

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

Leonardo Fernandes Sampaio

**SUPERCONDUTIVIDADE NA PRESENÇA DE  
CORRELAÇÕES QUE PODEM GERAR PSEUDOGAP**

Santa Maria, RS  
2019

**PPGF/UFSM, RS**

**Sampaio, L.F**

**Doutor**

**2019**

**Leonardo Fernandes Sampaio**

**SUPERCONDUTIVIDADE NA PRESENÇA DE CORRELAÇÕES QUE  
PODEM GERAR PSEUDOGAP**

Tese de Doutorado 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  
**Doutor em Física.**

ORIENTADOR: Prof. Eleonir João Calegari

Santa Maria, RS  
2019

Fernandes Sampaio, Leonardo

Supercondutividade na presença de correlações que podem gerar pseudogap / Leonardo Fernandes Sampaio.- 2019.  
97 p.; 30 cm

Orientador: Eleonir João Calegari

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, RS, 2019

1. Pseudogap 2. Funções de Green 3. Interação Coulombiana 4. Modelo de Hubbard de uma banda 5. Supercondutividade I. João Calegari, Eleonir 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.

---

©2019

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


End. Eletr.: leo.sampaio@gmail.com

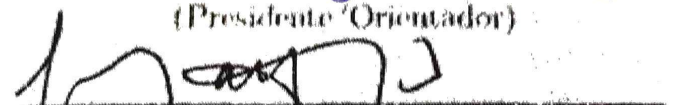
Leonardo Fernandes Sampaio

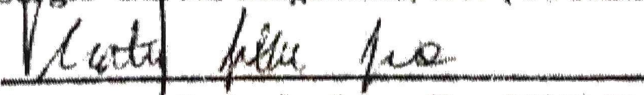
**SUPERCONDUTIVIDADE NA PRESENÇA DE CORRELAÇÕES QUE  
PODEM GERAR PSEUDOGAP**


Tese de Doutorado 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 **Doutor em Física.**

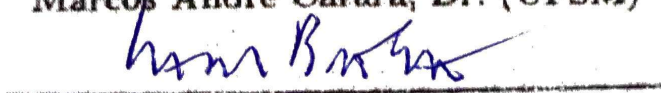
Aprovado em 30 de setembro de 2019:

  
Eleonir João Calegari, Dr. (UFSM)  
(Presidente Orientador)

  
Sergio Garcia Magalhães, Dr. (UFRGS)

  
Matheus Jatkoske Lazo, Dr. (FURG)

  
Marcos André Carara, Dr. (UFSM)

  
Leandro Barros da Silva, Dr. (UFSM)

## AGRADECIMENTOS

*Agradeço a todos professores e colegas que colaboraram de alguma forma para elaboração deste trabalho em particular*

- *Ao professor Eleonir João Calegari, pela orientação, pela paciência na elaboração deste trabalho.*
- *Ao Laboratório de Teoria da Matéria Condensada do departamento da Universidade Federal de Santa Maria.*
- *Aos meus pais José Louis e Carmem Suzana por tudo.*
- *Ao felino Galileu pela companhia durante as madrugadas de estudo.*
- *Aos meus professores e colegas de tatame pelas horas de treino de jiu jitsu.*
- *Agradeço ao professor Ricardo Farias e ao Aritra Bandyopadhyay pelas discussões sobre soma sobre frequências de Matsubara.*
- *A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior CAPES, pela bolsa de estudos.*

## RESUMO

# SUPERCONDUTIVIDADE NA PRESENÇA DE CORRELAÇÕES QUE PODEM GERAR PSEUDOGAP

AUTOR: Leonardo Fernandes Sampaio

ORIENTADOR: Eleonir João Calegari

Desde a descoberta da supercondutividade em altas temperaturas em 1986, o problema das correlações na supercondutividade tem recebido muita atenção, mas permanece como um problema em aberto na física da matéria condensada. Neste trabalho, considera-se supercondutividade com diferentes simetrias em um modelo de Hubbard de uma banda. Além da interação repulsiva local, o modelo estudado apresenta também um potencial atrativo, responsável pela supercondutividade. Este estudo foi realizado para supercondutores com simetria de onda  $s$ ,  $d_{x^2-y^2}$  e  $s$ -estendida. O principal objetivo, é investigar o papel das correlações nas propriedades normais e supercondutoras do modelo. Para tratar o modelo, utilizou-se a técnica das funções de Green em conjunto com uma aproximação de n-polos. Considerou-se a aproximação de n-polos em duas versões, a versão original (R-O) proposta por Roth (Phys. Rev 184 (1969)) e uma versão modificada (R-M) (IJMPB 25 (2011)), a qual descreve de forma mais adequada as correlações antiferromagnéticas associadas ao modelo. Na versão R-M, as correlações antiferromagnéticas podem dar origem a um *pseudogap* na densidade de estados do estado normal. O *pseudogap* tem sido um ponto central no estudo dos supercondutores cupratos, porque acredita-se que o mesmo esteja diretamente associado aos mecanismos responsáveis pela supercondutividade, nesses sistemas. Mais especificamente, investigamos de que forma as correlações responsáveis pelo cenário do *pseudogap* afetam a temperatura crítica supercondutora para as simetrias de onda  $s$ ,  $d_{x^2-y^2}$  e  $s$ -estendida. Os resultados obtidos mostram que supercondutores com simetrias distintas são afetados de forma diferente, pelas correlações. De forma geral, a temperatura crítica de transição  $T_c$  é maior na aproximação R-M quando comparada com a da aproximação R-O. Em comparação com resultados de campo médio, os  $T_c$ 's obtidos nas aproximações n-polos são maiores do que os de campo médio. Para a simetria  $s$ , na aproximação R-M, o aumento da interação coulombiana  $U$  suprime a supercondutividade na região de ocupações próximas a  $N_T = 1,0$  (com  $N_T < 1,0$ ) e favorece a supercondutividade em uma região intermediária de ocupação, inclusive aumentando o  $T_c$  máximo. Para a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , na aproximação R-M, observa-se um comportamento para o  $T_c$  em função de  $U$ , parecido ao da simetria  $s$ , no entanto, nesse caso o  $T_c$  máximo diminui com  $U$ . A simetria  $s$ -estendida apresenta um comportamento diferente para o  $T_c$  em função da ocupação onde a supercondutividade ocorre, na região de baixas ocupações, no regime de dopagem por buracos, e na região de altas ocupações, no regime de dopagem por elétrons. No entanto, quando o  $U$  aumenta, a supercondutividade passa a ocorrer também para

ocupações próximas a  $N_T = 1,0$ . Uma análise mais detalhada da estrutura de bandas mostrou que o aumento da região supercondutora quando  $U$  cresce, está diretamente ligado às correlações antiferromagnéticas, as quais deformam as bandas de energia. Assim, podemos concluir que as correlações antiferromagnéticas responsáveis por dar origem a um *pseudogap* na densidade de estados, podem afetar significativamente a temperatura crítica supercondutora.

**Palavras-chave:** Pseudogap, Funções de Green, Interação coulombiana, Modelo de Hubbard de uma banda, Supercondutividade



## ABSTRACT

# SUPERCONDUCTIVITY IN THE PRESENCE OF CORRELATIONS THAT CAN GENERATE PSEUDOGAP

AUTHOR: Leonardo Fernandes Sampaio

ADVISOR: Eleonir João Calegari

Since the discovery of superconductivity at high temperatures in 1986, the problem of correlations in superconductivity has received a lot of attention, but it remains as an open problem in condensed matter physics. In this work, superconductivity with different symmetries is considered in an one-band Hubbard model. Besides the local repulsive interaction, the studied model also presents an attractive potential, which is responsible for the superconductivity. This study was conducted for superconductors with  $s$ ,  $d_{x^2-y^2}$ , and  $s$ -extended symmetry. The main objective is to investigate the role of correlations in the normal and superconducting properties of the model. To treat the model, we used the Green's functions technique together with a  $n$ -pole approximation. The  $n$ -pole approximation was considered in two versions, the original version (R-O) proposed by Roth (Phys. Rev 184 (1969)) and a modified version (R-M) (IJMPB 25 (2011)), which describes most appropriate antiferromagnetic correlations associated with the model. In the R-M version, antiferromagnetic correlations may give rise to a pseudogap in the density of states of the normal state. The pseudogap has been a central point in the study of cuprate superconductors because it is believed to be directly associated with the mechanisms responsible for superconductivity in these systems. More specifically, we investigated how the correlations responsible for the pseudogap scenario affect the superconducting critical temperature for the different symmetries. The obtained results show that superconductors with different symmetries are affected differently by the correlations. In general, the critical transition temperature  $T_c$  is higher in the R-M approximation compared to that of the R-O approximation. Compared to mean field results, the  $T_c$ 's obtained in the  $n$ -pole approximations are higher than the mean field ones. For  $s$  symmetry, in the RM approximation, the increasing of the interaction  $U$ , suppresses the superconductivity in the region of occupations close to  $N_T = 1, 0$  (with  $N_T < 1, 0$ ) and favors superconductivity in an intermediate region of occupation. In this case, it was observed an increasing of the maximum  $T_c$ . For the symmetry  $d_{x^2-y^2}$ , in the RM approximation, we observe a behavior for  $T_c$  as a function of  $U$ , similar to that one of the symmetry  $s$ , however, in this case the maximum  $T_c$  decreases with  $U$ . The  $s$  extended symmetry presents a different behavior for the  $T_c$ . The superconductivity occurs in the low occupancy region, in the hole doping regime, and in the region of high occupations, in the electron doping regime. However, when  $U$  increases, superconductivity also occurs for occupations close to  $N_T = 1, 0$ . A more detailed analysis of the band structure has shown that the increase in the superconducting

region when  $U$  is increased, is directly linked to the antiferromagnetic correlations, which deform the energy bands. Thus, in general, we can conclude that the antiferromagnetic correlations that cause a *pseudogap* in the density of states can significantly affect the superconducting critical temperature.

**Keywords:** Pseudogap, Green's functions, Coulomb Interaction, Superconductivity, Hubbard model

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Evolução da temperatura crítica de transição para o estado supercondutor em relação ao tempo (anos). . . . .	15
Figura 2.2 – Estruturas cristalinas de alguns compostos do tipo cupratos. . . . .	16
Figura 2.3 – O painel da esquerda mostra o diagrama de fases para o supercondutor LSCO dopado por buracos enquanto que o painel da direita mostra o diagrama de fases para o sistema LCCO dopado por elétrons. . . . .	17
Figura 2.4 – (A) Representação espacial da estrutura cristalina do $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . Em (B), representação de um plano de cobre e oxigênio cercado pelos reservatórios de carga (RC). . . . .	18
Figura 2.5 – Representação da montagem de um experimento de ARPES, explicitando as direções das colisões dos elétrons as quais são definidas pelos ângulos $\theta$ e $\phi$ . . . . .	20
Figura 2.6 – O painel (a), mostra a primeira zona de Brillouin e também a superfície de Fermi para uma amostra de Bi2201, em conjunto com a definição dos ângulos na superfície de Fermi. No painel (b), é mostrada a intensidade do espectro ARPES ao longo da direção anti nodal ( $\phi = 0^\circ$ ). O painel (c), mostra o espectro de ARPES para a direção nodal ( $\phi = 45^\circ$ ), para uma temperatura de 11 K. . . . .	20
Figura 2.7 – Espectro de energia explicitando o <i>gap</i> supercondutor e o <i>pseudogap</i> para o composto <i>Bi2212</i> em um regime considerado de baixas dopagens. A amostra supercondutora tem um $T_c = 85\text{K}$ . As figuras (a), (b) e (c), mostram os espectros de ARPES para as direções dos pontos a,b e c indicados na superfície de Fermi do painel (d). Em (e), o painel superior mostra um nó no estado supercondutor, um arco de Fermi na região do <i>pseudogap</i> , e no painel inferior uma superfície de Fermi fechada. . . . .	21
Figura 2.8 – Superfície de Fermi quando o sistema é dopado por buracos. . . . .	22
Figura 2.9 – Ilustração das simetrias $s$ , $d_{x^2-y^2}$ e $s$ -estendida, do <i>gap</i> supercondutor. . . . .	23
Figura 2.10 – O painel mostra o <i>gap</i> $ \Delta $ na superfície de Fermi para simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ . . . . .	23
Figura 2.11 – Comparação dos <i>gaps</i> supercondutor $\Delta_{SC}$ com simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ e do <i>pseudogap</i> $\Delta_{PG}$ dos cupratos. No lado direito, o painel superior mostra os arcos de Fermi enquanto que o painel inferior mostra a superfície de Fermi fechada do estado normal. . . . .	24
Figura 5.1 – Compara-se as bandas de energia para o método de campo médio (C-M), para diferentes valores de ocupação total $N_T$ em diferentes regiões, onde $N_T < 1$ é a dopagem por buracos e $N_T > 1$ é a dopagem por elétrons, com $U = 2,0\text{eV}$ e $T = 0$ . . . . .	65
Figura 5.2 – Direções de alta simetria da rede quadrada. Essas direções foram consideradas para gerar as bandas apresentadas nesse capítulo. . . . .	65
Figura 5.3 – Comparativo entre as estruturas de bandas de energia para as aproximações: (C-M), (R-O) e (R-M), com $U = 2,0\text{ eV}$ , $t_2 = 0,03\text{ eV}$ e $T=0,0$ . . . . .	66
Figura 5.4 – Comportamento de $k_B T_c$ em função da ocupação total $N_T$ , para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). Considerou-se $U = 2,0\text{ eV}$ . . . . .	67
Figura 5.5 – Comparativo entre as densidades de estados no regime de dopagem por	

	buracos, para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). A linha vertical mostra a posição do potencial químico $\mu$ . Considerou-se $U = 2,0$ eV. ....	69
Figura 5.6	– O painel (a) mostra o $k_B T_c$ para cada aproximação quando $N_T = 0,5$ e $U = 2,0$ eV. O painel (b) mostra $\rho(\omega = \mu)$ para cada aproximação para os mesmos parâmetros usados em (a). ....	69
Figura 5.7	– Comparativo entre as densidades de estados no regime de dopagem por elétrons, para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). A linha vertical mostra a posição do potencial químico $\mu$ . Considerou-se $U = 2,0$ eV. ....	70
Figura 5.8	– O painel (a) mostra o $k_B T_c$ para cada aproximação quando $N_T = 1,5$ e $U = 2,0$ eV. O painel (b) mostra $\rho(\omega = \mu)$ para cada aproximação para os mesmos parâmetros usados em (a). ....	71
Figura 5.9	– Comportamento do $k_B T_c$ em função do potencial coulombiano $U$ , para diferentes ocupações na região $N_T < 1$ , para versão (R-M). ....	71
Figura 5.10	– Comportamento do $k_B T_c$ em relação a interação coulombiana $U$ , para diferentes ocupações na região $N_T < 1$ , para versão (R-O). ....	72
Figura 5.11	– Comportamento do $k_B T_c$ em relação a ocupação total $N_T$ , para a aproximação R-M com diferentes valores do potencial coulombiano $U$ . ....	73
Figura 5.12	– Comportamento do $k_B T_c$ em relação a ocupação total $N_T$ , para a aproximação R-O com diferentes valores do potencial coulombiano $U$ . ....	73
Figura 5.13	– Comportamento da dupla ocupação $\langle n_{\sigma} n_{-\sigma} \rangle$ em relação à variação do potencial coulombiano $U$ , para diferentes valores de ocupação total $N_T$ . ....	74
Figura 5.14	– Comportamento da função de correlação $\langle \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle$ , quando fixamos o valor de $N_T$ e variamos $U$ . ....	75
Figura 5.15	– Comparativo entre o comportamento do potencial químico em relação ao potencial coulombiano $U$ , para diferentes ocupações na região $N_T < 1$ , considerando as duas versões da aproximação de n-polos. ....	76
Figura 5.16	– Densidades de estados e estrutura de bandas para a aproximação R-M com $N_T = 0,85$ e diferentes valores de $U$ . ....	77
Figura 5.17	– Densidades de estados e estrutura de bandas para a aproximação R-M com $U = 2,0$ eV e diferentes ocupações. ....	77
Figura 5.18	– Comportamento da função de correlação spin-spin $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ , quando fixamos o valor de $N_T$ e variamos o potencial coulombiano $U$ . ....	78
Figura 5.19	– Comportamento de $k_B T_c$ em função da ocupação total $N_T$ , para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). Considerou-se $U = 2,0$ eV. ....	79
Figura 5.20	– A banda renormalizada $E_1(\vec{k})$ para $N_T = 0,7$ , obtida para a aproximação R-O. O termo $\varphi(\vec{k})$ representa a simetria do parâmetro de ordem e as linhas horizontais mostram a frequência de corte de Debye $\omega_D$ . ....	80
Figura 5.21	– Mostra a diferença de temperatura entre as diferentes simetrias do parâmetro de ordem para $N_T = 0,70$ , na aproximação R-O. ....	81
Figura 5.22	– Comportamento do $k_B T_c$ em função da interação coulombiana para simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ . ....	81
Figura 5.23	– Comportamento de $k_B T_c$ (simetria $d_{x^2-y^2}$ ) em relação a ocupação total $N_T$ , para a aproximação R-M com diferentes valores para a interação coulombiana, na região onde $N_T < 1$ . ....	82

Figura 5.24 – Comportamento do $k_B T_c$ em função da ocupação total $N_T$ , para as aproximação de (C-M) e as duas versões para aproximação de n-polos, (R-O) e (R-M). . . . .	83
Figura 5.25 – Comportamento do $k_B T_c$ em relação a ocupação total $N_T$ , numa região de $N_T < 1$ , com diferentes valores da interação coulombiana $U$ . . . . .	83
Figura 5.26 – Comportamento do $k_B T_c$ em função da interação coulombiana para diferentes ocupações, usando a aproximação R-M. . . . .	84
Figura 5.27 – Estrutura de bandas do estado supercondutor mostrando as duas bandas mais próximas do nível de Fermi para a aproximação R-O comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se $T = 0,0$ , $U = 2,0$ eV e $N_T = 0,60$ . . . . .	84
Figura 5.28 – Densidade de estados do estado supercondutor mostrando a região próxima do nível de Fermi para a aproximação R-M, comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se $T = 0,0$ , $U = 2,0$ eV e $N_T = 0,60$ . . . . .	85
Figura 5.29 – Estrutura de bandas do estado supercondutor mostrando as duas bandas mais próximas do nível de Fermi para a aproximação R-O comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se $T = 0,0$ , $U = 2,0$ eV e $N_T = 0,60$ . . . . .	86
Figura 5.30 – Densidade de estados do estado supercondutor mostrando a região próxima do nível de Fermi para a aproximação R-M, comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se $T = 0,0$ , $U = 2,0$ eV e $N_T = 0,60$ . . . . .	86

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>FENOMENOLOGIA DOS CUPRATOS</b> .....	<b>15</b>
<b>2.0.1</b>	<b>A Região do <i>pseudogap</i></b> .....	<b>18</b>
<b>2.0.2</b>	<b>Técnica Experimental de ARPES</b> .....	<b>19</b>
<b>2.0.3</b>	<b>Simetria do gap supercondutor</b> .....	<b>22</b>
<b>3</b>	<b>MODELO DE HUBBARD E FUNÇÕES DE GREEN</b> .....	<b>25</b>
<b>3.1</b>	<b>FUNÇÕES DE GREEN EM MECÂNICA ESTATÍSTICA</b> .....	<b>25</b>
<b>3.2</b>	<b>APROXIMAÇÃO DE N-POLOS</b> .....	<b>39</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS ANALÍTICOS</b> .....	<b>42</b>
<b>4.1</b>	<b>FUNÇÕES DE GREEN</b> .....	<b>42</b>
<b>4.2</b>	<b>DESLOCAMENTO DE BANDA</b> .....	<b>50</b>
<b>4.3</b>	<b>CÁLCULO DO GAP SUPERCONDUTOR</b> .....	<b>51</b>
<b>4.3.1</b>	<b>Equação para o <math>T_c</math></b> .....	<b>62</b>
<b>5</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS</b> .....	<b>64</b>
<b>6</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	<b>87</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>90</b>

# 1 INTRODUÇÃO

No início dos anos 1900, a física do estado sólido estava prestes a escrever um novo capítulo totalmente inédito na física das baixas temperaturas. Em 1908, o físico Holandês Heike Kammerling Onnes conseguiu experimentalmente liquefazer uma amostra de Hélio a uma temperatura próxima do zero absoluto. Anos mais tarde, em 1911, Onnes ganharia o prêmio Nobel em física por tal descoberta (INNES, 1978; FETTER, 1971; TINKHAM, 1996). Com isso, os estudos sobre o comportamento da condutividade elétrica à baixas temperaturas poderia ser explorado em regimes termodinâmicos até então nunca atingidos. Em 1911, ao arrefecer uma amostra de mercúrio em um banho térmico com Hélio liquefeito, Onnes percebeu que quando a temperatura atingiu um valor próximo a  $T = 4,2\text{K}$ , a amostra de mercúrio apresentou uma queda súbita da resistência elétrica, a praticamente zero. Esta descoberta caracterizou um novo estado da matéria para o qual Heike Kammerling deu o nome de estado supercondutor. Cada material supercondutor possui uma temperatura crítica de transição ( $T_c$ ) para o estado supercondutor.

Em 1933, os físicos alemães Walther Meissner e Robert Oschenfeld descobriram experimentalmente que uma amostra de um material no estado supercondutor, quando submetida a um campo magnético externo fraco, se comporta como um material diamagnético perfeito, o campo magnético é expelido da amostra supercondutora. Este fenômeno físico conhecido como efeito Meissner Ochsensfeld é chamado de diamagnetismo perfeito (INNES, 1978; FETTER, 1971; TINKHAM, 1996). Por causa das descobertas destes fenômenos os quais caracterizam o estado supercondutor, iniciou-se uma busca por uma teoria capaz de explicar de forma satisfatória os fenômenos da supercondutividade e diamagnetismo perfeito. Os físicos Fritz London e Hans London propuseram uma teoria fenomenológica que era capaz de descrever o fenômeno diamagnético, mas não explicava a ocorrência da supercondutividade (CHARLES., 1953; INNES, 1978; FETTER, 1971). Quase na metade do século XX, surge uma teoria macroscópica para explicar as propriedades termodinâmicas da transição do estado normal para o estado supercondutor. A teoria foi proposta pelos físicos soviéticos V. L. Ginzburg e L. D. Landau (FETTER, 1971; TINKHAM, 1996). Ambas teorias tiveram um papel importante para estabelecer a relação entre esses diferentes fenômenos, a supercondutividade e o diamagnetismo perfeito.

A teoria microscópica capaz de explicar satisfatoriamente o mecanismo de transição de fase para o estado supercondutor foi elaborada com base nos trabalhos de Cooper (1956) o qual propõem que dois elétrons podem formar um par mediante a interação com a estrutura cristalina. Assim, os físicos Bardeen, Cooper e Schrieffer (1957), elaboraram uma teoria puramente quântica para supercondutividade, a qual recebeu o nome de teoria BCS, devido aos nomes dos autores. A teoria BCS, defende a linha de que a corrente

elétrica não era mediada via movimento ordenado de elétrons como afirmam as leis do eletromagnetismo clássico e sim por pares de elétrons os quais recebem o nome de pares de Cooper. Esta teoria explica de forma satisfatória a supercondutividade em sistemas com correlações fracas. Graças ao sucesso desta teoria, em 1972, os autores receberam o prêmio Nobel de física. As condições termodinâmicas necessárias para se manter a temperatura do sistema supercondutor era a base de Hélio liquefeito, e por isso a produção em larga escala de dispositivos supercondutores tornava-se de custo elevado.

Em 1986, os físicos Bednorz e Muller (Bednorz; Müller, 1986) descobrem uma nova classe de supercondutores dopados com buracos com um  $T_c$  bem maior do que aqueles apresentados pelos supercondutores convencionais. Esta nova classe de supercondutores são sistemas formados por planos de cobre e oxigênio  $\text{CuO}_2$ , em razão disso, são chamados de cupratos. Esta descoberta despertou novamente o interesse científico e tecnológico nesses sistemas. Por terem altas temperaturas críticas de transição, são chamados de supercondutores de altas temperaturas. De modo geral, os cupratos apresentam uma estrutura cristalina tetragonal, a base e o topo formam planos de  $\text{CuO}_2$ , a região intermediária é chamada de reservatório de carga o qual é responsável pela dopagem do sistema por elétrons ou buracos. Esses sistemas são classificados como sistemas de elétrons fortemente correlacionados. A supercondutividade nos cupratos ocorre principalmente nos planos de  $\text{CuO}_2$  (SHEN, 1995). Exemplos desses compostos são o  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO) e  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (NCCO). Os cupratos fazem parte de uma classe chamada de supercondutores não convencionais. Em consequência da alta complexabilidade desses sistemas, a explicação da origem da supercondutividade nos cupratos ainda é um problema em aberto na física da matéria condensada. Acredita-se que as propriedades físicas mais importantes responsáveis pela supercondutividade nesses sistemas, estão contidas nos planos de cobre-oxigênio (DAMASCELLI; HUSSAIN; SHEN, 2003).

Nos supercondutores de altas temperaturas do tipo cupratos é possível observar um regime anômalo chamado de *pseudogap*, o qual tem seu surgimento ainda no estado normal em uma região de dopagens baixas, onde existe uma predominância das correlações fortes (TIMUSK; STATT, 1999). O termo *pseudogap* foi criado por Névil Mott, com o propósito de nomear um mínimo de densidade de estados no nível de Fermi em uma amostra de mercúrio líquido (KORDYUK, 2015). O nome *pseudogap* é usado para definir propriedades do estado normal dos supercondutores de altas temperaturas. Os cupratos são compostos com origem em isolantes antiferromagnéticos do tipo de Mott, quando a dopagem é nula ( $x \approx 0$ ). A definição de isolantes de Mott surgiu em 1949, com a finalidade de descrever a situação onde o material que deveria ser metálico, segundo a teoria de bandas, é na verdade um sistema isolante devido à forte interação coulombiana entre dois elétrons de spins opostos localizados em um mesmo orbital (LEE; NAGAOSA; WEN, 2006).

Existem diferentes propostas para explicar a origem do *pseudogap*. Uma das te-



orias propostas, é de que a região do *pseudogap* que ocorre abaixo de uma temperatura  $T^*$ , seria uma fase precursora do estado superconductor. Contudo, a fase supercondutora só é possível de ocorrer quando o sistema atinge  $T_c$  (HASHIMOTO et al., 2014). Entretanto, existem técnicas experimentais as quais envolvem transporte eletrônico, calor específico, ressonância nuclear magnética entre outras, que mostram um cenário no qual o  $T^*$  atravessa o domo superconductor quando o sistema atinge um valor ideal de dopagem de aproximadamente ( $x \approx 0,15$ ), e decai a zero num ponto crítico quântico (QCP), situado em aproximadamente ( $x \approx 0,19$ ). Segundo este cenário, a região do *pseudogap* seria consequência da manifestação de fenômenos eletrônicos os quais são independentes da supercondutividade e com ela competiria (BADOUX et al., 2016).

Existe um outro cenário onde as correlações antiferromagnéticas possuem um papel relevante na topologia da superfície de Fermi (HARRISON; MCDONALD; SINGLETON, 2007). Uma das linhas teóricas propostas para a possível origem do *pseudogap* é baseada na hipótese de que o *pseudogap* teria origem na fase antiferromagnética de um sistema não dopado. Neste contexto, os estudos teóricos dos autores (KAMPF; SCHRIEFFER, 1990; MACRIDIN et al., 2006; MACRIDIN; JARRELL, 2008; PETERS; BAUER, 2015) defendem que a origem do *pseudogap* está associada às flutuações antiferromagnéticas de spin de curto alcance. Com o processo de dopagem por buracos, se estas flutuações (AF) forem fortes o suficiente, podem causar um deslocamento, da banda de condução, para baixas energias na região do ponto  $(\pi, \pi)$  (na primeira zona de Brillouin), produzindo um *pseudogap* no ponto  $(0, \pi)$ . É possível verificar a presença do *pseudogap* em quantidades como a densidade de estados, bandas de energia e superfície de Fermi (PRELOVSEK; RAMSAK, 2000).

Acredita-se que a compreensão dos mecanismos responsáveis pelo *pseudogap* nos supercondutores de altas temperaturas do tipo cupratos, contribuirá para o processo de entendimento das origens da supercondutividade não convencional nos cupratos.

Por se tratar de sistemas de elétrons fortemente correlacionados, que é o caso dos cupratos, é comum utilizar o modelo de Hubbard de uma banda (HUBBARD, 1963) para descrever esses sistemas. No modelo de Hubbard de uma banda, a interação coulombiana  $U$  desempenha um papel importante responsável pelas correlações.

Neste trabalho, será considerado um modelo de Hubbard de uma banda modificado, onde adicionou-se a esse modelo um potencial de interação atrativa, o qual é responsável pela supercondutividade. Esse modelo já foi estudado por outros autores (RODRIGUEZ-NUNEZ; ALEX, 2001; CALEGARI; RODRIGUEZ-NUNEZ, 2016), no entanto, nesses trabalhos não foi considerado a presença do *pseudogap* do estado normal. A proposta principal, é estudar o modelo da referência (RODRIGUEZ-NUNEZ; ALEX, 2001), fornecendo um tratamento mais adequado ao modelo de forma que as correlações antiferromagnéticas de spin de curto alcance não sejam desprezadas.

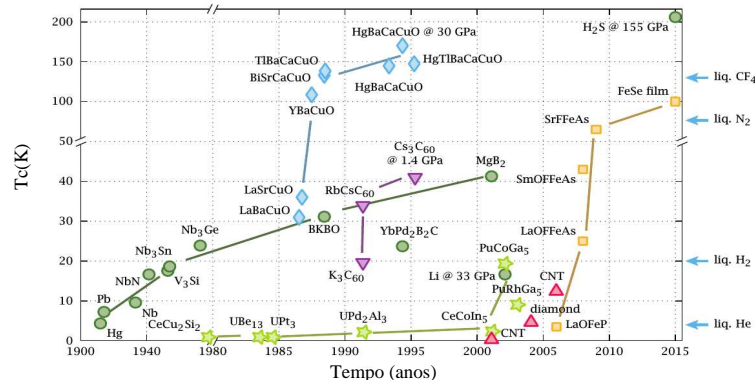
Esta tese está organizada no seguinte formato: no segundo capítulo são apresenta-

das as propriedades físicas dos cupratos. No terceiro capítulo é feita uma discussão sobre o modelo de Hubbard de uma banda (HUBBARD, 1963) e apresentada uma revisão detalhada sobre a técnica das funções de Green seguindo o formalismo proposto por Zubarev (ZUBAREV, 1960). No quarto capítulo são apresentados os resultados analíticos e no quinto capítulo, os resultados numéricos. No capítulo 6, são apresentadas as conclusões.

