

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

Leonardo Costa Prauchner

**COEXISTÊNCIA DE SUPERCONDUTIVIDADE E *CHARGE DENSITY*  
WAVE EM UM REGIME CORRELACIONADO**

Santa Maria, RS  
2021



Leonardo Costa Prauchner

**COEXISTÊNCIA DE SUPERCONDUTIVIDADE E *CHARGE DENSITY WAVE* EM UM  
REGIME CORRELACIONADO**

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

ORIENTADOR: Prof. Eleonir João Calegari

Santa Maria, RS  
2021

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001

Costa Prauchner, Leonardo  
Coexistência de supercondutividade e charge density wave em um regime correlacionado / Leonardo Costa Prauchner.- 2021.  
112 p.; 30 cm

Orientador: Eleonir João Calegari  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, RS, 2021

1. Supercondutividade 2. Charge Density Wave 3. Modelo de Hubbard 4. Funções de Green 5. Sistemas de Elétrons Fortemente Correlacionados I. Calegari, Eleonir João II. Título.

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

Declaro, LEONARDO COSTA PRAUCHNER, para os devidos fins e sob as penas da lei, que a pesquisa constante neste trabalho de conclusão de curso (Dissertação) foi por mim elaborada e que as informações necessárias objeto de consulta em literatura e outras fontes estão devidamente referenciadas. Declaro, ainda, que este trabalho ou parte dele não foi apresentado anteriormente para obtenção de qualquer outro grau acadêmico, estando ciente de que a inveracidade da presente declaração poderá resultar na anulação da titulação pela Universidade, entre outras consequências legais.

---

©2021

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

End. Eletr.: [leo.prauchner@gmail.com](mailto:leo.prauchner@gmail.com)

**Leonardo Costa Prauchner**

**COEXISTÊNCIA DE SUPERCONDUTIVIDADE E *CHARGE DENSITY WAVE* EM UM  
REGIME CORRELACIONADO**

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

**Aprovado em 28 de abril de 2021:**

---

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

---

**Fábio Mallmann Zimmer, Dr. (UFMS) (videoconferência)**

---

**Ricardo Luciano Sônego Farias, Dr. (UFSM) (videoconferência)**



Santa Maria, RS  
2021



## DEDICATÓRIA

*Aos meus pais e meu irmão, por todo o apoio.*



## AGRADECIMENTOS

*Aos meus pais, Maira e Claudio, e ao meu irmão Diogo, pelo apoio durante toda minha vida. Ao meu orientador, Eleonir João Calegari, pela orientação e paciência. Aos meus professores, amigos e colegas do Laboratório de Teoria da Matéria Condensada, pela convivência e discussões. Aos meus cães, Pipoca e Bob, pelo apoio emocional. E por fim, agradeço à CAPES<sup>1</sup> e ao CNPq<sup>2</sup>, pelo financiamento que permitiu a realização deste trabalho*

---

<sup>1</sup>O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (Capes) - Código de Financiamento 001.

<sup>2</sup>O autor foi bolsista do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico durante a elaboração deste trabalho. Número do processo junto ao CNPq: 134177/2019-3



*If it can, we will know if it does*

*(Rhett James McLaughlin)*



## RESUMO

### COEXISTÊNCIA DE SUPERCONDUTIVIDADE E *CHARGE DENSITY WAVE* EM UM REGIME CORRELACIONADO

AUTOR: Leonardo Costa Prauchner

ORIENTADOR: Eleonir João Calegari

Os sistemas de elétrons fortemente correlacionados despertam interesse de pesquisadores de diversas áreas. Contudo, uma das principais categorias destes são os supercondutores não convencionais, também conhecidos como supercondutores de altas temperaturas. Caracterizados por uma temperatura crítica acima dos 32 K, previstos pela teoria BCS, normalmente apresentam comportamentos típicos de sistemas fortemente correlacionados, como por exemplo, nos cupratos. Esta categoria de sistemas apresenta um riquíssimo diagrama de fases, com diversas fases e regimes de coexistência. O caso dos cupratos é um exemplo onde as fases supercondutora e *charge density wave* (CDW) coexistem, além de apresentar as fases antiferromagnéticas e spin density wave. Existe um consenso de que os mecanismos que geram a supercondutividade em sistemas como os cupratos estejam diretamente associados às outras fases vizinhas da fase supercondutora, sendo assim, o estudo dessas fases e de sua coexistência é importante para um melhor entendimento desses sistemas. O objetivo principal deste trabalho é estudar os efeitos da interação coulombiana repulsiva  $U$  na região de coexistência entre a fase supercondutora e a fase CDW. A principal característica da fase supercondutora é a resistência nula abaixo de uma determinada temperatura, enquanto que a fase *charge density wave* é caracterizada por um modulamento periódico de carga na rede. Para realizar este estudo, foi utilizada um modelo tipo BCS que leva em consideração as fases CDW e supercondutora. Para tratar o modelo, utilizou-se a técnica das funções de Green no formalismo de Matsubara. Porém, o modelo utilizado não leva em consideração as correlações fortes devido às interações coulombianas. Utiliza-se o fato de que o formalismo é invariante perante a presença de correlações, e as mesmas são introduzidas a partir da substituição da função de Green para o estado normal não correlacionada por uma correlacionada, obtida através do modelo de Hubbard de uma banda, tratado com a aproximação de Hubbard-I. O modelo de Hubbard é tradicionalmente utilizado para estudos de sistemas fortemente correlacionados, tais como os cupratos. Utilizando a combinação destas técnicas analíticas, juntamente com programas desenvolvidos em linguagem Fortran 95, estudou-se os efeitos de  $U$  no comportamento dos gaps supercondutor e *charge density wave*, puros e em coexistência. O principal efeito de  $U$  observado foi um desfavorecimento de ambas as fases, que por consequência, tende a destruir a coexistência das duas. Também verificou-se que o *hopping* de segundos vizinhos  $t_1$  tem efeitos semelhantes à interação coulombiana  $U$ . Devido à ocupação média por sítio estabilizar no limite de altos valores de  $U$ , os efeitos

da interação  $U$  sofrem uma tendência de saturação a partir de um determinado valor de  $U$ . Também foi constatado que o aumento de  $U$  requer um aumento no valor do potencial atrativo  $V$ , a fim de estabilizar as fases em questão.

**Palavras-chave:** supercondutividade. coexistência. *charge density wave*. correlações. modelo de Hubbard. funções de Green.

## ABSTRACT

### COEXISTENCE OF SUPERCONDUCTIVITY AND *CHARGE DENSITY WAVE* IN A CORRELATED REGIME

AUTHOR: Leonardo Costa Prauchner  
ADVISOR: Eleonir João Calegari

The strongly correlated electron systems raise the interest of researchers from different areas. However, one of the main categories of those are the unconventional superconductors, also known as high- $T_c$  superconductors. Characterized by a critical temperature above 32 K, predicted by the BCS theory, those systems generally show typical strongly correlated systems behaviors, such as in cuprates. This category of systems have a rich phase diagram, with many phases and coexistence regimes. The case of cuprates is an example where both charge density wave and superconductivity coexist, while also showing the antiferromagnetic and spin density wave phases. There exists a consensus that the mechanisms that generate the superconductivity on systems like cuprates are directly associated to the other, neighbouring phases to the superconductivity. Thanks to that, studying those phases and their coexistence is of utmost importance to the understanding of those systems. The main objective of this work is to analyze the effects of the repulsive coulomb interaction  $U$  on the coexistence between superconductivity and charge density wave phases region. The main characteristic of the superconductor phase is the null resistance below a certain temperature, while the charge density wave is characterized by a periodic charge modulation on the lattice. With the intent of perform this study, a BCS-like model was used, which considers both the CDW and superconductivity phases. To be able to study the model, the Green's functions technique was used, alongside the Matsubara's formalism. However, the utilized model does not consider strong correlations. The fact that the Matsubara's formalism is invariant towards correlations allows the introduction of correlations by replacing the normal state uncorrelated Green's function by a new Green's function, obtained through the Hubbard-I approximation. The Hubbard model is traditionally used to study strongly correlated systems. Utilizing the combination from those analytical techniques, together with programs developed in the Fortran 95 language, the effects of  $U$  on the superconductor and charge density wave gaps were studied, on their pure and coexistence regime. The main effect of  $U$  that was observed is a suppression on both phases, that tends to destroy the coexistence of them. The effect of the second nearest neighbor hopping  $t_1$  and  $U$  on the gaps was also verified, where both suffered a partial suppression. On the high values of  $U$  limit, there is a stabilization of the values of the occupation, which is equivalent to the half-filling regime, that causes  $U$  to have a saturation tendency above a certain  $U$  value. It has been observed that a rise on the value of  $U$  also requires a rise on the  $V$  values, to stabilize both phases.

**Keywords:** superconductivity. coexistence. charge density wave. correlations. Hubbard model. Green's functions.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Esquemática gráfica das possíveis transições para materiais que apresentam comportamento isolante de Mott. ....	23
Figura 2.2 – Diagrama de fases baseado no modelo de Hubbard no plano $U/t$ e ocupação ( <i>filling</i> ) $\langle n_{i,\sigma} \rangle$ . ....	24
Figura 3.1 – Resistividade elétrica ( $\Omega$ ) de uma amostra de Hg em função da temperatura. ....	29
Figura 3.2 – Gap supercondutor ( $\Delta$ ) em função da temperatura(K). ....	30
Figura 3.3 – Linha do tempo dos supercondutores tipo-II. ....	33
Figura 3.4 – Diagrama de fases de um cuprato. ....	34
Figura 4.1 – Representação gráfica de uma onda de densidade de carga. ....	35
Figura 7.1 – Bandas de energia para o estado supercondutor na ausência de correlações em $T = 0$ e para simetria $s$ . ....	64
Figura 7.2 – Bandas de energia para o estado supercondutor com $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}+\mathbf{Q}$ na ausência de correlações em $T = 0$ e com simetria $s$ calculados com $V = 2t_0, t_1 = 0, 125t_0$ e $\mu = 1t_0$ . ....	65
Figura 7.3 – Bandas de energia do estado supercondutor com simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ . ....	67
Figura 7.4 – Densidade de estados para o estado supercondutor na ausência de correlações fortes com $V = 2t_0, \mu = 0, k_B T = 0$ e $t_1 = 0$ . ....	67
Figura 7.5 – Gap supercondutor na ausência de correlações fortes, para simetria $s$ . Em (a) foi variado o valor de $V$ mantendo $t_1 = \mu = 0$ , em (b) variou-se $t_1$ com $V = 2t_0$ fixo e $\mu = 0$ e em (c) foi variado $\mu$ com $V = 2t_0$ e $t_1 = 0$ . ..	68
Figura 7.6 – Gap supercondutor na ausência de correlações fortes, com simetria $d_{x^2-y^2}$ . No painel (a), foi variado $V$ mantendo $\mu = t_1 = 0$ , no painel (b) variou-se $t_1$ com $V = 2t_0, \mu = 0$ e no painel (c) foi variado $\mu$ com $V = 2t_0, t_1 = 0$ . .	69
Figura 7.7 – Diferença entre as energias livres para o estado supercondutor, $F$ , e a energia livre para o estado normal, $F_0$ , em função de $\Delta$ , para diferentes valores de $\mu$ , para simetrias $s$ e $d_{x^2-y^2}$ . Manteve-se fixo $V = 2t_0$ e $t_1 = 0$ . ....	70
Figura 7.8 – Bandas de energia para o modelo BCS com <i>charge density wave</i> na ausência de correlações fortes. ....	71
Figura 7.9 – Densidade de estados para o caso <i>charge density wave</i> na ausência de correlações fortes para $T = 0, V = 2t_0$ e $\mu = 0$ . ....	73
Figura 7.10 – Gap CDW em função da temperatura para diferentes valores de $t_1$ e $V$ . No painel (a) é mantido fixo $t_1 = \mu = 0$ , variando $V$ . No painel (b), tem-se $V = 2t_0$ e $\mu = 0$ fixos. ....	74
Figura 7.11 – Diferença entre a energia livre do estado CDW e a energia livre do estado normal $F_0$ , em função de $W$ . No painel (a), foi calculado $F - F_0$ para diferentes valores de $\mu$ com $T = 0$ , onde $V = 2t_0$ e $t_1 = 0$ foram mantidos fixos. Nos painéis (b) e (c), manteve-se fixo $\mu = 0, 245t_0$ e variou-se $T$ . ....	75
Figura 7.12 – Bandas de energia na região de abertura dos gaps para o estado CDW, supercondutor e coexistência das duas fases com $t_1 = \mu = 0$ em $T = 0$ . Nos painéis (a) e (b), são apresentados os efeitos de $W$ , no painel (c) e (d) os efeitos de $\Delta$ e nos painéis (e) e (f), a coexistência. ....	76
Figura 7.13 – Bandas de energia para o modelo completo para diferentes valores de $\Delta, W$ e $t_1$ . $V = 2t_0$ e $\mu = k_B T = 0$ são mantidos fixos. ....	77

Figura 7.14 – Densidade de estados para o estado de coexistência entre supercondutividade e <i>charge density wave</i> com $W = \Delta = 0,25t_0$ , $\mu = 0$ e $V = 2t_0$ com $T = 0$ e com simetria $s$ para o gap supercondutor. ....	78
Figura 7.15 – Gaps supercondutor e CDW com coexistência em função da temperatura para diferentes valores de $t_1$ com $V = 2t_0$ , $\mu = 0$ com simetria $s$ para o gap supercondutor. ....	79
Figura 7.16 – Gap das fases supercondutora e CDW em função da interação $V$ para diferentes valores de $t_1$ com simetria $s$ , usando $k_B T = \mu = 0$ . ....	80
Figura 7.17 – Bandas de energia para o estado supercondutor, no painel (a), e de coexistência no painel (b), em $T = 0$ , $\mu = 0$ e $V = 2t_0$ com simetria $d_{x^2-y^2}$ para a supercondutividade, com diferentes valores de $t_1$ . ....	81
Figura 7.18 – Densidade de estados para a coexistência com simetria $d_{x^2-y^2}$ para a supercondutividade para diferentes valores de $t_1$ com $\mu = k_B T = 0$ . ....	82
Figura 7.19 – Gaps supercondutor e CDW com coexistência em função da temperatura para diferentes valores de $t_1$ com simetria $d_{x^2-y^2}$ usando $V = 2t_0$ e $\mu = 0$ . ....	82
Figura 7.20 – Gaps para a fase supercondutora e CDW em função da interação $V$ para diferentes valores de $t_1$ com simetria $d_{x^2-y^2}$ usando $T = 0$ e $\mu = 0$ . ....	83
Figura 7.21 – Bandas de Energia para o estado normal ( $\Delta = W = 0$ ) na presença de correlações, para diferentes valores de $t_1$ , com $k_B T = \mu = 0$ , e $V = 2t_0$ . ....	84
Figura 7.22 – Bandas de Energia para o estado supercondutor na presença de correlações, com $t_1 = 0$ , para ambas simetrias $s$ e $d_{x^2-y^2}$ . ....	85
Figura 7.23 – Bandas de Energia para o estado CDW na presença de correlações com $t_1 = \mu = k_B T = 0$ . ....	86
Figura 7.24 – Bandas de Energia para o estado de coexistência na presença de correlações, para diferentes valores de $t_1$ e com simetria $s$ e $d_{x^2-y^2}$ . ....	87
Figura 7.25 – Densidade de estados para o estado normal ( $\Delta = W = 0$ ) na presença de correlações para diferentes valores de $t_1$ , usando $k_B T = \mu = 0$ e $V = 2t_0$ . ....	88
Figura 7.26 – Densidade de estados para o estado de coexistência na presença de correlações para diferentes valores de $t_1$ e com simetria $s$ , usando $k_B T = \mu = 0$ e $V = 2t_0$ . ....	89
Figura 7.27 – Densidade de estados para o estado normal na presença de correlações para diferentes valores de $t_1$ e com simetria $d_{x^2-y^2}$ , usando $k_B T = \mu = 0$ e $V = 2$ . ....	89
Figura 7.28 – Gap supercondutor em função da temperatura para simetria de onda $s$ com $V = 2t_0$ , $\mu = 0$ e diferentes valores de $U$ , usando $t_1 = 0$ no painel (a). No painel (b), $t_1 = 0,125t_0$ . ....	90
Figura 7.29 – Gap supercondutor em função da temperatura para simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ com $V = 2t_0$ , $\mu = 0$ e diferentes valores de $U$ , usando $t_1 = 0$ no painel (a). No painel (b), $t_1 = 0,125t_0$ . ....	91
Figura 7.30 – Gap CDW em função da temperatura com $V = 3t_0$ , $\mu = 0$ e diferentes valores de $U$ , usando $t_1 = 0$ no painel (a). No painel (b), $t_1 = 0,125t_0$ . ..	91
Figura 7.31 – Gaps supercondutor e CDW em função da interação $V$ para $k_B T/t_0 = \mu = 0$ , e diferentes valores de $t_1$ e $U$ . ....	93
Figura 7.32 – Gaps supercondutor e CDW em função da interação coulombiana $U$ para $k_B T/t_0 = \mu = 0$ , e diferentes valores de $t_1$ e $V$ , com simetria $d_{x^2-y^2}$ para o gap supercondutor. ....	94
Figura 7.33 – Gaps supercondutor e CDW em função da temperatura para diferentes	

valores de $U$ , com $V = 2, 6t_0$ , $t_1 = 0, 125 t_0$ e $\mu = 0$ para ambas simetrias $s$ e $d_{x^2-y^2}$ . . . . .	96
Figura 7.34 – Gaps supercondutor e CDW em função da interação $V$ para $k_B T/t_0 = \mu = 0$ , e diferentes valores de $t_1$ e $U$ . . . . .	97
Figura 7.35 – Ocupação média por spin para o estado normal em função da interação coulombiana $U$ com $k_B T = \mu = 0$ . . . . .	98
Figura B.1 – Fluxograma do algoritmo da bissecção. . . . .	109
Figura B.2 – Fluxograma do algoritmo da auto consistência. . . . .	110



## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>21</b>
<b>2</b>	<b>SISTEMAS DE ELÉTRONS FORTEMENTE CORRELACIONADOS E MODELO DE HUBBARD</b> .....	<b>23</b>
2.1	SISTEMAS DE ELÉTRONS FORTEMENTE CORRELACIONADOS .....	23
2.2	MODELO DE HUBBARD .....	25
<b>3</b>	<b>SUPERCONDUTIVIDADE</b> .....	<b>29</b>
<b>4</b>	<b>CHARGE DENSITY WAVE</b> .....	<b>35</b>
<b>5</b>	<b>METODOLOGIA</b> .....	<b>39</b>
5.1	TÉCNICA DAS FUNÇÕES DE GREEN .....	39
5.2	MÉTODO DE MATSUBARA .....	42
5.3	APROXIMAÇÃO DE HUBBARD-I .....	48
<b>6</b>	<b>RESULTADOS ANALÍTICOS</b> .....	<b>53</b>
6.1	FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO .....	58
<b>7</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS</b> .....	<b>63</b>
7.1	REGIME NÃO CORRELACIONADO .....	64
7.1.1	<b>Estado Supercondutor</b> .....	<b>64</b>
7.1.2	<i>Charge density wave</i> .....	<b>71</b>
7.1.3	<b>Coexistência de supercondutividade e <i>charge density wave</i></b> .....	<b>75</b>
7.2	REGIME CORRELACIONADO .....	84
<b>8</b>	<b>CONCLUSÃO</b> .....	<b>99</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>103</b>
	<b>APÊNDICE A – APÊNDICE A</b> .....	<b>107</b>
	<b>APÊNDICE B – APÊNDICE B</b> .....	<b>109</b>



## 1 INTRODUÇÃO

Alvo de diversos estudos na área de física da matéria condensada, a supercondutividade de altas temperaturas críticas ainda apresenta diversos mecanismos não compreendidos. Capazes de apresentar um rico conjunto de fenômenos, estes sistemas são um dos focos da classe de sistemas de elétrons fortemente correlacionados, que também são o foco deste trabalho.

Recentes estudos experimentais (LORET et al., 2020) apontam para uma coexistência entre *charge density wave*, supercondutividade e pseudogap em supercondutores cupratos. O pseudogap é um fenômeno que aparece no estado normal, suprimindo estados eletrônicos de baixa energia. Por ser um fenômeno que aparece em sistemas de elétrons fortemente correlacionados, pode ser acompanhado da supercondutividade (LORET et al., 2020), e de ondas de densidade (BOSCHINI et al., 2020). Cupratos são sistemas os quais apresentam um riquíssimo diagrama de fases quando a dopagem ( $p$ ) do sistema é alterada.

A supercondutividade não motivou apenas buscas experimentais. Com o intuito de explicar os fenômenos observados, foram considerados diferentes modelos, como o modelo de Hubbard (HUBBARD, 1963; BEENEN; EDWARDS, 1995), amplamente utilizado no estudo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados, ou o modelo BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957), que a princípio é utilizado para descrever supercondutores não correlacionados. A confiabilidade de ambos estes modelos fazem com que sejam ferramentas versáteis de estudo. Uma vez que é possível utilizar o modelo de Hubbard levando em consideração interações não locais (CAIXEIRO; TROPER, 2009; DOMAŃSKI; WYSOKIŃSKI, 1999), e observar anomalias no gap supercondutor. Além disso, o modelo BCS é flexível o suficiente para ser adaptado com o intuito de apresentar coexistência entre *charge density wave* e supercondutividade (BALSEIRO; FALICOV, 1979).

Vista a abundância de evidências experimentais (FAYE; SÉNÉCHAL, 2017; ZHENG; FENG, 2019; WANG; AGTERBERG; CHUBUKOV, 2015), e o fato de estar, potencialmente, relacionada com o pseudogap, e os mecanismos por trás da supercondutividade nos cupratos supercondutores, o foco deste trabalho será estudar, em um regime correlacionado, a coexistência entre *charge density wave* e supercondutividade. Para isso, será utilizada a técnica das funções de Green (ZUBAREV, 1960), tradicionalmente utilizada nesta categoria de problemas, uma vez que apresenta um ferramental adequado para o tratamento de correlações.

Entre o grande escopo de possíveis técnicas aplicáveis no estudo desses sistemas, tais como simulação de Monte Carlo (HAYWARD et al., 2014), ou aproximação de Hartree-Fock (LERIDON et al., 2020), as funções de Green frequentemente se provam versáteis. Prova disso são trabalhos onde estas são combinadas com outras técnicas ou aproxima-

ções, como por exemplo, uma renormalização do modelo  $t$ - $t'$ - $J$ (TU; LEE, 2019), o qual posteriormente foi utilizado na equação de movimento das funções de Green. Também é válido mencionar um estudo onde foram combinados Monte Carlo Quântico e funções de Green(HOFMANN; BERG; CHOWDHURY, 2020), com o intuito de obter informações sobre o estado fundamental do sistema.

Para este trabalho serão utilizadas a aproximação de Hubbard-I (HUBBARD, 1963), em conjunto com o método de Matsubara(BRUUS; FLENSBERG, 2004). Visto a versatilidade das funções de Green, a combinação de técnicas aparece naturalmente (CALEGARI; RODRÍGUEZ-NÚÑEZ, 2016; RODRIGUEZ-NÚÑEZ; SCHMIDT, 2001). No caso deste trabalho, as escolhas se dão pela capacidade da aproximação de Hubbard-I em tratar correlações, e das funções de Green de Matsubara em obter os parâmetros de ordem de ambas as fases supercondutora e CDW.

A motivação principal deste trabalho são sistemas que apresentam coexistência de fases supercondutora e *charge density wave*, como é o caso dos supercondutores cupratos, que são sistemas de elétrons fortemente correlacionados, ou seja, possuem  $U/t_0 > 1$ , onde  $t_0$  está associado à energia cinética dos elétrons e  $U$  representa a interação coulombiana repulsiva entre dois elétrons com spins opostos localizados no mesmo sítio  $i$  da rede.

Embora os cupratos sejam a motivação principal deste trabalho, não pretende-se aqui fazer um estudo específico desses sistemas, já que isso implicaria na utilização de parâmetros de modelo específicos para um dado sistema cuprato particular, tais como o *hopping* de segundos vizinhos  $t_1$ , a dopagem  $\rho = 1 - \langle n \rangle$  e o potencial atrativo  $V$ . O objetivo aqui é estudar um modelo que apresente mecanismos que permitem o estudo do comportamento de certas propriedades físicas presentes em cupratos, tais como o calor específico, a resistividade elétrica, a densidade de estados, entre outras.

O trabalho está dividido em 8 capítulos, onde o capítulo 2 é dedicado aos sistemas de elétrons fortemente correlacionados, apresentando um contexto histórico e modelos a serem utilizados neste trabalho. Uma abordagem semelhante é utilizada para os capítulos 3 e 4, para supercondutividade e *charge density wave*, respectivamente. A metodologia será apresentada no capítulo 5. Os capítulos 6 e 7 contêm os resultados analíticos e numéricos respectivamente. E o capítulo 8 será dedicado às conclusões.

## 2 SISTEMAS DE ELÉTRONS FORTEMENTE CORRELACIONADOS E MODELO DE HUBBARD

### 2.1 SISTEMAS DE ELÉTRONS FORTEMENTE CORRELACIONADOS

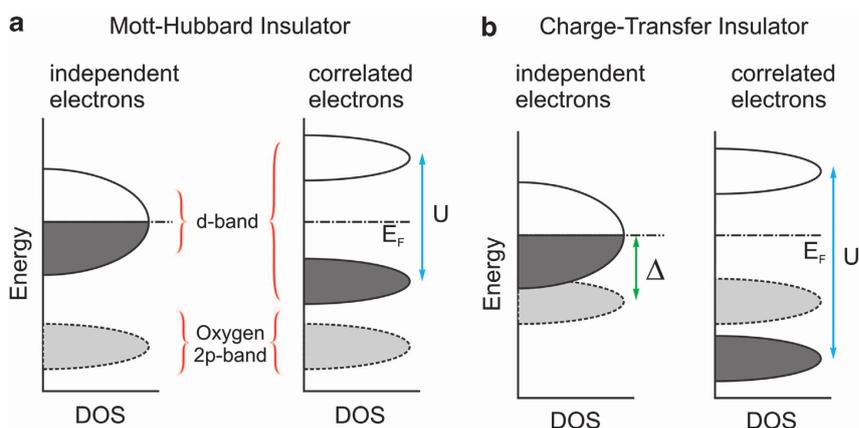
Sistemas de elétrons fortemente correlacionados formam uma categoria de sistemas nos quais a interação coulombiana local  $U$  é muito maior do que a energia associada à sobreposição de orbitais atômicos pertencentes à diferentes átomos (FULDE, 1984).

Uma característica destes sistemas é a categorização dos mesmos como sistemas de férmions pesados, ou seja, os elétrons se deslocam pela rede com uma massa efetiva muito maior do que a massa de repouso do elétron. Em geral, estes sistemas são categorizados pela existência de elétrons  $f$  na última camada parcialmente preenchida.

Um exemplo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados são os chamados Isolantes de Mott (GEBHARD, 1997). Esses sistemas são caracterizados pela banda de condução dividida em duas, a banda superior de Hubbard (BSH), e a banda inferior de Hubbard (BIH). Pela teoria de bandas, uma banda de condução parcialmente preenchida remete ao comportamento metálico, entretanto, no caso de isolantes de Mott, isto não é verdade, visto que este se comporta como isolante nas mesmas condições.

Em um isolante de Mott, se a BIH estiver totalmente preenchida, a banda de condução passa a ser a BSH. No entanto, para um elétron acessar a BSH, é necessário um custo de energia igual à interação coulombiana  $U$ . Portanto, se  $U \gg t$ , o elétron não terá energia cinética ( $t$ ) suficiente para superar  $U$  e ocupar a banda de condução (BSH). Nesse caso, mesmo com o preenchimento de um elétron por sítio (orbital), o sistema será isolante, neste caso, um isolante de Mott.

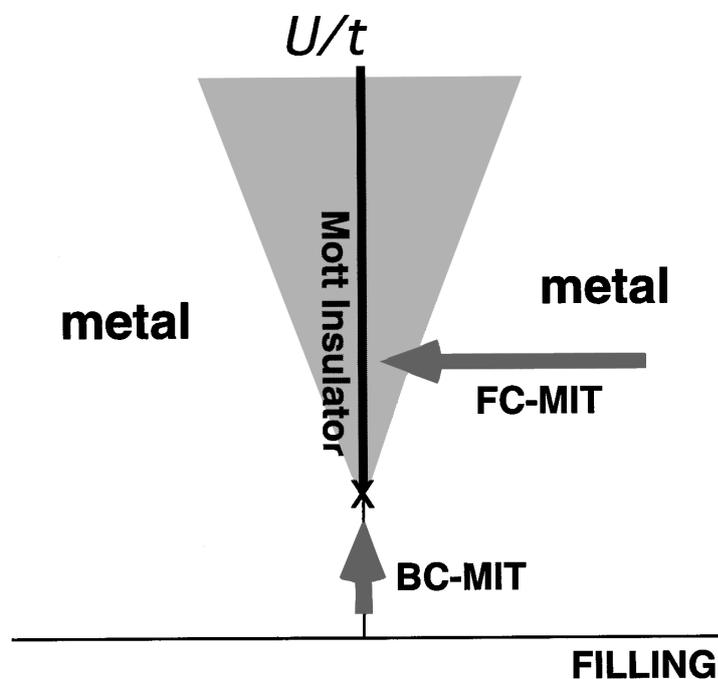
Figura 2.1 – Esquematização gráfica das possíveis transições para materiais que apresentam comportamento isolante de Mott.



Porém, não deve-se confundir a transição para isolante Mott-Hubbard com a transição para um isolante de transferência de carga, na qual a energia requerida para excitar um elétron do mais alto estado de oxigênio para o estado metálico desocupado mais baixo ( $\Delta$ ), é muito menor do que a interação coulombiana ( $U$ ), fazendo com que a banda de energia seja separada em dois níveis, como anteriormente, porém, estes novos níveis serão interceptados pelo nível de energia da banda de oxigênio. Esta transição para isolante de transferência de carga é muito presente em óxidos metálicos, como CuO, NiO e CoO (GREINER; LU, 2013), e é mostrada esquematicamente no painel (b) da figura 2.1

Os isolantes de Mott apresentam a chamada transição de Mott-Hubbard, na qual a condutividade diminui abruptamente na transição, ou seja, há uma transição metal-isolante, de maneira que o sistema pode se comportar como condutor para determinados espaçamentos de banda (GEBHARD, 1997). O estado isolante de Mott pode ser acessado tanto pelo aumento da relação  $U/t$ , como pelo aumento da ocupação média por sítio  $\langle n_{i,\sigma} \rangle$  (*filling*). Para  $U/t$  menor, é necessário uma ocupação  $\langle n_{i,\sigma} \rangle$  maior, para que o sistema acesse o estado isolante de Mott. Logo, a transição pode ser controlada tanto por  $U$  quanto por  $\langle n_{i,\sigma} \rangle$ , como pode ser visto na figura 2.2.

Figura 2.2 – Diagrama de fases baseado no modelo de Hubbard no plano  $U/t$  e ocupação (*filling*)  $\langle n_{i,\sigma} \rangle$ .



Fonte: Fonte (IMADA; FUJIMORI; TOKURA, 1998)

## 2.2 MODELO DE HUBBARD

Um modelo mínimo que pode ser proposto para explicar estes sistemas é o modelo de Hubbard (HUBBARD, 1963). Neste modelo, o movimento dos elétrons na rede é considerado como um grau de liberdade, contudo, este é influenciado pelas interações coulombianas repulsivas locais. O caso de maior interesse é o caso em que a interação local é muito maior que o termo de *hopping*. Neste caso específico, o movimento dos elétrons se dá através de saltos entre sítios vizinhos, visto que ao se alocar em um sítio já ocupado por um elétron, a repulsão coulombiana favorece o salto do elétron para um sítio vizinho. Logo, o sistema irá desfavorecer configurações com dupla ocupação, enquanto favorece a meia ocupação, ou seja, um elétron por sítio.

