painel *c*), a superfície de Fermi já é do tipo buraco, centrada em  $(\pi, \pi)$ . Ou seja, há um valor crítico de ocupação  $n_T \approx 0,73$  para o qual a topologia da superfície de Fermi passa por uma transição entre o tipo elétron e o tipo buraco. Essa mudança na topologia da superfície de Fermi indica uma transição de Lifshitz, que está relacionada com a posição da singularidade de van Hove<sup>2</sup> na densidade de estados relativa ao potencial químico<sup>3</sup>  $\mu$ . Além disso, para  $n_T = 0,85$  (painel *d*), há o surgimento do pseudogap nos pontos antinodais  $(\pi, 0)$  e  $(0, \pi)$ , e a topologia da superfície de Fermi muda novamente formando um *pocket*, centrado aproximadamente em  $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ . Devido à formação do *pocket*, a superfície de Fermi não toca as extremidades da primeira zona de Brillouin, produzindo assim pseudogaps nas regiões antinodais.

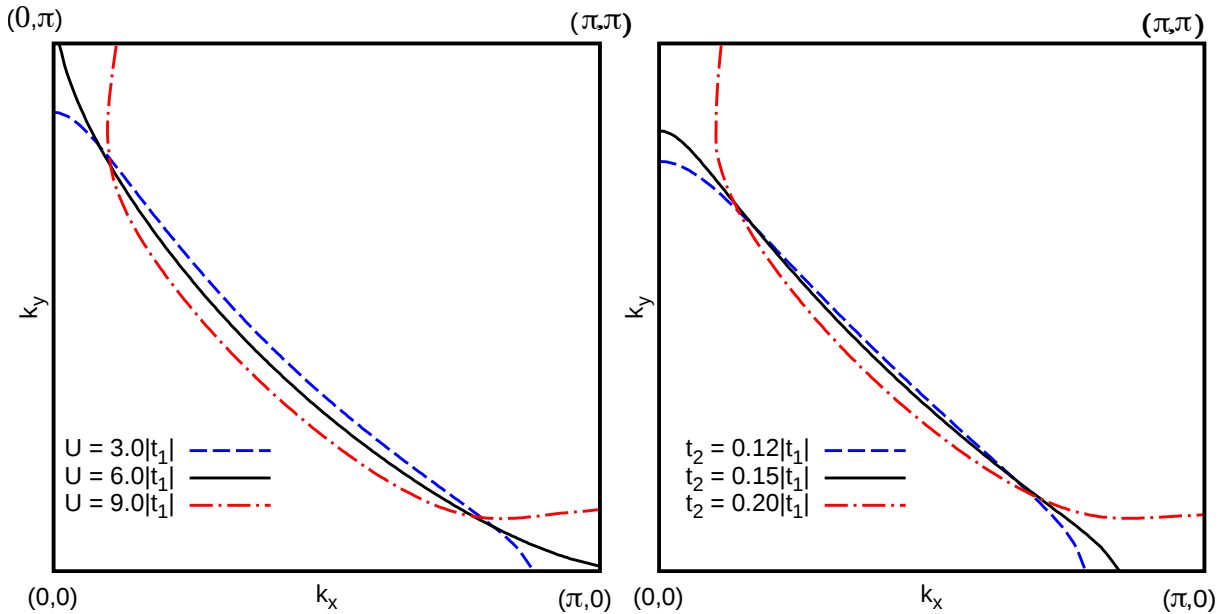
A transição de Lifshitz pode ser induzida também pela interação coulombiana e pelo salto para segundos vizinhos  $t_2$ , como pode ser visto nos painéis da figura 4.14.

Os resultados obtidos neste trabalho estão resumidos nos painéis da figura 4.15, os quais mostram as regiões de  $U$  e  $n_T$  onde ocorre o pseudogap (PG) e também as linhas onde ocorre a transição de Lifshitz (LT) e o cruzamento das energias (CR). São mostrados resultados para três valores de  $t_2$ , sendo que a transição de Lifshitz é a mais afetada pelo aumento de  $t_2$ . Isso ocorre porque o salto para segundos vizinhos desloca a singularidade

<sup>2</sup>A singularidade de van Hove ocorre quando há uma divergência na densidade de estados, como pode ser observado na figura 4.7.