## 2 FENOMENOLOGIA DOS CUPRATOS

Até a década de 1980, os supercondutores conhecidos apresentavam a temperatura crítica de transição  $T_c$  abaixo de 30K. Esta situação mudou após a descoberta da supercondutividade em altas temperaturas pelos físicos Bednorz e Muller (Bednorz; Müller, 1986), em sistemas cupratos. Esta descoberta despertou novamente o interesse científico e tecnológico por causa das altas temperaturas críticas de transição para o estado supercondutor. Exemplos desses compostos são o  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO) e o  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (NCCO). Os cupratos não são descritos pela teoria BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957) que explica a supercondutividade nos supercondutores convencionais, por isso são chamados de supercondutores não-convencionais. Estes novos materiais possuem em comum planos de  $\text{CuO}_2$  e entre a base e o topo, estão os reservatórios de cargas, os quais são responsáveis pelo procedimento de dopagem do sistema. Em consequência da alta complexibilidade desses sistemas, a explicação da origem da supercondutividade nos cupratos ainda é um problema em aberto na física da matéria condensada. Na figura 2.1 é possível ver que a partir da descoberta da supercondutividade nos cupratos houve um crescimento significativo no valor da temperatura crítica de transição supercondutora, chegando a ultrapassar a temperatura de liquefação do nitrogênio o qual é usado no banho térmico para arrefecer as amostras devido ao baixo custo em relação ao hélio liquefeito.

Figura 2.1 – Evolução da temperatura crítica de transição para o estado supercondutor em relação ao tempo (anos).

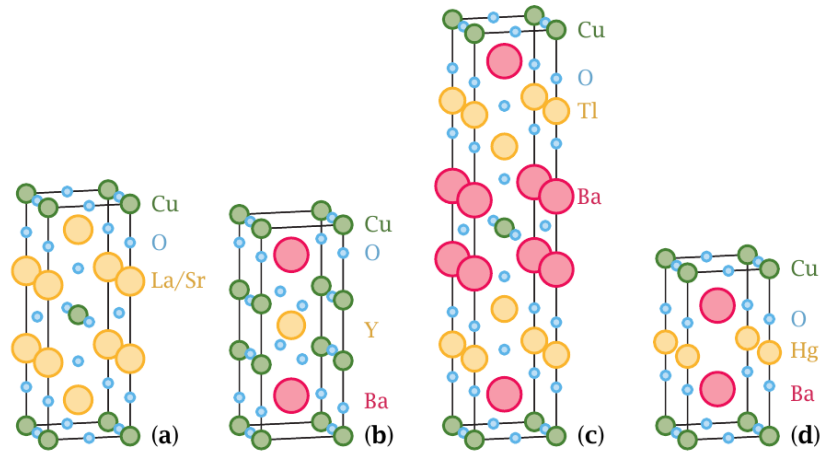


Fonte: Adaptado: (RAY, 2015).

### Estrutura Cristalina dos Cupratos

De modo geral, os sistemas cupratos possuem uma estrutura cristalina composta por planos de cobre e oxigênio na base e no topo da estrutura, intercalados por blocos de átomos que são chamados de reservatório de carga. No painel 2.2 estão representadas

Figura 2.2 – Estruturas cristalinas de alguns compostos do tipo cupratos.



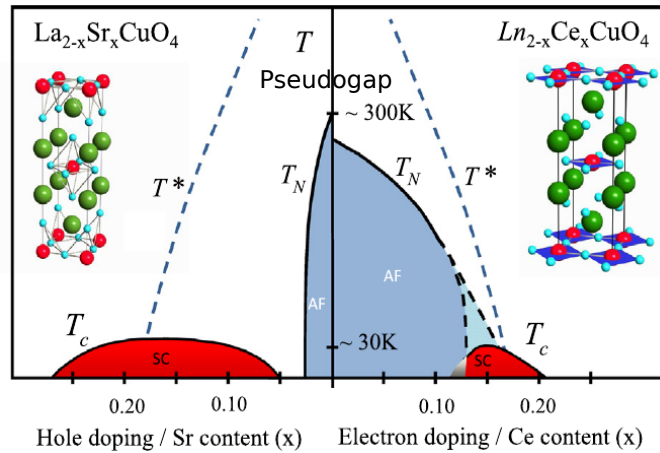
Fonte: Adaptado (KAMIMURA et al., 2005).

algumas das principais estruturas dos cupratos. As camadas isolantes (por exemplo, SrO, BaOY, LaO, TlOBa e HgBaO), formam blocos entre os planos de  $\text{CuO}_2$ . Em temperatura ambiente, os sistemas cupratos possuem um comportamento do tipo isolante de Mott (MOTT, 1961). Para atingir o estado supercondutor os sistemas cupratos necessitam ser dopados por elétrons ou por buracos. Acredita-se que a origem do estado supercondutor em alguns sistemas cupratos esteja relacionada com a ausência de elétrons nos planos de cobre e oxigênio (DAMASCELLI; HUSSAIN; SHEN, 2003). Por isso, o estudo das possíveis causas do cenário da supercondutividade em sistemas cupratos envolve a dinâmica dos elétrons nos planos de  $\text{CuO}_2$  de forma bidimensional  $(\hat{x}, \hat{y})$ . A distância entre átomos de cobre e oxigênio nos planos de  $\text{CuO}_2$  é muito menor do que a distância entre os planos e o reservatório de carga. Portanto, é mais provável que um elétron (ou buraco) movimente-se nos planos  $(\hat{x}, \hat{y})$  do que para o reservatório de carga  $(\hat{z})$  (DAGOTTO, 1994). Por serem isolantes de Mott na ausência de dopagem, os cupratos são sistemas de elétrons fortemente correlacionados (SEFC).

O painel da esquerda, na figura 2.3, mostra o diagrama de fases para o sistema supercondutor  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  o qual é dopado por buracos, onde  $T$  é a temperatura e  $x$  representa a dopagem. Numa região considerada de baixas dopagens o sistema apresenta uma fase antiferromagnética com um comportamento do tipo isolante de Mott (MOTT; PEIERLS, 1937).

A região em vermelho mostra o estado supercondutor, onde  $T_c$  é a temperatura crítica de transição. Entre as fases (AF) e (SC) existe a região chamada de *pseudogap* a qual sobrevive até uma temperatura de  $T^*$ . O painel da direita da figura 2.3, mostra o diagrama de fases do sistema  $\text{Ln}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ , o qual é dopado por elétrons. A similaridade entre os dois diagramas é grande, ambos apresentam uma fase antiferromagnética e uma

Figura 2.3 – O painel da esquerda mostra o diagrama de fases para o supercondutor LSCO dopado por buracos enquanto que o painel da direita mostra o diagrama de fases para o sistema LCCO dopado por elétrons.



Fonte: (FOURNIER, 2015).

região onde o *pseudogap* ocorre. No entanto, no sistema dopado por elétrons, a fase AF é mais robusta aos efeitos de dopagem. Embora a dopagem ótima (maior  $T_c$ ) ocorra para  $x = 0,15$  em ambos os sistemas, no caso do supercondutor dopado por elétrons, a supercondutividade ocorre em uma faixa menor de dopagem.

### Dopagem por Buracos

O composto (LSCO) mostrado na figura 2.2(a) possui na base e no topo uma maior concentração de átomos de cobre e oxigênio quando comparadas com a região central desta estrutura. O reservatório de carga localizado entre os planos de  $\text{CuO}_2$ , é composto por átomos com ionizações diferentes. Quando ocorre a substituição de um determinado átomo por outro com ionização diferente, no reservatório de carga, pode ocorrer a doação ou retirada de elétrons dos planos de cobre e oxigênio.

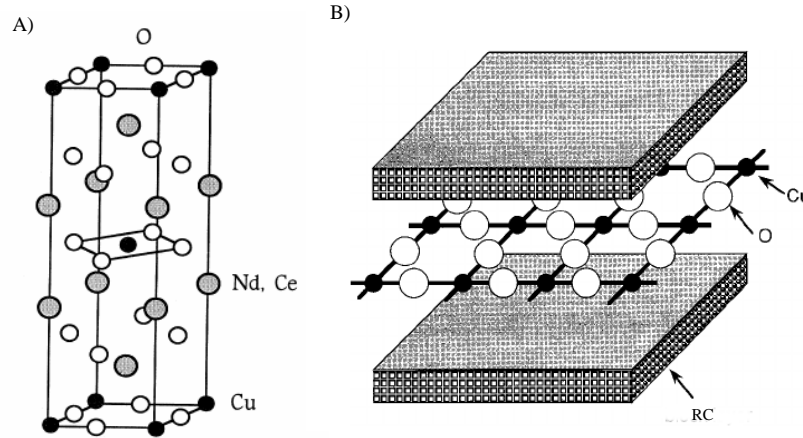
A dopagem por buracos é um processo usado para atingir o estado supercondutor em compostos como o  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO). Os planos de cobre e oxigênio estão separados por um bloco de dois planos formados por La e Sr que compõem o reservatório de carga o qual é responsável por retirar ou doar elétrons aos planos de  $\text{CuO}_2$ . O processo de dopagem é feito através da troca aleatória de átomos de  $\text{La}^{+3}$  por átomos de  $\text{Sr}^{+2}$ , no reservatório de carga. Com isso, existirão menos elétrons disponíveis nos planos de  $\text{CuO}_2$ , portanto nesse caso a dopagem é por buracos (GONZALEZ et al., 1995).

### Dopagem por Elétrons

Após a descoberta da supercondutividade nos sistemas cupratos (Bednorz; Müller, 1986), a busca por novos materiais com  $T_c$  mais elevado cresceu significativamente. Anos

mais tarde, Takagi et al. (1989) encontram supercondutividade em sistemas dopados por elétrons.

Figura 2.4 – (A) Representação espacial da estrutura cristalina do  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . Em (B), representação de um plano de cobre e oxigênio cercado pelos reservatórios de carga (RC).



Fonte: (DAGOTTO, 1994; IMADA; FUJIMORI; TOKURA, 1998).

O painel 2.4(A) mostra a estrutura cristalina para o composto  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (NCCO), o qual é um exemplo onde a supercondutividade é induzida através do procedimento de dopagem por elétrons. Ao comparar as estruturas do LSCO 2.2(a) em relação a do NCCO, é visto que a estrutura de NCCO não possui átomos de oxigênio apicais no reservatório de carga. Quando o composto NCCO encontra-se com dopagem nula, ele possui um comportamento tipo isolante de Mott (IMADA; FUJIMORI; TOKURA, 1998; MOTT, 1961), devido ao ordenamento magnético de longo alcance. No composto NCCO a dopagem por elétrons ocorre através da troca de átomos de neodímio (Nd) por átomos de cério (Ce), na estrutura representada em 2.4(A). O procedimento de dopagem nestes sistemas é realizado mediante a troca randômica de átomos de neodímio no estado eletrônico  $\text{Nd}^{+3}$ , por átomos de cério no estado eletrônico  $\text{Ce}^{+4}$ . Cada troca introduz um elétron extra nos planos de  $\text{CuO}_2$ .

### 2.0.1 A Região do *pseudogap*

A supercondutividade em sistemas de elétrons fortemente correlacionados é um fenômeno notável o qual atrai grande interesse. O estudo deste problema torna-se relevante em compostos cupratos que apresentam como característica primária uma alta temperatura crítica de transição para o estado supercondutor. As características apresentadas pelos supercondutores cupratos são na grande maioria modeladas pela competição de fases distintas, cuja sua natureza ainda é uma questão em aberto na física do estado

sólido. A principal característica é a região do *pseudogap*, a qual surge ainda no estado normal quando o sistema é submetido a um processo de dopagem. O *pseudogap* existe abaixo de uma dopagem ideal  $p^*$ , numa região onde há a predominância de correlações fortes (TIMUSK; STATT, 1999). O que determina  $p^*$  ainda é uma questão em aberto para a física das baixas temperaturas. Acredita-se que o segredo da supercondutividade em sistemas cupratos está nos mecanismos que dão origem ao cenário do *pseudogap*, o qual antecede o estado supercondutor.

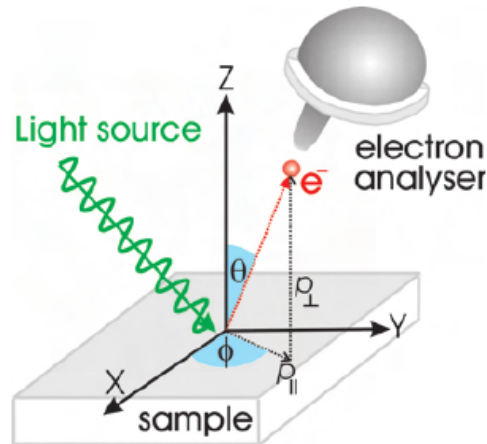
Diferentes teorias tem sido propostas para explicar a origem do *pseudogap*. Por um lado, existem teorias onde o *pseudogap* estaria associado a formação de pares de Cooper ainda no estado normal, ou seja, acima de  $T_c$  (MISHRA VIVEK. CHATTERJEE, 2014; KEIMER B. KIVELSON, 2015). Por outro lado, existem teorias que relacionam o *pseudogap* com instabilidades de cargas ou de spin (KEIMER B. KIVELSON, 2015; KUZMICHEVA et al., 2018). Uma dessas teorias propõe que o *pseudogap* tem origem nas flutuações antiferromagnéticas que ocorrem na região de baixas dopagens próxima a fase antiferromagnética (KAMPF; SCHRIEFFER, 1990; MACRIDIN et al., 2006; MACRIDIN; JARRELL, 2008; PETERS; BAUER, 2015; KUZMICHEVA et al., 2018; KEIMER B. KIVELSON, 2015). Neste trabalho adotaremos este último cenário para dar origem a um *pseudogap* na densidades de estados.

## 2.0.2 Técnica Experimental de ARPES

Uma das metodologias experimentais utilizadas para o estudo da fase *pseudogap* é a técnica experimental “Angle-resolved Photoemission Spectroscopy” (ARPES) (DAMASCELLI; HUSSAIN; SHEN, 2003). Esta técnica permite obter a energia e o momento dos estados de energia eletrônica preenchidos abaixo do nível de Fermi, e é baseada no efeito fotoelétrico como é mostrado na imagem 2.5. Um feixe de fótons com energia  $h\nu$  incide sobre uma amostra, se o elétron absorver a energia  $h\nu$  ele pode ser ejetado através da superfície da amostra e detectado por um coletor analisador. O coletor analisador pode ser colocado em diferentes posições definidas pelos ângulos  $\theta$  e  $\phi$ , cada posição do coletor analisador está relacionada com um vetor de onda  $\vec{k}$  na primeira zona de Brillouin. Conhecendo a energia dos fótons incidentes e a energia cinética dos elétrons ao atingirem o coletor analisador, é possível determinar a energia de ligação que prende os elétrons ao material.

A figura 2.6 mostra a superfície de Fermi em (a), e em (b) e (c), os espectros de ARPES em duas direções diferentes conforme o ângulo  $\phi$  mostrado em (a). Para  $\phi = 0^\circ$ , direção antinodal, o espectro de energia toca a energia de Fermi (localizada em 0) em uma região considerável de valores de  $k$ , indicando uma alta densidade de estados ocupados na região antinodal ( $\phi = 0^\circ$ ). Por outro lado, em (b) o espectro de energia toca a energia de

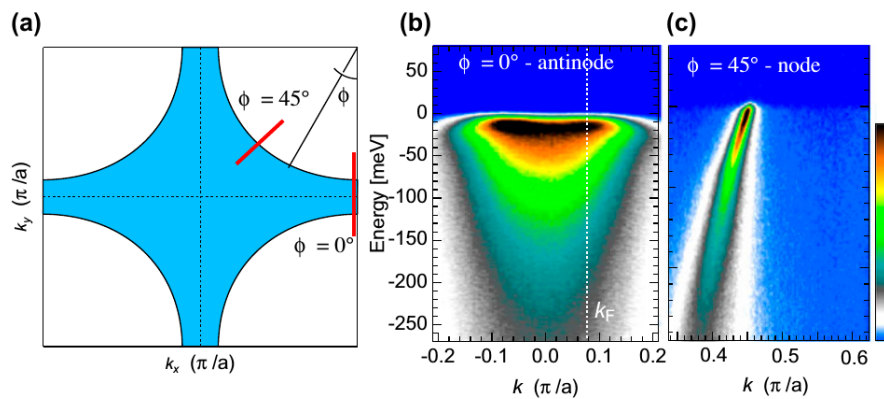
Figura 2.5 – Representação da montagem de um experimento de ARPES, explicitando as direções das colisões dos elétrons as quais são definidas pelos ângulos  $\theta$  e  $\phi$ .



Fonte: (RAY et al., 2017).

Fermi apenas em alguns poucos valores de  $k$  indicando uma baixa densidade de estados na direção nodal ( $\phi = 45^\circ$ ).

Figura 2.6 – O painel (a), mostra a primeira zona de Brillouin e também a superfície de Fermi para uma amostra de Bi2201, em conjunto com a definição dos ângulos na superfície de Fermi. No painel (b), é mostrada a intensidade do espectro ARPES ao longo da direção anti nodal ( $\phi = 0^\circ$ ). O painel (c), mostra o espectro de ARPES para a direção nodal ( $\phi = 45^\circ$ ), para uma temperatura de 11 K.



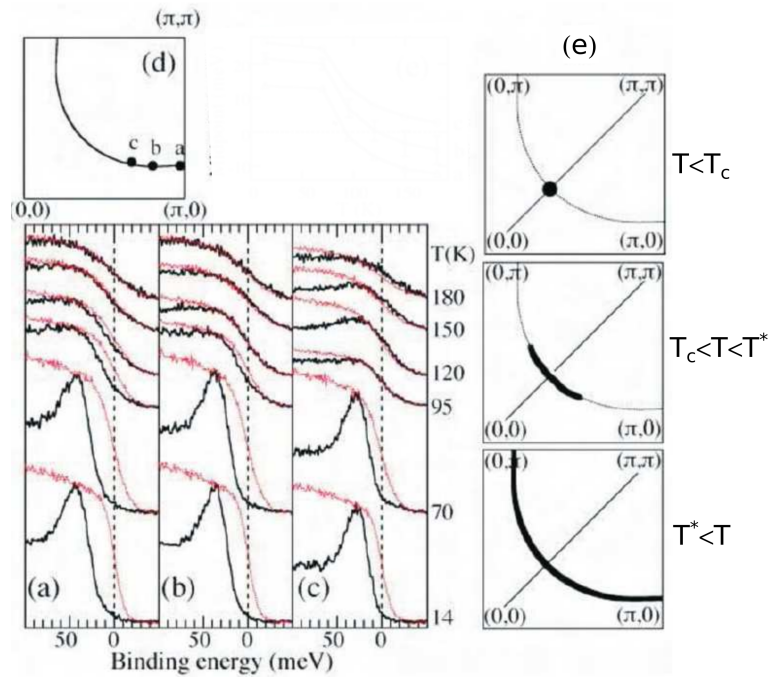
Fonte: (KHARE, 2003).

Na figura 2.7 são mostrados resultados de medidas da técnica ARPES para o composto supercondutor *Bi2212*. Em 2.7(a), mostra-se a intensidade do espectro de ARPES ( $I$ ), onde  $I$  está associado ao número de elétrons que colidem com o coletor analisador. As curvas em vermelho representam o espectro para um material de referência (platina), o qual não é supercondutor. As curvas em preto mostram o espectro para uma amostra supercondutora de *Bi2212*. A linha vertical tracejada representa a posição da



energia de Fermi (potencial químico, quando  $T > 0$ ). As curvas mostradas são para diferentes temperaturas.

Figura 2.7 – Espectro de energia explicitando o *gap* supercondutor e o *pseudogap* para o composto *Bi2212* em um regime considerado de baixas dopagens. A amostra supercondutora tem um  $T_c = 85\text{K}$ . As figuras (a), (b) e (c), mostram os espectros de ARPES para as direções dos pontos a,b e c indicados na superfície de Fermi do painel (d). Em (e), o painel superior mostra um nó no estado supercondutor, um arco de Fermi na região do *pseudogap*, e no painel inferior uma superfície de Fermi fechada.



Fonte: Adaptada (NORMAN et al., 1998).

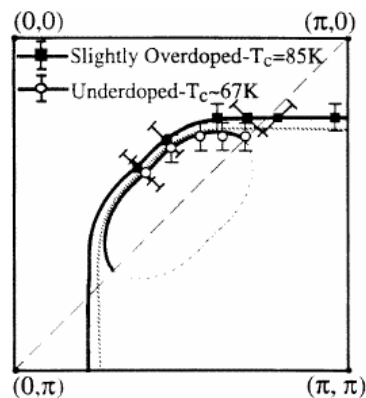
Inicialmente, para  $T = 14\text{K}$ , nota-se que o espectro do material de referência intercepta o potencial químico no chamado ponto médio. Por outro lado, o espectro do supercondutor está deslocado para esquerda do potencial químico. Essa diferença nas posições dos pontos médios do supercondutor e do não supercondutor, é o *gap* supercondutor. Os espectros de energia nos painéis (a), (b) e (c) correspondem aos diferentes pontos a,b e c da superfície de Fermi mostrados no painel (d). O *Bi2212* possui um  $T_c = 85\text{K}$ , portanto, no painel (a), o espectro do supercondutor para  $T = 95\text{K}$ , deveria coincidir com o espectro do não supercondutor. No entanto, é visto que mesmo acima de  $T = 85\text{K}$  os espectros não coincidem, indicando a presença de um *gap* parcial que no caso é o *pseudogap*. O *pseudogap* só desaparece em  $T \sim 150\text{K}$ . A temperatura que o *pseudogap* desaparece é chamada de  $T^*$ . Os espectros de energia do painel (b) correspondem ao ponto b na superfície de Fermi do painel (d). Nesse caso, é visto que o *pseudogap* desaparece em uma temperatura de  $T = 120\text{K}$  a qual é menor que os  $150\text{K}$  do painel (a). No painel (c), para  $T > T_c = 85\text{K}$  os espectros de energia do supercondutor e do não-supercondutor

coincidem, mostrando que não existe *pseudogap* nesse caso. Essa análise mostra que o *pseudogap* depende da temperatura e também de uma determinada região na superfície de Fermi, mais precisamente, o *pseudogap* ocorre na região dos pontos antinodais  $(\pm\pi, 0)$  e  $(0, \pm\pi)$ , portanto, está associado a uma simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ .

O painel 2.7(e) representa a superfície de Fermi em função da temperatura. O painel superior corresponde a  $T < T_c$ , logo, não há superfície de Fermi devido ao estado supercondutor. O painel inferior em 2.7(e), representa a superfície de Fermi fechada em  $T > T^*$ , ou seja, no estado normal. O painel intermediário representa o resultado para  $T_c < T < T^*$ . Nesse caso, observa-se apenas uma parte da superfície de Fermi. Esse fragmento de superfície de Fermi é chamado de *arco de Fermi* e surge devido à presença do *pseudogap* nas regiões antinodais.

A figura 2.8 mostra o efeito do processo de dopagem na superfície de Fermi. Quando o sistema possui uma dopagem considerada alta (*overdoped*), é visto que a superfície de Fermi no estado normal é fechada. Por outro lado, quando o sistema é pouco dopado (*underdoped*), é visto apenas um *arco de Fermi* indicando a presença do *pseudogap*. Logo, a dopagem do sistema é um fator que influencia diretamente o *pseudogap*.

Figura 2.8 – Superfície de Fermi quando o sistema é dopado por buracos.

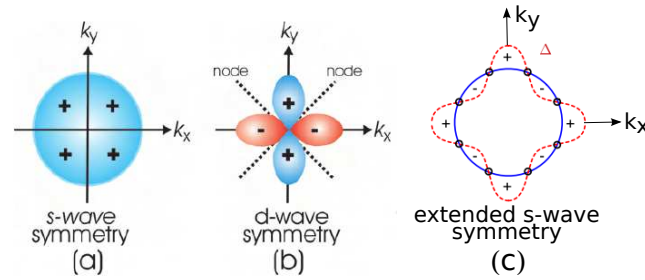


Fonte: (NORMAN et al., 1998).

### 2.0.3 Simetria do gap supercondutor

Um passo importante para entender os mecanismos responsáveis pela supercondutividade em sistemas supercondutores é conhecer a simetria do parâmetro de ordem supercondutor (KHARE, 2003; ZHAO, 2004). Neste trabalho, estamos pensando em supercondutores cupratos para os quais existe um consenso de que a simetria do gap supercondutor é do tipo  $d_{x^2-y^2}$ . No entanto, estamos interessados também em supercondutores

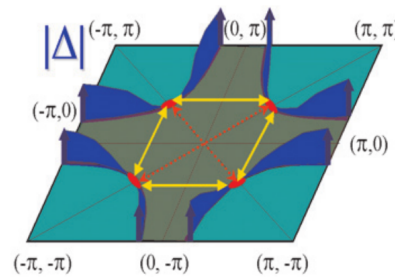
Figura 2.9 – Ilustração das simetrias  $s$ ,  $d_{x^2-y^2}$  e  $s$ -estendida, do gap supercondutor.



Fonte: Adaptado (SANTOSO, 2008; REID et al., 2012).

pinictídeos que podem apresentar o gap supercondutor com simetria  $s$  e  $s$ -estendida (REID et al., 2012; HIRSCHFELD, 2016).

Figura 2.10 – O painel mostra o  $gap$   $|\Delta|$  na superfície de Fermi para simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ .



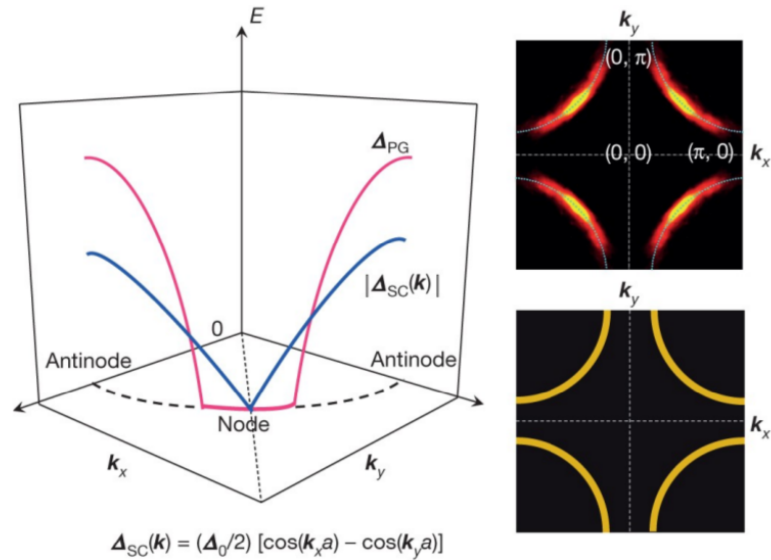
Fonte: (NARLIKAR AKIMITSU, 2005).

A figura 2.9 mostra uma ilustração das simetrias  $s$ ,  $d_{x^2-y^2}$  e  $s$ -estendida. Na simetria de onda  $s$  o  $gap$  supercondutor apresenta o mesmo comportamento, independente da direção considerada na primeira zona de Brillouin (isotrópico). Para a simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ , o parâmetro de ordem possui quatro nós nas direções  $|k_x| = |k_y|$ . Estas direções são chamadas de direções nodais. Por outro lado, o  $gap$  supercondutor é máximo nas direções  $k_x$  e  $k_y$ , chamadas de direções antinodais. Para a simetria  $s$ -estendida o  $gap$  também possui regiões nodais e antinodais, no entanto o  $gap$  possui oito nós, enquanto que para a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , possui apenas quatro nós. Os nós são pontos onde o  $gap$  se anula sobre a superfície de Fermi.

A figura 2.10, mostra o  $gap$   $|\Delta|$  na superfície de Fermi para parâmetro de ordem com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ . É visto que,  $|\Delta|$  é nulo nas direções nodais e é máximo próximo das direções antinodais.

O painel principal na figura 2.11 mostra uma comparação dos comportamentos do  $gap$  supercondutor  $\Delta_{SC}$  com a simetria  $d_{x^2-y^2}$  e do  $pseudogap$   $\Delta_{PG}$  observados nos cupratos. Tanto o  $\Delta_{SC}$  quando o  $\Delta_{PG}$  são máximos nas regiões antinodais. No entanto, na região nodal,  $\Delta_{SC}$  é nulo apenas em  $|k_x| = |k_y|$  enquanto que  $\Delta_{PG}$  é nulo em uma

Figura 2.11 – Comparação dos *gaps* supercondutor  $\Delta_{SC}$  com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$  e do *pseudogap*  $\Delta_{PG}$  dos cupratos. No lado direito, o painel superior mostra os arcos de Fermi enquanto que o painel inferior mostra a superfície de Fermi fechada do estado normal.



Fonte: (REID et al., 2012).

região entorno de  $|k_x| = |k_y|$ . Isso explica porque, só se observa um ponto e não uma superfície de Fermi na figura 2.7(e) para  $T < T_c$ , mas observa-se um arco (região onde  $\Delta_{PG} = 0$ ) quando  $T_c < T < T^*$ . Os arcos de Fermi são mostrados no painel superior do lado direito da figura 2.11 enquanto que o painel inferior mostra uma superfície de Fermi fechada típica de um estado metálico.

### 3 MODELO DE HUBBARD E FUNÇÕES DE GREEN

Em 1963 Hubbard (HUBBARD, 1963) propôs um modelo para descrever a dinâmica dos elétrons em bandas estreitas e com forte interação coulombiana. Mesmo sendo simples, o modelo de Hubbard de uma banda permite fazer uma boa descrição das tendências opostas encontradas em sistemas de elétrons fortemente correlacionados (SEFC). O modelo de Hubbard contém um termo cinético que dá um caráter itinerante aos elétrons. Por outro lado, há um termo de interação coulombiana que tende a localizar os elétrons nos sítios da rede. A competição entre esses dois termos é responsável pelas propriedades interessantes apresentadas pelos SEFC. O hamiltoniano do modelo de Hubbard de uma banda é descrito da seguinte forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}. \quad (3.1)$$

Os operadores de criação  $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$  e destruição  $\hat{c}_{j,\sigma}$  podem criar e destruir um elétron no  $i$ -ésimo sítio da rede cristalina. O primeiro termo do operador  $\hat{\mathcal{H}}$  descreve a itinerância dos elétrons na rede. O segundo termo considera a interação coulombiana entre dois elétrons de spin opostos localizados em um mesmo sítio  $i$  da rede cristalina.