O modelo, inicialmente proposto para explicar sistemas que apresentavam transição de Mott, tem sido usado principalmente para a análise de supercondutores não convencionais.

Para melhor compreensão da escolha deste modelo, olha-se para o problema que deu origem a tal hamiltoniano: a transição metal-isolante de Mott. Esta fase isolante é caracterizada pela sua inconsistência, pois pela teoria de bandas, um metal com banda de condução parcialmente preenchida deveria ser capaz de conduzir corrente, fato que não ocorre em algumas ligas metálicas, como por exemplo, NiO (MOTT, 1949), que apresenta comportamento isolante.

A suposição feita para justificar tais anomalias se deu na forma da existência de uma interação entre os elétrons que compõem os átomos da rede, nos quais estão localizados. Esta interação é responsável por manter os elétrons presos a estes íons, de maneira que é necessária uma alta energia para que os elétrons consigam saltar para o próximo átomo com um número ímpar de elétrons no último orbital ocupado.

O trabalho de Mott chamou a atenção de J. Hubbard, que propôs um modelo microscópico para tentar explicar estes fenômenos. Partindo das suposições de Mott, Hubbard propôs a aproximação de ligações fortes, na qual um elétron só pode percorrer a distância equivalente a um espaçamento entre átomos na rede, o que nos permite escrever o hamiltoniano como a composição de um termo cinético  $\mathcal{H}_K$ , análogo ao hamiltoniano de um gás de elétrons livres, e de um termo de interação  $\mathcal{H}_I$ :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_K + \mathcal{H}_I, \quad (2.1)$$

com o termo cinético  $\mathcal{H}_K$  dado por:

$$\mathcal{H}_K = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\mu,\nu} T_{ij}^{\mu\nu}, \quad (2.2)$$

onde  $T_{ij}^{\mu\nu}$  é a amplitude de *hopping*. Definindo  $V(|x|)$  como o potencial de um íon isolado

numa rede (GONZALEZ et al., 2008), tem-se a amplitude dada por:

$$T_{ij}^{\mu\nu} = \int d^3x \phi_{\mu}^*(x - R_i) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 - V(|x|) \right) \phi_{\nu}(x - R_j), \quad (2.3)$$

onde  $\phi$  é o operador orbital,  $m$  é a massa do elétron e  $R_j$  é o vetor posição do elétron no orbital  $\phi$ .

Adotando a linguagem em segunda quantização, com  $c_{i,\mu}$  e  $c_{j,\nu}^{\dagger}$  como operadores de destruição e criação, que obedecem à seguinte relação de comutação:  $[c_{i,\mu}, c_{j,\nu}^{\dagger}] = \delta_{i,j} \delta_{\mu,\nu}$ , define-se o conjunto de índices  $\{i, j, k, l\}$  referentes ao sítio onde o elétron está localizado, juntamente com o conjunto  $\{\mu, \nu, \sigma, \tau\}$  para representar spins.

Analisando o termo de interação:

$$\mathcal{H}_I = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\mu,\nu,\sigma,\tau} \langle i\mu, j\nu | \frac{1}{r} | k\sigma, l\tau \rangle c_{i\mu}^{\dagger} c_{j\nu}^{\dagger} c_{k\sigma} c_{l\tau}, \quad (2.4)$$

onde  $\langle i\mu, j\nu | \frac{1}{r} | k\sigma, l\tau \rangle$  são os elementos de matriz que descrevem a interação coulombiana entre elétrons de diferentes íons da rede.

Com o pressuposto de que a interação só atua localmente, ou seja, apenas entre elétrons em um mesmo sítio ( $i = j = k = l$ ), tem-se apenas um elemento de matriz  $\langle ii | \frac{1}{r} | ii \rangle = U$ , onde  $\frac{1}{r}$  é a distância entre dois elétrons localizados no mesmo sítio. Além disso, assumindo apenas spins opostos, ou seja,  $\mu = -\nu$  e  $\sigma = -\tau$ , define-se o operador número, originado da composição entre um operador de criação e outro de destruição atuando no mesmo sítio e no mesmo spin:  $n_{i\sigma} = c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$ , o que permite escrever o termo de interação na seguinte forma:

$$\mathcal{H}_I = \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma}. \quad (2.5)$$

Voltando para o termo cinético, redefine-se  $T_{ij}^{\mu\nu} = t_{ij}^{\mu\nu}$ , onde este termo representa a amplitude de probabilidade de transição de um elétron no orbital  $\mu$  no sítio  $i$  saltar para o orbital  $\nu$  no sítio  $j$ . Com isso, têm-se o modelo de Hubbard local de uma banda:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma}. \quad (2.6)$$

O modelo será tratado através da técnica das funções de Green, em conjunto com a aproximação de Hubbard-I. Esta aproximação fornece melhores resultados em relação á aproximação de campo médio, visto que esta última despreza a maior parte das correlações.

As vantagens de se usar Hubbard-I vêm na forma de efeitos de muitos-corpos, como

por exemplo, as bandas se tornam dinâmicas, ou seja, o número de estados acessíveis por banda, além da densidade de estados, dependem da magnitude da interação.

Entretanto, esta aproximação apresenta algumas falhas, entre as quais está a ausência de todo e qualquer tipo de correlação antiferromagnética, de maneira que mesmo em regimes no qual a Lei de Curie deveria ser válida, a susceptibilidade da banda inferior de Hubbard não se reduz à de um paramagneto isolante.

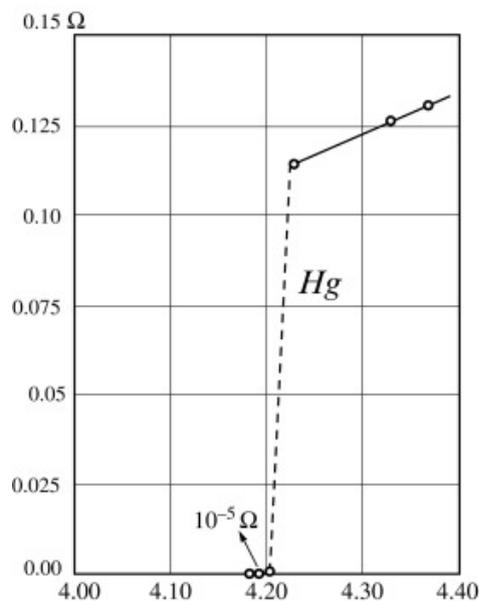


### 3 SUPERCONDUTIVIDADE

Dentre as diferentes fases possíveis de serem apresentadas por um material, a supercondutividade é uma das mais interessantes, tanto do ponto de vista teórico, uma vez que esta apresenta um riquíssimo conjunto de fenômenos físicos, quanto do ponto de vista experimental, visto suas diversas aplicações tecnológicas.

A característica principal desta categoria de sistemas é a resistividade nula em temperaturas abaixo de  $T_c$  (Kamerlingh Onnes, 1912), onde  $T_c$  é a temperatura crítica de transição para o estado supercondutor.

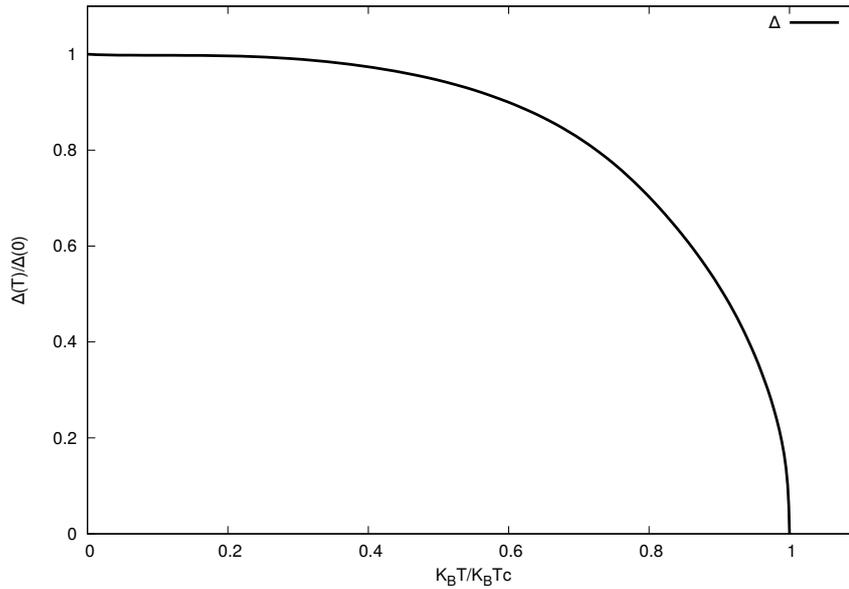
Figura 3.1 – Resistividade elétrica ( $\Omega$ ) de uma amostra de Hg em função da temperatura.



Fonte: (Kamerlingh Onnes, 1912)

Este fenômeno é acompanhado do efeito Meissner, o qual consiste em uma expulsão do campo magnético do interior do material, ou seja, dentro da amostra,  $\mathbf{B} = 0$ . Ambos efeitos intrigaram pesquisadores ao longo de anos, até o surgimento da teoria BCS, proposta por John Bardeen, Leon Cooper, e John Robert Schrieffer, a qual teve sucesso em explicar a supercondutividade através da proposição de uma interação elétron-fônon e a formação de pares de Cooper (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957). Estes pares são formados quando um par de elétrons tem uma energia menor do que a energia de Fermi, que seria a energia do elétron que ocupa o último estado acessível em  $T = 0$ , ou seja, este estado pareado é mais favorável energeticamente, de maneira que o par é mais estável do que os elétrons isolados.

Outra característica destes materiais é a existência de uma banda de energia proibida, gerada a partir da atração sentida entre si pelos pares de Cooper, ou seja, os efeitos

Figura 3.2 – Gap supercondutor ( $\Delta$ ) em função da temperatura(K).

Fonte: Elaborada pelo Autor

de muitos corpos serão afetados pela existência destes pares, o que irá refletir de diferentes maneiras, uma delas, é no aparecimento desta banda proibida. Chamando esta banda proibida de *gap* supercondutor ( $\Delta$ ), que está associado ao parâmetro de ordem do estado supercondutor, ou seja, uma vez que a supercondutividade é um estado ordenado, estuda-se  $\Delta$ , com o intuito de entender os fatores que levam ao desordenamento, cuja consequência é o retorno ao estado normal. A teoria BCS, mencionada anteriormente, foi capaz de associar  $\Delta$  com a temperatura, uma vez que o parâmetro de ordem decai com o aumento de  $T$ , até um valor crítico, no qual ele é nulo, marcada pela temperatura crítica de transição  $T_c$ , esta relação pode ser vista na figura 3.2. .

Com o intuito de descrever sistemas supercondutores, foi proposto o modelo BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957), o modelo mais simples capaz de descrever este tipo de sistema, o qual é dado abaixo:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} \quad (3.1)$$

onde  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda no espaço recíproco,  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  é a relação de dispersão,  $\sigma$  é o spin, e  $c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$  é o operador de criação e  $c_{-\mathbf{k}, -\sigma}$  é o operador de destruição.

Um dos problemas apresentados por esta forma do modelo está no termo associado à interação atrativa  $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ , já que os quatro operadores que compõem o termo irão gerar, quando tiverem as quantidades termodinâmicas de interesse calculadas, uma correlação de quatro pontos. Assim, o termo de interação não pode ser tratado da mesma forma que o termo cinético, que está associado à uma correlação de dois pontos. Logo, utiliza-se a aproximação de campo médio neste termo, com a finalidade de realizar o desacopla-

mento dos operadores. Uma vez que considera-se que a interação entre pares é pequena, aproxima-se a interação como um campo uniforme aplicado em todos os elétrons. Isto significa que as quantidades físicas de interesse, como por exemplo a ocupação por sítio  $n_{i,\sigma}$ , apresentam pequenas flutuações em torno do seu valor médio  $\langle n_{i,\sigma} \rangle$ .

O desacoplamento deste termo do hamiltoniano será feita utilizando algumas relações, as quais serão obtidas partindo da existência de um hamiltoniano genérico:

$$\mathcal{H}_{gen} = \sum_{\mu\mu'\eta\eta'} V_{\mu\mu'\eta\eta'} A_{\mu\mu'} B_{\eta\eta'}$$

onde A e B são operadores genéricos e o conjunto de índices  $\{\mu, \eta\}$  é arbitrário. Porém, assume-se que os operadores diferem pouco do seu valor médio, de maneira que:

$$\sum_{\mu\mu'\eta\eta'} V_{\mu\mu'\eta\eta'} (A_{\mu\mu'} - \langle A_{\mu\mu'} \rangle) (B_{\eta\eta'} - \langle B_{\eta\eta'} \rangle) \approx 0. \quad (3.2)$$

Agora, aplicar esta relação no hamiltoniano, permite reescrevê-lo como:

$$\mathcal{H}_{gen}^{MF} = \sum_{\mu\mu'\eta\eta'} V_{\mu\mu'\eta\eta'} (A_{\mu\mu'} \langle B_{\eta\eta'} \rangle + B_{\eta\eta'} \langle A_{\mu\mu'} \rangle) + \sum_{\mu\mu'\eta\eta'} V_{\mu\mu'\eta\eta'} \langle A_{\mu\mu'} \rangle \langle B_{\eta\eta'} \rangle. \quad (3.3)$$

Aplicando este procedimento no modelo BCS (3.1), onde  $A \equiv c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger$  e  $B \equiv c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow}$ , fazendo  $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$  e realizando a soma em  $\sigma$ , chega-se em:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow} + \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\downarrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} + \Delta_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \\ & + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Nesta relação acima definiu-se a quantidade  $\Delta_{\mathbf{k}}$ , como:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle, \quad (3.5)$$

e seu complexo conjugado  $\Delta_{\mathbf{k}}^*$ :

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (3.6)$$

Onde  $\Delta_k$  é o gap supercondutor que caracteriza a fase supercondutora.

Deve-se considerar também os efeitos da energia de *cutoff*  $\varepsilon_c$ , responsável por limitar a contribuição das bandas de energia apenas na região em torno do nível de Fermi, e dos efeitos de simetria de onda  $\Psi$  para o gap supercondutor .

A simetria para o gap supercondutor, associada à distribuição dos orbitais eletrôni-

cos é dada a partir da seguinte relação:

$$\Psi(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1, & \text{para simetria } s \\ \cos(ak_x) - \cos(ak_y), & \text{para simetria } d_{x^2-y^2}. \end{cases}$$

E a energia de *cutoff* obedece à seguinte relação:

$$\varepsilon_c(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1, & \text{para } \epsilon_k - \mu < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{para } \epsilon_k - \mu > \hbar\omega_D. \end{cases}$$

A energia de *cutoff* limita as contribuições apenas para regiões em torno do nível de Fermi ( $\epsilon_f = \mu$ ), e é proporcional à frequência de Debye. Neste trabalho é utilizado  $\hbar\omega_D = \frac{t_0}{2}$ , onde  $t_0$  é a amplitude de *hopping* para primeiros vizinhos.

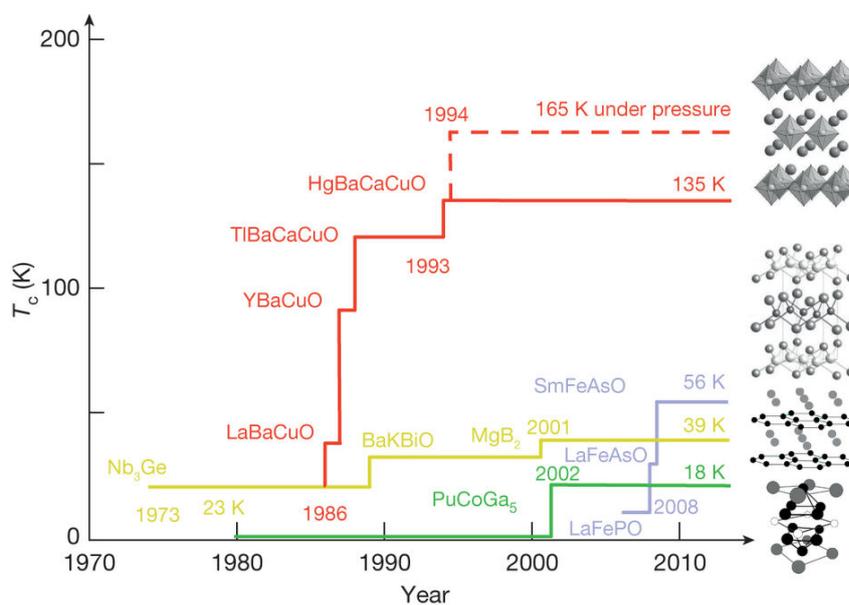
Uma quantidade que será explorada mais adiante neste trabalho é a energia livre  $F$  de Helmholtz, a qual possibilitará uma melhor análise do gap supercondutor,

$$\begin{aligned} F &= U - TS, \\ U &= \langle H \rangle = \frac{1}{N}(\epsilon_k - \mu) \left[ 1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{E_k^\pm} \tanh\left(\frac{E_k^\pm}{2k_B T}\right) \right] - \frac{\Delta^2}{V^2}, \\ S &= -2 \sum_k \{f(E_k) \ln(E_k) + [1 - f(E_k)] \ln[1 - f(E_k)]\}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde  $S$  é a entropia.