<sup>3</sup>Quando o potencial químico cruza a singularidade de van Hove devido a uma variação da ocupação, ocorre uma mudança na topologia da superfície de Fermi, a qual caracteriza uma transição de Lifshitz.

Figura 4.14 – Visualização da mudança na topologia da superfície de Fermi, a qual caracteriza uma transição de Lifshitz. No painel da esquerda, a mudança ocorre devido à variação de  $U$ , enquanto que no painel da direita ela se deve à variação de  $t_2$ . Ambos os resultados foram obtidos para  $n_T = 0,75$ . No painel da esquerda  $t_2 = 0,2|t_1|$  e no painel da direita  $U = 8,0|t_1|$ .

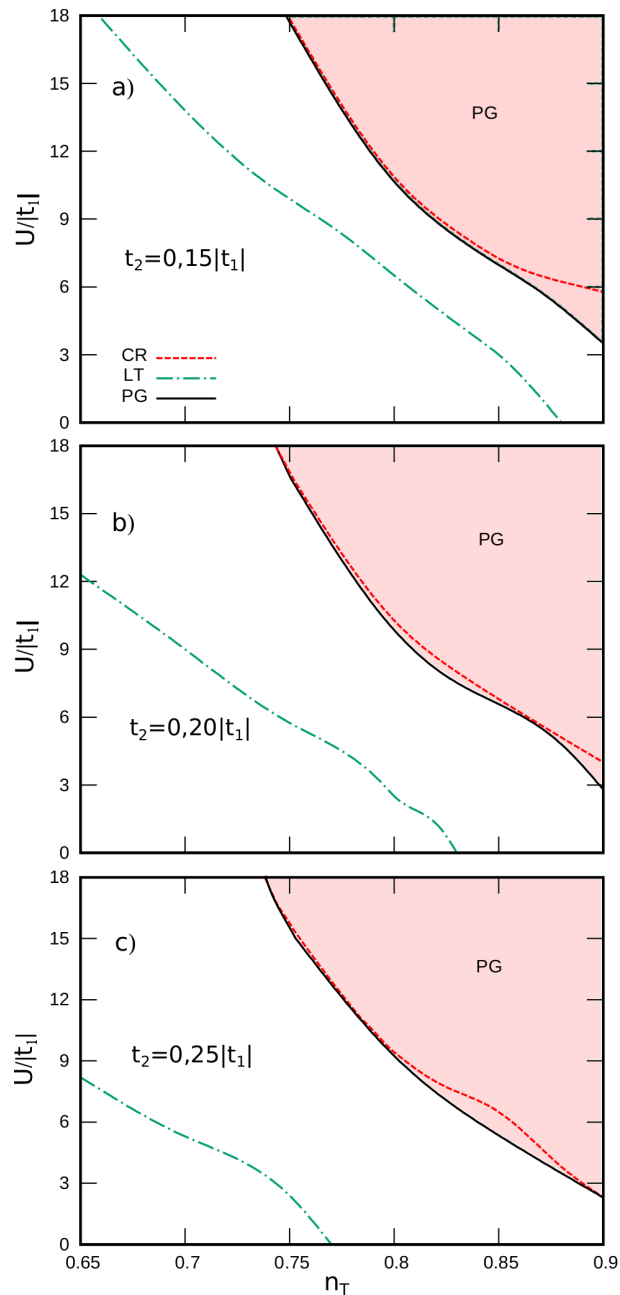


Fonte: Autor.