O modelo proposto por Hubbard (1963), tem sido um dos modelos mais utilizados para o entendimento das propriedades de sistemas de elétrons correlacionados em redes atômicas cristalinas. Neste trabalho, consideraremos um modelo de Hubbard que inclui um termo de pareamento do tipo BCS (TINKHAM, 1996),

$$\hat{\mathcal{H}}_{PAR} = \sum_{k,k'} V_{k,k'} \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow}, \quad (3.2)$$

o qual permite fazer um estudo das propriedades supercondutoras na presença de correlações. O potencial  $V_{k,k'}$ , é um potencial atrativo entre dois elétrons que podem formar pares responsáveis pela supercondutividade (TINKHAM, 1996). Para tratar o modelo, será utilizada a técnica das funções de Green, a qual será apresentada na próxima seção.

#### 3.1 FUNÇÕES DE GREEN EM MECÂNICA ESTATÍSTICA

Existem diferentes formas para as funções Green na física da teoria quântica de campos (INNES, 1978; FETTER, 1971; A.A. GOR'KOV L.P., 1963; ECONOMOU, 2006; MAHANTY, 1974; DONIACH, 1998). A diferença está na maneira como é feita a média do produto dos operadores utilizados para descrever o sistema. A técnica das funções de

Green é ideal para descrever sistemas de elétrons interagentes, na ordem de  $10^{23}$  partículas (elétrons), e por isso é muito utilizada em mecânica estatística. Com esta ferramenta, é possível investigar propriedades termodinâmicas de interesse, como por exemplo, densidades de estados (através da qual é possível obter a ocupação total  $\langle n_T \rangle$ ), energia cinética total, energia potencial total e também a média do operador Hamiltoniano  $\langle \mathcal{H} \rangle$ , o qual representa a energia total de um sistema. As funções de Green, quando usadas em mecânica estatística são definidas através do produto de dois operadores em um dado ensemble estatístico característico. Estas funções de Green estão relacionadas com o tempo e temperatura e seguem o formalismo proposto por Zubarev (ZUBAREV, 1960).

A seguir, serão apresentadas as funções de Green para um dado ensemble estatístico e também as equações de movimento, funções de correlação e suas respectivas representações espectrais.

### Funções de Green

Em mecânica estatística<sup>1</sup> a representação da média de um dado operador é:

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \text{Tr} [X e^{-H\beta}], \quad (3.3)$$

onde,

$$Z = \text{Tr} [e^{-H\beta}]$$

é a função de partição do ensemble grande canônico. Considera-se o ensemble grande-canônico, pois nesse caso, existe a possibilidade de variar o número de partículas do sistema. Temos também  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , onde  $T$  é a temperatura e  $k_B$  a constante de Boltzmann. Na equação 3.3, o símbolo  $\langle \dots \rangle$  indica a média termodinâmica sobre um dado ensemble.

O operador hamiltoniano é representado por:

$$\mathcal{H} = H_0 - \mu N, \quad (3.4)$$

onde  $H_0$  é operador hamiltoniano,  $\mu$  é o potencial químico e  $N$  o operador número de partículas.

As funções de Green em mecânica estatística são classificadas como retardada  $G_r(t, t')$ , avançada  $G_a(t, t')$  e causal  $G_c(t, t')$  (ZUBAREV, 1960). A seguir, será mostrado o formalismo da técnica das funções de Green, chegando nas equações de movimento e suas respectivas funções de correlação e também as representações espectrais.

As funções de Green são definidas levando em conta as regras de comutação canônicas dos operadores  $A(t)$  e  $B(t')$ , e por isso são representadas na seguinte forma:

---

<sup>1</sup>Para mais informações ver a referência (SALINAS, 2001).

$$\begin{aligned}
G_r(t, t') &= \left\langle \left\langle A(t); B(t') \right\rangle \right\rangle_r = -i\theta(t - t') \left\langle [A(t), B(t')] \right\rangle \\
G_a(t, t') &= \left\langle \left\langle A(t); B(t') \right\rangle \right\rangle_a = i\theta(t' - t) \left\langle [A(t), B(t')] \right\rangle \\
G_c(t, t') &= \left\langle \left\langle A(t); B(t') \right\rangle \right\rangle_c = -i \left\langle \text{T}A(t)B(t') \right\rangle,
\end{aligned} \tag{3.5}$$

onde,  $A(t)$  e  $B(t')$  são operadores descritos na representação de Heisenberg. O símbolo  $\text{T}$  que aparece na função de Green causal  $G_c(t, t')$ , representa o ordenamento temporal.

A função  $\theta(t-t')$  faz com que as funções de Green não sejam definidas em  $t-t'$ . No entanto, é possível mostrar que as funções de Green  $G_{r,a}$  dependem apenas da diferença  $t-t'$ . Partindo da relação 3.3, a média do produto dos operadores  $A(t)$  e  $B(t')$  é dada por:

$$\left\langle A(t)B(t') \right\rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} e^{iHt} A e^{-iHt} e^{iHt'} B e^{-iHt'} \right\}. \tag{3.6}$$

A operação traço ( $\text{Tr}$ ) permite que os operadores troquem de posição de forma cíclica, assim:

$$\begin{aligned}
\left\langle A(t)B(t') \right\rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-iHt} e^{-\beta H} e^{iHt} A e^{-iHt} e^{iHt'} B \right\} \\
&= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} e^{iH(t-t')} A e^{iH(t-t')} B \right\} \\
&= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} A(t-t') B \right\}.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Logo, pode-se escrever a seguinte relação :

$$\left\langle A(t)B(t') \right\rangle = \left\langle A(t-t')B(0) \right\rangle, \tag{3.8}$$

o que resulta em:

$$F_{AB}(t-t') = \left\langle A(t)B(t') \right\rangle. \tag{3.9}$$

Conseqüentemente, teremos tanto as funções de correlação  $F(t-t')$  quanto as funções de Green dependentes apenas da diferença  $t-t'$ .

### Equação de movimento das funções de Green

A relação de comutação entre dois operadores  $A$  e  $B$  é definida da seguinte forma:

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

onde,

$$\eta = \begin{cases} +1 & \rightarrow \text{Bose-Einstein} \\ -1 & \rightarrow \text{Fermi-Dirac.} \end{cases}$$

Combinando a relação de comutação 3.10 e a função de Green  $G_r(t, t')$  definida em 3.5, temos:

$$G_r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle A(t)B(t') - \eta B(t')A(t) \rangle. \quad (3.11)$$

Dado um operador na representação de Heisenberg

$$A(t) = e^{-i\mathcal{H}t} A(0) e^{i\mathcal{H}t}, \quad (3.12)$$

sua equação de movimento é:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A(t) &= i\mathcal{H}e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} + e^{-i\mathcal{H}t} A (-i\mathcal{H}t) e^{-i\mathcal{H}t} \\ i \frac{d}{dt} A(t) &= A(t)\mathcal{H} - \mathcal{H}A(t) \\ i \frac{d}{dt} A(t) &= [A(t), \mathcal{H}]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

A função de Green retardada definida em 3.11, pode ser derivada em relação ao tempo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} G_r(t, t') &= i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t)B(t') \rangle \rangle_r \\ &= i \frac{d}{dt} \left\{ -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Executando a derivada:

$$i \frac{d}{dt} G_r(t, t') = i \left\{ -i \frac{d\theta(t - t')}{dt} \langle [A(t), B(t')] \rangle + \left( -i\theta(t - t') \left\langle \left[ \frac{dA(t)}{dt}, B(t') \right] \right\rangle \right) \right\}, \quad (3.15)$$

e usando a relação 3.13, temos:

$$i \frac{d}{dt} G_r(t, t') = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle - i\theta(t - t') \langle [A(t), \mathcal{H}]; B(t') \rangle, \quad (3.16)$$



onde,

$$\frac{d}{dt}\theta(t-t') = \delta(t-t'). \quad (3.17)$$

Assim, chega-se em:

$$i\frac{d}{dt}G_r(t,t') = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle \langle [A(t), \mathcal{H}]; B(t') \rangle \rangle. \quad (3.18)$$

Para a função de Green avançada obtém-se uma equação de movimento semelhante. Assim, de forma geral, podemos escrever:

$$i\frac{d}{dt}G_k(t,t') = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle \langle [A(t), \mathcal{H}]; B(t') \rangle \rangle_k, \quad (3.19)$$

onde,  $k$  pode representar qualquer uma das funções de Green retardada ou avançada. Para obter uma representação das funções de Green no domínio das frequências ( $\omega$ ) ou no domínio das energias ( $E$ ), é necessário fazer a transformada de Fourier na equação de movimento definida em 3.19.

A transformada de Fourier de  $G_k(t-t')$  é:

$$G_k(E) = \mathcal{F}\{G_k(t-t')\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_k(t-t') e^{iE(t-t')} dt. \quad (3.20)$$

A transformada inversa de Fourier é dada por:

$$G_k(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G_k(E) e^{-iEt} dE, \quad (3.21)$$

e a função delta de Dirac é:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt} dE. \quad (3.22)$$

O lado esquerdo da igualdade na equação 3.19 envolve a transformada de Fourier de uma derivada.

Dada uma função diferenciável  $f(t)$  tal que:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0, \quad (3.23)$$

a transformada de Fourier de sua derivada será:

$$\mathcal{F}\{f'(t)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f'(t)e^{iEt} dt. \quad (3.24)$$

Resolvendo a integral por partes:

$$\mathcal{F}\{f'(t)\} = \frac{1}{2\pi} [f(t)e^{iEt}]_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} iE f(t)e^{iEt} dt. \quad (3.25)$$

Considerando a condição 3.23, o primeiro termo da integral por partes é  $[f(t)e^{iEt}]_{-\infty}^{\infty} = 0$ . Assim, a transformada da derivada é dada por:

$$\mathcal{F}\{f'(t)\} = \frac{-iE}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{iEt} dt. \quad (3.26)$$

Combinando o resultado 3.26 e a definição 3.20, obtém-se :

$$i \frac{d}{dt} G_k(t-t') = -\frac{i^2 E}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_k(t-t') e^{iE(t-t')} dt \quad (3.27)$$

ou

$$i \frac{d}{dt} G_k(t-t') = E G_k(E). \quad (3.28)$$

Com esse resultado, é possível chegar à transformada de Fourier no domínio das energias para a equação de movimento geral das funções de Green definida em 3.19. Assim, escreve-se:

$$\mathcal{F}\left\{\frac{d}{dt} G_k(t-t')\right\} = \mathcal{F}\{\delta(t-t') \langle [A, B] \rangle\} + \mathcal{F}\left\{\left\langle\left\langle [A(t), \mathcal{H}]; B(t') \right\rangle\right\rangle_k\right\}, \quad (3.29)$$

e chega-se na equação de movimento das funções de Green no domínio das energias:

$$E \langle \langle A_n; B \rangle \rangle_E = \langle [A_n, B]_+ \rangle + \langle \langle [A, \mathcal{H}]; B \rangle \rangle_E. \quad (3.30)$$

As quantidades físicas associadas ao modelo  $\mathcal{H}$ , o qual aparece no segundo termo da equação de movimento são obtidas através das funções de correlação, as quais estão relacionadas com às funções de Green através da transformada de Fourier da seguinte forma:

$$\langle BA \rangle = \frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) [G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)] d\omega, \quad (3.31)$$

como será visto mais adiante.

## Função de Correlação Temporal

Uma função de correlação é definida como a média do produto de operadores, como por exemplo,  $\langle BA \rangle$ . As funções de correlação  $F_{AB}$  e  $F_{BA}$  estão relacionadas à função de Green  $G_r(t - t')$  através de:

$$G_r(t, t') = -iF_{AB}(t, t')\theta(t - t') + i\eta F_{BA}(t, t')\theta(t - t'), \quad (3.32)$$

onde,

$$\begin{cases} F_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle \\ F_{BA}(t, t') = \langle B(t')A(t) \rangle. \end{cases}$$

As equações de movimento das funções de Green  $G_r(t, t')$  e  $G_a(t, t')$  dependem do tempo através da diferença  $t - t'$ , portanto as funções de correlação também dependerão, logo:

$$F_{AB}(t, t') = F_{AB}(t - t'), \quad (3.33)$$

e

$$F_{BA}(t, t') = F_{BA}(t - t'). \quad (3.34)$$

As funções de correlação  $F_{AB}(t - t')$  e  $F_{BA}(t - t')$ , por não possuírem o fator  $\theta(t - t')$ , não possuem descontinuidade, ou seja, são definidas em  $t = t'$ . Com isso:

$$F_{BA}(0) = \langle B(t')A(t) \rangle = \langle B(0)A(0) \rangle, \quad (3.35)$$

e

$$F_{AB}(0) = \langle A(t)B(t') \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle. \quad (3.36)$$

Este resultado é de grande importância, pois através dele é possível obter várias quantidades físicas de interesse tais como, número médio de partículas  $\langle n_T \rangle$ , susceptibilidade magnética  $\langle \chi \rangle$ , valor médio da energia total  $\langle \mathcal{H} \rangle$  e também a resposta de um dado sistema (em um dado ensemble estatístico) a uma perturbação externa (FETTER, 1971; INNES, 1978; ABRIKOSOV, 1988; DONIACH, 1998).

## Representação Espectral

Um melhor entendimento das propriedades analíticas das funções de correlação, é possível através da representação espectral.

Inicialmente, define-se a autofunção  $\psi_v$  e o autovalor  $E_v$  para um dado operador hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , o qual descreve um sistema de muitos corpos que interagem em um

estado de equilíbrio. A equação de Schrödinger será:

$$\mathcal{H}\psi_v = E_v\psi_v. \quad (3.37)$$

A relação de completeza é dada por:

$$\sum_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle\langle\psi_{\mu}| = 1. \quad (3.38)$$

Tomando a média do produto dos operadores  $A(t)$  e  $B(t')$ , e levando em conta a definição 3.3, escrevemos essa média como:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{v,\mu} \langle\psi_v|B(t')|\psi_{\mu}\rangle\langle\psi_{\mu}|A(t)|\psi_v\rangle e^{\frac{-E_v}{k_B T}}. \quad (3.39)$$

Os operadores  $A(t)$  e  $B(t')$  são escritos na representação de Heisenberg<sup>2</sup> e com isso, é possível escrever:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{v,\mu} \langle\psi_v|e^{i\mathcal{H}t'} B(0)e^{-i\mathcal{H}t'}|\psi_{\mu}\rangle\langle\psi_{\mu}|e^{i\mathcal{H}t} A(0)e^{-i\mathcal{H}t}|\psi_v\rangle e^{\frac{-E_v}{k_B T}}. \quad (3.40)$$

Devido à  $\psi_v$  ser uma autofunção do operador  $\mathcal{H}$ , pode-se escrever a seguinte relação:

$$e^{-i\mathcal{H}t}|\psi_v\rangle = e^{-E_v t}|\psi_v\rangle. \quad (3.41)$$

Assim, a média do produto entre os operadores  $A(t)$  e  $B(t')$  definida em 3.40, pode ser reescrita na seguinte forma:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{v,\mu} \langle\psi_v|B(0)|\psi_{\mu}\rangle\langle\psi_{\mu}|A(0)|\psi_v\rangle e^{-i(E_v-E_{\mu})(t-t')} e^{-\beta E_v} \quad (3.42)$$

e

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} \sum_{v,\mu} \langle\psi_v|A(0)|\psi_{\mu}\rangle\langle\psi_{\mu}|B(0)|\psi_v\rangle e^{i(E_v-E_{\mu})(t-t')} e^{-\beta E_v}. \quad (3.43)$$

Realizando a transformada de Fourier de  $F_{BA}(t-t')$  do domínio dos tempos para o domínio das frequências, temos:

$$F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega)e^{-i\omega(t-t')}d\omega. \quad (3.44)$$

---

<sup>2</sup>Será levado em conta que a constante de Planck assume o valor  $\hbar = 1$ .

A transformada inversa de Fourier:

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F_{BA}(t-t') e^{i\omega(t-t')} dt. \quad (3.45)$$

Substituindo 3.42 em 3.45:

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \frac{Z^{-1}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \sum_{v,\mu} \langle \psi_v | B(0) | \psi_\mu \rangle \langle \psi_\mu | A(0) | \psi_v \rangle e^{-\beta E_v} e^{-i(E_v - E_\mu)\tau} \right] e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{Z^{-1}}{2\pi} \sum_{v,\mu} \langle \psi_v | B(0) | \psi_\mu \rangle \langle \psi_\mu | A(0) | \psi_v \rangle e^{-\beta E_v} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(E_v - E_\mu - \omega)\tau} d\tau, \end{aligned} \quad (3.46)$$

onde considera-se que  $\tau = t - t'$ .

A função  $\delta(x)$  na sua forma integral é dada por:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixz} dz, \quad (3.47)$$

assim:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(E_v - E_\mu - \omega)\tau} d\tau = 2\pi \delta[E_v - E_\mu - \omega]. \quad (3.48)$$

Por fim, pode-se escrever uma forma para  $J(\omega)$  dada por:

$$J(\omega) = Z^{-1} \sum_{v\mu} \langle \psi_v | B(0) | \psi_\mu \rangle \langle \psi_\mu | A(0) | \psi_v \rangle e^{-E_v\beta} \delta[E_v - E_\mu - \omega]. \quad (3.49)$$

Podemos obter também  $F_{AB}(t-t')$  em termos de  $J(\omega)$ , usando a relação 3.3:

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} Tr \left\{ e^{-\mathcal{H}\beta} A(t)B(t') \right\}. \quad (3.50)$$

O traço permite trocas cíclicas de seu argumento sem alterar o seu resultado. Após várias trocas cíclicas temos:

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} Tr \left\{ e^{-\mathcal{H}\beta} B(t')A(t+i\beta) \right\} \quad (3.51)$$

ou

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \langle B(t')A(t+i\beta) \rangle. \quad (3.52)$$

Fazendo a substituição  $(t-t') \rightarrow (t-t'+i\beta)$  em  $F_{BA}(t-t')$  da equação 3.44,

temos:

$$F_{AB}(t-t') = F_{BA}(t-t'+i\beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t'+i\beta)} d\omega, \quad (3.53)$$

ou

$$F_{AB}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{\omega\beta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (3.54)$$

### Representação espectral para as funções de Green

Através da representação espectral é possível obter uma compreensão do comportamento analítico das funções de correlação. Além disso, podemos utilizar a representação espectral das funções de correlação para obter a representação espectral das funções de Green. A dependência em  $t-t'$  das funções de Green permite fazer a transformada de Fourier<sup>3</sup>:

$$G_r(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_r(E) e^{iE\tau} dE. \quad (3.55)$$

Tomando como exemplo, o caso da função de Green  $G_r(\tau)$ :

$$\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_r(\tau) e^{iE\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -i\theta(\tau) \left\langle [A(t-t'), B(0)] \right\rangle \right\} e^{iE\tau} d\tau \\ &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(\tau) \left\{ \left\langle A(t-t')B(0) - \eta B(0)A(t-t') \right\rangle \right\} e^{iE\tau} d\tau \\ &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(\tau) \left\{ \langle A(\tau)B(0) \rangle - \eta \langle B(0)A(\tau) \rangle \right\} e^{iE\tau} d\tau. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Substituindo as funções de correlação 3.44 em 3.54 em 3.56, temos:

$$\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(\tau) \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega\tau} d\omega - \eta \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \right] e^{iE\tau} d\tau \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iE\tau} e^{-i\omega\tau} \theta(\tau) d\tau \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) d\omega \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (3.57)$$

A partir de agora, é necessário resolver a integral que envolve a função  $\theta(\tau)$ , a qual possui uma indeterminação em  $t=t'$ . Dessa forma, a função  $\theta(\tau)$  pode ser escrita em

---

<sup>3</sup>Para fins de notação  $\tau = t-t'$  e  $d\tau = dt$ .

termos da função delta de Dirac  $\delta(\tau)$ :

$$\theta(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\varepsilon\tau} \delta(\tau) d\tau \quad (3.58)$$

onde,

$$\varepsilon \rightarrow 0 \quad (\varepsilon > 0). \quad (3.59)$$

Como,

$$\delta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ix\tau} dx, \quad (3.60)$$

chega-se na relação:

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ixt} dx}{x + i\varepsilon}. \quad (3.61)$$

A nova definição para a função  $\theta(\tau)$ , obedece todos os critérios da descontinuidade da função original. Se a variável ( $x$ ) for assumida como complexa, o integrando possuirá um polo (singularidade) em  $x = -i\varepsilon$ . A técnica usada para resolver a integral 3.61 é o teoria dos resíduos (BUTKOV, 1973). Como a função  $\theta(\tau)$  possui uma descontinuidade em  $t = t'$ , será analisado cada ramo da função  $\theta(\tau)$ .

Quando o valor de  $\tau < 0$ , o contorno da integral deve ser fechado no hemisfério superior, não encerrando a singularidade. Segundo o teorema de Cauchy (BUTKOV, 1973), a integral assume um valor nulo, ou seja:

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\varepsilon} = 0. \quad (3.62)$$

Por outro lado, quando  $\tau$  assume valores positivos  $\tau > 0$ , o contorno da integral deve ser feito pela parte inferior encerrando a singularidade. Usando o teorema dos resíduos na integral em 3.61, chega-se em:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\varepsilon} = -2i\pi \text{Res}f(-i\varepsilon). \quad (3.63)$$

O sinal negativo no resultado da integral é por que o caminho de integração foi feito no sentido horário, e  $\text{Res}f(a)$  é o resíduo da função no ponto da singularidade,  $x = a$ .

Segundo o teorema dos resíduos:

$$\text{Res}f(a) = \lim_{x \rightarrow a} (x - a)f(x). \quad (3.64)$$

Definindo a função  $f(x) = \frac{e^{-ix\tau}}{x+i\varepsilon}$  e aplicando a relação 3.64 temos:

$$\begin{aligned} \text{Res}f(-i\varepsilon) &= \lim_{x \rightarrow -i\varepsilon} (x + i\varepsilon) \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\varepsilon} \\ &= e^{-\varepsilon\tau}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Assim :

$$\theta(\tau) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\varepsilon} = \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (-2i\pi e^{-\varepsilon\tau}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} e^{-\varepsilon\tau}. \quad (3.66)$$

Então,

$$\theta(\tau) = 1. \quad (3.67)$$

Assim, se  $\tau > 0$ ,  $\theta(\tau) = 1$ , e se  $\tau < 0$ ,  $\theta(\tau) = 0$ . Portanto a integral em  $\tau$  que aparece do lado direito de 3.57, pode ser reescrita na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau) d\tau &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E-\omega)\tau} d\tau \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\varepsilon} dx \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E-\omega)\tau} e^{-ix\tau} d\tau \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E-\omega-x)\tau} d\tau \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} 2\pi \delta(E - \omega - x) \\ &= \frac{i}{E - \omega + i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Por fim,  $G_r(E)$  assume a forma:

$$\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) d\omega \left[ \frac{i}{E - \omega + i\varepsilon} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega + i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

A função  $G_r(E)$  é analiticamente contínua no semi-plano superior do plano complexo, bem como  $G_a(E)$  pode ser analiticamente contínua no semi-plano inferior do plano complexo, ambas possuindo uma singularidade sobre o eixo real, que representa as excita-



ções do sistema. Da mesma forma que foi encontrada a nova representação para função de Green  $G_r(E)$ , pode-se fazer o mesmo para encontrar a função de Green avançada  $G_a(E)$ .

Assim, escreve-se :

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon}. \quad (3.70)$$

Com isso, as funções de Green podem ser escritas em uma única representação, como segue:

$$G_{a,r}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\varepsilon}. \quad (3.71)$$

Até então, a variável energia ( $E$ ) era tratada como sendo puramente real. A partir de agora, será assumido a variável energia como sendo uma variável complexa. Dessa forma, a seguinte relação é proposta:

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

Para que  $G_r(E)$  seja analiticamente estendida no plano complexo,  $\text{Im}(E) > 0$ , considera-se que  $G(\tau) = 0$ , para valores em que  $\tau < 0$ . Assim, considerando a variável  $E = \alpha + i\varepsilon$ , onde  $\varepsilon > 0$ , pode-se escrever:

$$\begin{aligned} G_r(\alpha + i\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_r(\tau) e^{i(\alpha+i\varepsilon)\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_r(\tau) e^{i\alpha\tau} e^{-\varepsilon\tau} d\tau. \end{aligned} \quad (3.72)$$

O termo  $e^{-\varepsilon\tau}$  atua como parâmetro de corte, fazendo com que  $G_r(E)$  e suas derivadas em relação a  $E$ , convirjam. Com o mesmo raciocínio, a equação de movimento  $G_a(E)$  pode ser analiticamente continuada dentro do plano complexo, ou seja,  $\text{Im}(E) < 0$ .

Assim, escreve-se:

$$\begin{aligned} G_a(\alpha - i\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_a(\tau) e^{i(\alpha-i\varepsilon)\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_a(\tau) e^{i\alpha\tau} e^{\varepsilon\tau} d\tau. \end{aligned} \quad (3.73)$$

O termo  $e^{\varepsilon\tau}$ , novamente desempenha o papel de fator de corte. Conhecendo a equação de movimento  $G(E)$ , é possível chegar até a intensidade espectral  $J(\omega)$ .

Assim, tem-se que:

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{\omega'\beta} - \eta) J(\omega') \frac{d\omega'}{E^+ - \omega} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{\omega'\beta} - \eta) J(\omega') \frac{d\omega'}{E^- - \omega}, \quad (3.74)$$

onde  $E^\pm = \omega' \pm i\varepsilon$ . Usando a identidade (ZUBAREV, 1960):

$$\frac{1}{\omega' - \omega \pm i\varepsilon} = \frac{P}{\omega' - \omega} \mp i\pi\delta(\omega' - \omega), \quad (3.75)$$

Na identidade 3.75,  $P$  representa a parte principal da integral<sup>4</sup>. Resolvendo a integral em  $\omega'$ :

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = -i(e^{\omega\beta} - \eta)J(\omega), \quad (3.76)$$

onde  $\omega$  é uma variável real, assim:

$$J(\omega) = i \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\beta\omega} - \eta}, \quad \varepsilon \rightarrow 0^+. \quad (3.77)$$

Na relação 3.77,  $J(\omega)$  é chamada de intensidade espectral. Conhecendo  $J(\omega)$ , é possível escrever a função de correlação  $\langle BA \rangle$ , da seguinte forma:

$$\langle BA \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{e^{\beta\omega} - \eta} [G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)] d\omega. \quad (3.78)$$

É visto que, a função de correlação 3.78 depende das funções de Green através da relação  $[G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)]$ .

Para  $\langle AB \rangle$  temos:

$$\langle AB \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega(t-t')} e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega} - \eta} [G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)] d\omega. \quad (3.79)$$

As funções de correlação de nosso interesse são a ocupação  $n_{i\sigma} = \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \rangle$  e a função de correlação  $\langle c_{i,\sigma} c_{i,-\sigma} \rangle$  que nos permite calcular o parâmetro de ordem supercondutor e a temperatura crítica de transição. Outra função de correlação importante neste trabalho é a função de correlação spin-spin  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  que poderá dar origem a um *pseudogap* na densidade de estados.

<sup>4</sup>Para mais detalhes sobre a identidade 3.75 ver referência (BUTKOV, 1973).

### 3.2 APROXIMAÇÃO DE N-POLOS

A aproximação de n-polos proposta por Roth (ROTH, 1969) é um formalismo apropriado para descrever sistemas de elétrons fortemente correlacionados. Esse método, não descarta funções de correlações importantes como é o caso da função de correlação de spin-spin  $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ , a qual não é levada em conta, por exemplo, na aproximação de campo médio (HUBBARD, 1963). Partindo da equação de movimento das funções de Green será mostrado como é feito o desacoplamento das equações de movimento das funções de Green.

Lembrando que a equação de movimento para um par de operadores fermiônicos, na representação de Heisenberg, é dada por:

$$\omega \langle \langle A_n; B \rangle \rangle_\omega = \langle [A_n, B]_+ \rangle + \langle \langle [A_n, \mathcal{H}]; B \rangle \rangle_\omega. \quad (3.80)$$

Para um sistema interagente, um dado par de operadores, gera uma nova função de Green com pelo menos três operadores. Ao calcular a nova equação de movimento para essa nova função de Green gera-se uma outra função de Green com pelo menos quatro operadores. Esse processo gera uma cadeia infinita de equações de movimento.

Para resolver este problema, deve-se usar um método aproximativo para limitar o número de equações de movimento e desacoplar a cadeia de equações. A aproximação de n-polos (ROTH, 1969) é capaz de resolver o problema de infinitas equações de movimento reescrevendo o comutador  $[A_n, \mathcal{H}]$  na seguinte forma:

$$[A_n, \mathcal{H}] = \sum_m K_{n,m} A_m. \quad (3.81)$$

Assim, o lado direito da equação 3.81 é dado por uma soma de termos onde cada termo depende de apenas um operador. Logo, dizemos que a equação de movimento  $[A_n, \mathcal{H}]$  foi linearizada.

Substituindo a relação 3.81 em 3.80 temos:

$$\omega \langle \langle A_n; B \rangle \rangle_\omega = \langle [A_n, B]_+ \rangle + \sum_m K_{n,m} \langle \langle A_m; B \rangle \rangle_\omega. \quad (3.82)$$

Para escrever a equação de movimento das funções de Green na forma matricial, é necessário definir:

$$G(\omega) = \langle\langle A; B \rangle\rangle, \quad (3.83)$$

tornando possível reescrever a equação 3.82 como

$$\omega \mathbf{G}(\omega) = \mathbf{N} + \mathbf{K} \mathbf{G}(\omega). \quad (3.84)$$

A equação 3.84 depende da matriz  $\mathbf{K}$ , a qual pode ser obtida através do seguinte procedimento: anticomuta-se ambos os lados da relação 3.81 em relação ao operador conjugado  $A_p^\dagger$  e toma-se a média termodinâmica. Com isso, chega-se na seguinte relação:

$$\langle\langle [A_n, H], A_p^\dagger \rangle\rangle_+ = \sum_m K_{n,m} \langle\langle A_m, A_p^\dagger \rangle\rangle_+. \quad (3.85)$$

Após este procedimento, é possível definir os elementos da matriz  $\mathbf{E}$  (energia) e da matriz  $\mathbf{N}$  (normalização) da seguinte forma:

$$E_{n,m} = \langle\langle [A_n, H], A_m^\dagger \rangle\rangle_+, \quad (3.86)$$

e

$$N_{n,m} = \langle\langle A_n, A_m^\dagger \rangle\rangle_+. \quad (3.87)$$

Assim, em notação matricial:

$$\mathbf{E} = \mathbf{K} \mathbf{N}. \quad (3.88)$$

Se  $\mathbf{N}$  for uma matriz não singular podemos multiplicar por  $\mathbf{N}^{-1}$ , pela esquerda, ambos os lados da equação 3.88. Logo, a matriz  $\mathbf{K}$  será dada em termos da matriz energia  $\mathbf{E}$  e da matriz normalização  $\mathbf{N}$

$$\mathbf{K} = \mathbf{E} \mathbf{N}^{-1}. \quad (3.89)$$

Usando o resultado 3.89, reescreve-se 3.84 da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\omega \mathbf{G}(\omega) &= \mathbf{N} + (\mathbf{E}\mathbf{N}^{-1}) \mathbf{G}(\omega) \\
\mathbf{N} &= \omega \mathbf{G}(\omega) - (\mathbf{E}\mathbf{N}^{-1}) \mathbf{G}(\omega) \\
\mathbf{N} &= \mathbf{G}(\omega) [\omega - (\mathbf{E}\mathbf{N}^{-1})] \\
\mathbf{G}(\omega) &= \mathbf{N} (\omega \mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1} \mathbf{N},
\end{aligned} \tag{3.90}$$

onde,  $\mathbf{G}(\omega)$  depende apenas da matriz  $\mathbf{E}$  e da matriz  $\mathbf{N}$ .