A teoria BCS falha em explicar uma nova categoria de supercondutores, os chamados supercondutores não convencionais, ou supercondutores de tipo-II, cuja principal característica é a alta temperatura crítica, a qual ultrapassa os 32 K previstos pela teoria BCS. A descoberta desses novos supercondutores iniciou uma busca por diferentes materiais capazes de apresentar este comportamento. Na figura 3.3 está apresentada uma linha do tempo com diferentes materiais e suas respectivas temperaturas críticas ao longo dos anos, como forma de ilustrar esta busca.

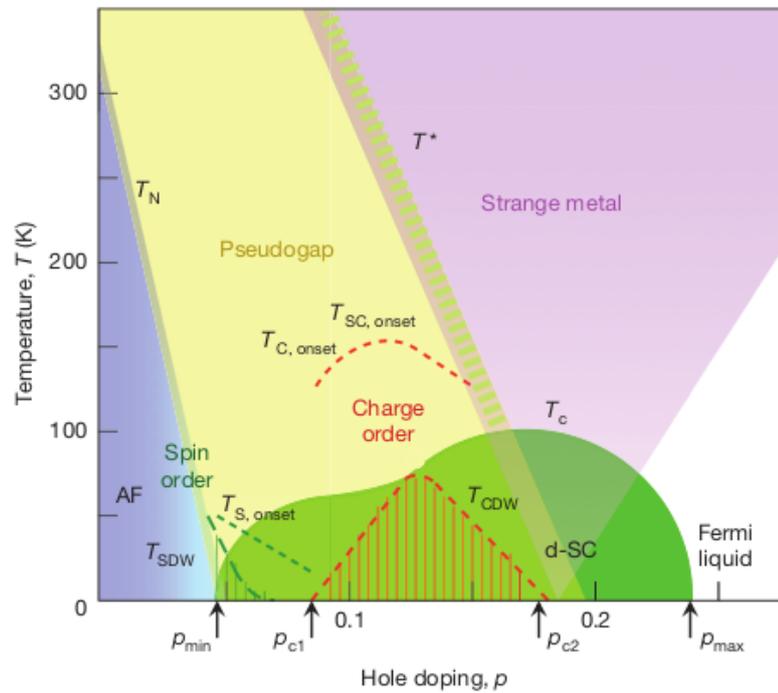
Figura 3.3 – Linha do tempo dos supercondutores tipo-II.



Fonte: (KEIMER et al., 2015)

Esta nova categoria de sistemas vem ganhando maior notoriedade, visto a sua aplicabilidade. Dentre estes novos sistemas, um grupo que recebe muita atenção é o dos cupratos, uma vez que estes apresentam um riquíssimo diagrama de fases, o qual apresenta ondas de densidade de carga, supercondutividade e *pseudogap*. Porém, é possível perceber neste diagrama de fases da figura 3.4 a possível coexistência entre supercondutividade e CDW, que é o objetivo de estudo deste trabalho.

Figura 3.4 – Diagrama de fases de um cuprato.



Fonte: (KEIMER et al., 2015)

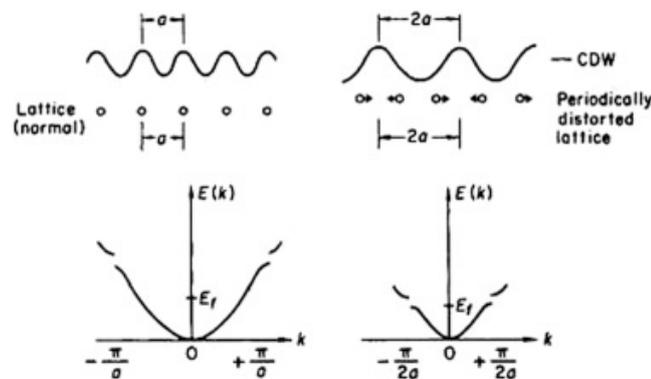
Outra fase de interesse neste diagrama é o *pseudogap*, fenômeno anômalo que ocorre no estado normal, onde a superfície de Fermi apresenta um *gap* parcial, além de um mínimo da densidade de estados no nível de Fermi. O interesse no *pseudogap* vem por este ser um fenômeno não totalmente compreendido, mas extremamente importante não apenas nos cupratos, mas em outros sistemas que apresentam supercondutividade de altas temperaturas críticas. Esta fase não será abordada neste trabalho, mas é relevante explicitar o interesse nesta.

## 4 CHARGE DENSITY WAVE

A constante busca por uma maneira de explicar os mecanismos da supercondutividade faz com que diferentes fases sejam também estudadas, com o intuito de compreender comportamentos que podem vir a afetar a fase supercondutora. Uma fase que vem ganhando notoriedade recentemente é a fase *charge density wave* (CDW) (LEE; JIN; YEOM, 2021; SHIN et al., 2021; LINGANNAN et al., 2021), a qual consiste em uma modulação periódica de carga, acompanhada de uma distorção periódica da rede, com ambos períodos determinados pelo vetor de onda de Fermi  $k_F$  (GRUNER, 2000). Uma das consequências destas modulações é a existência de um vetor de *nesting*  $\mathbf{Q}$ , o qual conecta duas extremidades da superfície de Fermi, deslocando assim o vetor de onda  $\mathbf{k}$ , gerando uma periodicidade na rede, e por consequência, um *gap* de energia.

A fase CDW foi prevista em 1955 por Sir Rudolf Ernst Peierls (PEIERLS et al., 1955), ao descrever a instabilidade de metais de baixa dimensionalidade acoplados à sua rede fundamental em baixas temperaturas, já que o seu estado fundamental é caracterizado por um *gap* no espectro de excitação de uma partícula única e por um modo coletivo, formado pelo par elétron-buraco envolvendo o vetor de *nesting*  $\mathbf{Q}$  (GRÜNER, 1988). Esta descrição pode ser visualizada na figura 4.1.

Figura 4.1 – Representação gráfica de uma onda de densidade de carga.



Fonte: (CAHN; HAASEN, 1996)

Entretanto, esta descrição foi reavaliada com o passar dos anos. Uma das descrições mais recentes propõe que a onda de densidade se comporta como um fluido quântico (MILLER et al., 2012), o qual sofre efeitos do processo de tunelamento de Josephson, inicialmente proposto para descrever o tunelamento de pares de Cooper através de dois supercondutores ligados por um vínculo fraco (JOSEPHSON, 1962). Logo, descreve-se a CDW como uma onda de densidade de carga, a qual é sujeita a efeitos de tunelamento quântico cooperativo.

Uma das maneiras de descrever a fase CDW, é utilizando uma abordagem seme-

lhante à utilizada para tratar supercondutores convencionas, ou seja, utilizando a teoria BCS (BALSEIRO; FALICOV, 1979). Uma vez que, de acordo com a descrição clássica do fenômeno, parte do princípio de uma instabilidade gerada por um acoplamento elétron-fônon(buraco), resultando no aparecimento de um *gap* de energia, a teoria BCS pode ser aplicada sem maiores problemas, visto a interação fraca que acopla o par elétron-buraco. Logo, partindo de um modelo tipo-BCS:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\sigma\sigma'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+Q,\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k}'-Q,\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}',\sigma'}, \quad (4.1)$$

aplica-se o mesmo procedimento de desacoplamento usado no caso supercondutor, porém, agora  $A \equiv c_{\mathbf{k}+Q,\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma}$  e  $B \equiv c_{\mathbf{k}'-Q,\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}',\sigma'}$ :

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} W_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+Q,\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (4.2)$$

Como no caso supercondutor, há o surgimento do parâmetro de ordem, definido por:

$$W_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}+Q}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (4.3)$$

com

$$\langle c_{\mathbf{k}+Q}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \rangle = (\langle c_{\mathbf{k}+Q,\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}+Q,\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\downarrow} \rangle) / 2. \quad (4.4)$$

A energia livre de Helmholtz é dada por  $F = U - TS$ , onde:

$$U = \frac{1}{N} \sum_k (\epsilon_k - \mu) \left\{ \left[ 1 + \frac{\gamma_k}{\sqrt{\gamma_k^2 + W_k^2}} f(E_k^+) \right] + \left[ 1 - \frac{\gamma_k}{\sqrt{\gamma_k^2 + W_k^2}} f(E_k^-) \right] \right\} + \frac{1}{N} \sum_k 2W_k^2 \left( \frac{f(E_k^+) - f(E_k^-)}{E_k^+ - E_k^-} \right), \quad (4.5)$$

e a entropia  $S$

$$S = - \sum_k \{ f(E_k^+) \ln(E_k^+) + [1 - f(E_k^+)] \ln[1 - f(E_k^+)] + f(E_k^-) \ln(E_k^-) + [1 - f(E_k^-)] \ln[1 - f(E_k^-)] \}, \quad (4.6)$$

com  $\gamma_k = \frac{\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}}{2} = -2t_0(\cos(ak_x) + \cos(ak_y))$ .

Como mencionado nas sessões anteriores, em determinados sistemas há a coexistência de supercondutividade e CDW. Este fenômeno é o foco principal deste trabalho, uma vez que é um comportamento presente tanto em supercondutores de altas temperaturas críticas, como cupratos, e supercondutores convencionais, como em sistemas à base de platina, como por exemplo, SrPt<sub>2</sub>As<sub>2</sub> (KUDO; NISHIKUBO; NOHARA, 2010; GUPTA et al., 2017). Logo, com o intuito de estudar esta coexistência, propõe-se uma variação do

modelo BCS, o qual leva em consideração ambos parâmetros de ordem, e é dado por:

$$\mathcal{H} = \sum_k [\xi_k c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + \xi_k c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow} + \Delta_k c_{k,\uparrow} c_{-k,\downarrow} + \Delta_k c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}^\dagger + W_k c_{k+Q,\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + W_k c_{k+Q,\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}]. \quad (4.7)$$

Esta variação do modelo já leva em conta a soma sobre os spins, deixando-os explicitados, uma vez que os pares de Cooper só são criados a partir de elétrons de spins opostos, e o o par elétron-buraco presente na CDW só depende de um elétron. Contudo, esta versão do modelo não leva em consideração a forte interação coulombiana que age sobre os elétrons na rede, logo, uma vez que o formalismo BCS é invariante perante correlações (NAMBU, 1960), será feita a introdução das mesmas através de uma técnica de substituição, a qual será abordada em detalhes mais adiante neste trabalho.



## 5 METODOLOGIA

### 5.1 TÉCNICA DAS FUNÇÕES DE GREEN

Com o intuito de analisar os modelos considerados neste trabalho será utilizada a técnica das funções de Green no formalismo de Zubarev (ZUBAREV, 1960). Seja  $X$  um operador qualquer,  $\langle \dots \rangle$  a média termodinâmica no ensemble grande-canônico, e  $Z$  a função partição, temos que:

$$\langle X \rangle = Z^{-1} Tr[X e^{-\beta(H-\mu N)}], \quad Z = Tr[e^{-\beta(H-\mu N)}]. \quad (5.1)$$

Explicitar a dependência temporal do operador  $X$  permite utilizar a representação de Heisenberg:

$$X(t) = e^{-iHt} X(0) e^{iHt}. \quad (5.2)$$

Considerando dois operadores genéricos dependentes do tempo,  $A(t)$  e  $B(t')$ , define-se as funções de Green avançada(-) e retardada(+) como:

$$\langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^{\pm} = \pm i \theta[\mp(t-t')] \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle, \quad (5.3)$$

onde a função  $\theta(x)$  é a função degrau definida por:

$$\begin{cases} \theta(x) = 1 & x > 0 \\ \theta(x) = 0 & x < 0 \end{cases}$$

que obedece à:

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t) dt, \quad (5.4)$$

onde  $\delta(t)$  é a função Delta de Dirac, e a escolha do sinal de  $\eta$  no comutador  $[A, B] = AB - \eta BA$  é dada baseando-se na escolha da distribuição mais adequada:

$$\begin{cases} \eta = -1 & \text{Para a distribuição de Fermi-Dirac} \\ \eta = 1 & \text{Para a distribuição de Bose-Einstein.} \end{cases}$$

As funções de Green definidas anteriormente devem satisfazer à seguinte equação de movimento :

$$i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^{\pm} = i \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle + \langle \langle [A(t), H]; B(t') \rangle \rangle^{\pm}. \quad (5.5)$$

Usando os resultados das equações (5.1) e (5.2), e o fato de os eventos de interesse ocorrerem quando  $t = t'$ , ou seja, quando o sistema está em equilíbrio, o argumento da exponencial  $e^{i\omega(t-t')}$  irá se anular. Além disso, usando as propriedades cíclicas do traço e da equação 5.10, pode-se demonstrar que as funções de correlação, as quais vêm das funções de Green, dependem apenas da diferença entre  $t$  e  $t'$ :

$$\begin{aligned}\langle B(t')A(t) \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{\beta\mathcal{H}} e^{-i\mathcal{H}t'} B e^{i\mathcal{H}t'} e^{-i\mathcal{H}t} A e^{i\mathcal{H}t}] \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t'} e^{-i\mathcal{H}t} B e^{-i\mathcal{H}t'} e^{i\mathcal{H}t} A] \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{\beta\mathcal{H}} B(t-t') A] \\ &= \langle B(t-t')A(0) \rangle.\end{aligned}\tag{5.6}$$

Só é possível realizar a transformada de Fourier no tempo graças à dependência das funções de Green em relação à diferença  $(t-t')$ , fazendo assim com que seja possível tratar o problema no espaço das frequências.

$$\langle\langle A; B \rangle\rangle_E^\pm = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A(t); B(0) \rangle\rangle^\pm e^{iEt} dt.\tag{5.7}$$

Este resultado permite escrever a equação de movimento das funções de Green:

$$E \langle\langle A; B \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle[A, B]_\eta\rangle + \langle\langle[A, \mathcal{H}]; B \rangle\rangle_E.\tag{5.8}$$

O comutador  $[A, \mathcal{H}]$  é proveniente da equação de movimento de Heisenberg:

$$\partial_t A^H(t) = [A^H, \mathcal{H}]\tag{5.9}$$

onde o índice  $H$  indica que o operador está na representação de Heisenberg.

Os polos das Funções de Green estão localizados ao longo do eixo real do plano das energias, o que faz com que a integral no plano complexo não possa ser realizada, logo, define-se uma nova grandeza imaginária,  $\mathcal{I}E$ , o que permite escrever  $E = E + \mathcal{I}E$ , onde  $\mathcal{I}E = i\epsilon$ , com  $\epsilon$  sendo uma quantidade infinitesimal, mas suficientemente grande para deslocar o polo no eixo imaginário, permitindo a realização da integral de resíduos em torno dos polos.

Neste formalismo, as funções de Green por si só não têm significado físico, contudo, as funções de correlação obtidas destas funções de Green contém informações sobre as quantidades físicas de interesse. A expressão destas é dada abaixo:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} [\langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon} - \langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega-i\epsilon}] \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{e^{\beta(\omega-\mu)} - \eta} d\omega.\tag{5.10}$$

A convergência desta integral se dá ao longo do plano complexo. No caso da função

retardada, temos que a energia  $E$  é convergente na metade superior do plano das energias, enquanto no caso da função avançada, a integral é convergente na metade inferior do plano.