de van Hove (região plana da banda em  $(\pi,0)$ ) para energias mais baixas, fazendo com que a transição ocorra em ocupações menores quando  $t_2$  aumenta. Outro fato interessante é que o surgimento do pseudogap e o cruzamento das energias  $\Delta E_K$  e  $\Delta E_V$  ocorrem, em geral, em valores muito próximos de  $U$  e  $n_T$ . Esse resultado está totalmente de acordo com a discussão do comportamento do potencial químico da figura 4.8, que leva a concluir que o cruzamento das energias ocorre devido à abertura do pseudogap na densidade de estados. Esses resultados também estão de acordo com resultados teóricos para o modelo de Hubbard de uma banda sem os segundos vizinhos (GULL; MILLIS, 2012), onde os autores concluem que o pseudogap é um fenômeno que ocorre no regime de correlações fortes, em que a energia cinética do estado superconductor é reduzida e a energia potencial aumenta devido às fortes correlações.

Para finalizar, a figura 4.16 mostra o comportamento da densidade de estados do estado normal no nível do potencial químico  $\rho(\mu)$ . Observa-se que o aumento da ocupação provoca também um aumento em  $\rho(\mu)$ , já que  $\mu$  se move em direção à singularidade de van Hove, como pode ser visto no painel esquerdo da figura 4.7. Para  $U = 8,0|t_1|$  e  $t_2 = 0,2|t_1|$ ,  $\mu$  passa pela singularidade de van Hove em  $n_T \approx 0,71$ , que é quando ocorre a transição de Lifshitz indicada pelo primeiro máximo em  $\rho(\mu)$ . Aumentando ainda mais  $n_T$ ,  $\rho(\mu)$  inicialmente decresce por se afastar da singularidade de van Hove, mas em seguida começa a crescer novamente até chegar a um máximo que coincide com a abertura do

Figura 4.15 – Região do pseudogap (PG) em termos da interação coulombiana e da ocupação para diferentes valores de  $t_2$ . As curvas que indicam a transição de Lifshitz (LT) e o cruzamento das energias (CR) também são mostradas.

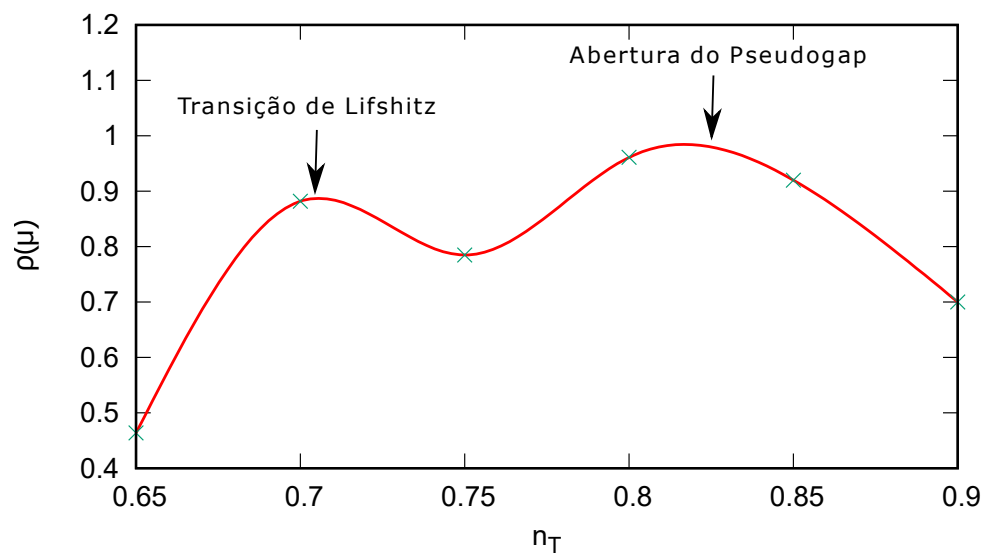


Fonte: Autor.

pseudogap, o qual faz com que  $\rho(\mu)$  diminua novamente, como mostra a figura 4.16.

Assim, percebe-se que as propriedades normais e supercondutoras do modelo estão diretamente relacionadas a  $\rho(\mu)$  porque quanto maior  $\rho(\mu)$ , maior é a quantidade de elétrons envolvida tanto no fenômeno da supercondutividade quanto no do pseudogap.