As funções de Green possuem uma estrutura de n-polos onde o número de polos depende do número de operadores do conjunto  $\{A_n\}$  utilizado na relação 3.81. Para o modelo de Hubbard de uma banda (HUBBARD, 1963), em geral, considera-se apenas dois operadores, logo, as funções de Green possuem a seguinte estrutura:

$$G_{k,\sigma}(\omega) = \frac{Z_{1,k\sigma}}{\omega - \omega_{1,k\sigma}} + \frac{Z_{2,k\sigma}}{\omega - \omega_{2,k\sigma}}, \tag{3.91}$$

onde  $Z_{1,k\sigma}$  e  $Z_{2,k\sigma}$  são os pesos espectrais e  $\omega_{1,k\sigma}$  e  $\omega_{2,k\sigma}$  são as bandas de energia. Na aproximação de n-polos essas bandas contém um termo chamado de deslocamento de banda  $W_{k,\sigma}$ . Esse termo possui funções de correlação importantes, as quais são descartadas em outros métodos baseados em campo médio como é o caso da aproximação de Hubbard-I (HUBBARD, 1963).

Neste trabalho, as funções de correlação presentes em  $W_{\vec{k},\sigma}$  desempenham um papel importante porque permitem o surgimento de um *pseudogap* na densidade de estados. Mais adiante será feita uma discussão mais detalhada a respeito do deslocamento de banda.

## 4 RESULTADOS ANALÍTICOS

### 4.1 FUNÇÕES DE GREEN

Neste capítulo, serão calculadas as funções de Green para o estado normal, para um dado sistema de elétrons fortemente correlacionados, descrito pelo hamiltoniano do modelo de Hubbard de uma banda, dado por:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}. \quad (4.1)$$

No primeiro termo do hamiltoniano,  $t_{i,j}$  representa o salto de um elétron entre o sítio  $i$  e o sítio  $j$ , o operador de criação  $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$  cria uma partícula com spin  $\sigma$  no sítio  $i$  da rede e o operador destruição  $\hat{c}_{j,\sigma}$  destrói uma partícula com spin  $\sigma$  no sítio  $j$  da rede. No segundo termo,  $U$  representa a interação coulombiana entre dois elétrons de spins opostos localizados em um mesmo sítio  $i$  da rede.

O modelo será tratado pela técnica das funções de Green, juntamente com a aproximação de n-polos, discutidas no capítulo 3.1. A equação de movimento para o operador de destruição  $\hat{c}_{i,\sigma}$  é:

$$\left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] = \hat{c}_{i,\sigma} \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}} \hat{c}_{i,\sigma} \quad (4.2)$$

ou

$$\left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] = \sum_{l,j,\sigma'} t_{l,j} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{l,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'} + \frac{U}{2} \sum_{l,\sigma'} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{n}_{l,-\sigma'} \hat{n}_{l,\sigma'} - \hat{\mathcal{H}} \hat{c}_{i,\sigma}. \quad (4.3)$$

Usando as relações de anti-comutação:

$$\left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \right]_+ = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (4.4)$$

e

$$\left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'} \right] = \left[ \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \right]_+ = 0 \quad (4.5)$$

temos

$$\left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] = \sum_j t_{i,j} \hat{c}_{j,\sigma} + U \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}. \quad (4.6)$$

No resultado 4.6 nota-se a presença de um novo operador  $\hat{d}_{i,\sigma} = \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}$ . O passo seguinte é encontrar a equação de movimento para esse novo operador  $\hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}$ . Nesse caso, é necessário resolver a seguinte comutação:

$$\left[ \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] = \sum_{l,j,\sigma'} t_{l,j} \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{l,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'} + \frac{U}{2} \sum_{l,\sigma'} \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{n}_{l,\sigma'} \hat{n}_{l,-\sigma'} - \hat{\mathcal{H}} \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \quad (4.7)$$

o que resulta em:

$$\left[ \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] = U \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \sum_j t_{i,j} \left( \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} - \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \right). \quad (4.8)$$

Essa nova equação de movimento possui novos operadores mais complexos que os operadores  $\hat{c}_{i,\sigma}$  e  $\hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}$ . Se tentarmos obter equações de movimento para esses novos operadores, serão gerados novos operadores mais complexos ainda. A cada novo operador, uma nova equação de movimento de uma nova função de Green é gerada. Assim, teremos infinitas equações de movimento, para as funções de Green. Para resolver este problema, neste trabalho, usamos a aproximação de n-polos (ROTH, 1969) apresentada na seção 3.2, para o tratamento das equações de movimento.

Seguindo o procedimento original proposto por Roth (1969), consideramos somente os operadores  $\hat{c}_{i,\sigma}$  e  $\hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}$ . Como foi visto na seção 3.2, na equação 3.90, a matriz das funções de Green depende apenas da matriz energia e da matriz normalização, cujos elementos são definidos como:

$$E_{n,m} = \left\langle \left[ [A_n, \mathcal{H}], A_m^\dagger \right]_+ \right\rangle \quad (4.9)$$

e

$$N_{n,m} = \left\langle [A_n, A_m^\dagger]_+ \right\rangle. \quad (4.10)$$

Definimo a matriz  $E_{n,m}$  como:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} E_{1,1} & E_{1,2} \\ E_{2,1} & E_{2,2} \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

o elemento  $E_{1,1}$  é:

$$E_{1,1} = \left\langle \left[ \left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right], \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right]_+ \right\rangle, \quad (4.12)$$

onde  $\left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right]$  é dado na equação 4.6. Assim,

$$E_{1,1} = \left\langle \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} + U \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle \quad (4.13)$$

onde

$$\sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} = \sum_l t_{i,l} \delta_{j,l} - \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{l,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \quad (4.14)$$

e

$$U \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} = U \hat{n}_{j,-\sigma} \delta_{i,j}. \quad (4.15)$$

Com 4.14 e 4.15 em 4.13, temos:

$$E_{1,1} = t_{i,j} + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j}. \quad (4.16)$$

O elemento  $E_{1,2}$  é:

$$E_{1,2} = \left\langle \left[ \left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right], \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right]_+ \right\rangle. \quad (4.17)$$

Assim,

$$E_{1,2} = \left\langle \sum_l t_{i,l} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} + U \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle \quad (4.18)$$

onde,

$$\sum_l t_{i,l} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} = t_{i,j} \hat{n}_{j,-\sigma} - \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{l,\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \quad (4.19)$$

e

$$U \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} = U \hat{n}_{j,\sigma} \delta_{i,j} - U \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger. \quad (4.20)$$

Com 4.19 e 4.20 em 4.18, temos:

$$E_{1,2} = t_{i,j} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j}. \quad (4.21)$$



O elemento de matriz  $E_{2,1}$  é:

$$E_{2,1} = \left\langle \left[ \left[ \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right], \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \right]_+ \right\rangle. \quad (4.22)$$

Assim,

$$\begin{aligned} E_{2,1} = & \left\langle \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} + \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \right. \\ & \left. - \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + U \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \left[ \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde

$$\sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} = \sum_l t_{i,l} \hat{n}_{i,-\sigma} - \sum_l t_{i,l} \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger, \quad (4.24)$$

e

$$\sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} = \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \delta_{i,j} - \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \quad (4.25)$$

e

$$\sum_l t_{i,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} = - \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \delta_{i,j} - \sum_l t_{i,l} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger. \quad (4.26)$$

Com os resultados (4.24 - 4.26) em 4.23:

$$E_{2,1} = t_{i,j} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j}. \quad (4.27)$$

O último termo é definido como:

$$E_{2,2} = \left\langle \left[ \left[ \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right], \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right]_+ \right\rangle \quad (4.28)$$

Assim,

$$\begin{aligned} E_{2,2} = & \sum_l t_{j,l} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} + \sum_l t_{j,l} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \\ & - \sum_l t_{j,l} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + U \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \left[ \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \end{aligned} \quad (4.29)$$

ou

$$\begin{aligned}
E_{2,2} &= \sum_l t_{i,l} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} \\
&- \sum_l t_{i,l} \langle \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} - \sum_l t_{i,l} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle \delta_{j,l} \\
&+ U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \rangle \delta_{i,j} + t_{i,j} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

O elemento de matriz  $E_{2,2}$  pode ser reescrito como:

$$E_{2,2} = U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} + t_{i,j} \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2 + \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle (1 - \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle) W_{i,j,\sigma} \tag{4.31}$$

onde  $W_{i,j,\sigma}$  é o deslocamento de banda que será discutido na seção 4.2.

Definindo a matriz normalização como  $\mathbf{N}$ :

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_{11} & N_{12} \\ N_{21} & N_{22} \end{bmatrix}, \tag{4.32}$$

onde

$$\begin{aligned}
N_{1,1} &= \langle \left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right]_+ \rangle \\
&= \delta_{i,j}.
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Calculando  $N_{1,2}$ :

$$\begin{aligned}
N_{1,2} &= \langle \left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \right]_+ \rangle \\
&= \langle \left( \delta_{i,j} - \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right) \hat{n}_{j,-\sigma} + \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle \\
&= \langle \left( \hat{n}_{j,-\sigma} \delta_{i,j} \right) - \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle \\
&= \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j}
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Calculando  $N_{2,1}$ :

$$\begin{aligned}
N_{2,1} &= \langle \left[ \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right]_+ \rangle \\
&= \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \rangle \\
&= \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \left( \delta_{i,j} - \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \right) + \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \rangle \\
&= \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \delta_{i,j} - \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger + \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \rangle \\
&= \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j}
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Calculando  $N_{2,2}$ :

$$\begin{aligned}
N_{2,2} &= \langle [\hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma}]_+ \rangle \\
&= \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle \\
&= \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} + \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle \\
&= \langle \hat{n}_{i,-\sigma} (\delta_{i,j} - \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger) \hat{n}_{j,-\sigma} + \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle \\
&= \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} - \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} + \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle \\
&= \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j}
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Após calcular as matrizes energia  $\mathbf{E}$  e normalização  $\mathbf{N}$  temos que :

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} t_{i,j} + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} & t_{i,j} + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} \\ t_{i,j} + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} & U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{i,j} + t_{i,j} \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2 + \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle (1 - \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle) W_{i,j,\sigma} \end{bmatrix} \tag{4.37}$$

e

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \delta_{i,j} & \delta_{i,j} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \\ \delta_{i,j} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle & \delta_{i,j} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \end{bmatrix}. \tag{4.38}$$

Definindo a transformada de Fourier dos elementos de matriz  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{N}$  como

$$E_k = \frac{1}{L} \sum_{i,j} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} E_{i,j} \tag{4.39}$$

e

$$N_k = \frac{1}{L} \sum_{i,j} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} N_{i,j} \tag{4.40}$$

podemos encontrar as funções de Green no espaço recíproco. Em termos das matrizes energia e normalização, a matriz das funções de Green é:

$$\mathbf{G}(\omega) = \mathbf{N}[\omega \mathbf{N} - \mathbf{E}]^{-1} \mathbf{N}. \tag{4.41}$$

Para calcular  $\mathbf{G}$  é preciso primeiramente encontrar a matriz  $\mathbf{X}^{-1}$  onde,

$$\mathbf{X} = \omega \mathbf{N} - \mathbf{E} \tag{4.42}$$

com

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} \\ X_{2,1} & X_{2,2} \end{bmatrix}. \tag{4.43}$$

Calculando a matriz inversa de 4.43, temos:

$$\mathbf{X}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{X}|} = \begin{bmatrix} X_{2,2} & -X_{1,2} \\ -X_{2,1} & X_{1,1} \end{bmatrix} \quad (4.44)$$

onde  $|\mathbf{X}| = X_{1,1}X_{2,2} - X_{1,2}X_{2,1}$ , é o determinante da matriz  $\mathbf{X}$ . Definindo

$$\mathbf{Q} = \mathbf{N}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{N} \quad (4.45)$$

onde

$$\begin{aligned} Q_{1,1} &= X_{2,2} - (X_{2,1} + X_{1,2}) \langle n_{-\sigma} \rangle + X_{1,1} \langle n_{-\sigma}^2 \rangle \\ Q_{1,1} &= (X_{2,2} - X_{1,2}) \langle n_{-\sigma}^2 \rangle (X_{1,1} - X_{2,1}) \\ Q_{2,1} &= \langle n_{-\sigma}^2 \rangle (X_{2,2} - X_{2,1}) \langle n_{-\sigma} \rangle + (X_{1,1} - X_{1,2}) \langle n_{-\sigma}^2 \rangle \\ Q_{2,2} &= (X_{2,2} - X_{2,1}) \langle n_{-\sigma}^2 \rangle + X_{1,1}X_{1,2} \langle n_{-\sigma}^2 \rangle \end{aligned} \quad (4.46)$$

e

$$\begin{aligned} X_{11} &= \omega N_{11} - E_{11} \\ X_{11} &= \omega N_{12} - E_{12} \\ X_{21} &= \omega N_{21} - E_{21} \\ X_{22} &= \omega N_{22} - E_{22}, \end{aligned} \quad (4.47)$$

a matriz  $\mathbf{G}$  será:

$$\mathbf{G} = \frac{\mathbf{Q}}{|\mathbf{X}|}. \quad (4.48)$$

O determinante  $|\mathbf{X}|$  é um polinômio de grau dois

$$|X| = aw^2 + bw + c, \quad (4.49)$$

onde,

$$a = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \langle n_{-\sigma} \rangle, \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} b &= -U \langle n_{-\sigma} \rangle - \varepsilon_{\vec{k}} \langle n_{-\sigma} \rangle^2 - (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \langle n_{-\sigma} \rangle W_{\vec{k}\sigma} \\ &\quad - (\varepsilon_{\vec{k}} + U \langle n_{-\sigma} \rangle) \langle n_{-\sigma} \rangle - 2 (\varepsilon_{\vec{k}} + U) \langle n_{-\sigma} \rangle^2 \end{aligned} \quad (4.51)$$

e

$$c = \varepsilon_{\vec{k}} - U \langle n_{-\sigma} \rangle U \langle n_{-\sigma} \rangle + \varepsilon_{\vec{k}} \langle n_{-\sigma} \rangle^2 + (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \langle n_{-\sigma} \rangle W_{\vec{k},\sigma}^- . \quad (4.52)$$

As bandas de energia devem satisfazer  $|\mathbf{X}|=0$ . Assim, as raízes deste polinômio são:

$$\omega_{1,k} = \frac{U + \varepsilon_k + W_{k,\sigma}}{2} - \frac{X_{k,\sigma}}{2} \quad (4.53)$$

e

$$\omega_{2,k} = \frac{U + \varepsilon_k + W_{k,\sigma}}{2} + \frac{X_{k,\sigma}}{2} \quad (4.54)$$

onde,

$$X_{k,\sigma} = \sqrt{(U + \varepsilon_k + W_{k,\sigma})^2 + 4 \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle (\varepsilon_k - W_{k,\sigma})} . \quad (4.55)$$

O deslocamento de banda  $W_{\vec{k},\sigma}^-$  será apresentado na próxima seção.

O elemento (1,1) da matriz das funções de Green é um dos mais importantes porque permite calcular o potencial químico e o número de ocupação. Essa função de Green é dada por

$$G(k, \sigma, \omega) = \frac{Z_{1,k}}{\omega - \omega_{1,k}} + \frac{Z_{2,k}}{\omega - \omega_{2,k}} \quad (4.56)$$

onde

$$Z_{1,k} = \frac{1}{2} + \frac{U(1 - 2\langle n \rangle) - \varepsilon_k + W_k}{2X_{k,\sigma}} \quad (4.57)$$

e

$$Z_{2,k} = 1 - Z_{1,k} \quad (4.58)$$

são os pesos espectrais.

## 4.2 DESLOCAMENTO DE BANDA

Seguindo o formalismo de Edwards (BEENEN; EDWARDS, 1995), o termo de deslocamento de banda é dado por:

$$n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})W_{\vec{k},\sigma} = S + \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} t_{i,j} \{S_{ij,\sigma}^{(1)} + S_{ij,\sigma}^{(2)} + S_{ij,\sigma}^{(3)}\} \quad (4.59)$$

onde

$$S = - \sum_{j \neq i} t_{i,j} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} (1 - \hat{n}_{i,-\sigma} - \hat{n}_{j,-\sigma}) \rangle, \quad (4.60)$$

$$S_{i,j,\sigma}^{(1)} = \frac{1}{4} \sum_{j \neq i} t_{i,j} (\langle \hat{N}_j \hat{N}_i \rangle - \langle \hat{N}_j \rangle \langle \hat{N}_i \rangle), \quad (4.61)$$

$$S_{i,j,\sigma}^{(2)} = \sum_{j \neq i} t_{i,j} \langle \vec{\hat{S}}_j \cdot \vec{\hat{S}}_i \rangle, \quad (4.62)$$

e

$$S_{i,j,\sigma}^{(3)} = - \sum_{j \neq i} t_{i,j} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle. \quad (4.63)$$

$\hat{N}_i = \hat{n}_{i,\sigma} + \hat{n}_{i,-\sigma}$  é o operador número total de ocupação por sítio. O termo  $S^{(2)}$  está relacionado à função de correlação spin-spin  $\langle \vec{\hat{S}}_j \cdot \vec{\hat{S}}_i \rangle$ , a qual está associada às correlações antiferromagnéticas (BEENEN; EDWARDS, 1995).

As funções de correlação presentes em  $S^{(1)}$ ,  $S^{(2)}$  e  $S^{(3)}$  são calculadas seguindo o procedimento proposto por Roth (ROTH, 1969) onde utiliza-se um conjunto de operadores auxiliares os quais permitem obter as funções de Green necessários para o cálculo de cada uma das funções de correlação presentes em  $S^{(1)}$ ,  $S^{(2)}$  e  $S^{(3)}$ .

No método original proposto por Roth (ROTH, 1969), ela desconsidera a dependência em  $j$  do produto de  $t_{i,j}$  com as respectivas funções de correlação, como consequência, a dependência de  $W_{\vec{k},\sigma}$  no vetor de onda  $\vec{k}$ , é bastante simplificada.

Existem casos onde essa dependência em  $\vec{k}$  é bastante relevante como no caso do *pseudogap* na densidade de estados produzido por correlações antiferromagnéticas (AVELLA; MANCINI, 2007; CALEGARI; MAGALHÃES, 2011). Para tratar de uma forma mais adequada a dependência de  $W_{\vec{k},\sigma}$  em  $\vec{k}$ , vamos considerar a transformada inversa de Fourier dos termos  $S^{(n)}$ .

$$S_{i,j,\sigma}^{(n)} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} S_{\vec{q},\sigma}^{(n)}. \quad (4.64)$$

Com 4.64 em 4.59, temos:

$$n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})W_{\vec{k},\sigma} = S + \sum_{\vec{q}} \frac{1}{L} \sum_{j \neq i} e^{i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{i,j} \{S_{\vec{q},\sigma}^{(1)} + S_{\vec{q},\sigma}^{(2)} + S_{\vec{q},\sigma}^{(3)}\}. \quad (4.65)$$

Definindo a relação de dispersão:

$$\varepsilon(\vec{k} - \vec{q}) = \frac{1}{L} \sum_{j \neq i} e^{i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \quad (4.66)$$

e

$$F_{\vec{q}, \sigma} = S_{\vec{q}, \sigma}^{(1)} + S_{\vec{q}, \sigma}^{(2)} + S_{\vec{q}, \sigma}^{(3)}, \quad (4.67)$$

obtém-se uma forma compacta para o deslocamento de banda:

$$n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})W_{\vec{k}, -\sigma} = S + \sum_{\vec{q}} \varepsilon(\vec{k} - \vec{q})F_{\vec{q}, \sigma}. \quad (4.68)$$

Agora, a função de correlação  $F_{\vec{q}, \sigma}$  tem uma estrutura no espaço dos  $\vec{q}$ 's, ou seja,  $F_{\vec{q}, \sigma}$  tem um peso diferente para cada vetor  $\vec{q}$ . Logo,  $F_{\vec{q}, \sigma}$  modifica a banda podendo dar origem a um *pseudogap* que pode ser observado nas bandas, na densidade de estados ou na superfície de Fermi (AVELLA; MANCINI, 2007; CALEGARI; MAGALHÃES, 2011). O termo de deslocamento de banda  $W_{\vec{k}, \sigma}$ , está relacionado com as correlação de spin-spin, cujo o efeito é o que se pretende investigar.

### 4.3 CÁLCULO DO GAP SUPERCONDUTOR

O *gap* supercondutor é definido como a energia necessária para criar e destruir pares de elétrons supercondutores. Nesta seção utilizaremos a técnica das funções de Green para obter a equação do *gap* supercondutor para o modelo a seguir (TINKHAM, 1996):

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k, \sigma} \varepsilon_k \hat{c}_{k, \sigma}^\dagger \hat{c}_{k, \sigma} + \sum_{k, k'} \hat{V}_{k, k'} \hat{c}_{k, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{-k', \downarrow} \hat{c}_{k', \uparrow}. \quad (4.69)$$

O primeiro termo do modelo está associado à energia cinética dos elétrons enquanto que o segundo é o termo de pareamento que permite a formação de pares de elétrons mediados pelo potencial atrativo  $V_{k, k'}$ . Seguindo o teoria BCS, vamos utilizar uma aproximação de campo médio para tratar o termo de pareamento do modelo. Nesta aproximação temos que o produto de dois operadores  $a$  e  $b$  pode ser escrito como:

$$ab \cong \langle a \rangle b + a \langle b \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle. \quad (4.70)$$

O erro introduzido nessa aproximação é da ordem do produto dos desvios dos operadores e suas médias, ou seja, despreza-se o termo

$$(a - \langle a \rangle) (b - \langle b \rangle). \quad (4.71)$$

No caso do hamiltoniano 4.69, isso significa assumir que as flutuações do parâmetro de ordem em torno do seu valor médio são pequenas, portanto o produto definido em 4.71, pode ser desprezado (CHARLES et al., 2007).

Definindo  $b$  e  $a$  como:

$$b = \hat{c}_{-k,\downarrow} \hat{c}_{k,\uparrow} \quad (4.72)$$

e

$$a = \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger, \quad (4.73)$$

o termo de interação do modelo 4.69 pode ser reescrito como:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{k,k'} V_{k,k'} \left( \langle \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow} \rangle \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow} \langle \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger \rangle - \langle \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow} \rangle \langle \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger \rangle \right). \quad (4.74)$$

O último termo do modelo acima é uma constante, portanto pode ser desconsiderado, no cálculo do *gap* supercondutor.

Definindo o *gap* como:

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \langle \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow} \rangle \quad (4.75)$$

e

$$\Delta_{k'}^* = \sum_k V_{k,k'} \langle \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger \rangle, \quad (4.76)$$

é possível reescrever o hamiltoniano 4.69 como

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma} + \sum_{k'} \Delta_{k'}^* \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow} + \sum_k \Delta_k \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger. \quad (4.77)$$

A próxima etapa é encontrar as equações de movimento das funções de Green para o hamiltoniano acima. Para alcançar esse objetivo, seguiremos o procedimento descrito no capítulo 9 do livro Mahan (1990). A equação de movimento de uma função de Green de dois operadores na representação de Heisenberg depende da equação de movimento do



operador  $A(t)$  definida como (MAHAN, 1990):

$$\frac{d}{dt}A(t) = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}(t)]. \quad (4.78)$$

Para o operador de destruição  $\hat{c}_{k,\sigma}$ ,

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\sigma}] = \hat{\mathcal{H}}\hat{c}_{k,\sigma} - \hat{c}_{k,\sigma}\hat{\mathcal{H}} \quad (4.79)$$

onde

$$\hat{c}_{k,\sigma}\hat{\mathcal{H}} = \sum_{l,\sigma'} \varepsilon_l \hat{c}_{k,\sigma} \hat{c}_{l,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma'} + \sum_{l'} \Delta_{l'}^* \hat{c}_{k,\sigma} \hat{c}_{-l',\downarrow} \hat{c}_{l',\uparrow} + \sum_l \Delta_l \hat{c}_{k,\sigma} \hat{c}_{l,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-l,\downarrow}^\dagger. \quad (4.80)$$

Usando as relações de comutação

$$[\hat{c}_{k,\sigma}, \hat{c}_{k',\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (4.81)$$

e

$$[\hat{c}_{k,\sigma}, \hat{c}_{k',\sigma'}]_+ = [\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{k',\sigma'}^\dagger] = 0 \quad (4.82)$$

em 4.80 e substituindo o resultado em 4.79, temos

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\sigma}] = -\varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma} - \Delta_k \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger \delta_{\sigma,\uparrow} + \Delta_{-k} \hat{c}_{-k,\uparrow}^\dagger \delta_{\sigma,\downarrow}. \quad (4.83)$$

Escrevendo 4.83 segundo a orientação de spin ( $\sigma = \uparrow$ ) e ( $\sigma = \downarrow$ ):

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\uparrow}] = -\varepsilon_k \hat{c}_{k,\uparrow} - \Delta_k \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger \quad (4.84)$$

e

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\downarrow}] = -\varepsilon_k \hat{c}_{k,\downarrow} + \Delta_{-k} \hat{c}_{-k,\uparrow}^\dagger. \quad (4.85)$$

Juntando as duas equações 4.84 e 4.85 em uma única equação, temos:

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger] = -\varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma} - \sigma \Delta_k \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger \quad (4.86)$$

onde estamos assumindo que  $|\Delta_{-k}| = |\Delta_k|$ .

Repetindo o mesmo procedimento para o operador de criação  $\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger$  temos:

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger] = \hat{\mathcal{H}}\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger - \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger\hat{\mathcal{H}}, \quad (4.87)$$

onde

$$\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{\mathcal{H}} = \sum_{l,\sigma'} \varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma'} + \sum_{l'} \Delta_{l'}^* \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{-l',\downarrow} \hat{c}_{l',\uparrow} + \sum_l \Delta_l \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{c}_{-l,\downarrow}. \quad (4.88)$$

Usando novamente as relações de comutação 4.81 e 4.82 temos:

$$\left[ \hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right] = \varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger - \Delta_{-k}^* \hat{c}_{-k,\uparrow} \delta_{\sigma,\downarrow} + \Delta_k^* \hat{c}_{-k,\downarrow} \delta_{\sigma,\uparrow}. \quad (4.89)$$

Escrevendo 4.89 segundo a orientação de spin ( $\sigma = \uparrow$ ) e ( $\sigma = \downarrow$ ):

$$\left[ \hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger \right] = \varepsilon_k \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger + \Delta_k^* \hat{c}_{-k,\downarrow} \quad (4.90)$$

e

$$\left[ \hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\downarrow}^\dagger \right] = \varepsilon_k \hat{c}_{k,\downarrow}^\dagger - \Delta_{-k}^* \hat{c}_{-k,\uparrow}. \quad (4.91)$$

Rescrevendo 4.90 e 4.91 na forma compacta :

$$\left[ \hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right] = \varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger + \sigma \Delta_k^* \hat{c}_{-k,-\sigma}. \quad (4.92)$$

Agora escreve-se a equação de movimento das funções de Green para cada um dos operadores (MAHAN, 1990). Para o operador de destruição:

$$\frac{d}{dt} \left\langle \left\langle \hat{c}_{k,\sigma}; \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle = -\delta(t-t') \left\langle \left[ \hat{c}_{k,\sigma}, \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right]_+ \right\rangle - \left\langle T \left[ \hat{c}_{k,\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right] \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right\rangle. \quad (4.93)$$

Substituindo o resultado 4.86 em 4.93, temos:

$$\frac{d}{dt} \left\langle \left\langle \hat{c}_{k,\sigma}; \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle + \varepsilon_k \left\langle \left\langle \hat{c}_{k,\sigma}; \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle + \sigma \Delta_k \left\langle \left\langle \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger; \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle = -\delta(t-t'). \quad (4.94)$$

Realizando o mesmo procedimento para o operador de criação:

$$\frac{d}{dt} \left\langle \left\langle \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger; \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle = \delta(t-t') \left\langle \left[ \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger \right] \right\rangle + \left\langle T \left[ \hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right] \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger \right\rangle. \quad (4.95)$$

Substituindo 4.92 em 4.95, temos:

$$\frac{d}{dt} \left\langle \left\langle \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger; \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle = \varepsilon_k \left\langle \left\langle \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger; \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle + \sigma \Delta_k^* \left\langle \left\langle \hat{c}_{-k,-\sigma}; \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle. \quad (4.96)$$

O próximo passo consiste em fazer a transformada de Fourier para o espaço das

frequências. Para isso usaremos as seguintes relações (ASHOK, 2006):

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_\beta(i\omega_n) \quad (4.97)$$

e

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G(\tau) \quad (4.98)$$

onde:

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.99)$$

são as frequências de Matsubara para férmions. Definindo a transformada de Fourier de uma função como  $\mathcal{F}\{f(t)\}$ , então a transformada de Fourier da equação de movimento 4.94 fica

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d}{dt} G(k, \sigma, \tau) \right\} + \varepsilon_k \mathcal{F} \{G(k, \sigma, \tau)\} + \sigma \Delta_k \mathcal{F} \{F^\dagger(k, \sigma, \tau)\} = -\mathcal{F} \left\{ \delta(t - t') \right\} \quad (4.100)$$

onde definiu-se que  $\tau = t - t'$ , e

$$\begin{aligned} G(k, \sigma, \tau) &= \left\langle \left\langle \hat{c}_{k,\sigma}; \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle \\ F^\dagger(k, \sigma, \tau) &= \left\langle \left\langle \hat{c}_{-k,-\sigma}^\dagger; \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.101)$$

Considerando a definição 4.98, temos

$$G(k, \sigma, i\omega_n) = \mathcal{F} \{G(k, \sigma, \tau)\} \quad (4.102)$$

e

$$F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = \mathcal{F} \{F^\dagger(k, \sigma, \tau)\} \quad (4.103)$$

então,

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d}{d\tau} G(k, \sigma, \tau) \right\} + \varepsilon_k G(k, \sigma, i\omega_n) + \sigma \Delta_k F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = -1. \quad (4.104)$$

A transformada de Fourier da derivada de  $G$  pode ser obtida seguindo o procedimento descrito nas equações (3.23-3.26), no capítulo 3.1.

Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left\{ \frac{d}{d\tau} G(k, \sigma, \tau) \right\} &= \int_0^\beta \frac{d}{d\tau} G(k, \sigma, \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \\ &= [G(k, \sigma, \tau) e^{i\omega_n \tau}]_0^\beta - \int_0^\beta i\omega_n G(k, \sigma, \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau. \end{aligned} \quad (4.105)$$

Se  $\tau = 0$ , temos  $e^{i\omega_n \tau} = 1$ , e se  $\tau = \beta$ , temos:

$$e^{i\omega_n \tau} = e^{\frac{i(2n+1)\pi\beta}{\beta}}, \quad (4.106)$$

onde considerou-se a definição de  $\omega_n$  da equação 4.99. Reescrevendo a exponencial como:

$$e^{i(2n+1)\pi} = \cos[(2n+1)\pi] + i \operatorname{sen}[(2n+1)\pi], \quad (4.107)$$

onde  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , temos que para qualquer valor de  $n$ ,  $\operatorname{sen}[(2n+1)\pi] = 0$ . Por outro lado, para qualquer valor de  $n$ ,  $\cos[(2n+1)\pi] = -1$ . Além disso,  $G(k, \sigma, \tau + \beta) = -G(k, \sigma, \tau)$  (IMADA; FUJIMORI; TOKURA, 1998), dessa forma,

$$[G(k, \sigma, \tau) e^{i\omega_n \tau}]_0^\beta = 0. \quad (4.108)$$

Logo,

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d}{d\tau} G(k, \sigma, \tau) \right\} = -i\omega_n \int_0^\beta G(k, \sigma, \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \quad (4.109)$$

ou

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d}{d\tau} G(k, \sigma, \tau) \right\} = -i\omega_n G(k, \sigma, i\omega_n). \quad (4.110)$$

Com o resultado 4.110 em 4.104, temos:

$$-i\omega_n G(k, \sigma, i\omega_n) + \varepsilon_k G(k, \sigma, i\omega_n) + \sigma \Delta_k F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = -1 \quad (4.111)$$

ou

$$(i\omega_n - \varepsilon_k) G(k, \sigma, i\omega_n) - \sigma \Delta_k F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = 1. \quad (4.112)$$

Seguindo o mesmo procedimento para o resultado 4.96 temos:

$$-i\omega_n F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) - \varepsilon_k F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) - \sigma \Delta^* G(k, \sigma, i\omega_n) = 0 \quad (4.113)$$

ou

$$(i\omega_n + \varepsilon_k)F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) + \sigma\Delta_k^*G(k, \sigma, i\omega_n) = 0. \quad (4.114)$$

Resolvendo o sistema formado pelas equações 4.112 e 4.114, temos

$$G(k, \sigma, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + \varepsilon_k}{(i\omega_n - \varepsilon_k)(i\omega_n + \varepsilon_k) + |\Delta_k|^2} \quad (4.115)$$

e

$$F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = \frac{-\sigma\Delta_k}{(i\omega_n - \varepsilon_k)(i\omega_n + \varepsilon_k) + |\Delta_k|^2}. \quad (4.116)$$

Para  $\Delta_k = 0$ , temos o estado normal onde

$$G_0(k, \sigma, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k} \quad (4.117)$$

e

$$F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = 0 \quad (4.118)$$

assim,

$$i\omega_n - \varepsilon_k = \frac{1}{G_0(k, \sigma, i\omega_n)} = G_0^{-1}(k, \sigma, i\omega_n). \quad (4.119)$$

Nesse caso, podemos reescrever as equações 4.112 e 4.114 como

$$\begin{aligned} G_0^{-1}(k, \sigma, i\omega_n)G(k, \sigma, i\omega_n) - \sigma\Delta_k F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) &= 1 \\ G_0^{-1}(k, \sigma, i\omega_n)F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) + \sigma\Delta_k^*G(k, \sigma, i\omega_n) &= 0. \end{aligned} \quad (4.120)$$

Assumindo que o formalismo BCS não é afetado quando as correlações são levadas em conta (RODRIGUEZ-NUNEZ; ALEX, 2001), podemos fazer a seguinte substituição

$$G_0(k, \sigma, i\omega_n) \rightarrow G_N(k, \sigma, i\omega_n). \quad (4.121)$$

Através da relação 4.121 é possível introduzir as correlações no sistema, onde  $G_N$  é a função de Green correlacionada ( $U \neq 0$ ) do estado normal. Neste trabalho, a função de Green  $G_N$  é calculada usando a aproximação de n-polos (ROTH, 1969).

De forma similar, os autores (IKEDA; LARSEN; MATTUCK, 1972; RODRIGUEZ-NUNEZ et al., 2001; SINGH, 2000; ROMANO; NOCE; MICNAS, 1997) estudam a presença das correlações em sistemas diversos usando outras aproximações para obter as funções de Green correlacionadas.

Para resolver o conjunto de equações 4.120 vamos considerar o produto de matrizes

$$\mathbf{AB} = \mathbf{C}, \quad (4.122)$$

ou seja,

$$\begin{bmatrix} G_N^{-1} & -\sigma\Delta_k \\ \sigma\Delta_k^* & G_N^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G \\ F^\dagger \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.123)$$

A matriz,

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} G \\ F^\dagger \end{bmatrix} \quad (4.124)$$

pode ser obtida como:

$$\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}. \quad (4.125)$$

Definindo

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} G_N^{-1} & -\sigma\Delta_k \\ \sigma\Delta_k^* & G_N^{-1} \end{bmatrix}, \quad (4.126)$$

sua inversa será:

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{G_N^{-1}}{\det \mathbf{A}} & \frac{\sigma\Delta_k^*}{\det \mathbf{A}} \\ \frac{-\sigma\Delta_k}{\det \mathbf{A}} & \frac{G_N^{-1}}{\det \mathbf{A}} \end{bmatrix}, \quad (4.127)$$

onde o determinante da matriz  $\mathbf{A}$  é :

$$\det \mathbf{A} = (G_N^{-1})^2 + |\Delta_k|^2. \quad (4.128)$$

Assim, a matriz  $\mathbf{B}$  será:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{G_N^{-1}}{\det \mathbf{A}} \\ \frac{-\sigma\Delta_k}{\det \mathbf{A}} \end{bmatrix} \quad (4.129)$$

ou seja:

$$\begin{bmatrix} G \\ F^\dagger \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{G_N^{-1}}{\det \mathbf{A}} \\ \frac{-\sigma\Delta_k}{\det \mathbf{A}} \end{bmatrix}, \quad (4.130)$$

onde

$$G(k, \sigma, i\omega_n) = \frac{G_N^{-1}(k, \sigma, i\omega_n)}{|G_N(k, \sigma, i\omega_n)|^{-2} + |\Delta_k|^2} \quad (4.131)$$

e

$$F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = \frac{-\sigma \Delta_k^*}{|G_N(k, \sigma, i\omega_n)|^{-2} + |\Delta_k|^2}. \quad (4.132)$$

Para obter uma equação para o *gap* supercondutor, consideraremos a definição 4.75

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \langle \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow} \rangle$$

onde podemos relacionar  $\langle \hat{c}_{-k',\downarrow} \hat{c}_{k',\uparrow} \rangle$  com a função de Green  $F^\dagger$ . Considerando a transformada de Fourier da equação 4.97, em  $\tau = 0$ , temos:

$$F(k, \sigma, 0) = \frac{1}{\beta} \sum_n F(k, \sigma, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_n F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n) = F^\dagger(k, \sigma, 0) \quad (4.133)$$

assim,

$$\langle \hat{c}_{-k,\downarrow} \hat{c}_{k,\uparrow} \rangle = F^\dagger(k, \sigma, 0), \quad (4.134)$$

portanto,

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} F^\dagger(k, \sigma, 0) \quad (4.135)$$

ou, com a transformada de Fourier

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{1}{\beta} \sum_n F^\dagger(k, \sigma, i\omega_n). \quad (4.136)$$

Substituindo  $F^\dagger$  da equação 4.132 em 4.136, temos

$$\Delta_k = -\frac{1}{\beta} \sum_{k'n} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{|G_N(k, \sigma, i\omega_n)|^{-2} + |\Delta_{k'}|^2}. \quad (4.137)$$

Para encontramos a equação para o *gap* é necessário resolver o somatório que envolve a função  $G_N$  e para isso, será usado o formalismo de Matsubara. Por isso, reescreve-se a equação para *gap* como

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \varphi(\vec{k}) \left( \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{|G_N(k, \sigma, i\omega_n)|^{-2} + |\Delta_{k'}|^2} \right), \quad (4.138)$$

onde

$$\varphi(\vec{k}) = \begin{cases} 1 & \rightarrow \text{simetria } s \\ \cos(k_x) - \cos(k_y) & \rightarrow \text{simetria } d_{x^2-y^2} \\ \cos(k_x) + \cos(k_y) & \rightarrow \text{simetria } s\text{-estendida.} \end{cases}$$

O próximo passo consiste em fazer a soma sobre as frequências de Matsubara, do termo que aparece entre parenteses, na equação acima 4.138. Para fazer a soma vamos considerar a função de Green do estado normal dada pela equação 4.56.

Fazendo o mínimo múltiplo comum:

$$G_N(\vec{k}, \sigma, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + Z_{1,k}B + Z_{2,k}A}{(i\omega_n + A)(i\omega_n + B)} \quad (4.139)$$

e

$$\begin{aligned} G_N(\vec{k}, \sigma, -i\omega_n) &= \frac{-i\omega_n + Z_{1,k}B + Z_{2,k}A}{(i\omega_n + A)(i\omega_n + B)} \\ &= \frac{-i\omega_n + Z_{1,k}B + Z_{2,k}A}{(-i\omega_n + A)(-i\omega_n + B)} \end{aligned} \quad (4.140)$$

onde

$$A = -\omega_{1,\vec{k}} \quad (4.141)$$

e

$$B = -\omega_{2,\vec{k}}, \quad (4.142)$$

com  $\omega_{1,\vec{k}}$  e  $\omega_{2,\vec{k}}$  definidos nas equações 4.53 e 4.54, respectivamente.

Assim

$$\begin{aligned} |G_N(k, i\omega_n)|^2 &= G_N(k, i\omega_n)G_N(k, -i\omega_n) \\ &= \left( \frac{i\omega_n + Z_{1,k}B + Z_{2,k}A}{(i\omega_n + A)(i\omega_n + B)} \right) \left( \frac{-i\omega_n + Z_{1,k}B + Z_{2,k}A}{(-i\omega_n + A)(-i\omega_n + B)} \right) \\ &= \frac{\omega_n^2 + (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2}{(\omega_n^2 + A^2)(\omega_n^2 + B^2)}. \end{aligned} \quad (4.143)$$

Então,

$$|G_N|^{-2} + |\Delta_k|^2 = \frac{(\omega_n^2 + A^2)(\omega_n^2 + B^2) + |\Delta_k|^2[\omega_n^2 + (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2]}{\omega_n^2 + (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2} \quad (4.144)$$

e

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{|G_N|^{-2} + |\Delta_k|^2} = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{\omega_n^2 + (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2}{(\omega_n^2 + A^2)(\omega_n^2 + B^2) + [\omega_n^2 + (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2]|\Delta_k|^2}. \quad (4.145)$$



A soma sobre as frequências de Matsubara pode ser feita transformando a soma sobre frequências de Matsubara em integrais de contorno no plano complexo (ASHOK, 2006). Assim, usaremos a relação:

$$T \sum_n f(k_0 = i\omega_n) = \frac{1}{4i\pi} \oint_c dk_0 f(k_0) \tanh\left(\frac{\beta k_0}{2}\right) \quad (4.146)$$

onde a função  $\frac{\beta}{2} \tanh\left(\frac{\beta k_0}{2}\right)$  possui polos situados sobre as frequências de Matsubara fermiônicas e com resíduos iguais a 1. Usando a fórmula 4.146 para fazer a soma em 4.145, temos

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{|G_N|^{-2} + |\Delta_k|^2} = \frac{1}{4i\pi} \oint_c dk_0 \frac{k_0^2 - (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2}{D(k_0)} \tanh\left(\frac{\beta k_0}{2}\right) \quad (4.147)$$

ou

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{|G_N|^{-2} + |\Delta_k|^2} = \frac{1}{4i\pi} \oint_c dk_0 \frac{k_0^2 - (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2}{(k_0 - k_0^+)(k_0 + k_0^+)(k_0 - k_0^-)(k_0 + k_0^-)} \tanh\left(\frac{\beta k_0}{2}\right) \quad (4.148)$$

onde

$$D(k_0) = (k_0 - k_0^+)(k_0 + k_0^+)(k_0 - k_0^-)(k_0 + k_0^-) \quad (4.149)$$

é o denominador da equação 4.145 e  $k_0^\pm$  são as raízes do polinômio. Separando em frações parciais temos

$$= \frac{1}{4i\pi} \oint_c dk_0 \left\{ \alpha_{1,k} \left[ \frac{1}{k_0 - k_0^+} - \frac{1}{k_0 + k_0^+} \right] + \alpha_{2,k} \left[ \frac{-1}{k_0 - k_0^-} + \frac{1}{k_0 + k_0^-} \right] \right\} \tanh\left(\frac{\beta k_0}{2}\right) \quad (4.150)$$

onde

$$\alpha_{1,k} = \frac{(k_0^+)^2 - (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2}{2k_0^+((k_0^+)^2 - (k_0^-)^2)} \quad (4.151)$$

e

$$\alpha_{2,k} = \frac{(k_0^-)^2 - (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2}{2k_0^-((k_0^+)^2 - (k_0^-)^2)}. \quad (4.152)$$

Portanto, devemos calcular integrais do tipo (SPIEGEL, 1969)

$$\frac{1}{2i\pi} \oint_c f(z) dz = 2\pi b \quad (4.153)$$

onde, o resíduo  $b$  pode ser calculado pela fórmula

$$b = \lim_{z \rightarrow a} (z - a) f(z). \quad (4.154)$$

Assim,

$$\lim_{k_0 \rightarrow k_0^+} (k_0 - k_0^+) \frac{\tanh\left(\frac{\beta k_0}{2}\right)}{k_0 - k_0^+} = \tanh\left(\frac{\beta k_0^+}{2}\right). \quad (4.155)$$

Realizando o mesmo procedimento para os demais termos,

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{|G_N|^{-2} + |\Delta_k|^2} = \frac{1}{2} \left[ \tanh\left(\frac{\beta k_0^+}{2}\right) \alpha_{1,k} - \tanh\left(\frac{\beta k_0^-}{2}\right) \alpha_{2,k} \right]. \quad (4.156)$$

Substituindo o resultado 4.156 em 4.138

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \Delta_{k'} \varphi(\vec{k}') \left[ \tanh\left(\frac{\beta k_0^+}{2}\right) \alpha_{1,k'} - \tanh\left(\frac{\beta k_0^-}{2}\right) \alpha_{2,k'} \right]. \quad (4.157)$$

Seguindo o formalismo BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957), vamos considerar:

$$V_{k,k'} = -V, \quad (4.158)$$

assim

$$\Delta_k = \Delta_{k'} = \Delta, \quad (4.159)$$

logo, multiplicando ambos os lados por  $\Delta$ ,

$$\Delta = \frac{\Delta V}{2 N} \sum_k \varphi(\vec{k}) \left[ \tanh\left(\frac{\beta k_0^+}{2}\right) \alpha_{1,k} - \tanh\left(\frac{\beta k_0^-}{2}\right) \alpha_{2,k} \right]. \quad (4.160)$$

A equação acima deve ser resolvida numericamente para encontrar o  $\Delta$  que a satisfaça.

### 4.3.1 Equação para o $T_c$

A partir da equação do *gap*, podemos encontrar uma equação para a temperatura de transição supercondutora, assumindo que a transição é de segunda ordem. Nesse caso, próximo a  $T_c$ , o *gap*  $\Delta$  tende a zero, assim podemos expandir a equação do *gap* entorno

de  $\Delta = 0$  e vamos obter,

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2N} \sum_k \varphi(\vec{k}) \psi(\vec{k}) \left[ b_{1,k} \tanh\left(\frac{\beta \xi_k^+}{2}\right) - b_{2,k} \tanh\left(\frac{\beta \xi_k^-}{2}\right) \right] \quad (4.161)$$

com

$$\psi(\vec{k}) = \begin{cases} 1 & \text{se } |\xi_k^\pm| < \omega_D \\ 0 & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

onde  $\omega_D$  é a frequência de Debye.

Temos também

$$\xi_k^\pm = \pm \sqrt{\frac{A^2 + B^2 \pm \sqrt{(A^2 + B^2)^2 - 4A^2B^2}}{2}}, \quad (4.162)$$

$$b_{1,k} = \frac{(\xi_k^+)^2 - (Z_{1,k}B - Z_{2,k}A)^2}{2\xi_k^+[(\xi_k^+)^2 - (\xi_k^-)^2]} \quad (4.163)$$

e

$$b_{2,k} = \frac{(\xi_k^-)^2 - (Z_{1,k}B + Z_{2,k}A)^2}{2\xi_k^-[(\xi_k^+)^2 - (\xi_k^-)^2]} \quad (4.164)$$

onde  $A$  e  $B$  estão definidos em 4.141 e 4.142, respectivamente. A equação 4.161 deve ser resolvida em conjunto com a equação

$$\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) [G(k, \sigma, \omega + i\varepsilon) - G(k, \sigma, \omega - i\varepsilon)] d\omega \quad (4.165)$$

a qual determina o potencial químico  $\mu$  para uma dada ocupação e temperatura. Assim, com o resultado da auto-consistência das equações 4.161 e 4.165, teremos a temperatura  $T_c$  e o potencial químico  $\mu$ .

## 5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Os resultados numéricos foram obtidos usando um código em linguagem Fortran 95, desenvolvido e atualizado durante o período do doutorado. O código utilizado fornece resultados para a temperatura crítica  $T_c$ , o potencial químico, a estrutura de bandas e a densidade de estados. Alguns parâmetros do modelo foram mantidos fixos para a obtenção de todos os resultados que serão apresentados neste capítulo. Esses parâmetros são a frequência de Debye ( $\omega_D = 0,5$ ), o potencial atrativo ( $V = -0,5\text{eV}$ ) e a amplitude do salto para os primeiros vizinhos ( $t_1 = 0,2\text{eV}$ ). Os valores de  $t_1$  e  $t_2$  utilizados, são próximos de valores considerados para supercondutores cupratos.

Levando em conta que o termo  $t_1$  representa a amplitude do salto para os primeiros vizinhos do sítio  $i$  da rede e  $t_2$  a amplitude do salto para os segundos vizinhos do sítio  $i$  da rede, a relação de dispersão é dada por:

$$\varepsilon_k = 2t_1 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a), \quad (5.1)$$

onde o parâmetro de rede  $a$  foi considerado igual a 1. Consideramos duas versões para a aproximação de n-polos (ROTH, 1969), a primeira é a versão original proposta por Roth a qual simplifica a dependência em  $\vec{k}$  do deslocamento de banda  $W_{\vec{k},\sigma}$ , essa versão será chamada de (R-O). A segunda versão proposta por Calegari e Magalhães (2011), discutida na seção 4.2, será chamada de (R-M). Na versão (R-M), a dependência em  $\vec{k}$  das funções de correlação presentes no deslocamento de banda  $W_{\vec{k},\sigma}$  é tratada de uma forma mais adequada. Essa dependência em  $\vec{k}$  exerce um papel importante, podendo dar origem a um *pseudogap* na densidade de estados.

O salto para os segundos vizinhos  $t_2$  exerce um papel importante principalmente para diferenciar o regime de dopagem por buracos do regime de dopagem por elétrons, no modelo de Hubbard. Portanto, primeiramente, será mostrado como a contribuição da amplitude do salto para os segundos vizinhos mais próximos  $t_2$ , afeta as estruturas de bandas. Várias propriedades eletrônicas são possíveis de serem compreendidas quando se observa as estruturas das bandas de energia de um dado sistema.

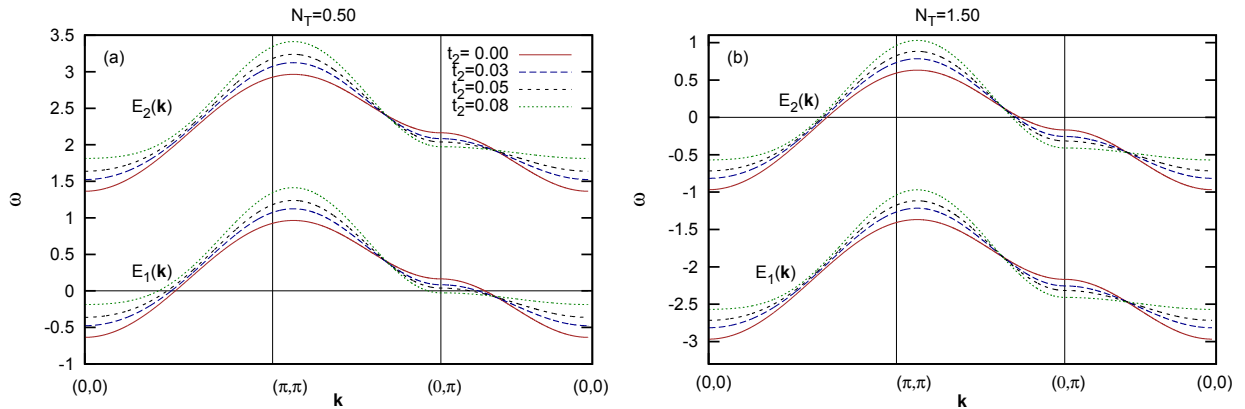
Outra quantidade importante diretamente relacionada às bandas de energia é a densidade de estados  $\rho(E)$ . A densidade de estados para uma dada banda  $n$  é definida como o número de estados para uma dada orientação de spin e número de onda  $\vec{k}$  permitidos, por unidade de energia (ABRIKOSOV, 1988; BLATT et al., 1976):

$$\rho(E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{ds}{|\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})|}. \quad (5.2)$$

A análise da relação 5.2 permite concluir que para bandas  $E_n(\vec{k})$  estreitas, haverá

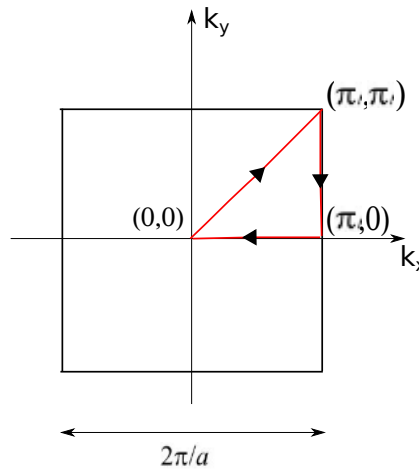
uma alta densidade de estados. Por outro lado, se a banda de energia for larga, terá como consequência uma baixa densidade de estados.

Figura 5.1 – Compara-se as bandas de energia para o método de campo médio (C-M), para diferentes valores de ocupação total  $N_T$  em diferentes regiões, onde  $N_T < 1$  é a dopagem por buracos e  $N_T > 1$  é a dopagem por elétrons, com  $U = 2,0\text{eV}$  e  $T = 0$ .



Fonte: Autor.

Figura 5.2 – Direções de alta simetria da rede quadrada. Essas direções foram consideradas para gerar as bandas apresentadas nesse capítulo.



Fonte: Autor.

Na figura 5.1, mostra-se a estrutura de banda para a aproximação de campo médio (C-M), para avaliar a contribuição de  $t_2$  a medida que ele cresce. As bandas são mostradas nas direções de alta simetria indicadas na figura 5.2. As bandas apresentadas na figura 5.1, foram calculadas usando as expressões

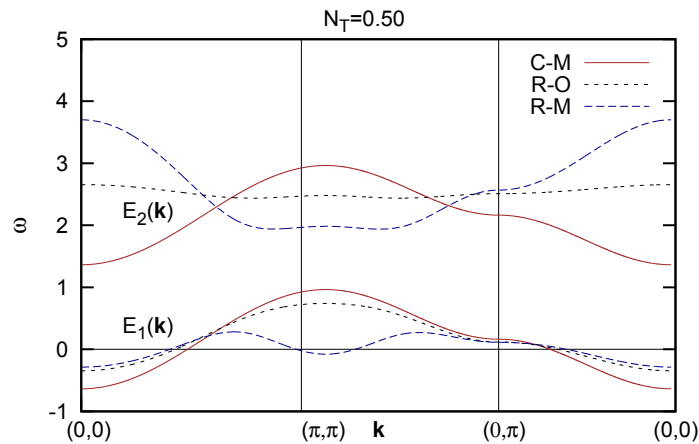
$$E_1(\vec{k}) = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu \quad (5.3)$$

e

$$E_2(\vec{k}) = \varepsilon_{\vec{k}} + U - \mu \quad (5.4)$$

da referência Rodriguez-Nunez e Alex (2001). Para a região  $N_T < 1$ , mostrada na figura (a),  $E_1(\vec{k})$  intercepta a energia de Fermi em  $\omega = 0$ . Com o aumento gradual do valor de  $t_2$ , a região plana da banda  $E_1(\vec{k})$  localizada entorno do ponto  $(0, \pi)$  é deslocada para baixas energias, chegando a ultrapassar o nível da energia de Fermi. A imagem 5.1(b), mostra as bandas de energia na região de dopagem  $N_T > 1, 0$ . Nesse caso é a banda  $E_2(\vec{k})$  que intercepta o nível da energia de Fermi. O efeito de  $t_2$  sobre a região plana da banda localizada entorno do ponto  $(0, \pi)$ , é o de deslocá-la para baixas energias afastando-a do nível de Fermi quando  $t_2$  cresce. A diferença entre as duas estruturas de bandas de energia, é devido a quebra de simetria entre o regime de dopagem por buracos  $N_T < 1, 0$ , e o regime de dopagem por elétrons  $N_T > 1, 0$ . A influência de  $t_2$  sobre as propriedades do modelo não deve depender da aproximação utilizada, portanto, essa mesma análise é válida também para a aproximação (R-O), e para a versão modificada da aproximação de n-polos (R-M).

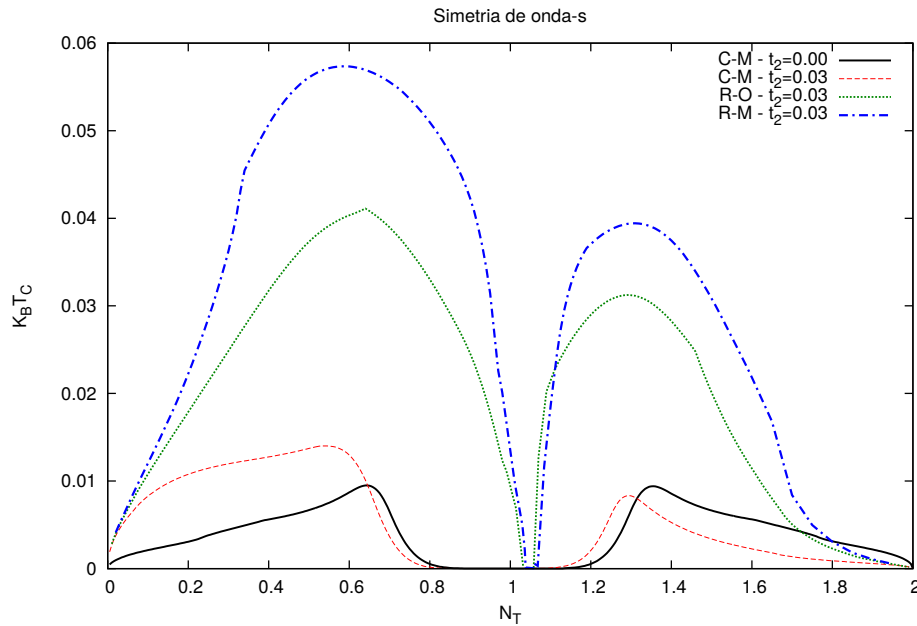
Figura 5.3 – Comparativo entre as estruturas de bandas de energia para as aproximações: (C-M), (R-O) e (R-M), com  $U = 2,0$  eV,  $t_2 = 0,03$  eV e  $T=0,0$ .



Fonte: Autor.

O painel 5.3 mostra o comportamento da estrutura de bandas com ocupação total,  $N_T = 0,50$ . O cálculo foi realizado para comparar as três aproximações. É visto que, o método (R-O) apresenta a banda de energia  $E_1(\vec{k})$  mais estreita do que no método (C-M). Isto ocorre porque, na aproximação (R-O) são levados em conta algumas funções de correlação importantes como é o caso da função de correlação  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ , a qual é desconsiderada na aproximação (C-M). O fato da aproximação (R-O) apresentar a banda  $E_1(\vec{k})$  mais estreita indica que a densidade de estados no nível de Fermi será maior no caso (R-O) do que no caso (C-M). Isso é importante para a supercondutividade, já que os elétrons responsáveis pela supercondutividade são aqueles próximos ao nível de Fermi.

Figura 5.4 – Comportamento de  $k_B T_c$  em função da ocupação total  $N_T$ , para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). Considerou-se  $U = 2,0$  eV.



Fonte: Autor.

Quando comparamos as aproximações (C-M) e (R-O) com o resultado obtido com (R-M), a estrutura de bandas tem um comportamento diferente. Para o método (R-M), observa-se que a banda  $E_1(\vec{k})$  é deslocada para baixas energias na região do ponto  $(\pi, \pi)$ . Esse deslocamento ocorre principalmente devido aos efeitos da função de correlação spin-spin  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ , associada à correlações antiferromagnéticas. A função de correlação  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  depende principalmente da ocupação  $N_T$  e da interação coulombiana. Mais adiante mostraremos que  $|\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle|$  aumenta com  $N_T$  e  $U$ .

Após este comparativo entre as aproximações, percebe-se que a aproximação proposta por (ROTH, 1969) descreve as bandas de energia com algumas particularidades descartadas pela aproximação de (C-M). No entanto, a versão (R-M) apresenta uma riqueza ainda maior de detalhes na estrutura de bandas.

A seguir apresentaremos os resultados para a temperatura crítica de transição supercondutora  $T_c$ , para as três simetrias consideradas para o parâmetro de ordem nesse trabalho.