Definindo as funções de Green avançada (índice  $-$ ) e retardada (índice  $+$ ) em termos desta nova grandeza  $\mathcal{I}E$ :

$$\begin{cases} \langle\langle A; B \rangle\rangle_E = \langle\langle A; B \rangle\rangle_E^+ & \mathcal{I}E > 0 \\ \langle\langle A; B \rangle\rangle_E = \langle\langle A; B \rangle\rangle_E^- & \mathcal{I}E < 0. \end{cases}$$

A equação (5.10) pode ser expressada em termos dos seus polos, através de frações parciais, isto possibilita a aplicação da identidade:

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\epsilon} = \frac{P}{E - \omega} \mp i\pi\delta(E - \omega), \quad (5.11)$$

onde  $P$  é a parte principal da integral.

Agora, definindo  $G(\omega) = \langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega$ , reescreve-se a equação (5.10) em termos de  $G(\omega + i\epsilon)$  e  $G(\omega - i\epsilon)$ , que são as funções de Green obtidas através da equação de movimento após a transformada de Fourier no tempo, têm-se:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} [G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)] \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{e^{\beta(\omega-\mu)} - \eta} d\omega. \quad (5.12)$$

Usando o resultado da equação (5.6), tem-se a função de correlação dada por:

$$\langle B(0)A(0) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} [G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)] f(\omega) d\omega, \quad (5.13)$$

onde  $f(\omega)$  é a função de Fermi, dada por:

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} + \eta}. \quad (5.14)$$

Esta forma da função de correlação é muito mais conveniente, pois uma vez obtida a função de Green a partir da equação de movimento (5.8), aplica-se o resultado da equação (5.13), obtendo assim a função de correlação de interesse, sem a necessidade de repetir o procedimento novamente.

Além disso, é de interesse definir a expressão que será utilizada para o cálculo da densidade de estados  $\rho(\omega)$ :

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi^2} \sum_i Z_i^{11} \delta(\omega - \omega_i), \quad (5.15)$$

onde  $Z^{11}$  são os pesos espectrais da função de Green  $G^{11}$ ,  $\delta(\omega)$  é a função Delta de Dirac,

e  $\omega_i$  são os polos da função de Green.

## 5.2 MÉTODO DE MATSUBARA

O formalismo apresentado anteriormente para as funções de Green apenas engloba detalhes sobre as funções avançada e retardada, porém, há mais um tipo de função de Green: a função causal, a qual depende de um ordenamento temporal. Porém, quando se fala do formalismo de Matsubara (1955), é necessário falar de temperaturas não nulas, ou seja, o formalismo é utilizado em situações com temperatura finita, o que fará com que a temperatura seja inclusa dentro da função de Green. Para esclarecer melhor isto, parte-se de um operador genérico dependente do tempo  $t$ :

$$C_{p,\sigma}(t) = e^{itH} C_{p,\sigma} e^{-itH}, \quad (5.16)$$

com  $H = H_0 + V$ , onde  $V$  é a interação e  $H_0$  tem solução exata. Neste caso, a interação faz com que o cálculo das funções de correlação seja complicado. O método de Matsubara, com o intuito de facilitar a solução deste problema trata  $t$  e  $\beta$  como a parte real e imaginária de uma variável complexa, ou seja, trata o tempo como uma temperatura imaginária (MAHAN, 2013).

Uma quantidade de grande interesse neste formalismo se dá através do número de ocupação de férmions ( $n_F$ ) e bósons ( $n_B$ ), os quais podem ser expandidos em série, já que estes são funções meromórficas, as quais podem ser expandidas em série com soma sobre seus polos e resíduos nestes polos, logo:

$$\begin{aligned} \eta_F(\omega) &= \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)i\pi/\beta - \omega} \\ \eta_B(\omega) &= \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2ni\pi/\beta - \omega}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Uma vez que neste trabalho serão abordados apenas férmions, o restante desta seção será focada no formalismo de Matsubara para férmions. Logo, definindo  $\omega_n = (2n+1)i\pi/\beta$  como as frequências no polo  $\omega = (2n+1)\pi/\beta$ , onde existirão polos para valores ímpares de  $n$ , permitindo reescrever  $\eta_F(\omega)$  como:

$$\eta_F(\omega) = \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \omega}, \quad (5.18)$$

esta forma remete à algo semelhante a uma função de Green de um sistema não interagente, porém, esta é, de fato, a própria função de Green não interagente no método de

Matsubara.

Como mencionado anteriormente, o tempo, neste caso, é uma grandeza imaginária, o qual pode ser chamado de  $\tau = it$ , e irá governar o domínio da função de Green, o qual varia entre  $-\beta \leq \tau \leq \beta$ . Usando do fato de que se uma função  $f(\tau)$  está definida sobre um período  $-\beta \leq \tau \leq \beta$ , é possível expandir em uma série de Fourier:

$$f(\tau) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ a_n \cos\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right) \right], \quad (5.19)$$

onde os coeficientes  $a_n$  e  $b_n$  são dados por:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\beta} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau f(\tau) \cos\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right) \\ b_n &= \frac{1}{\beta} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau f(\tau) \sin\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Porém, também é possível escrever a transformada de Fourier em termos destes coeficientes e da sua frequência, ao invés do período:

$$f(i\omega_n) = \frac{1}{2}\beta(a_n + ib_n), \quad (5.21)$$

o que permite associar este resultado com a equação de Euler ( $e^{ix} = \cos(x) + i\sin(x)$ ), onde neste caso  $x = \frac{n\pi\tau}{\beta}$ , logo:

$$f(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{in\pi\tau}{\beta}} f(i\omega_n), \quad (5.22)$$

com a sua inversa dada por:

$$f(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau f(\tau) e^{\frac{in\pi\tau}{\beta}}. \quad (5.23)$$

As funções de Green fermiônicas apresentam a propriedade  $f(\tau) = -f(\tau + \beta)$  quando  $-\beta < \tau < 0$ , esta propriedade pode ser utilizada para simplificar as expressões anteriores. Separando a integral acima em uma região positiva e uma região negativa:

$$f(i\omega_n) = \frac{1}{2} \left( \int_{-\beta}^0 d\tau f(\tau) e^{\frac{in\pi\tau}{\beta}} + \int_0^{\beta} d\tau f(\tau) e^{\frac{in\pi\tau}{\beta}} \right). \quad (5.24)$$

Aplicando a propriedade no primeiro termo:

$$\int_{-\beta}^0 d\tau f(\tau) e^{\frac{in\pi\tau}{\beta}} = - \int_0^{\beta} d\tau f(\tau) e^{\frac{in\pi(\tau+\beta)}{\beta}} = -e^{in\pi} \int_0^{\beta} d\tau f(\tau) e^{\frac{in\pi\tau}{\beta}}. \quad (5.25)$$

Combinando as equações (5.24) e (5.25), têm-se:

$$f(i\omega_n) = \frac{1}{2}(1 - e^{in\pi}) \int_0^\beta d\tau f(\tau) e^{\frac{in\pi\tau}{\beta}}. \quad (5.26)$$

Devido ao fator  $(1 - e^{in\pi})$ , esta função só é não nula para valores ímpares de  $n$ , logo:

$$\begin{aligned} f(i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} f(\tau) \\ f(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n\tau} f(i\omega_n) \\ \omega_n &= (2n + 1)\pi k_B T. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Para que seja possível avançar com a metodologia, é necessário mostrar a conexão entre a função de Green de tempo imaginário e a função de Green retardada com tempo real, para isso, parte-se da representação espectral de Lehmann para uma função de Green retardada  $\mathcal{C}_{AB}^R$ :

$$\mathcal{C}_{AB}^R(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle}{\omega + E_n - E_{n'} + i\eta} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_{n'}}), \quad (5.28)$$

agora, olhando para uma função de Green de Matsubara:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{AB}(\tau) &= -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta H} e^{\tau H} A e^{-\tau H} B] \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle e^{\tau(E_n - E_{n'})}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Fazendo a transformada de Fourier no tempo de  $\mathcal{C}_{AB}(\tau)$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{AB}(i\omega_n) &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle e^{\tau(E_n - E_{n'})} \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle \int_0^\beta d\tau e^{\tau(E_n - E_{n'} + i\omega_n)} \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \frac{\langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle}{i\omega_n + E_n - E_{n'}} (e^{\beta(i\omega_n + E_n - E_{n'})} - 1). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Como mencionado anteriormente, esta seção é focada para o estudo sobre férmions. A substituição  $i\omega_n = (2n + 1)/\beta$  na exponencial da expressão anterior faz com que

$e^{\beta i\omega_n} = e^{\frac{\beta(2n+1)\pi}{\beta}} = -1$ , devido à equação de Euler. Com isso:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{AB}(i\omega_n) &= -\frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \frac{\langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle}{i\omega_n + E_n - E_{n'}} (-e^{\beta(E_n - E_{n'})} - 1) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle}{i\omega_n + E_n - E_{n'}} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Esta equação é semelhante à equação para a função de Green retardada a qual é possível de ser obtida a partir de  $\mathcal{C}_{AB}(\omega)$ , para isso, utiliza-se do fato de que ambas funções coincidem, e são casos especiais da mesma função, uma vez que ambas têm polos em  $E_{n'} - E_n$  e são analíticas na metade superior do plano complexo. Assim, se duas funções analíticas coincidem em um infinito conjunto de pontos, então são funções idênticas dentro do domínio no qual pelo menos uma delas é uma função analítica, além disso, há apenas uma função em comum (BRUUS; FLENSBERG, 2004).

Com essas informações em mãos, e considerando que a função de Green para o tempo imaginário está em sua forma racional, é possível fazer uma continuação analítica na forma  $\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta)$ :

$$\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle}{\omega + E_n - E_{n'} + i\eta} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}), \quad (5.32)$$

que é exatamente a função de Green retardada no tempo real, a qual permite obter as quantidades físicas de interesse através do uso de funções de correlação.

Esta mesma abordagem permite encontrar a função de Green avançada, apenas fazendo  $\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega - i\eta)$ :

$$\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega - i\eta) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n|A|n'\rangle \langle n'|B|n\rangle}{\omega + E_n - E_{n'} - i\eta} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}). \quad (5.33)$$

Com as funções de Green  $\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta)$  e  $\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega - i\eta)$ , é possível obter a expressão (5.13), porém, sem o trabalho adicional de encontrar ambas as funções de Green avançada e retardada.

Mesmo com a possibilidade de encontrar as funções de correlação a partir desta propriedade, pode-se também calculá-las através da soma sobre as frequências de Matsubara, neste caso fermiônicas. Por simplicidade, serão abordadas apenas funções de Green racionais e com polos simples conhecidos como funções de Green não interagentes, por exemplo:

$$g_0^i(z) = \frac{1}{z - z_i}, \quad (5.34)$$

onde  $z_i$  é o polo, e  $g_0(z)$  é analítica em todos os outros pontos do plano complexo. É importante ressaltar que a utilização do método de Matsubara fará com que surja a necessidade

de resolver somas do tipo:

$$S(v, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \mathcal{G}(v, i\omega_n) e^{i\omega_n \tau}, \tau > 0. \quad (5.35)$$

Para resolver esta soma será necessário encontrar uma maneira de reescrever o somatório como uma integral sobre o plano complexo. Para isso, será necessário o resíduo de uma função cujos polos estejam sobre as frequências fermiônicas de Matsubara, ou seja, a própria função distribuição de Fermi. Logo, o resíduo desta é facilmente encontrado:

$$\begin{aligned} \text{Res}[\eta_F(z)] &= \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{e^{\beta z} + 1} = \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{e^{\beta(z - i\omega_n + i\omega_n)} + 1} = \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{e^{(\beta z - i\omega_n)} e^{\beta i\omega_n} + 1} \\ &= \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{e^{(\beta z - i\omega_n)} e^{\beta \frac{2(n+1)i\pi}{\beta}} + 1} = \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{-e^{\beta(z - i\omega_n)} + 1}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Para que seja possível calcular este limite, expande-se  $e^{-\beta(z - i\omega_n)}$  em série de potência, resultando em  $e^{\beta(z - i\omega_n)} = 1 + \beta(z - i\omega_n) + \mathcal{O}(z - i\omega_n)^2$ .

Retornando ao cálculo do resíduo:

$$\begin{aligned} \text{Res}[\eta_F(z)] &= \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{e^{(\beta z - i\omega_n)} e^{\beta \frac{2(n+1)i\pi}{\beta}} + 1} \\ &= \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{1 - 1 - \beta(z - i\omega_n) - \mathcal{O}(z - i\omega_n)^2 + \dots} \\ &= \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{(z - i\omega_n)}{-\beta(z - i\omega_n)} = -\frac{1}{\beta}, \end{aligned} \quad (5.37)$$

onde o termo  $\mathcal{O}(z - i\omega_n)^2$  foi desconsiderado, devido ao fato de ter seu valor negligenciável quando  $z \rightarrow i\omega_n$ .

Com este resultado em mãos, a integral de contorno que envolve esses pontos sem envolver singularidades de  $g(z)$  é dada por:

$$\oint_C dz \eta_F(z) g(z) = 2\pi i \text{Res}[\eta_F(z) g(i\omega_n)] = -\frac{2\pi i}{\beta} g(i\omega_n), \quad (5.38)$$

onde  $C$  é o contorno que engloba todos os pontos  $z = i\omega_n$  onde  $g(z)$  é analítico.

Definindo uma soma genérica  $S^F$ :

$$S^F = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau}. \quad (5.39)$$

Substituindo a expressão anterior 5.39 para  $g(i\omega_n)$ , tem-se:

$$S^F = - \int_C \frac{dz}{2\pi i} \eta_F(z) g(z) e^{\tau z}. \quad (5.40)$$

Esta expressão permite o cálculo de funções de correlação através das funções de Green de Matsubara, porém, uma vez que neste trabalho as funções de Green obedecem a estrutura de um produtório de funções de Green não interagentes com polos simples, é de interesse encontrar a expressão para a soma deste tipo de função. Para isso, serão definidas uma função de Green genérica  $g_0(z)$  e a soma  $S_0^F$ :

$$g_0(z) = \prod_j \frac{1}{z - z_j} \quad (5.41)$$

$$S_0^F = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} g_0(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau}.$$

Para utilizar a integral (5.40), é necessário definir o contorno  $C$ , e uma vez que os polos são conhecidos, faz com que o contorno seja todo o plano complexo, acarretando contribuições dos polos de  $\eta_F(z)$  e  $g_0(z)$ , entretanto, a integral converge a 0 conforme  $z \rightarrow \infty$ , devido ao produto  $\eta_F(z)e^{z\tau}$ . Para melhor visualizar os dois possíveis casos, ou seja  $Re(z) > 0$  e  $Re(z) < 0$ , calcula-se o limite do produto com  $z \rightarrow \infty$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \eta_F(z) e^{z\tau} = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{e^{z\tau}}{e^{\beta z} + 1}. \quad (5.42)$$

Começando pelo caso onde  $Re(z) > 0$ , e usando do fato de que  $e^{\beta z} \gg 1$  e  $0 < \tau < \beta$ :

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \eta_F(z) e^{z\tau} = \lim_{z \rightarrow \infty} e^{z(\tau - \beta)} \rightarrow 0. \quad (5.43)$$

Para  $Re(z) < 0$ , com  $e^{\beta z} \ll 1$  e  $0 < \tau < \beta$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \eta_F(z) e^{z\tau} = \lim_{z \rightarrow \infty} e^{z\tau} \rightarrow 0. \quad (5.44)$$

Com estes resultados, retorna-se para a integral (5.40):

$$0 = \int_C \frac{dz}{2i\pi} \eta_F z g_0(z) e^{z\tau} = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} g_0 i\omega_n e^{i\omega_n \tau} + \sum_j Res[g_0(z)] \eta_F z_j e^{z_j \tau} \quad (5.45)$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} g_0 i\omega_n e^{i\omega_n \tau} = \sum_j Res[g_0(z)] \eta_F z_j e^{z_j \tau}.$$

Este resultado permite chegar na expressão que possibilita calcular as somas sobre as frequências fermiônicas de Matsubara, as quais serão utilizadas no estudo deste trabalho:

$$S_0^F(\tau) = \sum_j Res[g_0(z)] \eta_F(z_j) e^{z_j \tau}. \quad (5.46)$$

Com estas definições em mãos, finalmente é possível obter a equação de movi-

mento para funções de Green com ordenamento temporal. Para isso, define-se uma função de Green  $\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau(A(\tau)B(\tau')) \rangle$ , e toma-se a derivada temporal parcial do operador genérico mencionado anteriormente (ver equação (5.16)), porém com  $t \rightarrow \tau$ :

$$\partial_\tau C_{p,\sigma}(\tau) = \partial_\tau(e^{\tau H} C_{p,\sigma} e^{-\tau H}) = e^{\tau H} ([H, C_{p,\sigma}]) e^{-\tau H} = [H, C_{p,\sigma}](\tau). \quad (5.47)$$

Agora, ao realizar a derivada temporal da função de Green  $\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau')$  definida anteriormente é possível obter a equação de movimento:

$$\begin{aligned} -\partial_\tau \mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') &= \partial_\tau \langle T_\tau(A(\tau)B(\tau')) \rangle = \partial_\tau [\theta(\tau - \tau') \langle A(\tau)B(\tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle B(\tau')A(\tau) \rangle] \\ &= \delta(\tau - \tau') \langle \{A, B\} \rangle + \langle T_\tau([H, A](\tau)B(\tau')) \rangle. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Esta equação de movimento, em conjunto com os outros resultados e definições até aqui apresentados possibilitarão o estudo do modelo (4.7), fazendo com que seja possível encontrar as funções de Green, e por consequência, as funções de correlação, relacionadas às quantidades físicas de interesse.