Figura 4.16 – Comportamento da densidade de estados do estado normal no nível do potencial químico  $\rho(\mu)$ , para  $U = 8,0|t_1|$  e  $t_2 = 0,2|t_1|$ .



Fonte: Autor.

## 5 CONCLUSÃO

Os estados normal e supercondutor do modelo de Hubbard em duas dimensões foram investigados através de uma aproximação de n-polos (ROTH, 1969) para as funções de Green. Tal aproximação é cabível ao presente estudo porque permite analisar o regime de fortes correlações do modelo considerando supercondutividade com simetria de onda- $d_{x^2-y^2}$  e também um pseudogap como o observado em supercondutores de alta temperatura. Neste trabalho são reportados alguns resultados para a diferença nas energias cinética  $\Delta E_K$  e potencial  $\Delta E_V$  entre os estados normal e supercondutor. Como o interesse é nos efeitos de fortes correlações, as diferenças de energia foram calculadas para diferentes valores da interação  $U$  e ocupação total  $n_T$ . Para valores baixos de  $U$  e  $n_T$ , as energias  $\Delta E_K$  e  $\Delta E_V$  se comportam como em supercondutores convencionais, ou seja, a energia cinética  $\Delta E_K$  aumenta enquanto que a energia potencial  $\Delta E_V$  diminui com  $U$  e  $n_T$ . Contudo, quando  $U$  e  $n_T$  atingem certos valores críticos,  $\Delta E_K$  diminui enquanto que  $\Delta E_V$  aumenta com  $U$  e  $n_T$ . Os valores de  $U$  e  $n_T$  críticos determinam uma fronteira entre os regimes de fraca e forte correlação. Os resultados obtidos neste trabalho estão em concordância qualitativa com os resultados reportados por Gull e Millis (2012) usando a aproximação de cluster dinâmico (DCA). É interessante notar que o regime de pseudogap coincide com o regime de forte correlação, no qual as correlações antiferromagnéticas associadas a  $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$  se tornam mais fortes.

Um estudo do comportamento dos potenciais químicos dos estados normal ( $\mu_N$ ) e supercondutor ( $\mu_S$ ) e das respectivas densidades de estados mostrou que o cruzamento das diferenças de energia  $\Delta E_K$  e  $\Delta E_V$  é um efeito da abertura do pseudogap na densidade de estados do estado normal. Isso explica o fato do cruzamento das energias ocorrer aproximadamente na mesma ocupação  $n_T$  onde o pseudogap se manifesta. A abertura do pseudogap ocorre na região de altas ocupações e relativamente altos valores de  $U$ . Logo, o pseudogap é um fenômeno que se manifesta no regime de correlações fortes onde  $U \gtrsim 8, 0|t_1|$  e  $t_1$  representa o salto para vizinhos mais próximos de um sítio  $i$  da rede.

Outro resultado que é importante destacar é o efeito do salto para os segundos vizinhos  $t_2$  sobre o comportamento do pseudogap e da superfície de Fermi. Para valores pequenos e intermediários de  $t_2$  ( $0 \lesssim \frac{t_2}{|t_1|} \lesssim 0,3$ ), o pseudogap é favorecido devido ao deslocamento da banda renormalizada para energias mais baixas, na região do ponto  $(\pi, 0)$ . Esse deslocamento induz a abertura do pseudogap em ocupações cada vez menores, quando  $t_2$  aumenta.

Outro fenômeno que é significativamente afetado pelo aumento de  $t_2$  é a transição de Lifshitz, que passa a ocorrer em ocupações bem menores quando  $t_2$  aumenta. Em geral, verificou-se que a abertura do pseudogap é sempre precedida de uma transição de Lifshitz quando a ocupação aumenta. No entanto, o aumento de  $t_2$  faz com que a



transição de Lifshitz e a abertura do pseudogap ocorram em ocupações cada vez mais distantes uma da outra, ou seja, a transição de Lifshitz tem um deslocamento maior em direção a ocupações mais baixas quando comparado com o deslocamento da ocupação onde o pseudogap se manifesta.