### *Simetria de onda-s*

Apresentaremos agora os resultados para a simetria de onda s definida abaixo da equação 4.138. O painel 5.4 mostra o comportamento de  $k_B T_c$  quando ocorre uma variação do valor de ocupação total ( $0 \leq N_T \leq 2$ ). A linha sólida na cor preta, mostra o resultado para a aproximação de campo médio (C-M) utilizada na referência (RODRIGUEZ-NUNEZ; ALEX, 2001). Para  $t_2 = 0,00$ , observa-se um comportamento simétrico entre

as regiões  $N_T > 1$  e  $N_T < 1$ . Considera-se que  $N_T = 1$  equivale ao meio preenchimento, então  $N_T < 1$  refere-se ao regime de dopagem por buracos e  $N_T > 1$  ao regime de dopagem por elétrons. Quando  $t_2 \neq 0$ , o resultado para (C-M) (curva em vermelho), apresenta uma quebra na simetria entre as regiões  $N_T > 1$  e  $N_T < 1$ . Nesse caso, a região de  $N_T < 1$  apresenta o domo com  $k_B T_c$  maior que na região de  $N_T > 1$ . Isso acontece porque o  $t_2$  desloca a região plana de  $E_1(\vec{k})$ , para mais próximo do potencial químico (quando  $N_T < 1$ ), como podemos ver no painel (a) da figura 5.1. Como consequência, haverá uma alta densidade de estados ocupados próximo ao potencial químico favorecendo a formação de pares de elétrons responsáveis pela supercondutividade. Por outro lado, para  $N_T > 1$ , a região plana de  $E_2(\vec{k})$  é afastada do potencial químico, fazendo com que o potencial químico se encontre em uma região de baixa densidade de estados ocupados, desfavorecendo a supercondutividade.

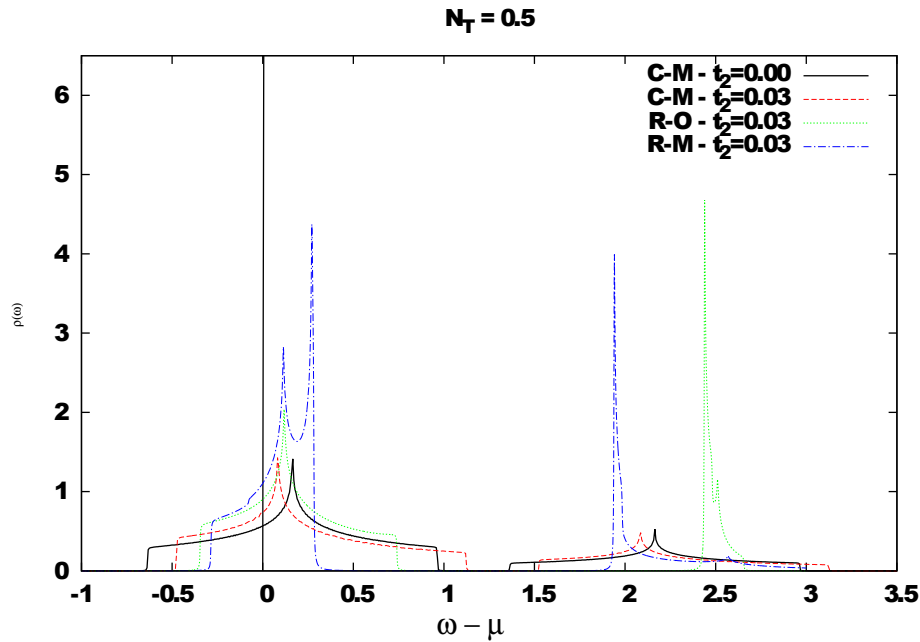
A curva tracejada (verde), mostra o resultado usando o procedimento original da aproximação de n-polos (ROTH, 1969). Nota-se um aumento significativo no  $k_B T_c$ , tanto no regime de dopagem por buracos como no regime de dopagem por elétrons. Esse aumento no  $k_B T_c$  está diretamente relacionado com a presença de correlações importantes que são descartadas na aproximação de campo médio. A assimetria entre o regime de dopagem por buracos  $N_T < 1$  e o regime de dopagem por elétrons  $N_T > 1$ , também é observada nesse caso onde  $t \neq 0$ . A curva tracejada (azul) mostra resultados para  $k_B T_c$  para a versão (R-M). Nota-se que essa versão do método possui o maior  $T_c$  em ambos regimes de dopagem, por buracos e por elétrons, quando comparado com os outros casos.

O comportamento de  $k_B T_c$  observado em 5.4, pode ser melhor entendido analisando a densidade de estados (DOS) para cada caso. Considerando que os elétrons que formam pares responsáveis pela supercondutividade são aqueles que possuem energias próximas do nível de Fermi (JAPIASSÚ; CONTINENTINO; TROPER, 1992), quanto maior a densidade de estados na região da energia de Fermi, maior deve ser o  $k_B T_c$ . De um modo geral, a densidade de estados na região do potencial químico  $\rho(\omega = \mu)$  difere para cada aproximação. Na região de dopagem por buracos, escolhemos um valor de ocupação com alto  $k_B T_c$ , para analisar  $\rho(\omega = \mu)$ .

O painel 5.5, mostra o comportamento de  $\rho(\omega)$ , para  $N_T = 0,5$ . Para a aproximação (C-M), a linha sólida (em preto) mostra  $\rho(\omega)$  com  $t_2 = 0$ , e quando é levado em conta  $t_2 \neq 0$ , o resultado é mostrado pelas linhas tracejadas em vermelho. Observa-se que, na região onde encontra-se o potencial químico  $\rho(\omega = \mu)$ , a (DOS) aumenta em relação ao caso com  $t_2 = 0$ . No caso da aproximação (R-O), quando,  $t_2 \neq 0$ , representado por linhas pontilhadas em verde, as correlações presentes no deslocamento de banda favorecem o aumento da densidade de estados em  $\omega = \mu$ . Para a aproximação (R-M) com  $t_2 \neq 0$ , a presença de  $t_2$  e das correlações antiferromagnéticas que estão presentes no termo  $W_{k,\sigma}$ , favorecem ainda mais o aumento da densidade de estados na região do potencial químico, apresentando a maior  $\rho(\omega = \mu)$  entre as três aproximações.

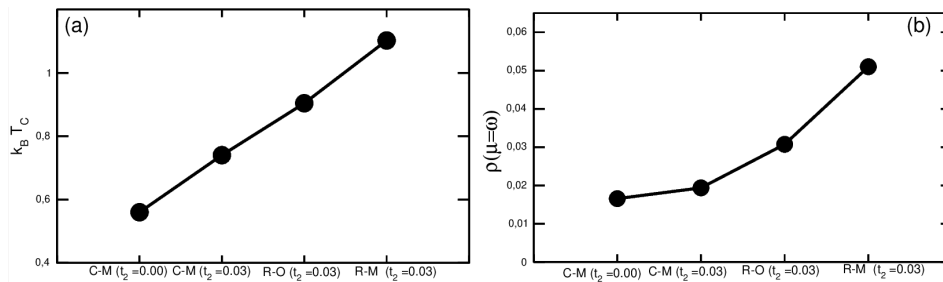


Figura 5.5 – Comparativo entre as densidades de estados no regime de dopagem por buracos, para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). A linha vertical mostra a posição do potencial químico  $\mu$ . Considerou-se  $U = 2,0$  eV.



Fonte: Autor.

Figura 5.6 – O painel (a) mostra o  $k_B T_c$  para cada aproximação quando  $N_T = 0,5$  e  $U = 2,0$  eV. O painel (b) mostra  $\rho(\omega = \mu)$  para cada aproximação para os mesmos parâmetros usados em (a).

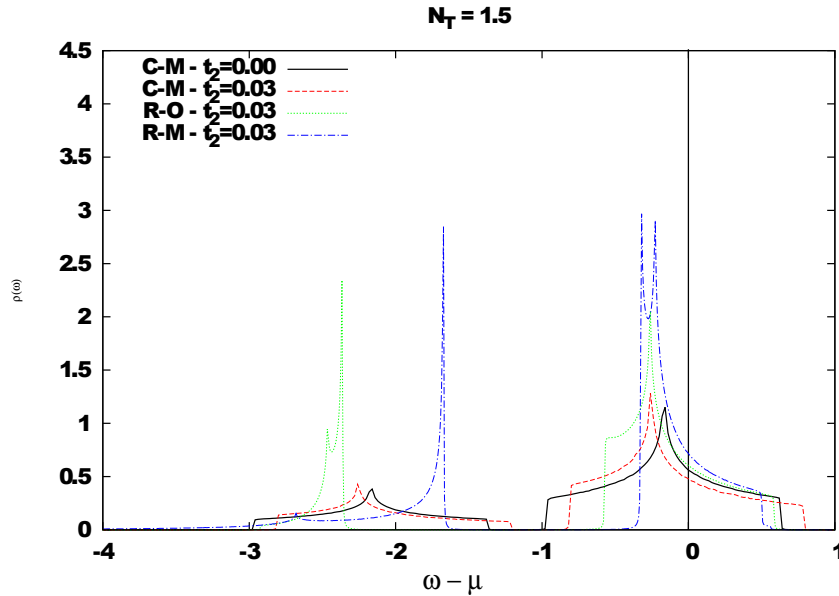


Fonte: Autor.

O comportamento do  $k_B T_c$  e da densidade de estados para cada caso está resumido na figura 5.6, para  $N_T = 0,5$ . No painel 5.6(a), o  $k_B T_c$  aumenta com a adição do salto para os segundos vizinhos ( $t_2$ ) na aproximação de campo médio CM. Quando considera-se o método R-O com  $t_2 \neq 0$ , o  $k_B T_c$  também apresenta um aumento. O mesmo aumento ocorre para o método R-M. Quando analisamos a densidade de estados no potencial químico  $\rho(\omega = \mu)$ , como pode ser visto no painel 5.6(b), verifica-se um comportamento muito próximo daquele observado para  $k_B T_c$ . Portanto, esses resultados mostram a relação direta entre  $k_B T_c$  e  $\rho(\omega = \mu)$ . Essa verificação é importante porque permite entender melhor o papel das correlações no  $k_B T_c$  através da análise da densidade de estados a qual

depende das correlações presentes em cada método.

Figura 5.7 – Comparativo entre as densidades de estados no regime de dopagem por elétrons, para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). A linha vertical mostra a posição do potencial químico  $\mu$ . Considerou-se  $U = 2,0$  eV.



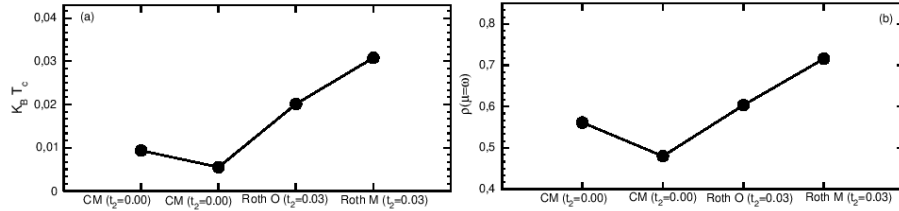
Fonte: Autor.

Para fins de comparação, a densidade de estados para dopagem por elétrons,  $N_T > 1$ , também foi calculada. Nesse caso, escolheu-se o valor de ocupação  $N_T = 1,50$ , o qual equivale a  $N_T = 0,50$  no regime de dopagem por buracos. O resultado das densidades de estados é mostrado na figura 5.7. Observa-se que para a aproximação de campo médio sem a presença dos segundos vizinhos ( $t_2 = 0,0$ ),  $\rho(\omega = \mu)$  é maior do que quando considera-se os segundos vizinhos ( $t_2 = 0,03$ ). Esse resultado mostra um comportamento oposto ao observado para o caso de dopagem por buracos, mostrado na figura 5.6. Essa diferença ocorre devido à assimetria entre a dopagem por buracos e a dopagem por elétrons quando  $t_2$  é finito, conforme foi mostrado na figura 5.1. Quando comparamos o resultado de campo medio com  $t_2 = 0,03$  e o resultado para a aproximação R-O, observa-se um aumento de  $\rho(\omega = \mu)$ . O mesmo aumento é verificado ao compararmos os resultados para R-O e R-M.

A figura 5.8(a) compara o  $k_B T_c$  para  $N_T = 1,5$  para as diferentes aproximações enquanto que a figura 5.8(b) compara  $\rho(\omega = \mu)$ . Novamente, observa-se uma relação direta entre  $k_B T_c$  e  $\rho(\omega = \mu)$ , mostrando que o comportamento de  $\rho(\omega = \mu)$  pode auxiliar no entendimento do comportamento do  $T_c$ .

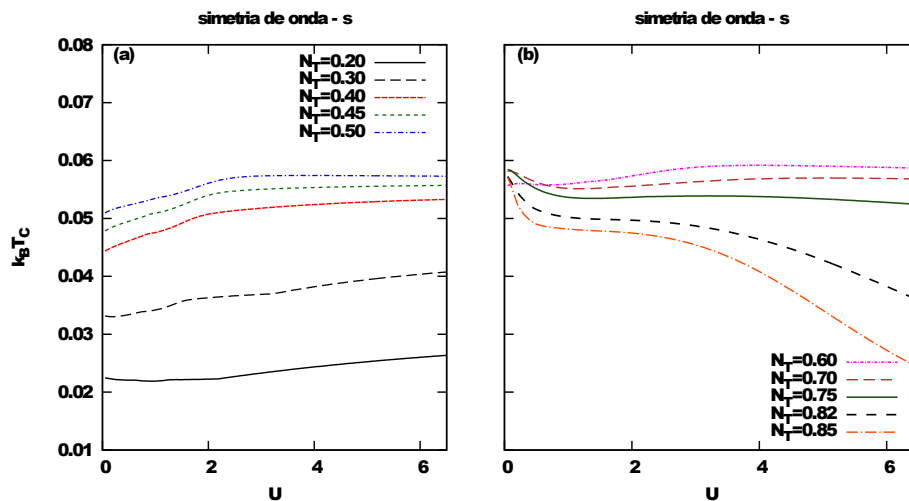
As correlações que afetam o  $T_c$  e a densidade de estados, estão diretamente ligadas à intensidade da interação coulombiana  $U$ . Portanto,  $U$  é um dos parâmetros mais importantes deste trabalho. Quando  $\frac{U}{t_1} > 1$ , o sistema entra no regime de correlações fortes. A seguir apresentaremos resultados mostrando os efeitos de  $U$  na temperatura crítica supercondutora e em outras quantidades físicas importantes, como a dupla ocupação e o

Figura 5.8 – O painel (a) mostra o  $k_B T_c$  para cada aproximação quando  $N_T = 1,5$  e  $U = 2,0$  eV. O painel (b) mostra  $\rho(\omega = \mu)$  para cada aproximação para os mesmos parâmetros usados em (a).



Fonte: Autor.

Figura 5.9 – Comportamento do  $k_B T_c$  em função do potencial coulombiano  $U$ , para diferentes ocupações na região  $N_T < 1$ , para versão (R-M).



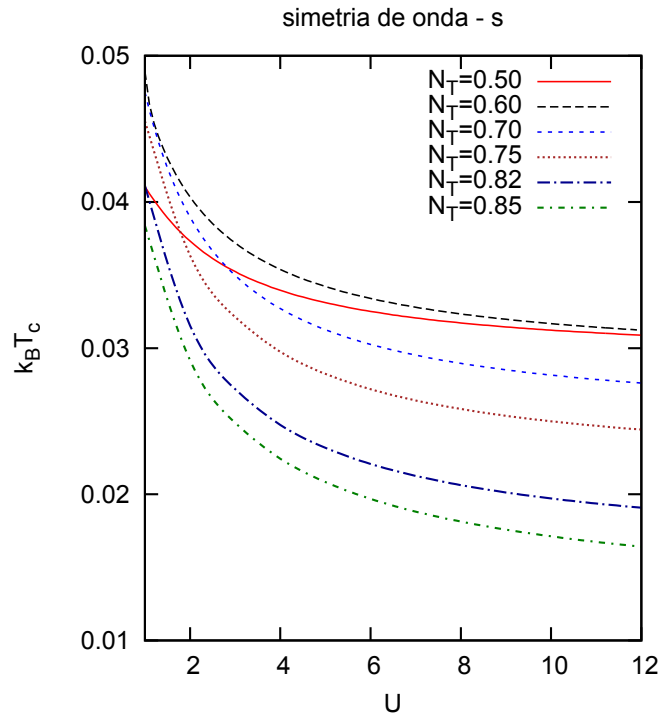
Fonte: Autor.

potencial químico.

A figura 5.9 mostra como  $k_B T_c$  depende da interação coulombiana  $U$ . São mostrados resultados para diferentes ocupações na região  $N_T < 1$ , para o método R-M. O painel 5.9(a) mostra  $k_B T_c$  para  $N_T < 0,5$ , enquanto que o painel 5.9(b) mostra  $k_B T_c$  para  $N_T > 0,5$ . No painel 5.9(a) verifica-se um crescimento suave de  $T_c$  com  $U$ , principalmente para as ocupações mais baixas. Para ocupações mais próximas de  $N_T = 0,5$ , há um crescimento inicial até atingir um valor máximo, mas depois o  $T_c$  é pouco afetado por  $U$ . O painel 5.9(b) mostra o  $T_c$  na região de ocupação mais alta. Nesse caso, para  $N_T > 0,75$ , a interação coulombiana sempre desfavorece a supercondutividade. Observa-se também, que para as ocupações maiores, o  $T_c$  é mais afetado pelo  $U$  do que para as ocupações menores. Isso acontece porque devido à baixa ocupação  $N_T$ , os elétrons podem evitar os sítios já ocupados ao se deslocarem pela rede.

Resultados para o comportamento do  $T_c$  em função de  $U$  para a aproximação R-O, são mostrados na figura 5.10. Quando comparamos os resultados para o método

Figura 5.10 – Comportamento do  $k_B T_c$  em relação a interação coulombiana  $U$ , para diferentes ocupações na região  $N_T < 1$ , para versão (R-O).



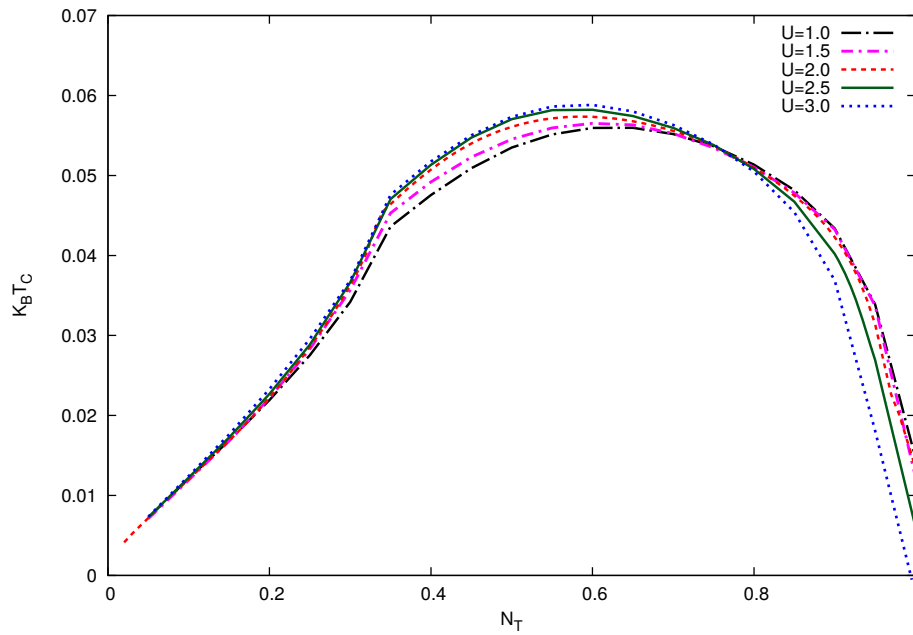
Fonte: Autor.

R-M com os resultados para R-O mostrados na figura 5.10, observa-se que existem duas diferenças significativas entre as duas versões do método da Roth. A primeira é que o  $T_c$  é significativamente maior no método modificado R-M do que no método original R-O. Esse resultado já foi discutido na figura 5.4. A segunda diferença, é o comportamento de  $T_c$  na região de dopagens mais baixas ( $N_T < 0,75$ ). Enquanto que no método R-M, o  $T_c$  aumenta com  $U$  ou permanece inalterado, no método R-O, o  $T_c$  sempre decresce com  $U$ . Esse resultado é importante porque mostra que as correlações responsáveis pelo *pseudogap* no estado normal, também afetam o  $T_c$ .

Para entender melhor os diferentes comportamentos do  $T_c$  no caso da aproximação R-M, calculou-se o  $T_c$  em função da ocupação para diferentes valores de  $U$ , conforme mostrado na figura 5.11. Observa-se que para  $N_T \lesssim 0,75$ , o aumento da interação coulombiana favorece a supercondutividade. Por outro lado, para  $N_T \gtrsim 0,75$ , o  $U$  desfavorece a supercondutividade. A região de  $N_T \gtrsim 0,75$  encontra-se em um regime de correlações mais fortes que é exatamente onde o *pseudogap* ocorre.

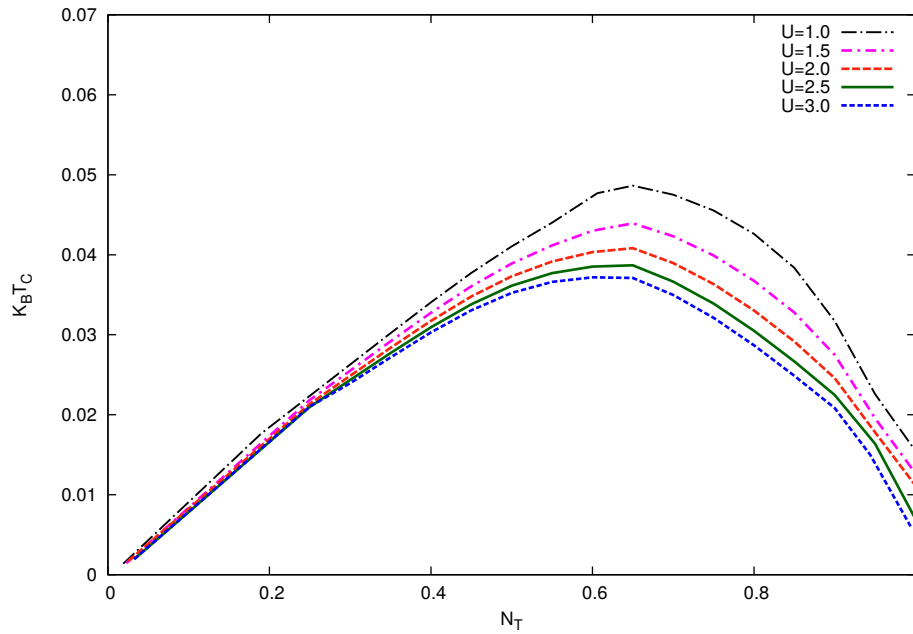
O comportamento de  $T_c$  em função da ocupação para diferentes valores de  $U$ , para a aproximação R-O, é mostrado na figura 5.12. Nesse caso, independente do regime de ocupação, alta ou baixa, a interação coulombiana atua sempre no sentido de desfavorecer a supercondutividade. Esses resultados estão de acordo com resultados obtidos na referência (DOMANISKI; WYSOKINISKI, 1999) para um modelo de Hubbard estendido

Figura 5.11 – Comportamento do  $k_B T_c$  em relação a ocupação total  $N_T$ , para a aproximação R-M com diferentes valores do potencial coulombiano  $U$ .



Fonte: Autor.

Figura 5.12 – Comportamento do  $k_B T_c$  em relação a ocupação total  $N_T$ , para a aproximação R-O com diferentes valores do potencial coulombiano  $U$ .

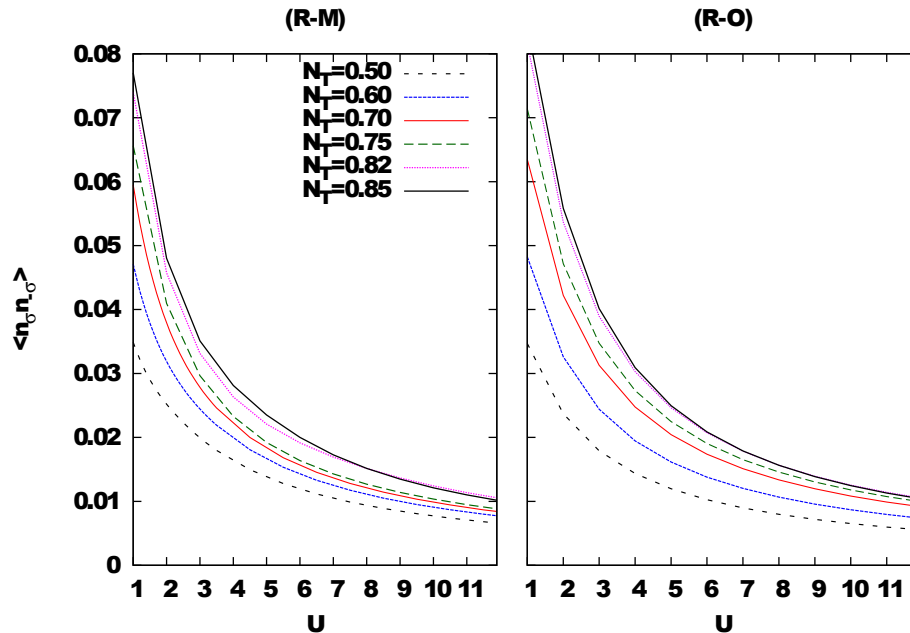


Fonte: Autor.

tratado por campo médio com aproximação até segunda ordem. Outros resultados similares também foram obtidos por Sacramento, Aparício e Nunes (2010) para um modelo de Anderson e mais recentemente, por Reyes et al. (2019) em um modelo multibandas,

ambos tratados com o formalismo de *slave boson*. Por outro lado, os resultados da aproximação R-M estão de acordo com resultados para o modelo de Hubbard tratado com DMFT, obtidos por Oliveira e Sacramento (2002).

Figura 5.13 – Comportamento da dupla ocupação  $\langle n_\sigma n_{-\sigma} \rangle$  em relação à variação do potencial coulombiano  $U$ , para diferentes valores de ocupação total  $N_T$ .

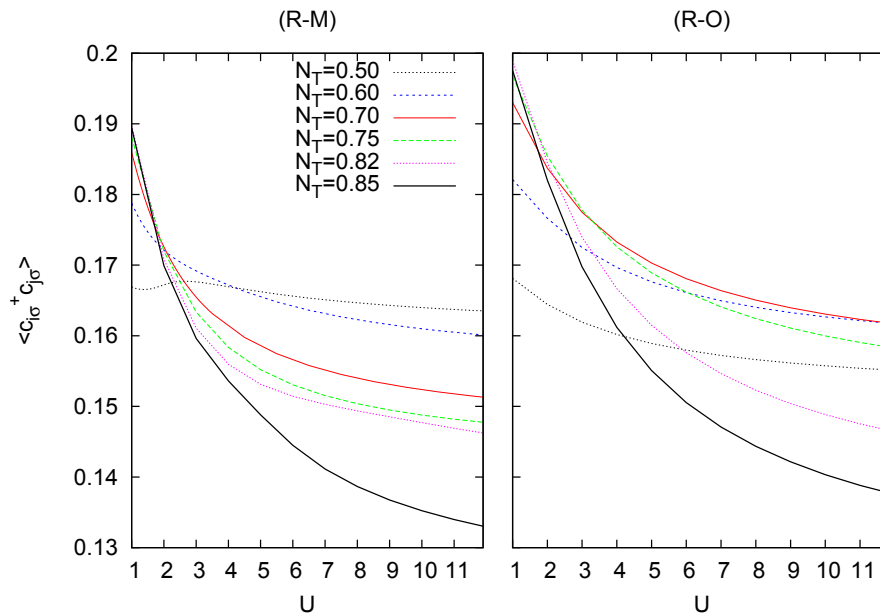


Fonte: Autor.

A figura 5.13 mostra a dupla ocupação  $\langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle$  para o método R-M (painel da esquerda) e para o método R-O (painel direita). Em geral, o método R-M apresenta uma dupla ocupação menor, principalmente no regime de altas ocupações, onde as correlações são mais fortes. A interação coulombiana afeta a dupla ocupação  $\langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle$  da seguinte forma, a medida que a repulsão dentro do orbital cresce e chega há um valor crítico, ocorre a separação das partículas presentes no orbital. Logo, o orbital torna-se celibatário e a média da dupla ocupação diminui. Assim, pode-se observar que este comportamento possui uma dependência com a ocupação total  $N_T$ . A ocupação  $N_T = 0,5$  é a que possui menor sensibilidade ao aumento da interação coulombiana. Por outro lado, a dupla ocupação para  $N_T = 0,85$  é a mais afetada. Isso acontece porque no regime onde  $U$  é menor, existem vários sítios duplamente ocupados, mas conforme  $U$  aumenta, esses sítios tornam-se celibatários.

Em um modelo discreto como é o caso do modelo considerado neste trabalho, os elétrons se movem pela rede saltando entre sítios vizinhos da rede. A função de correlação  $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle$  está associada ao salto de uma partícula entre vizinhos mais próximos. Essa função de correlação está diretamente relacionada com a energia cinética do sistema. Para que uma partícula salte de um sítio  $i$  para o sítio  $j$ , é necessário um certo valor de energia cinética. Se a interação coulombiana for intensa, a partícula terá dificuldade para saltar

Figura 5.14 – Comportamento da função de correlação  $\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle$ , quando fixamos o valor de  $N_T$  e variamos  $U$ .