### 5.3 APROXIMAÇÃO DE HUBBARD-I

Com o intuito de introduzir as correlações no problema, utiliza-se a aproximação de Hubbard-I (HUBBARD, 1963), a qual permitirá a obtenção de uma função de Green correlacionada para o estado normal, a qual pode ser inserida no formalismo de Matsubara, dado que certas condições sejam respeitadas (CALEGARI; RODRÍGUEZ-NÚÑEZ, 2016).

Partindo do modelo de Hubbard repulsivo de uma banda introduzido na equação 2.6:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma}, \quad (5.49)$$

com  $t_{ij}$  sendo a amplitude de *hopping*,  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$  o operador número e  $U$  a interação coulombiana repulsiva.

Calcula-se a equação de movimento para o operador  $c_{i,\sigma}$ , utilizando o formalismo do tempo real, obtendo:

$$i \frac{d}{dt} \langle \langle c_{i,\sigma}(t); c_{j,\sigma}^\dagger(t') \rangle \rangle = i\theta(t - t') \langle [c_{i,\sigma}(t), c_{j,\sigma}^\dagger(t')] \rangle + \langle \langle [c_{i,\sigma}(t), H]; c_{j,\sigma}^\dagger(t') \rangle \rangle. \quad (5.50)$$

Aplicando a transformada de Fourier no tempo nos dois lados da equação:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left[i\frac{d}{dt}\langle\langle c_{i,\sigma}(t); c_{j,\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle\right] &= \mathcal{F}[i\theta(t-t')\langle\langle c_{i,\sigma}(t), c_{j,\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle + \langle\langle [c_{i,\sigma}(t), H]; c_{j,\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle]. \\ \omega\langle\langle c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{1}{2\pi}\langle\langle [c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma}^\dagger] \rangle\rangle + \langle\langle [c_{i,\sigma}, H]; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Agora, calculando o comutador  $[c_{i,\sigma}, H]$ , e substituindo o resultado na equação (5.52), tem-se:

$$\omega\langle\langle c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi}\delta_{ij} + \sum_j t_{ij}\langle\langle c_{j,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle + U\langle\langle n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \quad (5.52)$$

Nota-se o surgimento de uma função de Green de ordem maior  $\langle\langle n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ , cuja equação de movimento é:

$$\begin{aligned} \omega\langle\langle n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{1}{2\pi}\langle\langle [n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma}^\dagger] \rangle\rangle + \langle\langle [n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}, H]; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi}\delta_{ij}\langle n_{i,\sigma} \rangle + U\langle\langle n_{i,-\sigma}n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \sum_j t_{ij}\langle\langle n_{i,-\sigma}c_{j,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad + \sum_{il} t_{il}\langle\langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle - \sum_{il} t_{il}\langle\langle c_{l,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Novamente, há o aparecimento de funções de Green de ordem superior, porém, caso estas fossem calculadas, gerariam outras funções de ordem ainda maior. Este processo geraria uma cadeia infinita de funções de Green acopladas. Logo, para que seja possível obter a função de Green desejada, aplica-se a aproximação de Hubbard-I.

Assumindo que o sistema possui invariância translacional, esta aproximação consiste em aplicar campo médio nas funções de Green, já que é assumido que o custo de energia necessário para uma partícula transladar do sítio  $i$  para o sítio  $j$ , ou do sítio  $j$  para o sítio  $i$ , é o mesmo. Assim  $[\langle c_{l,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} \rangle - \langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma} \rangle] \approx 0$ .

$$\begin{aligned} \langle\langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma} \rangle \langle\langle c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle \\ \langle\langle c_{l,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \langle c_{l,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} \rangle \langle\langle c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Substituindo o resultado acima na equação de movimento (5.53) :

$$\begin{aligned}\omega \langle \langle n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} \langle [n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma}^\dagger] \rangle + \langle \langle [n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}, H]; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} \langle n_{i,\sigma} \rangle + U \langle \langle n_{i,-\sigma} n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \sum_j t_{il} \langle \langle n_{i,-\sigma} c_{l,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle \\ &\quad + \sum_{il} t_{il} [\langle c_{l,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} \rangle - \langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma} \rangle] \langle \langle c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle.\end{aligned}\quad (5.55)$$

Aplicou-se campo médio em  $\langle \langle n_{i,-\sigma} c_{j,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \langle n_{i,-\sigma} \rangle \langle \langle c_{j,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle$ , onde utilizou-se que  $n_{i,-\sigma}^2 = n_{i,-\sigma}$ , com isso, a equação (5.55) torna-se:

$$\omega \langle \langle n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} \langle n_{i,\sigma} \rangle + U \langle \langle n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \sum_j t_{ij} \langle n_{i,-\sigma} \rangle \langle \langle c_{j,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle. \quad (5.56)$$

Montando o sistema de equações, formado pelas equações (5.52) e (5.56):

$$\begin{aligned}\omega \langle \langle c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} + \sum_j t_{ij} \langle \langle c_{j,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle + U \langle \langle n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle. \\ \omega \langle \langle n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} \langle n_{i,\sigma} \rangle + U \langle \langle n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \sum_j t_{ij} \langle n_{i,-\sigma} \rangle \langle \langle c_{j,\sigma}; c_{j,\sigma}^\dagger \rangle \rangle,\end{aligned}\quad (5.57)$$

e aplicando a transformada de Fourier no espaço, onde  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{mn} e^{-i(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{k}} t_{mn}$  é a relação de dispersão:

$$\begin{aligned}\omega \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} + \epsilon_{\mathbf{k}} \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle + U \langle \langle n_{\mathbf{k},-\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle. \\ \omega \langle \langle n_{\mathbf{k},-\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle + U \langle \langle n_{\mathbf{k},-\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \epsilon_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle.\end{aligned}\quad (5.58)$$

Reorganizando

$$\begin{aligned}(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} + U \langle \langle n_{\mathbf{k},-\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle \\ (\omega - U) \langle \langle n_{\mathbf{k},-\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle &= \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \left[ \frac{1}{2\pi} + \epsilon_{\mathbf{k}} \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle \right].\end{aligned}\quad (5.59)$$

A solução deste sistema resulta em

$$(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} + \frac{U \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{\omega - U} \left[ \frac{1}{2\pi} + \epsilon_{\mathbf{k}} \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle \right] \quad (5.60)$$

ou:

$$\langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \frac{\omega - U(1 - n_\sigma)}{2\pi(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})(\omega - U) - U n_\sigma \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (5.61)$$

O processo acima permitiu a obtenção da função de Green correlacionada para o

estado normal, a qual será utilizada mais adiante neste trabalho.



## 6 RESULTADOS ANALÍTICOS

Esta seção será destinada à aplicação da técnica das funções de Green no modelo (4.7). Para o estudo deste, será utilizado o método de Matsubara, uma vez que o modelo será tratado no formalismo BCS. Definindo a matriz das funções de Green, a qual utilizará o conjunto de operadores  $\{c_{\mathbf{k},\uparrow}, c_{\mathbf{k},\downarrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger\}$ . Definindo  $\mathbf{k}+\mathbf{Q} \equiv \mathbf{K}$ , tem-se a matriz :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) = \begin{pmatrix} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) & G^{12}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) & G^{13}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) & G^{14}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) \\ G^{21}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) & G^{22}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) & G^{23}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) & G^{24}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) \\ G^{31}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) & G^{32}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) & G^{33}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) & G^{34}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) \\ G^{41}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) & G^{42}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) & G^{43}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) & G^{44}(\mathbf{K}, \sigma, \tau) \end{pmatrix},$$

ou

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) = \begin{pmatrix} \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \rangle\rangle \\ \langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \rangle\rangle \\ \langle\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}; c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}; c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle & \langle\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}; c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \rangle\rangle \\ \langle\langle c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger; c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} \rangle\rangle & \langle\langle c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger; c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \rangle\rangle. \end{pmatrix}$$

A equação de movimento de  $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma, \tau)$  será

$$-\partial_\tau \mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) = \delta(\tau) + \mathcal{H}_K \mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma, \tau). \quad (6.1)$$

A aplicação da transformada de Fourier no tempo nesta equação de movimento resulta em:

$$(i\omega_n \mathcal{I} - \mathcal{H}_K) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) = \mathcal{I}, \quad (6.2)$$

onde  $\mathcal{I}$  é uma matriz identidade de ordem 4.

Para que seja possível montar a matriz dos coeficientes, deve-se calcular as equações de movimento das funções de Green apresentadas na matriz acima, logo, começando pela  $G^{11}$ , utiliza-se a equação (5.48), onde o comutador  $[\mathcal{H}, c_{\mathbf{k},\uparrow}]$  é dado por:

$$[\mathcal{H}, c_{\mathbf{k},\uparrow}] = -\xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow} - W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \quad (6.3)$$

o que permite olhar para a equação de movimento:

$$\begin{aligned} \partial_\tau \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau); c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle\rangle &= -\delta(\tau - \tau') \langle\{c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau), c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau')\}\rangle - \langle T_\tau [\mathcal{H}, c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)] c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle \\ &= -\delta(\tau - \tau') - W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow} \langle\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}(\tau); c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle\rangle - \xi_{\mathbf{k}} \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau); c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle\rangle \\ &\quad + \Delta_{\mathbf{k}} \langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(\tau); c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Realizando a transformada de Fourier no tempo, e definindo  $\langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau); c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle\rangle \equiv G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau)$

$$\mathcal{F}(\partial_\tau G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau)) = \mathcal{F}(-\delta(\tau - \tau') - W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \langle\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle - \xi_{\mathbf{k}} \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle + \Delta_{\mathbf{k}} \langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle). \quad (6.5)$$

Utilizando as relações (5.27) obtidas anteriormente, tem-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\partial_\tau G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau)) &= \partial_\tau \int_0^\beta d\tau \partial_\tau e^{i\omega_n \tau} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) \\ &= [e^{i\omega_n \tau} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau)]_0^\beta - i\omega_n \int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) d\tau. \end{aligned} \quad (6.6)$$

olhando agora para o termo fora da integral:

$$\begin{aligned} [e^{i\omega_n \tau} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau)]_0^\beta &= e^{\frac{2(n+1)i\pi}{\beta}\beta} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \beta) - e^0 G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, 0) \\ &= -G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \beta) - G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, 0), \end{aligned} \quad (6.7)$$

usando a propriedade das funções fermiônicas  $f(\tau) = -f(\tau + \beta)$  :

$$[e^{i\omega_n \tau} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau)] = -G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, 0) + G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, 0) = 0. \quad (6.8)$$

Considerando que

$$\int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, \tau) d\tau = G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n). \quad (6.9)$$

Tem-se:

$$-(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}})G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) = -1 - W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}G^{13}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) + \Delta_{\mathbf{k}}G^{21}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n). \quad (6.10)$$

Repetir o processo acima para as outras funções de Green presentes na matriz permite encontrar a matriz dos coeficientes. O cálculo destas outras funções será omitido, visto que o processo é repetitivo e análogo ao cálculo anterior, logo, dá-se a matriz dos coeficientes  $\mathcal{H}_k$ :

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} & W_{\mathbf{k}} & 0 \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & -\xi_{\mathbf{k}} & 0 & -W_{\mathbf{k}} \\ W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & 0 & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \\ 0 & -W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & -\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix}$$

No estado normal, os parâmetros de ordem  $W_{\mathbf{k}}$  e  $\Delta_{\mathbf{k}}$  são nulos, então:

$$G_{W_{\mathbf{k}} \rightarrow 0, \Delta_{\mathbf{k}} \rightarrow 0}^{11}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) = \left( \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}} \right) \equiv G_{0\uparrow}(\mathbf{k}, \uparrow, i\omega_n) \quad (6.11)$$

Combinando os resultados (6.9) e (6.11), chega-se em:

$$G_{0\uparrow}(\mathbf{k}, i\omega_n)G_{\uparrow}^{11}(\mathbf{k}, i\omega_n) = 1 + W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}G_{\uparrow}^{13}(\mathbf{k}, i\omega_n) - \Delta_{\mathbf{k}}G_{\downarrow}^{21}(\mathbf{k}, i\omega_n). \quad (6.12)$$

Repetindo este processo para  $G^{22}$ ,  $G^{33}$  e  $G^{44}$ :

$$\begin{aligned} i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} &= -G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}, -i\omega_n) \\ i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} &= G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, i\omega_n) \\ i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} &= -G_{0\downarrow}^{-1}(-\mathbf{k} - \mathbf{Q}, -i\omega_n). \end{aligned} \quad (6.13)$$

Substituir estes resultados em suas respectivas equações de movimento dará origem à uma nova matriz  $\mathcal{H}'_k$ :

$$\mathcal{H}'_k = \begin{pmatrix} G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}) & \Delta_{\mathbf{k}} & -W_{\mathbf{k}} & 0 \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}) & 0 & -W_{\mathbf{k}} \\ -W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & 0 & G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{K}) & \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \\ 0 & -W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{K}) \end{pmatrix}$$

na qual, por simplicidade, omitiu-se a dependência em  $i\omega_n$ .

Neste trabalho, será considerado que o gap CDW é constante sobre toda a primeira zona de Brillouin, ou seja  $W_{\mathbf{k}} = W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ .

A nova matriz das funções de Green pode ser obtida da relação:

$$\mathcal{G} = (\mathcal{H}'_k)^{-1}\mathcal{I}, \quad (6.14)$$

onde  $\mathcal{I}$  também é uma matriz identidade de ordem 4. Assim,

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}) & \Delta_{\mathbf{k}} & -W_{\mathbf{k}} & 0 \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}) & 0 & -W_{\mathbf{k}} \\ -W_{\mathbf{k}} & 0 & G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{K}) & \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \\ 0 & -W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{K}) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nomeando  $(\mathcal{H}'_k)^{-1} \equiv A$ :

$$A = \frac{1}{D} \begin{pmatrix} A^{11} & A^{12} & A^{13} & A^{14} \\ A^{21} & A^{22} & A^{23} & A^{24} \\ A^{31} & A^{32} & A^{33} & A^{34} \\ A^{41} & A^{42} & A^{43} & A^{44} \end{pmatrix},$$

onde  $D$  é o determinante da matriz  $\mathcal{H}'_k$ :

$$D = [G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{k})G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}) + \Delta_k^2][G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{K})G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{K}) + \Delta_{k+Q}^2] - W_k^2[G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{K})G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}) + G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{k})G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{K})] + W_k^4 + 2\Delta_k\Delta_{k+Q}W_k^2. \quad (6.15)$$

E os elementos  $A^{ij}$  referentes às funções de Green  $G^{11}$ ,  $G^{12}$  e  $G^{13}$ , que corresponderão às funções de correlação que permitirão a obtenção do potencial químico ( $G^{11}$ ) e dos parâmetros de ordem  $\Delta_k$  ( $G^{12}$ ) e  $W_k$  ( $G^{13}$ ) serão dados por:

$$\begin{aligned} A^{11} &= -G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{K})W_k^2 + (G_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{K})G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{K}) + \Delta_{k+Q}^2)G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}) \\ A^{12} &= -\Delta_{k+Q}W_k^2 - \Delta_k\Delta_{k+Q}^2 - \Delta_kG_{0\uparrow}^{-1}(\mathbf{K})G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{K}) \\ A^{13} &= -W_k(\Delta_k\Delta_{k+Q} - G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{k})G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{K}) + W_k^2). \end{aligned} \quad (6.16)$$

Assim, a nova matriz  $\mathcal{G}$  é definida como:

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) = \begin{pmatrix} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{12}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{13}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{14}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \\ G^{21}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{22}(\mathbf{k}, \sigma, -i\omega_n) & G^{23}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{24}(\mathbf{k}, \sigma, -i\omega_n) \\ G^{31}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{32}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{33}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{34}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \\ G^{41}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{42}(\mathbf{k}, \sigma, -i\omega_n) & G^{43}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) & G^{44}(\mathbf{k}, \sigma, -i\omega_n) \end{pmatrix}$$

Com os elementos  $G^{ij}$  de interesse neste trabalho dados por:

$$\begin{aligned} G^{11}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) &= \frac{A^{11}}{D} \\ G^{12}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) &= \frac{A^{12}}{D} \\ G^{13}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) &= \frac{A^{13}}{D}. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Até agora, não foram substituídas as funções de Green correlacionadas, a fim de explicitar a natureza polinomial das expressões. Isto será feito a partir de agora, contudo, serão omitidos vários passos do processo, uma vez que estes se resumem a manipulações algébricas repetitivas e laboriosas.

Os elementos de matriz  $A^{11}$ ,  $A^{12}$  e  $A^{13}$  dependem de funções de Green para o estado normal denominadas  $G_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ . Para a introdução das correlações, será feita a substituição  $G_0 \rightarrow G_N$ , onde  $G_N$  é uma função de Green correlacionada, calculada no estado normal do sistema (CALEGARI; RODRÍGUEZ-NÚÑEZ, 2016).

No presente trabalho, será utilizada a função de Green obtida utilizando a aproximação de Hubbard-I. Ou seja,  $G_0$  será substituída pela função de Green da equação

5.61.

O denominador  $D(i\omega_n)$ , cujas raízes permitem o cálculo das bandas é dado por:

$$D = \lambda_0 + \lambda_1 z^2 + \lambda_2 z^4 + \lambda_3 z^6 + \lambda_4 z^8 \quad (6.18)$$

Para que seja possível realizar o cálculo das bandas, é necessário definir os coeficientes  $\lambda_i$ :

$$\lambda_0 = U^4 (n_\sigma - 1)^4 \left( (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2) (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) + 2W_{\mathbf{k}}^2 (\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + W_{\mathbf{k}}^4 \right). \quad (6.19)$$

$$\begin{aligned} \lambda_1 = & U^4 \left( -(n_\sigma - 1)^2 \left( \Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2W_{\mathbf{k}}^2 \right) \right. \\ & - 2U^2 (n_\sigma - 1)^2 \left[ (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2) (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) + 2W_{\mathbf{k}}^2 (\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + W_{\mathbf{k}}^4 \right] \\ & \left. - 2U^3 (n_\sigma - 1)^2 n_\sigma \left[ \Delta_{\mathbf{k}}^2 \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 \xi_{\mathbf{k}} + (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) (\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - W_{\mathbf{k}}^2) \right] \right). \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} \lambda_2 = & U^2 \left[ \Delta_{\mathbf{k}}^2 ((n_\sigma - 2)n_\sigma + 2) + n_\sigma (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 (n_\sigma - 2) + \xi_{\mathbf{k}}^2 (n_\sigma - 2) \right. \\ & + 4\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} n_\sigma + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 (n_\sigma - 2) - 2(n_\sigma + 2)W_{\mathbf{k}}^2 \\ & \left. + 2 (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2W_{\mathbf{k}}^2) \right] + (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2) (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) \\ & + 2U n_\sigma \left[ (\Delta_{\mathbf{k}}^2 \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 \xi_{\mathbf{k}} + (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) (\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - W_{\mathbf{k}}^2)) \right] \\ & + 2W_{\mathbf{k}}^2 (\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + 2U^3 n_\sigma (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + U^4 + W_{\mathbf{k}}^4. \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\lambda_3 = -\Delta_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - 2U n_\sigma (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - 2U^2 - 2W_{\mathbf{k}}^2. \quad (6.22)$$

E por fim,

$$\lambda_4 = 1. \quad (6.23)$$

É possível realizar uma nova mudança de variável,  $x = z^2$ , o que permite reescrever

D:

$$D = \lambda_0 + \lambda_1 x + \lambda_2 x^2 + \lambda_3 x^3 + \lambda_4 x^4. \quad (6.24)$$

Este polinômio possui raízes analíticas  $x_1, x_2, x_3$  e  $x_4$ . Logo, as raízes de  $D$  serão:

$$\begin{aligned} z_1^\pm &= \pm\sqrt{x_1} \\ z_2^\pm &= \pm\sqrt{x_2} \\ z_3^\pm &= \pm\sqrt{x_3} \\ z_4^\pm &= \pm\sqrt{x_4}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

## 6.1 FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO

Como mencionado anteriormente, as funções de Green não têm significado físico, para isso, é necessário utilizar as funções de correlação, que estão diretamente associadas às funções de Green. Logo, uma vez que as funções foram calculadas a partir das matrizes definidas na sessão anterior, utiliza-se o formalismo de Matsubara para realizar a soma sobre as frequências, obtendo assim as grandezas termodinâmicas de interesse.

Começando pela ocupação:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} (\langle c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\downarrow} \rangle) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} (G^{11}(\mathbf{k}, \uparrow, i\omega_n) + G^{22}(\mathbf{k}, \downarrow, -i\omega_n)). \quad (6.26)$$

Para que seja possível realizar esta soma, utiliza-se a equação (5.46), porém, ela só é válida para funções de Green com polos simples. Portanto, será feita a separação da função de Green em frações parciais. Antes de reescrever  $G^{11}$  em frações parciais, seu numerador será escrito como um polinômio:

$$G_N^{11}(z) = \frac{y_0 + y_1 z + y_2 z^2 + y_3 z^3 + y_4 z^4 + y_5 z^5 + y_6 z^6 + y_7 z^7}{\lambda_0 + \lambda_1 z^2 + \lambda_2 z^4 + \lambda_3 z^6 + \lambda_4 z^8}. \quad (6.27)$$

É de interesse explicitar os coeficientes  $y_i$  em termos de  $z$ , assim como foi feito para  $D$ :

$$y_0 = -U^4(n_\sigma - 1)^4 (\xi_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} W_{\mathbf{k}}^2). \quad (6.28)$$

$$y_1 = U^4(n_\sigma - 1)^3 (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2). \quad (6.29)$$

$$\begin{aligned} y_2 = & U^3(n_\sigma - 1)^2 n_\sigma (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - W_{\mathbf{k}}^2) \\ & + 2U^2(n_\sigma - 1)^2 (\xi_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} W_{\mathbf{k}}^2) + \xi_{\mathbf{k}} U^4(n_\sigma - 1)^2. \end{aligned} \quad (6.30)$$

$$y_3 = U^2(n_\sigma - 2)(n_\sigma - 1) (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2) - 2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}U^3(n_\sigma - 1)n_\sigma + U^4(1 - n_\sigma). \quad (6.31)$$

$$y_4 = -Un_\sigma (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - W_{\mathbf{k}}^2) - \xi_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) \\ + U^2 (-\xi_{\mathbf{k}}((n_\sigma - 2)n_\sigma + 2) - 2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}n_\sigma^2) + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}W_{\mathbf{k}}^2 + U^3(-n_\sigma). \quad (6.32)$$

$$y_5 = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - 2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}Un_\sigma + U^2(n_\sigma - 2) - W_{\mathbf{k}}^2. \quad (6.33)$$

$$y_6 = \xi_{\mathbf{k}} + Un_\sigma. \quad (6.34)$$

$$y_7 = 1. \quad (6.35)$$

Agora, reescrevendo o denominador como:

$$D = (z - z_1)(z - z_2)(z - z_3)(z - z_4)(z - z_5)(z - z_6)(z - z_7)(z - z_8), \quad (6.36)$$

onde  $z_i$  são as raízes do polinômio  $D$ .

Escrevendo  $G_{11}$  em termos dos seus pesos espectrais:

$$G^{11}(z) = \sum_j \frac{Z_j^{11}}{z - z_j}, \text{ onde } Z_j \text{ são dados por :} \quad (6.37)$$

$$Z_1^{11} = \frac{y_0 + y_1z_1 + y_2z_1^2 + y_3z_1^3 + y_4z_1^4 + y_5z_1^5 + y_6z_1^6 + y_7z_1^7}{(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)(z_1 - z_5)(z_1 - z_6)(z_1 - z_7)(z_1 - z_8)}$$

$$Z_2^{11} = \frac{-y_0 - y_1z_2 - y_2z_2^2 - y_3z_2^3 - y_4z_2^4 - y_5z_2^5 - y_6z_2^6 - y_7z_2^7}{(z_1 - z_2)(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)(z_2 - z_5)(z_2 - z_6)(z_2 - z_7)(z_2 - z_8)}$$

$$Z_3^{11} = \frac{-y_0 - y_1z_3 - y_2z_3^2 - y_3z_3^3 - y_4z_3^4 - y_5z_3^5 - y_6z_3^6 - y_7z_3^7}{(z_1 - z_3)(z_3 - z_2)(z_3 - z_4)(z_3 - z_5)(z_3 - z_6)(z_3 - z_7)(z_3 - z_8)}$$

$$Z_4^{11} = \frac{-y_0 - y_1z_4 - y_2z_4^2 - y_3z_4^3 - y_4z_4^4 - y_5z_4^5 - y_6z_4^6 - y_7z_4^7}{(z_1 - z_4)(z_4 - z_2)(z_4 - z_3)(z_4 - z_5)(z_4 - z_6)(z_4 - z_7)(z_4 - z_8)}$$

$$Z_5^{11} = \frac{-y_0 - y_1z_5 - y_2z_5^2 - y_3z_5^3 - y_4z_5^4 - y_5z_5^5 - y_6z_5^6 - y_7z_5^7}{(z_1 - z_5)(z_5 - z_2)(z_5 - z_3)(z_5 - z_4)(z_5 - z_6)(z_5 - z_7)(z_5 - z_8)}$$

$$Z_6^{11} = \frac{-y_0 - y_1z_6 - y_2z_6^2 - y_3z_6^3 - y_4z_6^4 - y_5z_6^5 - y_6z_6^6 - y_7z_6^7}{(z_1 - z_6)(z_6 - z_2)(z_6 - z_3)(z_6 - z_4)(z_6 - z_5)(z_6 - z_7)(z_6 - z_8)}$$

$$Z_7^{11} = \frac{-y_0 - y_1z_7 - y_2z_7^2 - y_3z_7^3 - y_4z_7^4 - y_5z_7^5 - y_6z_7^6 - y_7z_7^7}{(z_1 - z_7)(z_7 - z_2)(z_7 - z_3)(z_7 - z_4)(z_7 - z_5)(z_7 - z_6)(z_7 - z_8)}$$

$$Z_8^{11} = \frac{-y_0 - y_1z_8 - y_2z_8^2 - y_3z_8^3 - y_4z_8^4 - y_5z_8^5 - y_6z_8^6 - y_7z_8^7}{(z_1 - z_8)(z_8 - z_2)(z_8 - z_3)(z_8 - z_4)(z_8 - z_5)(z_8 - z_6)(z_8 - z_7)}.$$

Calculando o resíduo de  $G_N^{11}(z_j)$ :

$$\langle n_{\uparrow} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} G_N^{11}(i\omega_n) = \sum_j \text{Res}[G^{11}(z_j)]f(z_j) = \sum_j Z_j^{11}f(z_j), \quad (6.38)$$

onde  $f(z)$  é a função de Fermi.

Repetindo o mesmo processo para  $G_N^{22}(i\omega_n)$ , o qual possui os seguintes coeficientes no polinômio do seu numerador:

$$\psi_0 = -U^4(n_{\sigma} - 1)^4 (\xi_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} W_{\mathbf{k}}^2). \quad (6.39)$$

$$\psi_1 = -U^4(n_{\sigma} - 1)^3 (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2). \quad (6.40)$$

$$\begin{aligned} \psi_2 = & U^3(n_{\sigma} - 1)^2 n_{\sigma} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - W_{\mathbf{k}}^2) \\ & + 2U^2(n_{\sigma} - 1)^2 (\xi_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} W_{\mathbf{k}}^2) + \xi_{\mathbf{k}} U^4(n_{\sigma} - 1)^2. \end{aligned} \quad (6.41)$$

$$\psi_3 = -U^2(n_{\sigma} - 2)(n_{\sigma} - 1) (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2) + (2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} U^3 n_{\sigma} + U^4)(n_{\sigma} - 1). \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} \psi_4 = & -U n_{\sigma} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - W_{\mathbf{k}}^2) - \xi_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) \\ & + U^2 (-\xi_{\mathbf{k}}((n_{\sigma} - 2)n_{\sigma} + 2) - 2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} n_{\sigma}^2) + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} W_{\mathbf{k}}^2 + U^3(-n_{\sigma}). \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$\psi_5 = \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} U n_{\sigma} + U^2(2 - n_{\sigma}) + W_{\mathbf{k}}^2. \quad (6.44)$$

$$\psi_6 = \xi_{\mathbf{k}} + U n_{\sigma}. \quad (6.45)$$

$$\psi_7 = -1. \quad (6.46)$$

Ou seja, a ocupação média é dada por:

$$\langle n \rangle = \sum_j (\text{Res}[G_j^{11}(z)]f(z_j) + \text{Res}[G^{22}(z)]f(z_j)). \quad (6.47)$$

Agora, serão abordados os *gaps* supercondutor e CDW. O processo a ser realizado é o mesmo utilizado para obter  $\langle n_{\uparrow} \rangle$  e  $\langle n_{\downarrow} \rangle$ . O gap supercondutor depende da função de

Green  $G_N^{12}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n)$ :

$$\begin{aligned} G_N^{12}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) &= \langle T_\tau c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle \\ &= \frac{\alpha_0 + \alpha_1 z + \alpha_2 z^2 + \alpha_3 z^3 + \alpha_4 z^4 + \alpha_5 z^5 + \alpha_6 z^6}{(z_1 - z_2)(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)(z_2 - z_5)(z_2 - z_6)(z_2 - z_7)(z_2 - z_8)}, \end{aligned} \quad (6.48)$$

com os coeficientes  $\alpha$  do numerador definidos abaixo:

$$\alpha_0 = -\Delta_{\mathbf{k}} U^4 (n_\sigma - 1)^4 (\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} U^4 (n_\sigma - 1)^4 W_{\mathbf{k}}^2 \quad (6.49)$$

$$\alpha_2 = \Delta_{\mathbf{k}} U^2 (n_\sigma - 1)^2 (2\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + 2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + Un_\sigma) + U^2) + 2\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} U^2 (n_\sigma - 1)^2 W_{\mathbf{k}}^2 \quad (6.50)$$

$$\alpha_4 = \Delta_{\mathbf{k}} (-\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - 2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} Un_\sigma - U^2((n_\sigma - 2)n_\sigma + 2)) - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} W_{\mathbf{k}}^2 \quad (6.51)$$

$$\alpha_6 = \Delta_{\mathbf{k}} \quad (6.52)$$

$$\alpha_1 = \alpha_3 = \alpha_5 = 0. \quad (6.53)$$

Dados os coeficientes, o processo é análogo ao realizado anteriormente para encontrar  $\langle n_\sigma \rangle$ , ou seja, separar em frações parciais e encontrar os pesos espectrais, os quais serão multiplicados pela função de Fermi  $f(z)$  associada ao peso. Os pesos espectrais  $Z_i^{12}$ , da função  $G^{12}$  estão definidos no apêndice A.