Estudos a respeito dos efeitos de  $t_2$  sobre o pseudogap e a transição de Lifshitz tem se tornado importantes devido a resultados experimentais recentes mostrando uma relação direta entre a topologia da superfície de Fermi (transição de Lifshitz), o pseudogap e o aumento da pressão hidrostática no sistema (DOIRON-LEYRAUD et al., 2017). Do ponto de vista teórico, os efeitos de pressão podem ser simulados através da variação de  $\frac{|t_2|}{|t_1|}$ , já que essa quantidade é sensível a variações de pressão (DOIRON-LEYRAUD et al., 2017). Os resultados experimentais apresentados na referência (DOIRON-LEYRAUD et al., 2017) mostram que a pressão afeta significativamente a dopagem na qual o pseudogap se manifesta. Esse resultado é importante porque indica uma nova rota experimental para investigar o fenômeno do pseudogap. Como consequência, na área teórica, o efeito de  $\frac{|t_2|}{|t_1|}$  é o que permite uma nova abordagem no estudo de modelos propostos para descrever sistemas cupratos e, particularmente, os fenômenos do pseudogap e da transição de Lifshitz. Sendo assim, os resultados apresentados nesse trabalho concordam, pelo menos qualitativamente, com os resultados experimentais da referência (DOIRON-LEYRAUD et al., 2017) e também com resultados teóricos utilizando outras técnicas (CHEN et al., 2012; BRAGANÇA et al., 2018) e contribuem para melhorar o entendimento desse fenômeno complexo que é a supercondutividade em supercondutores de altas temperaturas.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, P. W. The resonating valence bond state in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . **Science**, v. 235, p. 1196, 1987.

B. Battlog and C. M. Varma. **The Underdoped Phase of Cuprate Superconductors**. IOP, 2000. Acesso em 06 fev. 2020. Disponível em: <<https://physicsworld.com/a/the-underdoped-phase-of-cuprate-superconductors/>>.

BAERISWYL, D. Superconductivity from repulsion: variational results for the two-dimensional Hubbard model in the limit of weak interaction. **Physical Review B**, v. 99, 2019.

BARDEEN, J.; COOPER, L.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. **Physical Review**, v. 108, p. 1175–1205, 1957.

BARISIC, N. et al. Universal sheet resistance and revised phase diagram of the cuprate high-temperature superconductors. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 110, 2013.

BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible high- $T_c$  in the Ba-La-Cu-O system. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, v. 64, p. 189–193, 1986.

BEENEN, J.; EDWARDS, D. M. Superconductivity in the two-dimensional Hubbard model. **Physical Review B**, v. 52, 1995.

BRAGANÇA, H. et al. Correlation-driven Lifshitz transition at the emergence of the pseudogap phase in the two-dimensional Hubbard model. **Physical Review Letters**, v. 120, 2018.

BUCHANAN, M. Mind the pseudogap. **Nature**, v. 409, p. 8–11, 2001.

CALEGARI, E. J. **Supercondutividade em um Modelo de Hubbard d-p, em Duas Dimensões**. 2006. 121 f. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2006.

CHEN, K. S. et al. Lifshitz transition in the two-dimensional Hubbard model. **Physical Review B**, v. 86, 2012.

DAGOTTO, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. **American Physical Society**, v. 66, p. 763–840, 1994.

DAMASCELLI, A.; HUSSAIN, Z.; SHEN, Z.-X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. **Rev. Mod. Phys.**, v. 75, p. 473, 2003.

DOIRON-LEYRAUD, N. et al. Pseudogap phase of cuprate superconductors confined by Fermi surface topology. **Nature Communications**, v. 8, p. 2044, 2017.

GEHL, M. et al. Superconductivity in epitaxially grown self-assembled indium islands: progress toward hybrid superconductor/semiconductor optical sources. **Journal of the Optical Society of America B**, v. 33, 2016.