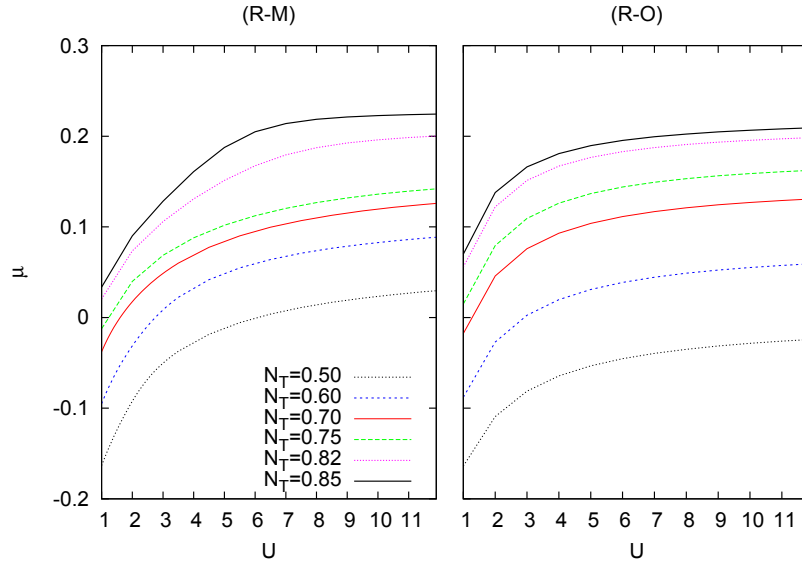


Fonte: Autor.

de um sítio para outro já ocupado. Portanto, quando  $U$  for grande, a única opção para a partícula se mover pela rede é através do sítio vazios. No entanto, se  $N_T$  for grande, a maioria dos sítios estarão ocupados e essa segunda possibilidade também é frustrada. Nesse caso, as partículas tendem a se localizar nos sítios da rede. A figura 5.14 mostra exatamente esse comportamento, através da análise da função de correlação  $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle$ . Para valores baixos de  $N_T$ ,  $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle$  é pouco afetada por  $U$ , já que os elétrons podem se mover através dos sítios vazios da rede. Para  $N_T$  grande,  $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle$  é bastante afetada por  $U$  o qual diminui as possibilidades de salto da partícula. Comparando os resultados para a aproximação R-M e para a aproximação R-O, vemos que os valores de  $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle$  são menores na aproximação R-M, principalmente para ocupações maiores. Esse é um exemplo de como as correlações afetam as propriedades físicas do sistema. Ou seja, na aproximação R-M, a itinerância dos elétrons na rede é mais sensível aos efeitos do  $U$  devido aos efeitos das correlações antiferromagnéticas que são melhor tratadas na aproximação R-M.

O papel do potencial químico  $\mu$  é o de regular a ocupação média por orbital. Esse parâmetro tem uma relação direta com a interação coulombiana  $U$ , conforme mostra a figura 5.15. A interação coulombiana modifica a densidade de estados na região de  $\omega = \mu$ . Com isso, para manter fixo o valor da ocupação total  $N_T$  é preciso que ocorra um deslocamento do potencial químico. A figura 5.15 mostra o potencial químico em função de  $U$  para diferentes valores de ocupação total  $N_T$ . Para baixas ocupações a dependência de  $\mu$  em  $U$  é bastante similar nos dois métodos. No entanto, para ocupações na região

Figura 5.15 – Comparativo entre o comportamento do potencial químico em relação ao potencial coulombiano  $U$ , para diferentes ocupações na região  $N_T < 1$ , considerando as duas versões da aproximação de n-polos.



Fonte: Autor.

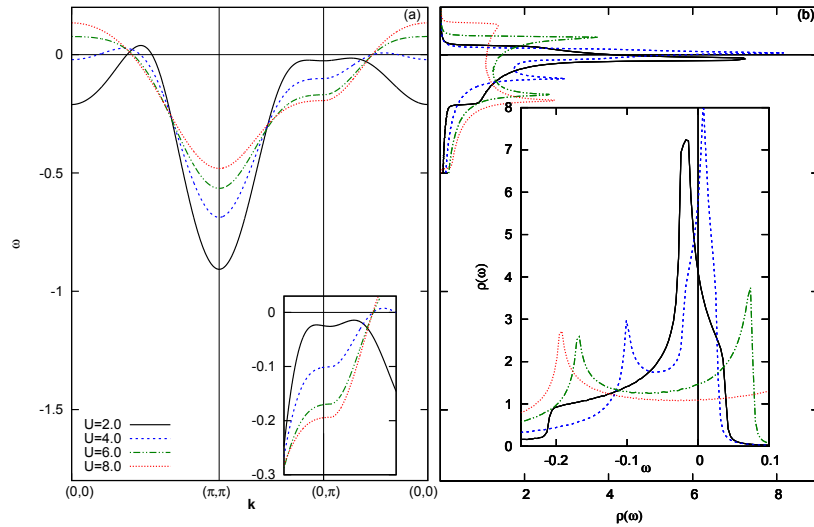
de  $N_T \gtrsim 0,75$ , observa-se um comportamento diferente. Para o método R-O, o potencial químico cresce mais rapidamente na região  $U \lesssim 4$  e depois diminui a taxa de crescimento. Por outro lado, no método R-M esse crescimento acentuado continua até  $U \sim 7$ .

A análise da DOS mostrada na figura 5.16 permite entender o comportamento do potencial químico para  $N_T = 0,85$ . Para  $U=2,0$  eV, o *pseudogap* está presente na DOS como pode ser confirmado na figura das bandas em 5.16(a). Conforme  $U$  aumenta, a DOS torna-se mais estreita, portanto, é necessário um aumento no potencial químico para manter a ocupação constante. Para  $U \geq 4$ , a DOS começa a se alargar novamente, portanto, o potencial químico continua crescendo para manter a ocupação constante. Para  $U \geq 7$ , a maioria dos sítios da rede está com apenas uma partícula, e portanto o potencial químico é pouco afetado por  $U$ .

Vimos que a interação coulombiana interfere diretamente na intensidade do *pseudogap*. Outra quantidade que afeta significativamente o *pseudogap* é a ocupação. A figura 5.17 mostra as bandas renormalizadas para diferentes ocupações. Para  $N_T = 0,80$ , a banda intercepta o potencial químico (em  $\omega = 0$ ) tanto na direção  $(0,0)$ - $(\pi, \pi)$  quanto na direção  $(\pi, \pi)$ - $(0, \pi)$ , logo, nesse caso não há *pseudogap*. Por outro lado, a partir de  $N_T = 0,85$ , a banda intercepta o potencial químico na direção  $(0,0)$ - $(\pi, \pi)$ , mas não intercepta na direção  $(\pi, \pi)$ - $(0, \pi)$ , gerando um gap na região do ponto  $(0, \pi)$ , como pode ser visto no detalhe do painel (a). Por ser um gap que ocorre somente na região do ponto  $(0, \pi)$ , esse gap é na verdade um *pseudogap* como aquele observado nos supercondutores cupratos dopados por buracos.

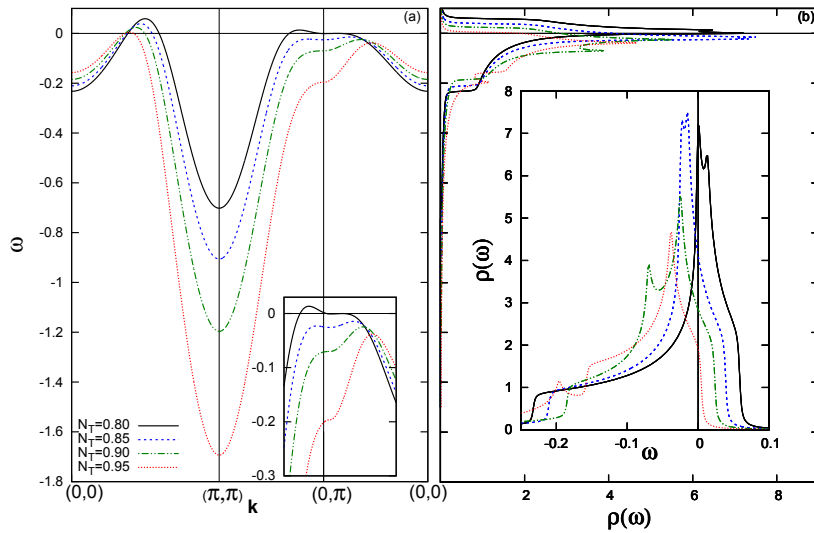


Figura 5.16 – Densidades de estados e estrutura de bandas para a aproximação R-M com  $N_T = 0,85$  e diferentes valores de  $U$ .



Fonte: Autor.

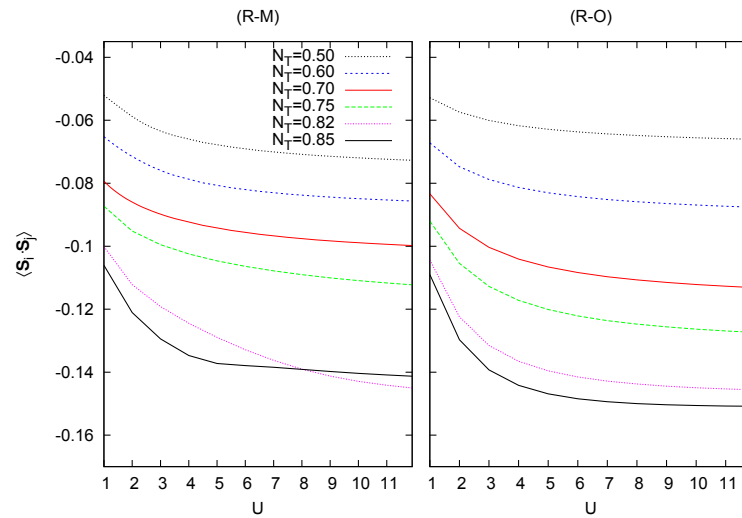
Figura 5.17 – Densidades de estados e estrutura de bandas para a aproximação R-M com  $U = 2,0\text{eV}$  e diferentes ocupações.



Fonte: Autor.

A figura 5.18 mostra como a função de correlação spin-spin  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  depende de  $U$ . O painel da esquerda mostra  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  para diferentes ocupações  $N_T$ , considerando o método R-M. Observa-se que  $|\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle|$ , aumenta com  $U$  e também com  $N_T$ , ou seja,  $|\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle|$  é maior no regime de correlações fortes onde  $\frac{U}{t_1} > 1$  e  $N_T \rightarrow 1$ . Para  $N_T = 0,85$

Figura 5.18 – Comportamento da função de correlação spin-spin  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ , quando fixamos o valor de  $N_T$  e variamos o potencial coulombiano  $U$ .



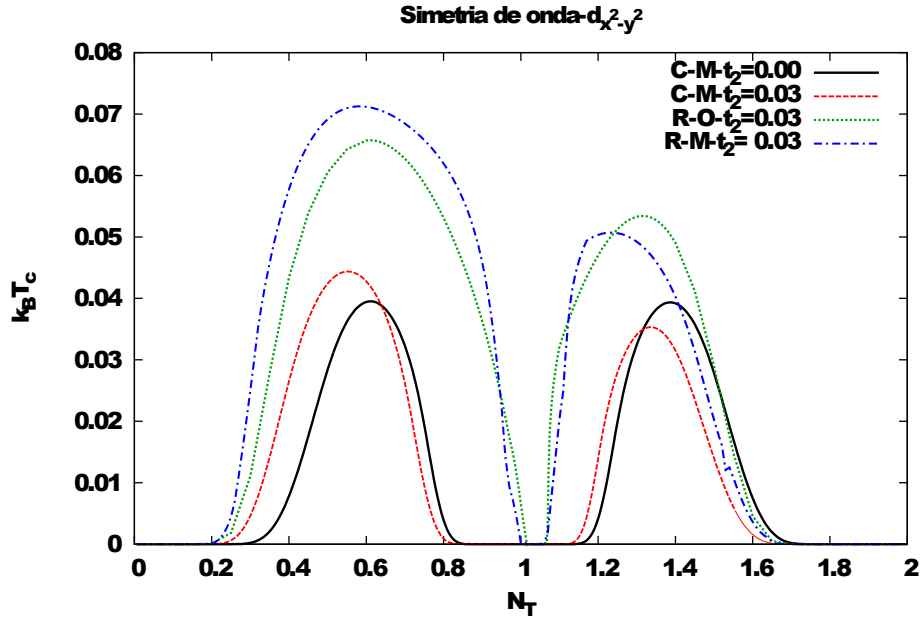
Fonte: Autor.

na aproximação R-M,  $\left| \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \right|$  aumenta com  $U$ , na região de  $U \lesssim 5,0$ , e tende a estabilizar na região de  $U \gtrsim 5,0$ . Nota-se que a curva para  $N_T = 0,85$  intercepta a curva de  $N_T = 0,82$  em  $U \sim 8$ . Esse comportamento não é observado no resultado para o método R-O mostrado no painel direito da figura 5.18. Esse resultado sugere que esse comportamento deve estar relacionado às correlações associadas ao *pseudogap*, o qual surge em  $N_T \gtrsim 0,83$ . Para valores de  $N_T < 0,85$  não observa-se diferenças significativas no comportamento da amplitude  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ , nas duas aproximações. Isso mostra que a estrutura de  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  no espaço recíproco, é o fator mais relevante para dar origem ao *pseudogap* na densidade de estados (AVELLA; MANCINI, 2007; CALEGARI; MAGALHÃES, 2011)

#### *Simetria de onda- $d_{x^2-y^2}$*

A figura 5.19 mostra o  $k_B T_c$  em função de  $N_T$  para um parâmetro de ordem supercondutor com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ . O cálculo de  $T_c$  foi realizado considerando os mesmos parâmetros da figura 5.4. Em geral, para o método Roth com simetria de onda  $d$ , observa-se um comportamento similar ao observado na figura 5.4, para a simetria de onda  $s$ . A diferença mais significativa está relacionada aos valores máximos de  $k_B T_c$ , que são significativamente maiores na simetria de onda  $d$ , quando comparados com os valores da simetria de onda  $s$ . O  $T_c$  é obtido da equação 4.161, na qual a simetria do parâmetro de ordem supercondutor é introduzida através de  $\varphi(\vec{k})$ , definido abaixo da equação 4.138. A figura 5.20 mostra o comportamento de  $\varphi(\vec{k})^2$  nas direções de alta simetria da primeira zona de Brillouin (ver figura 5.2). Para a simetria de onda  $s$ ,  $\varphi(\vec{k})$  independe do vetor de onda  $\vec{k}$ . Para a simetria de onda  $d$ ,  $\varphi(\vec{k})^2$  é nulo na direção de  $(0,0)$ - $(\pi, \pi)$  e é máximo

Figura 5.19 – Comportamento de  $k_B T_c$  em função da ocupação total  $N_T$ , para as diferentes aproximações (C-M), (R-O) e (R-M). Considerou-se  $U = 2,0$  eV.



Fonte: Autor.

em  $(0, \pi)$ . A figura mostra também a banda renormalizada  $E_{1, \vec{k}}$  obtida para o método da R-O. Observa-se que  $E_{1, \vec{k}}$  apresenta uma região plana exatamente na região onde  $\varphi(\vec{k})^2$  é máximo, na simetria  $d$ . A frequência de corte  $w_D$ , faz com que a região do ponto  $(0, \pi)$  tenha a maior contribuição na soma em  $\vec{k}$ , da equação 4.161.

Em  $(0, \pi)$  temos que:

$$\varphi^2(\vec{k})_{onda-d} = 4\varphi^2(\vec{k})_{onda-s}, \quad (5.5)$$

conforme pode ser visto na figura 5.20. Para mostrar como essa relação afeta o  $T_c$ , vamos reescrever a equação 4.161 como:

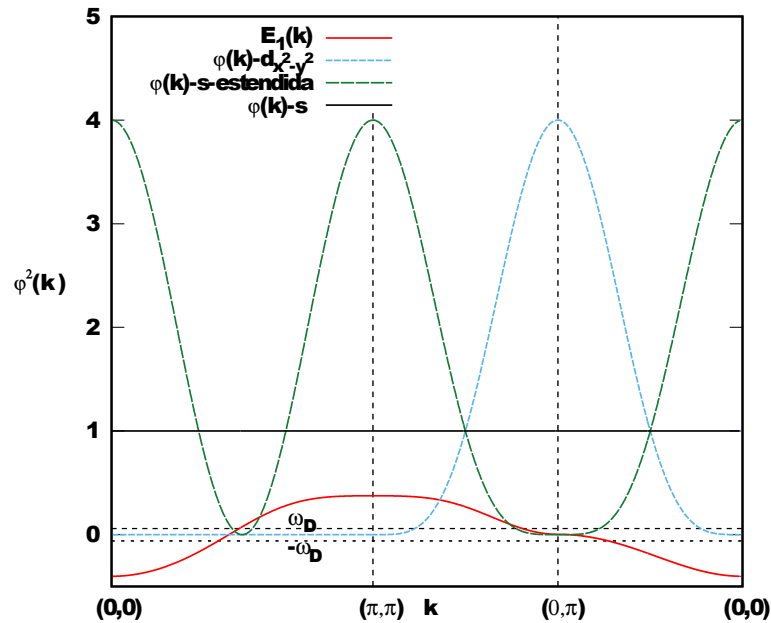
$$T = F(T) = TV \frac{1}{2N} \sum_k g(\vec{k}) \varphi^2(\vec{k}) \psi(\vec{k}) \quad (5.6)$$

onde

$$g(\vec{k}) = b_{1,k} \tanh\left(\frac{\beta \xi_k^+}{2}\right) - b_{2,k} \tanh\left(\frac{\beta \xi_k^-}{2}\right). \quad (5.7)$$

O valor de  $T$  que satisfaz a equação 5.6 para um determinado conjunto de parâmetros do modelo, é o  $T_c$ . A figura 5.21 mostra  $F(T)$  em função de  $T$  para as simetrias  $s$ ,  $d$  e  $s$ -estendida. A linha em marrom mostra  $F(T)=T$ , portanto os pontos onde as curvas interceptam a linha marrom indicam as temperaturas críticas  $T_c$  para cada uma das simetrias. Assim, fica claro que  $F(T)$  é maior para a simetria  $d$ , conseqüentemente o  $T_c$  na

Figura 5.20 – A banda renormalizada  $E_1(\vec{k})$  para  $N_T = 0,7$ , obtida para a aproximação R-O. O termo  $\varphi(\vec{k})$  representa a simetria do parâmetro de ordem e as linhas horizontais mostram a frequência de corte de Debye  $\omega_D$ .



Fonte: Autor.

simetria  $d$  também é maior que o  $T_c$  da simetria  $s$ . Para a ocupação  $N_T = 0,70$ , a simetria  $s$ -estendida não apresenta solução supercondutora, como será mostrado na próxima seção. Essa mesma análise também é válida para o método R-M.

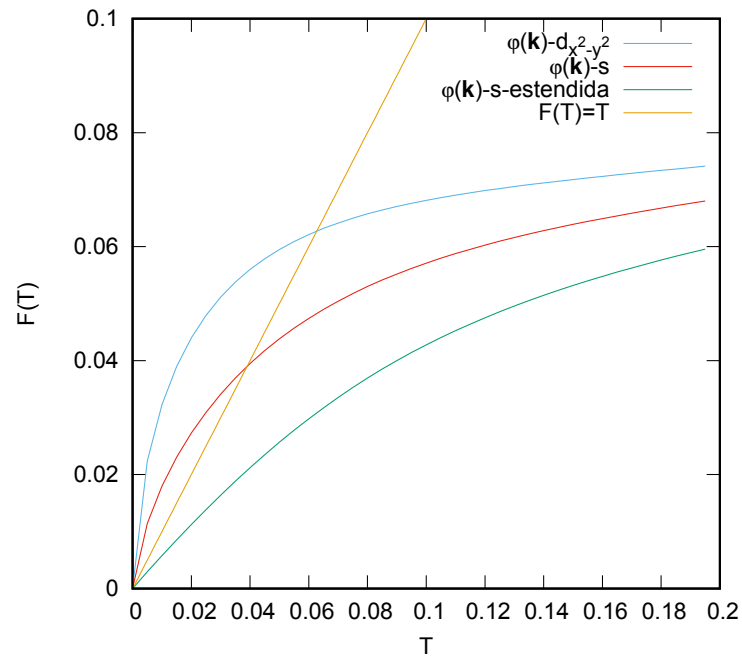
O comportamento de  $k_B T_c$  em função de  $U$  é mostrado na figura 5.22. Os resultados para o método R-O com simetria  $d$  apresentam o mesmo comportamento dos resultados para simetria  $s$  mostrados na figura 5.10. Por outro lado, os resultados para o método R-M apresentam diferenças significativas quando comparados com os resultados da simetria  $s$ . Ao contrário da simetria  $s$ , na simetria  $d$ , o  $T_c$  sempre decresce com  $U$ , tanto no método R-O quanto no método R-M. Ao compararmos os métodos R-M e R-O para a simetria  $d$ , nota-se que na região de maior ocupação,  $N_T \geq 0,82$ , o  $k_B T_c$  é mais afetado pela interação coulombiana no método R-M. Esse resultado indica que as mesmas correlações que dão origem ao *pseudogap* do estado normal também afetam o  $T_c$ , principalmente na região de ocupação mais alta.

A figura 5.23 mostra  $k_B T_c$  em função de  $N_T$  para diferentes valores de  $U$ , para a aproximação R-M. Conforme  $U$  aumenta, a região supercondutora vai sendo deslocada para ocupações menores. Observa-se também que o  $T_c$  máximo diminui com o aumento do  $U$ . Esses resultados estão de acordo com os resultados das referências (DOMANISKI; WYSOKINISKI, 1999; DOMANINSKI, 2002).

#### *Simetria de onda s-estendida*

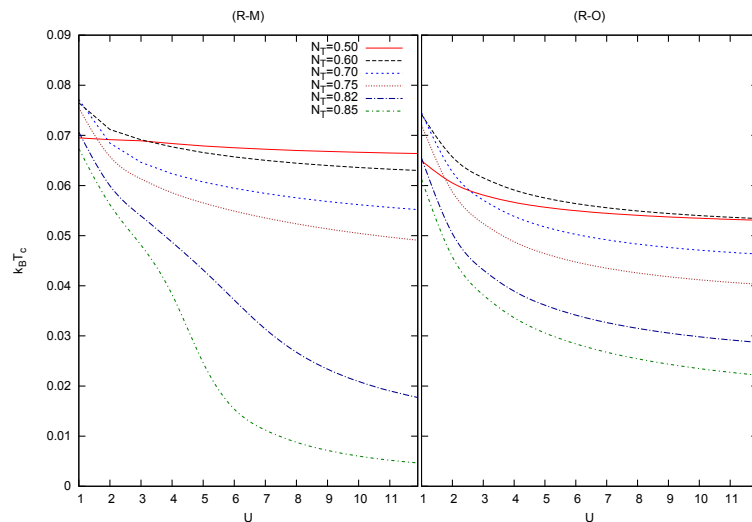
A figura 5.24 mostra o comportamento de  $k_B T_c$  em relação a ocupação total  $N_T$ .

Figura 5.21 – Mostra a diferença de temperatura entre as diferentes simetrias do parâmetro de ordem para  $N_T = 0,70$ , na aproximação R-O.



Fonte: Autor.

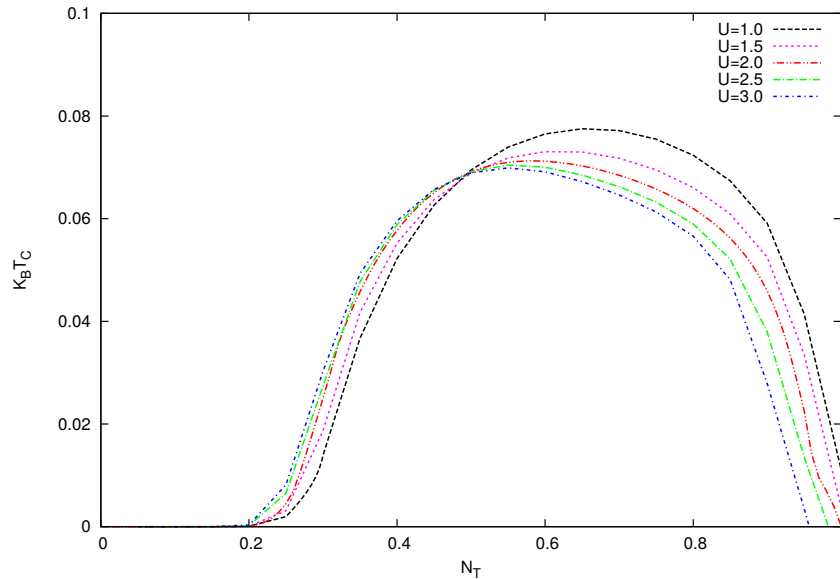
Figura 5.22 – Comportamento do  $k_B T_c$  em função da interação coulombiana para simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ .



Fonte: Autor.

Os parâmetros utilizados para o cálculo do  $T_c$  são os mesmos da figura 5.4. A principal diferença dos resultados da simetria s-estendida em relação as outras simetrias é a região de ocupação onde a supercondutividade ocorre. Ao contrário das simetrias s e d, na simetria s-estendida, a supercondutividade ocorre em baixas ocupações no regime de dopagem por buracos e em altas ocupações no regime de dopagem por elétrons. Na figura 5.20, vemos

Figura 5.23 – Comportamento de  $k_B T_c$  (simetria  $d_{x^2-y^2}$ ) em relação a ocupação total  $N_T$ , para a aproximação R-M com diferentes valores para a interação coulombiana, na região onde  $N_T < 1$ .



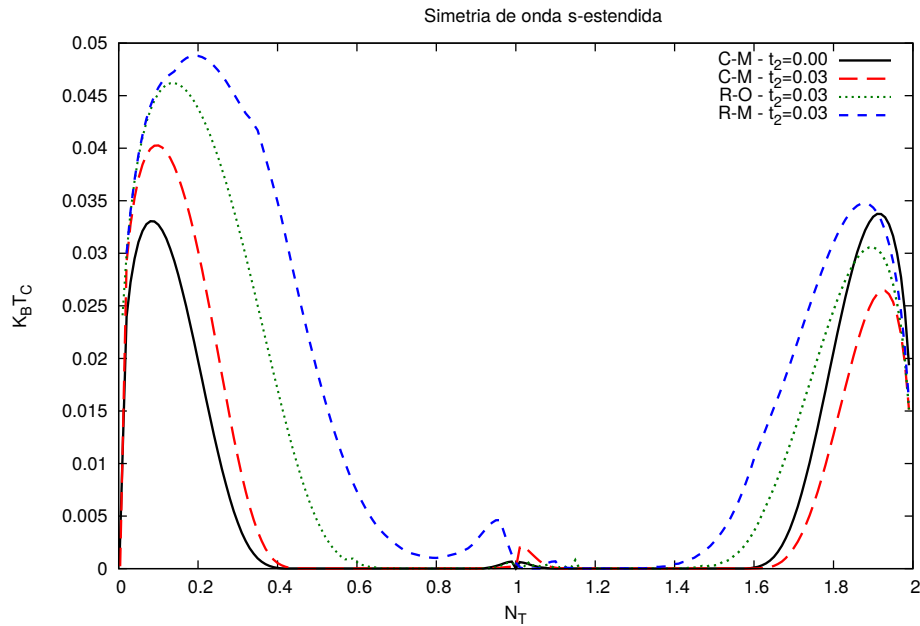
Fonte: Autor.

que para a simetria s-estendida,  $\varphi(\vec{k})^2$  é nulo na região do ponto  $(0, \pi)$  onde a banda  $E_{1,\vec{k}}$  apresenta uma região plana responsável por uma alta densidade de estados. Por outro lado,  $\varphi(\vec{k})^2$  é máximo nas regiões dos pontos  $(0, 0)$  e  $(\pi, \pi)$ . Assim, a supercondutividade com simetria s-estendida ocorre quando o potencial químico encontra-se próximo a uma das extremidades da banda. Isso acontece quando a ocupação é muito baixa ou muito alta. Resultados similares a estes são encontrados nos trabalhos de Domaniski e Wysokiniski (1999), Domaninski (2002).

O comportamento de  $k_B T_c$  em função da ocupação total  $N_T$  para diferentes valores de  $U$ , para a aproximação R-M, é mostrado na figura 5.25. Como era esperado, na região de baixas ocupações a interação coulombiana afeta pouco o  $T_c$  já que os elétrons podem evitar a dupla ocupação. No entanto, para ocupações maiores, o  $T_c$  é bastante afetado pelo  $U$ , sendo que o  $T_c$  aumenta com  $U$ , nessa região de ocupação. Esse aumento no  $T_c$  ocorre porque as correlações antiferromagnéticas se tornam mais intensas com o aumento do  $U$  e da ocupação, conforme foi mostrado na figura 5.18. As correlações antiferromagnéticas deformam as bandas, principalmente nas regiões  $(\pi, \pi)$  e  $(0, 0)$  (ver figura 5.16), exatamente onde  $\varphi(\vec{k})^2$  é máximo para o caso da simetria s-estendida (ver figura 5.20). Portanto, quando  $U$  aumenta, as correlações antiferromagnéticas movem as regiões das bandas em  $(\pi, \pi)$  e  $(0, 0)$  para próximo do potencial químico gerando uma alta densidade de estados ocupados, portanto, favorecendo a supercondutividade.

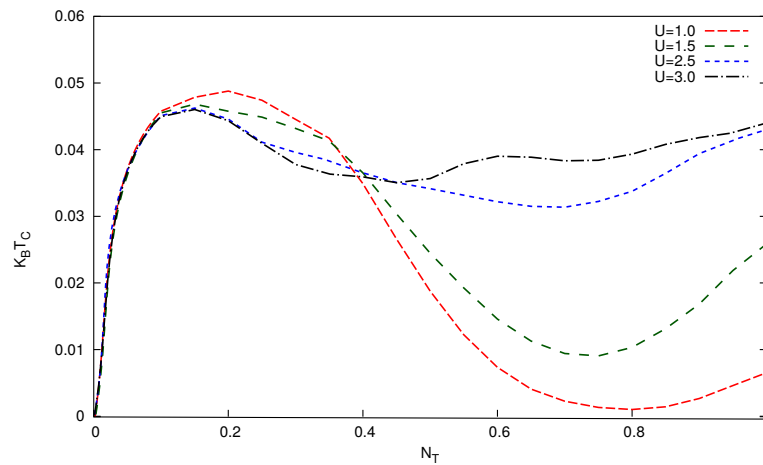
A figura 5.26 mostra  $k_B T_c$  em função da interação coulombiana para diferentes ocupações. Observa-se claramente dois comportamentos diferentes relacionados a dois

Figura 5.24 – Comportamento do  $k_B T_c$  em função da ocupação total  $N_T$ , para as aproximações de (C-M) e as duas versões para aproximação de n-polos, (R-O) e (R-M).



Fonte: Autor.

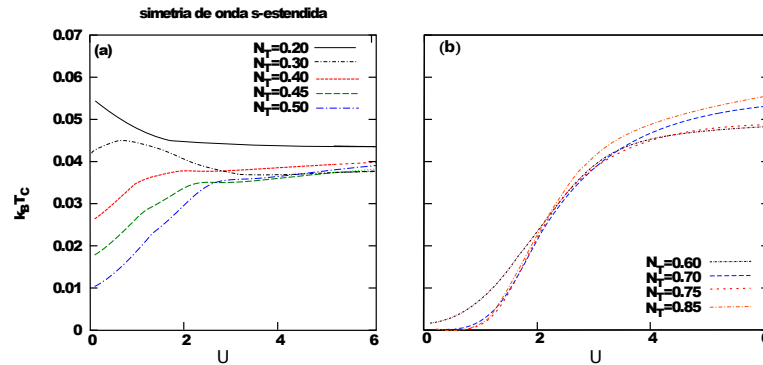
Figura 5.25 – Comportamento do  $k_B T_c$  em relação a ocupação total  $N_T$ , numa região de  $N_T < 1$ , com diferentes valores da interação coulombiana  $U$ .