GULL, E.; MILLIS, A. J. Energetics of superconductivity in two-dimensional Hubbard model. **Phys. Rev. B**, v. 86, p. 241106, 2012.

HARRISON, N.; MCDONALD, R. D.; SINGLETON, J. Cuprate Fermi orbits and Fermi arcs: the effect of short-range antiferromagnetic order. **Phys. Rev. Lett.**, v. 9, p. 206406, 2007.

HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. **Proceedings of the Royal Society of London Series A - Mathematical and Physical Sciences**, v. 276, p. 238, 1963.

IMADA, M.; FUJIMORI, A.; TOKURA, Y. Metal-insulator transitions. **Review of Modern Physics**, v. 70, p. 1039, 1998.

JANDKE, J. M. **Elastic and Inelastic Scanning Tunneling Spectroscopy on Iron-based Superconductors**. Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2019. 220 p.

LIFSHITZ, I. M. Anomalies of electron characteristics of a metal in the high pressure region. **Soviet Physics JETP**, v. 11, p. 1569–1576, 1960.

MEISSNER, W.; OCHSENFELD, R. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. **Naturwissenschaften**, v. 21, p. 787–788, 1933.

MORINARI, T. Relationship between magnetic anisotropy below pseudogap temperature and short-range antiferromagnetic order in high-temperature cuprate superconductor. **J. Phys. Soc.**, v. 87, p. 063707, 2018.

\_\_\_\_\_. Short-range antiferromagnetic correlation effect on conduction electrons in two-dimensional strongly correlated electron systems. **J. Phys. Soc.**, v. 88, p. 104707, 2019.

MOTOYAMA, E. **Neutron Scattering Studies of the Electron-Doped High Temperature Superconductor Neodymium Cerium Copper Oxide**. 2009. 230 f. Tese (Doutorado em Física) — Stanford University, 2009.

MOTT, N. The transition to the metallic state. **The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics**, v. 6, p. 287–309, 1961.

NAZARENO, H. N. **Mecânica Estatística e Funções de Green**. Brasília: Editora Universidade de Brasília, 1986. 127 p.

NORMAN, M. Have cuprates earned their stripes? **Science**, v. 303, p. 1985–1986, 2004.

OGATA, M. et al. Kinetic energy pairing and condensation energy in cuprates. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, v. 67, p. 37–40, 2006.

ONNES, H. K. On the sudden change in the rate at which the resistance of mercury disappears. **KNAW Proceedings**, v. 14 II, p. 818–821, 1912.

RAY, P. J. **Structural investigation of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+y}$** . 2015. 185 p. Dissertação (Mestrado em Física) — University of Copenhagen, Copenhagen, 2015.

ROSE-INNES, A. C.; RODERICK, E. H. **Introduction to Superconductivity**. 2. ed. [S.l.]: Pergamon Press, 1978. v. 1, 237 p.

ROTH, L. M. Electron correlation in narrow energy bands. i. the two-pole approximation in a narrow s band. **Phys. Rev.**, v. 184, n. 2, p. 451–459, 1969.

RYBICKI, D. et al. Perspective on the phase diagram of cuprate high-temperature superconductors. **Nature Communications**, 2016.

SANTOSO, I. **K-Space microscopy  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  fermiology and many-body effects**. 2008. 100 f. Tese (Doutorado em Física), 2008.

SCHWINGER, J. The greening of quantum field theory: George and i. 1993.

TIMUSK, T.; STATT, B. The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey. **Rep. Prog. Phys.**, v. 62, p. 61–122, 1999.

VOLOVIK, G. E. Topological Lifshitz transitions. **arXiv:1606.08318v6**, 2016.

YOKOYAMA, H. et al. Crossover between BCS superconductor and doped Mott insulator of d-wave pairing state in two-dimensional Hubbard model. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 82, 2013.

ZUBAREV, D. N. Double-time Green functions in statistical physics. **Sov. Phys. Uspekhi**, v. 3, p. 320, 1960.