Fonte: Autor.

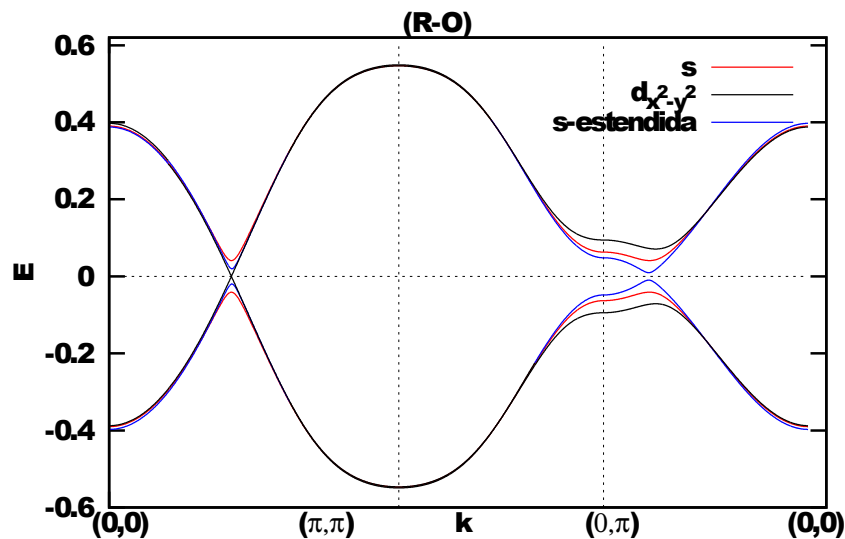
regimes de ocupação. Para baixas ocupações  $N_T \lesssim 0,50$  o  $T_c$  tende a saturar conforme  $U$  aumenta. No painel (b), são mostrados resultados para ocupações mais altas,  $N_T > 0,50$ . Nesse caso, o  $T_c$  sempre aumenta com  $U$  pelos mesmos motivos discutidos na figura 5.25, isto é, as correlações antiferromagnéticas movem as regiões das bandas em  $(\pi, \pi)$  e  $(0, 0)$  para próximo do potencial químico  $\mu$ , gerando uma alta densidade de estados próximo ao  $\mu$ .

Figura 5.26 – Comportamento do  $k_B T_c$  em função da interação coulombiana para diferentes ocupações, usando a aproximação R-M.



Fonte: Autor.

Figura 5.27 – Estrutura de bandas do estado supercondutor mostrando as duas bandas mais próximas do nível de Fermi para a aproximação R-O comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se  $T = 0, 0$ ,  $U = 2, 0$  eV e  $N_T = 0, 60$ .



Fonte: Autor.

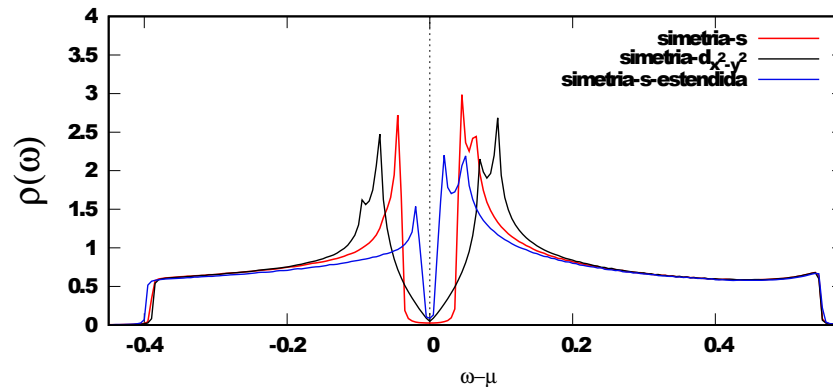
### *Estrutura de bandas e densidade de estados para o estado supercondutor*

A estrutura de bandas para o estado supercondutor na aproximação R-O é mostrada na figura 5.27 para as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. As simetrias  $s$  e  $s$ -estendida apresentam gap tanto na direção  $(0, 0)$ - $(\pi, \pi)$  quanto na direção do ponto  $(0, \pi)$ . No entanto, para a simetria  $s$ , o gap é isotrópico, ou seja, tem a mesma largura em todas as direções. A simetria  $d_{x^2-y^2}$  apresenta o maior gap na região do ponto  $(0, \pi)$  e não apresenta gap na direção  $(0, 0)$ - $(\pi, \pi)$ .

As densidades de estados (DOS) para a aproximação R-O, mostrando os gaps do estado supercondutor para as diferentes simetrias, são mostradas na figura 5.28. A DOS para a simetria  $s$  apresenta um gap total em uma região entorno do potencial químico.



Figura 5.28 – Densidade de estados do estado supercondutor mostrando a região próxima do nível de Fermi para a aproximação R-M, comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se  $T = 0, 0$ ,  $U = 2, 0$  eV e  $N_T = 0, 60$ .



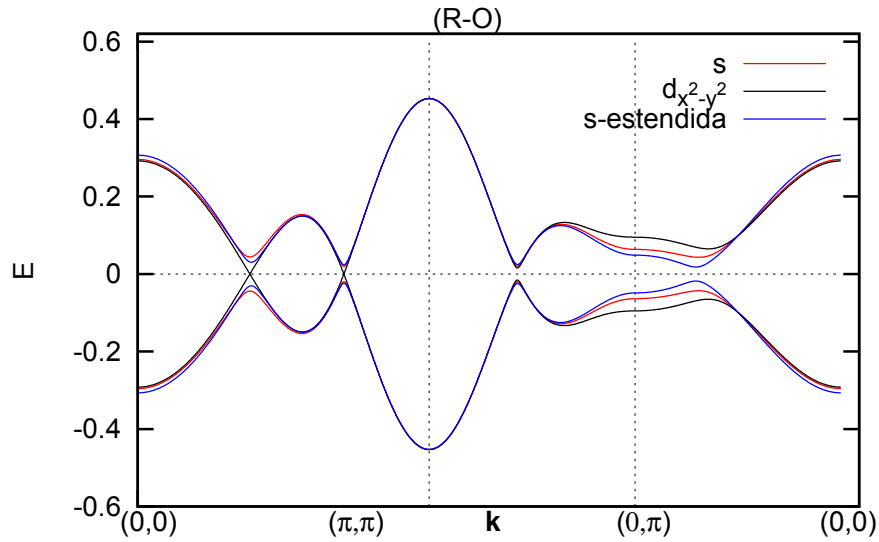
Fonte: Autor.

Para a simetria s-estendida, o gap supercondutor é menor e tem o formato da letra V. Para a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , o gap tem um formato de um V mais aberto e a densidade de estados é nula somente em  $\omega - \mu = 0$ . Os comportamentos das DOS e das estruturas de bandas estão de acordo com o esperado para cada uma das simetrias.

As estruturas de bandas para as diferentes simetrias para a aproximação R-M são apresentadas na figura 5.29. Observa-se uma estrutura mais complexa do que na aproximação R-O. Para a aproximação R-M, as correlações antiferromagnéticas deslocam as bandas do tipo elétron para baixas energias e as do tipo buraco para altas energias na região do ponto  $(\pi, \pi)$ . Assim, aparece o dobro do número de gaps nas bandas, quando comparadas com as bandas da aproximação R-O.

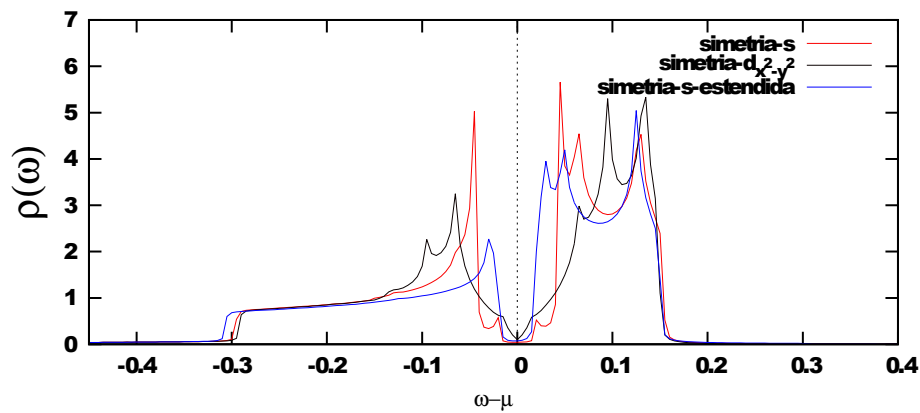
As densidades de estados para a aproximação R-M são mostradas na figura 5.30. Devido à presença do dobro do número de gaps nas estruturas de bandas, os gaps nas densidades de estados apresentam uma estrutura de dois gaps sobrepostos em cada uma das simetrias. Na simetria s, a DOS apresenta um gap total menor e um gap parcial mais largo. O gap total ocorre nas regiões mais próximas do ponto  $(\pi, \pi)$  enquanto que o gap maior ocorre em  $(0, \pi)$  e próximo a  $(0, 0)$ . Para a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , o gap ocorre somente nas direções  $(\pi, \pi) - (0, \pi) - (0, 0)$ , sendo que o gap é menor na direção  $(\pi, \pi) - (0, \pi)$  e maior na direção  $(0, \pi) - (0, 0)$ . O gap na DOS com simetria s-estendida, aparentemente não apresenta uma estrutura de dois gaps sobrepostos.

Figura 5.29 – Estrutura de bandas do estado supercondutor mostrando as duas bandas mais próximas do nível de Fermi para a aproximação R-O comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se  $T = 0,0$ ,  $U = 2,0$  eV e  $N_T = 0,60$ .



Fonte: Autor.

Figura 5.30 – Densidade de estados do estado supercondutor mostrando a região próxima do nível de Fermi para a aproximação R-M, comparando as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Considerou-se  $T = 0,0$ ,  $U = 2,0$  eV e  $N_T = 0,60$ .



Fonte: Autor.

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo do presente trabalho foi o de investigar os efeitos das correlações nas propriedades normais e supercondutoras de um modelo de Hubbard de uma banda com um termo de pareamento o qual é responsável pela supercondutividade. Esse estudo pode ser relacionado com supercondutores de altas temperaturas cupratos, os quais possuem o gap supercondutor com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ , mas também pode ser aplicado em supercondutores com simetria  $s$  ou  $s$ -estendida. Assim, considerou-se supercondutividade com simetria de ondas  $s$ ,  $d_{x^2-y^2}$  e  $s$ -estendida. Um dos principais objetivos, foi verificar como as correlações antiferromagnéticas associadas à função de correlação spin-spin  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ , afetam o  $T_c$ . Essas correlações podem dar origem a um *pseudogap* presente na densidade de estados do estado normal. Portanto, pode ser importante para o estudo dos supercondutores fortemente correlacionados, investigar se há relação entre os mecanismos responsáveis pelo *pseudogap* e os mecanismos responsáveis pela supercondutividade.

O modelo de Hubbard foi tratado utilizando a técnica das funções de Green em conjunto com diferentes níveis de aproximação, campo médio (C-M), aproximação de n-polos proposta por Roth (1969), Beenen e Edwards (1995) (R-O) e a aproximação de n-polos modificada (R-M) (CALEGARI; MAGALHÃES, 2011), conforme discutido na seção 4.2. As diferentes aproximações foram consideradas para permitir o estudo dos efeitos das correlações na supercondutividade, em diferentes níveis. Foram apresentados resultados para o regime de dopagem por buracos e também para o regime de dopagem por elétrons dando uma atenção maior para o regime de dopagem por buracos. Inicialmente, mostrou-se que o salto para os segundos vizinhos ( $t_2$ ) é importante para quebrar a simetria entre os dois regimes de dopagem. Os resultados para o  $T_c$  com a simetria isotrópica  $s$  mostram que, em geral, o  $T_c$  é maior no regime de dopagem por buracos do que no regime de dopagem por elétrons. Além disso, a aproximação R-M foi a que apresentou o maior  $T_c$  enquanto que a aproximação de campo médio apresentou o menor  $T_c$ . Para entender esse resultado, foi feita uma análise das estruturas de bandas e das densidades de estados nas três diferentes aproximações. Considerando que os elétrons responsáveis pela supercondutividade são aqueles mais próximos do nível de Fermi, uma alta densidade de estados no nível de Fermi deve produzir o maior  $T_c$ . Assim, observou-se que a aproximação R-M que apresenta o maior  $T_c$ , também apresenta a maior densidade de estados no nível de Fermi ( $\rho(\omega = \mu)$ ). Por outro lado, a aproximação C-M apresenta a menor  $\rho(\omega = \mu)$  e o menor  $T_c$ . A densidade de estados  $\rho(\omega = \mu)$  está diretamente relacionada com as correlações. Na aproximação R-M, as correlações antiferromagnéticas distorcem as bandas de energia, gerando bandas mais estreitas, portanto, com alta densidades de estados. Através de um diagrama de fase de  $T_c$  versus  $N_T$  com diferentes valores da interação coulombiana  $U$ , mostrou-se que, na região de dopagem por buracos, o  $U$  age no sentido de suprimir a supercondutividade

na região de ocupação maior, mas favorece na região de ocupações intermediárias dentro do regime de dopagem por buracos. Esse resultado é interessante porque sugere que na presença de correlações, a supercondutividade com simetria  $s$  ocorre em um regime onde as correlações não são extremamente fortes. Na verdade, com a abertura do *pseudogap* no regime de correlações fortes, caracterizado por altas ocupações e interação coulombiana, existem menos elétrons disponíveis no nível de Fermi afetando diretamente o  $T_c$ .

Para a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , observou-se valores maiores para  $T_c$  quando comparados com os valores obtidos na simetria  $s$ . Para entender essa diferença, foi feita uma análise do comportamento de  $\varphi(\vec{k})^2$ , o qual define as diferentes simetrias do parâmetro de ordem. Essa análise mostrou que para a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , há uma contribuição maior dos estados na região do potencial químico, quando comparado com a simetria  $s$ . Isso explica o maior  $T_c$  exibido pela simetria  $d_{x^2-y^2}$ . Esse estudo ajuda a entender porque supercondutores com simetria  $d_{x^2-y^2}$  como é o caso dos cupratos possuem  $T_c$  maior do que supercondutores convencionais com simetria  $s$ .

Os resultados de  $T_c$  para a simetria  $s$ -estendida mostraram uma diferença significativa em relação aos resultados das simetrias  $s$  e  $d_{x^2-y^2}$ . Para a simetria  $s$ -estendida, a supercondutividade ocorre principalmente em uma região de ocupação baixa ou alta, excluindo o regime intermediário de ocupação. A análise de  $\varphi(\vec{k})^2$  mostrou que as regiões da primeira zona de Brillouin que mais contribuem para a supercondutividade com simetria  $s$ -estendida, são as regiões dos pontos  $(\pi, \pi)$  e  $(0, 0)$ . Na densidade de estados, essas regiões são acessadas quando o potencial químico está em uma das extremidades da densidade de estados. Em geral, essa situação ocorre em ocupações muito baixas ou muito altas. Por outro lado, um estudo mais detalhado com a aproximação R-M, no regime de dopagem por buracos, mostrou que, com o aumento da interação coulombiana  $U$ , a supercondutividade passa a ocorrer também para ocupações intermediárias, próximas de  $N_T = 1, 0$ . Isso acontece porque com o aumento da interação coulombiana  $U$ , as correlações antiferromagnéticas se intensificam e deslocam a banda de energia para perto do potencial químico nas regiões dos pontos  $(\pi, \pi)$  e  $(0, 0)$ , que são as regiões que mais contribuem para a supercondutividade com simetria  $s$ -estendida. Ou seja, as correlações antiferromagnéticas responsáveis pelo *pseudogap*, podem também favorecer a supercondutividade com simetria  $s$ -estendida.

Além da função de correlação  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ , para o regime de dopagem por buracos, foi apresentado também um estudo de correlações importantes, como a dupla ocupação  $\langle n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} \rangle$  e da função de correlação de salto  $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle$  que estão diretamente associadas à energia total do sistema. Observou-se que ambas as funções de correlação são suprimidas com o aumento da interação coulombiana, principalmente no regime de ocupações mais altas onde as correlações são mais fortes.

Para concluir, os resultados deste trabalho mostram que as correlações afetam diretamente as propriedades supercondutoras do modelo, como foi observado na temperatura

crítica de transição. Em um cenário onde correlações antiferromagnéticas dão origem a um *pseudogap* na densidade de estados, essas mesmas correlações podem desfavorecer ou favorecer a supercondutividade, dependendo da simetria do parâmetro de ordem supercondutor. Os resultados para as simetrias  $s$  e  $d_{x^2-y^2}$  concordam qualitativamente com os resultados teóricos apresentados nas referências (DOMANISKI; WYSOKINISKI, 1999; OLIVEIRA; SACRAMENTO, 2002; DOMANINSKI, 2002; SACRAMENTO; APARÍCIO; NUNES, 2010). No entanto, os efeitos de  $U$  no  $T_c$  na simetria  $s$ -estendida, para a aproximação R-M, mostrando que o  $T_c$  pode aumentar com o  $U$ , não concordam totalmente com os resultados apresentados nas referências (DOMANISKI; WYSOKINISKI, 1999; OLIVEIRA; SACRAMENTO, 2002; DOMANINSKI, 2002; SACRAMENTO; APARÍCIO; NUNES, 2010) onde, mostrou-se que o  $U$  destrói a supercondutividade. Uma possível explicação para essa contradição, é que nos trabalhos apresentados nessas referências, as correlações antiferromagnética não são levadas em conta.

Como continuação deste trabalho, seria interessante aplicar esse formalismo no estudo de modelos multibandas utilizados para descrever supercondutores a base de ferropnictídeos, os quais podem apresentar *pseudogap* e a simetria do parâmetro de ordem ainda não é bem estabelecida.

## REFERÊNCIAS

A.A. GOR'KOV L.P., D. I. A. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. [S.l.]: PH, 1963. ISBN 315-320-342-3,215-239-261-2.

ABRIKOSOV, A. **Fundamentals of the Theory of Metals**. [S.l.]: North Holland, 1988. ISBN 0444870954.

ASHOK. **Field Theory: A Path Integral Approach**. 2. ed. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2006. (World Scientific Lecture Notes in Physics). ISBN 9812568476,9789812568472.

AVELLA, A.; MANCINI, F. Underdoped cuprate phenomenology in the two-dimensional hubbard model within the composite operator method. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 75, p. 134518, Apr 2007. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.134518>>.

BADOUX, S. et al. Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor. *Nature Physics*, 531, p. 210–214, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature16983>>.

BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Microscopic theory of superconductivity. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 106, p. 162–164, Apr 1957. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.106.162>>.

Bednorz, J.; Müller, K. Possible high  $t_c$  superconductivity in the ba-la-cu-o system. **Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter**, v. 64, p. 189–193, jun 1986.

BEENEN, J.; EDWARDS, D. M. Superconductivity in the two-dimensional hubbard model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 52, p. 13636–13651, Nov 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.13636>>.

BLATT, F. J. et al. **Thermoelectric Power of Metals**. 1. ed. [S.l.]: Springer US, 1976. ISBN 978-1-4613-4270-0,978-1-4613-4268-7.

BUTKOV, E. **Mathematical physics**. New ed. [S.l.]: Addison-Wesley Educational Publishers Inc, 1973. (World Student). ISBN 0201007479,9780201007473.

CALEGARI, E.; MAGALHÃES, S. Spectral function of a d-p hubbard model. **International Journal of Modern Physics B**, v. 25, p. 41–53, 01 2011.

CALEGARI, E.; RODRIGUEZ-NUNEZ, J. Superconductivity in the presence of correlations. **Physics Letters A**, v. 380, n. 3, p. 495 – 501, 2016. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960115009512>>.

CHARLES., K. **Introduction to Solid State Physics**. [S.l.]: Wiley, 1953.

CHARLES, P. et al. **Superconductivity**. 2. ed. [S.l.]: Academic Press, 2007. ISBN 0120887614.

COOPER, L. N. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 104, p. 1189–1190, Nov 1956. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.104.1189>>.

DAGOTTO, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 66, p. 763–840, Jul 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66.763>>.

DAMASCELLI, A.; HUSSAIN, Z.; SHEN, Z.-X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 75, p. 473–541, Apr 2003. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.473>>.

DOMANINSKI, T. Effect of on-site coulomb repulsion on superconductivity in the boson-fermion model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 66, p. 134512, Oct 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.134512>>.

DOMANINSKI, T.; WYSOKINISKI, K. I. Superconducting phases in the presence of coulomb interaction: From weak to strong correlations. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 59, p. 173–176, Jan 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.173>>.

DONIACH, E. H. S. **Green's Functions for Solid State Physicists**. [S.l.]: Imperial College Press; Distributed by World Scientific Pub, 1998. ISBN 9781860940781,1860940781,1860940803.

ECONOMOU, E. N. **Green's Functions in Quantum Physics**. 3rd ed.. ed. [S.l.]: Springer, 2006. (Springer Series in Solid-State Sciences). ISBN 3540288384,9783540288381.

FETTER, J. D. W. A. L. **Quantum theory of many-particle systems**. First edition. [S.l.]: Mcgraw-Hill College, 1971. (Pure and Applied Physics). ISBN 9780070206533,0070206538.

FOURNIER, P. T' and infinite-layer electron-doped cuprates. **Physica C: Superconductivity and its Applications**, v. 514, p. 314 – 338, 2015. ISSN 0921-4534. Superconducting Materials: Conventional, Unconventional and Undetermined. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921453415000635>>.

GONZALEZ, J. et al. **Quantum electron liquids and high-Tc superconductivity**. 1. ed. [S.l.]: Springer, 1995. (Lecture Notes in Physics New Series M). ISBN 3540605037.

HARRISON, N.; MCDONALD, R. D.; SINGLETON, J. Cuprate fermi orbits and fermi arcs: The effect of short-range antiferromagnetic order. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 99, p. 206406, Nov 2007. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.206406>>.

HASHIMOTO et al. Energy gaps in high-transition-temperature cuprate superconductors. **Nature Physics**, v. 10, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys3009>>.

HIRSCHFELD, P. J. Using gap symmetry and structure to reveal the pairing mechanism in fe-based superconductors. **Comptes Rendus Physique**, v. 17, n. 1, p. 197 – 231, 2016. ISSN 1631-0705. Iron-based superconductors and Supraconducteurs à base de fer. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631070515001693>>.

HUBBARD, J. Electron correlation in narrow energy bands. The Royal Society, v. 276, p. 238–257, 1963. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2414761>>.

IKEDA, M.; LARSEN, U.; MATTUCK, R. Another approach to localized magnetic moments in the hubbard model. **Physics Letters A**, v. 39, n. 1, p. 55 – 56, 1972. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960172903258>>.

IMADA, M.; FUJIMORI, A.; TOKURA, Y. Metal-insulator transitions. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 70, p. 1039–1263, Oct 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.1039>>.

INNES, A. **Introduction to Superconductivity**. Revised. [S.l.]: Pergamon Press, 1978. ISBN 978-0-08-021651-5, 0-08-021651-X, 0-08-021652-8.

JAPIASSÚ, G. M.; CONTINENTINO, M. A.; TROPER, A. Mean-field treatment of the hybridization influence on narrow-band superconductivity. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 45, p. 2986–2992, Feb 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.45.2986>>.

KAMIMURA, H. et al. **Theory of Copper Oxide Superconductors**. [S.l.]: Springer, 2005. ISBN 9783540251897, 3540251898.

KAMPF, A.; SCHRIEFFER, J. R. Pseudogaps and the spin-bag approach to high- $t_c$  superconductivity. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 41, p. 6399–6408, Apr 1990. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.6399>>.

KEIMER B. KIVELSON, S. A. N. M. R. S. Z. J. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides. **Nature**, American Physical Society, v. 518, p. 235106, Jun 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature14165>>.

KHARE, N. **Handbook of high-temperature superconductor electronics**. 1. ed. [S.l.]: CRC Press, 2003. (Applied Physics). ISBN 9780824708238, 0824708237.

KORDYUK, A. A. Pseudogap from arpes experiment: Three gaps in cuprates and topological superconductivity (review article). **Low Temperature Physics**, v. 41, n. 5, p. 319–341, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.4919371>>.

KUZMICHEVA, T. E. et al. Superconducting gap symmetry in the superconductor  $\text{bafe}_{1.9}\text{ni}_{0.1}\text{as}_2$ . **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 97, p. 235106, Jun 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.235106>>.

LEE, P. A.; NAGAOSA, N.; WEN, X.-G. Doping a mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 78, p. 17–85, Jan 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.17>>.

MACRIDIN, A.; JARRELL, M. Bond excitations in the pseudogap phase of the hubbard model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 78, p. 241101, Dec 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.241101>>.

MACRIDIN, A. et al. Pseudogap and antiferromagnetic correlations in the hubbard model. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 97, p. 036401, Jul 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.036401>>.



MAHAN, G. D. **Many-particle physics**. 2nd ed. ed. [S.l.]: Plenum Press, 1990. (Physics of solids and liquids). ISBN 0306434237,9780306434235.

MAHANTY, J. **The Green function method in solid state physics: An introduction**. [S.l.]: New Delhi, India:Affiliated East-West Press, 1974. ISBN B0007AH3BC.

MISHRA VIVEK. CHATTERJEE, U. C. J. C. N. M. R. Effect of the pseudogap on the transition temperature in the cuprates and implications for its origin. **Nature Physics**, v. 10, n. 357, p. 197 – 231, 2014.

MOTT, N. F. The transition to the metallic state. **The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics**, Taylor and Francis, v. 6, n. 62, p. 287–309, 1961. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786436108243318>>.

MOTT, N. F.; PEIERLS, R. Discussion of the paper by de boer and verwey. **Proceedings of the Physical Society**, v. 49, n. 4S, p. 72, 1937. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0959-5309/49/i=4S/a=308>>.

NARLIKAR AKIMITSU, J. A. V. B. D. H. B. A. H. H. C. C. C. A. V. **Frontiers in Superconducting Materials**. -. [S.l.]: Springer, 2005. (-, -). ISBN 3-540-24513-1,3-540-24513-8.

NORMAN, M. R. et al. Destruction of the fermi surface in underdoped high- $t_c$  superconductors. **Nature**, v. 392, n. 6672, p. 157–160, mar 1998. ISSN 0028-0836.

OLIVEIRA, L. P.; SACRAMENTO, P. D. Local f-electron superconductivity in an interacting conduction band. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 66, p. 014516, Jul 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.014516>>.

PETERS, R.; BAUER, J. Local origin of the pseudogap in the attractive hubbard model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 92, p. 014511, Jul 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.014511>>.

PRELOVSEK, P.; RAMSAK, A. Pseudogap in the density of states in cuprates. **Physica C: Superconductivity**, v. 341-348, p. 893 – 894, 2000. ISSN 0921-4534. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092145340000722X>>.

RAY, P. et al. Staging superstructures in high- $t_c$  sr/o codoped  $La_{2-x}Sr_xCu_{4+y}$ . **Physical Review B**, v. 96, p. 174106, 11 2017.

RAY, P. J. **Estructural investigation of  $La_{2-x}Sr_xCu_{4+y}$** . [S.l.]: University of Copenhagen, 2015.

REID, J. et al. From d-wave to s-wave pairing in the iron-pnictide superconductor  $(ba,k)Fe_2As_2$ . **Superconductor Science and Technology**, IOP Publishing, v. 25, n. 8, p. 084013, jul 2012.

REYES, D. et al. Influence of the symmetry of hybridization on the critical temperature of multiband superconductors. **Physical Review B**, APS, v. 99, n. 22, p. 224514, 2019.

RODRIGUEZ-NUNEZ, J.; ALEX, S. Superconducting critical temperature, for s-wave symmetry order parameter, for intermediate correlated electron systems. v. 350, p. 88–96, 02 2001.

RODRIGUEZ-NUNEZ, J. et al. Metal-insulator transition driven by short range ferromagnetic correlations. **Physics Letters A**, v. 288, n. 3, p. 220 – 226, 2001. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960101005606>>.

ROMANO, A.; NOCE, C.; MICNAS, R. Symmetry of the superconducting order parameter in the anderson lattice model with nearest-neighbor attractive interaction. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 55, p. 12640–12647, May 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.12640>>.

ROTH, L. M. Electron correlation in narrow energy bands. i. the two-pole approximation in a narrow  $s$  band. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 184, p. 451–459, Aug 1969. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.184.451>>.

SACRAMENTO, P. D.; APARÍCIO, J.; NUNES, G. S. Superconductivity in the anderson lattice: a finite-temperature boson description. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 22, n. 6, p. 065702, jan 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.10882F0953-89842F222F62F065702>>.

SALINAS, S. **Introduction to statistical physics**. 1. ed. [S.l.]: Springer, 2001. ISBN 0387951199,9780387951195.

SANTOSO, I. **K-space Microscopy  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$  Fermiology and Many-Body Effects**. 05 2008. 100 p. Tese (Doutorado), 05 2008.

SHEN, D. D. Z.-X. Electronic structure and photoemission studies of late transition-metal oxides-mott insulators and high-temperature superconductors. **PHYSICA REPORTS**, v. 253, p. 1–995, 1995.

SINGH, A. Equation of motion approach for the hubbard model: improved decoupling scheme, charge fluctuations, and the metal-insulator transition. 02 2000.

SPIEGEL, M. R. **Real variables, Lebesgue measure with applications to Fourier series**. [S.l.]: McGraw-Hill Companies, 1969. (Schaum's outline). ISBN 0070602212,9780070602212.

TAKAGI, H. et al. Superconductor-to-nonsuperconductor transition in  $(La_{1-x}Sr_x)_2CuO_4$  as investigated by transport and magnetic measurements. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 40, p. 2254–2261, Aug 1989. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.40.2254>>.

TIMUSK, T.; STATT, B. The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey. **Reports on Progress in Physics**, v. 62, n. 1, p. 61, 1999.

TINKHAM, M. **Introduction to superconductivity**. 2nd ed. ed. [S.l.]: McGraw Hill, 1996. (International series in pure and applied physics). ISBN 0070648786,9780070648784.

ZHAO, G. meng. Unambiguous evidence for extended s-wave pairing symmetry in hole-doped high-temperature superconductors. **Philosophical Magazine**, Taylor and Francis, v. 84, n. 36, p. 3861–3867, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786430412331293504>>.

ZUBAREV, D. N. Double-time green functions in statistical physics. **Phys. Usp**, Physics-Uspeski, v. 3, n. 3, p. 320–345, 1960. Disponível em: <<http://ufn.ru/en/articles/1960/3/b/>>.