O que permite realizar a soma sobre as frequências fermiônicas de Matsubara:

$$\langle c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} G_N^{12}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) = \sum_j Res[Z_j^{12}(z_j)] \eta_F(z_j). \quad (6.54)$$

O resultado acima permite encontrar uma expressão para o gap supercondutor, o qual foi definido anteriormente (ver equação (3.5)) como:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_j Res[G^{12}(z)] f(z_j), \quad (6.55)$$

onde os efeitos do *cutoff* e da simetria estão implícitos dentro da expressão.

A principal característica dessa expressão para o gap supercondutor é a sua natureza transcendental, ou seja, é uma função que depende de si mesma, semelhante a equação  $\tan(x) = x$ . Esta expressão não apresenta solução analítica, necessitando técnicas numéricas para resolvê-la, as quais serão abordadas mais adiante neste trabalho.

O processo para obter o gap CDW é exatamente o mesmo, salvo a diferente função de Green, a qual é dada por  $G^{14}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n)$ , e apresenta os seguintes coeficientes no seu numerador:

$$\phi_0 = -U^4(n_\sigma - 1)^4 W_{\mathbf{k}}(\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - U^4(n_\sigma - 1)^4 W_{\mathbf{k}}^3 \quad (6.56)$$

$$\phi_1 = U^4(n_\sigma - 1)^3 W_{\mathbf{k}}(-(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})) \quad (6.57)$$

$$\begin{aligned} \phi_2 = & U^2(n_\sigma - 1)^2 W_{\mathbf{k}}(2\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - Un_\sigma(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - 2\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + U^2) \\ & + 2U^2(n_\sigma - 1)^2 W_{\mathbf{k}}^3 \end{aligned} \quad (6.58)$$

$$\phi_3 = -U^2(n_\sigma - 1)W_{\mathbf{k}}(n_\sigma(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - 2U) - 2(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})) \quad (6.59)$$

$$\phi_4 = W_{\mathbf{k}}(-\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}}(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + Un_\sigma) + U(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}n_\sigma + U(n_\sigma(n_\sigma + 2) - 2))) - W_{\mathbf{k}}^3 \quad (6.60)$$

$$\phi_5 = W_{\mathbf{k}}(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + 2Un_\sigma) \quad (6.61)$$

$$\phi_6 = W_{\mathbf{k}}. \quad (6.62)$$

Assim como no gap supercondutor, o parâmetro de ordem CDW também será uma equação transcendental.

$$W_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle = \sum_j \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{Res}[G^{13}(z)] f(z_j). \quad (6.63)$$

Ambos os gaps CDW e supercondutor, assim como suas soluções numéricas serão abordadas com maior ênfase no capítulo a seguir.

## 7 RESULTADOS NUMÉRICOS

O objetivo principal deste trabalho consiste em mostrar os efeitos da interação coulombiana na coexistência entre CDW e a supercondutividade. No entanto, para facilitar a compreensão geral dos resultados, este capítulo será dividido em duas partes. A primeira metade será destinada aos resultados para o regime não correlacionado, ou seja, livre dos efeitos de  $U$ . Enquanto a segunda metade terá como foco os efeitos de  $U$  nas quantidades a serem apresentadas.

Considerando a complexidade do problema estudado, a seção de resultados será composta de várias sub seções dentro da divisão entre o regime correlacionado e o regime não correlacionado. Inicialmente serão apresentados separadamente os resultados para CDW e a supercondutividade, assumindo que a outra fase não existe, ou seja, os seus casos puros. As grandezas apresentadas serão as bandas de energia, as densidades de estados e o parâmetro de ordem referente à fase.

Com o problema definido, os seguintes parâmetros serão variados: potencial químico ( $\mu$ ), *hopping* de segundos vizinhos ( $t_1$ ) e o gap ( $\Delta, W$ ) da fase em questão.

Os resultados numéricos foram obtidos utilizando um programa desenvolvido em linguagem Fortran 95, com o intuito de resolver numericamente as equações resultantes dos cálculos analíticos das funções de correlação. Entre as técnicas utilizadas estão a integração em duas dimensões com o método de Simpson, e a implementação das raízes de um polinômio de grau 4 (PERRIN, 1997).

Também foram construídos algoritmos para implementação da técnica da bissecção, além do método iterativo, os quais são utilizados no cálculo do potencial químico, assim como no cálculo dos parâmetros de ordem. Estes algoritmos estão apresentados no apêndice B, em forma de fluxogramas.

Para este trabalho, todos os cálculos foram realizados utilizando uma rede quadrada, que resulta na seguinte relação de dispersão:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t_0[\cos(ak_x) + \cos(ak_y)] + 4t_1\cos(ak_x)\cos(ak_y). \quad (7.1)$$

Onde  $a$  é o parâmetro de rede,  $k_x$  e  $k_y$  são as componentes dos vetores do espaço recíproco,  $t_0$  é o *hopping* de primeiros vizinhos, e  $t_1$  o *hopping* para segundos vizinhos.

Em todos os resultados apresentados neste capítulo será considerado  $t_0 = 1, 0 \text{ eV}$ , o qual será a unidade de energia para os parâmetros  $t_1, U, V, k_B T, \hbar\omega_D, \Delta, W$  e  $\mu$ , além de  $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$  e  $\epsilon_c = 0, 5t_0$ .

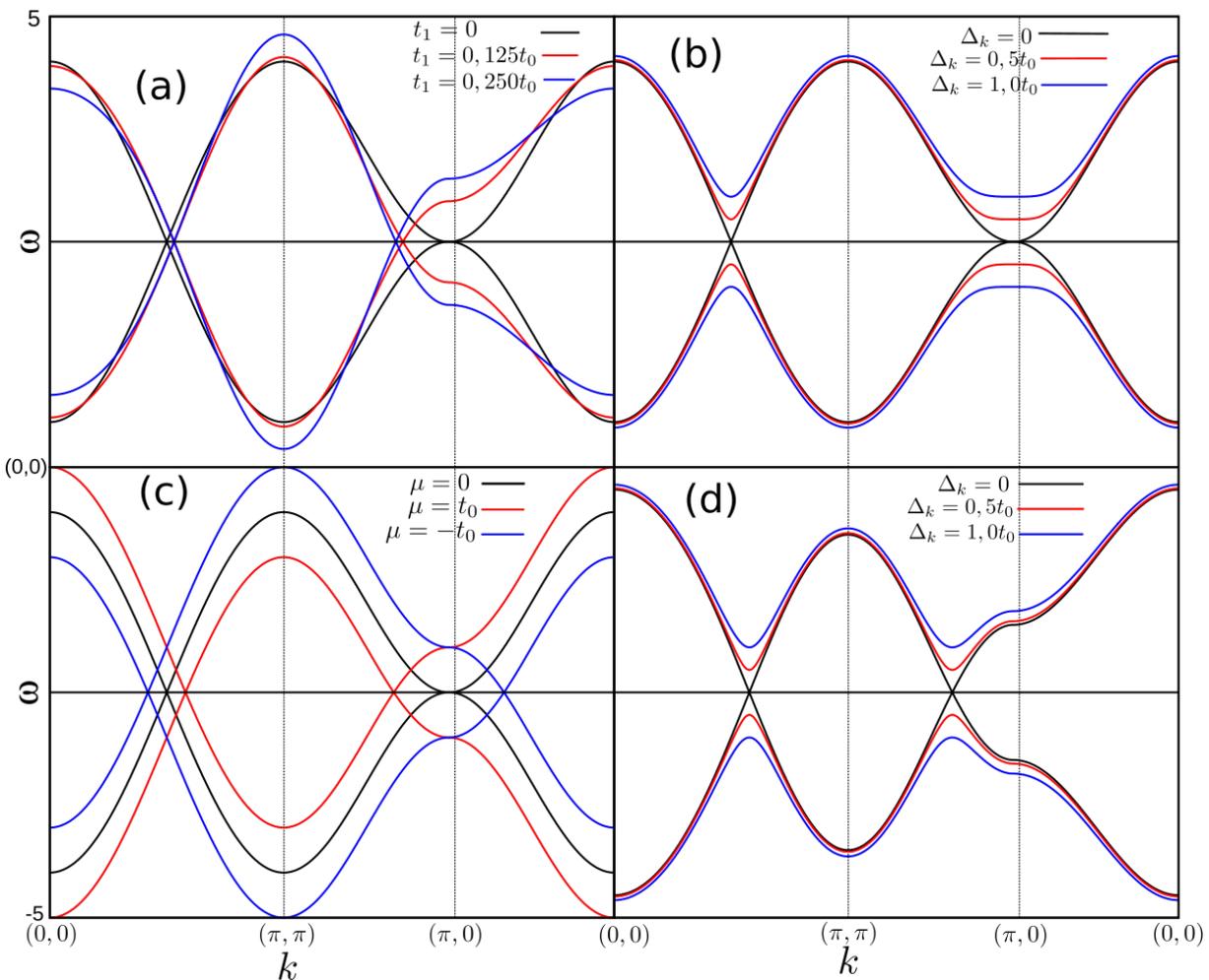
## 7.1 REGIME NÃO CORRELACIONADO

Para  $U = 0$ , os únicos efeitos são o do potencial atrativo  $V_{\mathbf{k}}$ , o qual modula os gaps supercondutor e CDW, além dos próprios gaps  $\Delta$  e  $W$ . Nesta seção, como mencionado anteriormente, serão variados  $t_1, \mu, \Delta$  e  $W$ .

### 7.1.1 Estado Supercondutor

Para o estado supercondutor puro, as bandas de energia são dadas através da relação  $E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \pm \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ . A figura 7.1 foi obtida para direções de alta simetria da primeira zona de Brillouin.

Figura 7.1 – Bandas de energia para o estado supercondutor na ausência de correlações em  $T = 0$  e para simetria  $s$ .



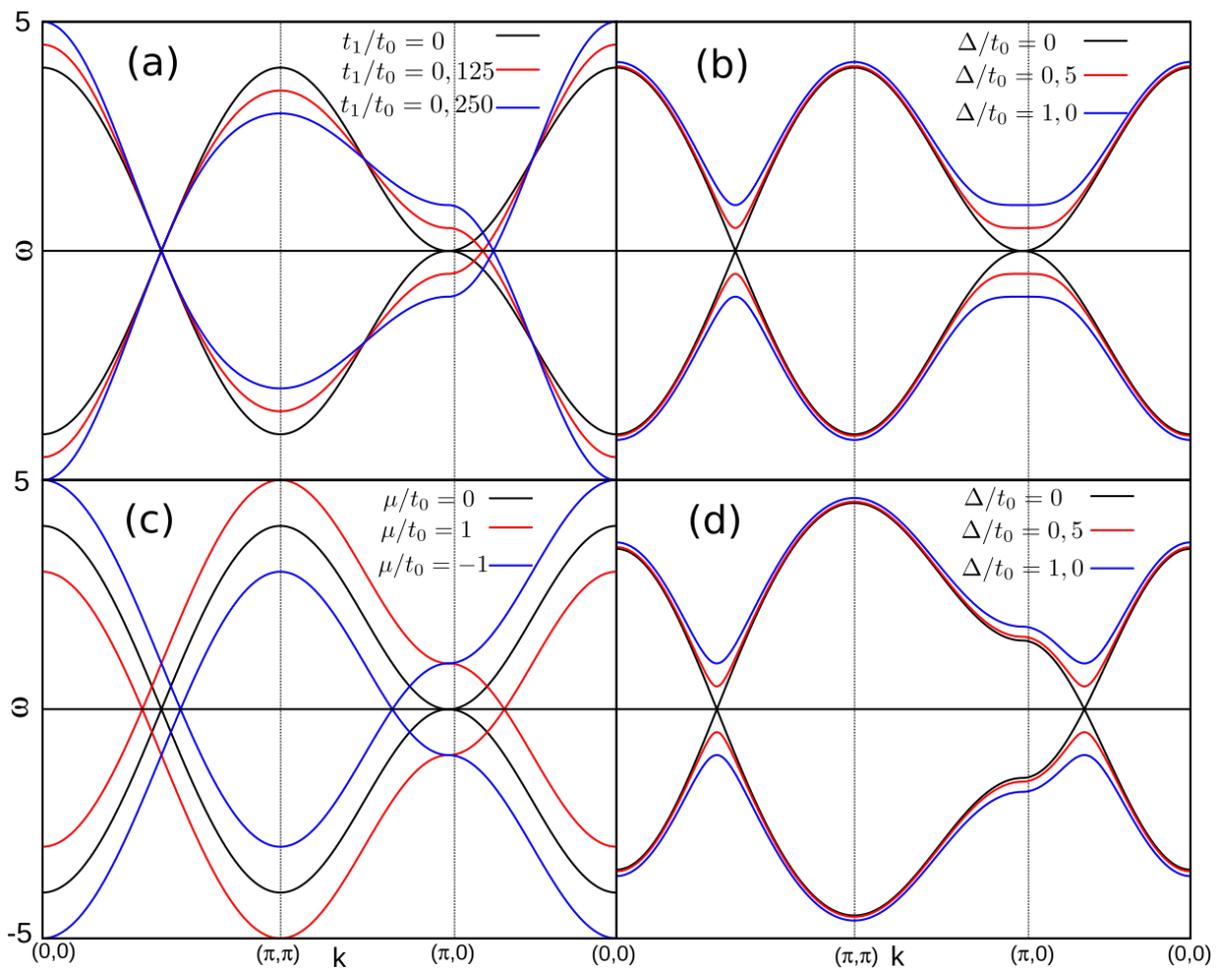
Fonte: Elaborada pelo Autor.

Começando pelo painel (a), onde  $\Delta$  e  $\mu$  foram mantidos fixos e iguais a 0. Neste

caso, foi variado  $t_1$ , o qual causou um deslocamento nas regiões de abertura do gap supercondutor, em  $(\pi, 0)$ , para regiões próximas a  $(\pi/2, \pi/2)$ . Nota-se também a alteração na amplitude da região em torno de  $(\pi/2, \pi/2)$ , a qual cresce com o aumento de  $t_1$ , em contraste com os valores da energia em  $(0, 0)$ , os quais decrescem com o aumento em questão. Uma vez que a largura da banda deve se manter constante e igual a  $8t_1$ , a diminuição dos valores de  $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$  em  $(0, 0)$  causam um aumento em  $(\pi/2, \pi/2)$ .

No painel (b), foram mantidos  $t_1 = \mu = 0$ , e foi variado o valor de  $\Delta$ .  $\Delta$  causa a abertura do gap supercondutor em torno de  $(\pi, 0)$ , além da abertura de um gap em em  $(\pi/2, \pi/2)$ , cuja largura de gap é proporcional a  $\Delta$ . Esta estrutura de gap está diretamente relacionada à simetria de onda  $s$ , considerada para o gap  $\Delta$ . Neste regime, não há alteração nos valores de amplitude em nenhuma região, além dos locais onde ocorre abertura do gap.

Figura 7.2 – Bandas de energia para o estado supercondutor com  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}+\mathbf{Q}$  na ausência de correlações em  $T = 0$  e com simetria  $s$  calculados com  $V = 2t_0, t_1 = 0, 125t_0$  e  $\mu = 1t_0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Graças ao resultado obtido para  $\mu = -t_0$ , é de interesse analisar o comportamento das bandas de energia para o caso  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}+\mathbf{Q}$ , com o intuito de conferir a região de abertura

e possível estreitamento do gap sob variação dos parâmetros.

Imediatamente, ao analisar o painel (a) da figura 7.2, nota-se o comportamento semelhante ao caso para  $\mathbf{k}$ , porém a primeira diferença causada pelo vetor de *nesting*  $\mathbf{Q}$  é a influência do  $t_1$ , além do deslocamento do ponto de cruzamento das bandas, que agora ocorre à direita do ponto  $(\pi, 0)$ .

No painel (b), o comportamento é idêntico ao caso onde não foi utilizado o vetor de *nesting*, o que era esperado, já que a ausência do  $t_1$  faz com que os efeitos de  $\mathbf{Q}$  sejam desprezados no caso supercondutor.

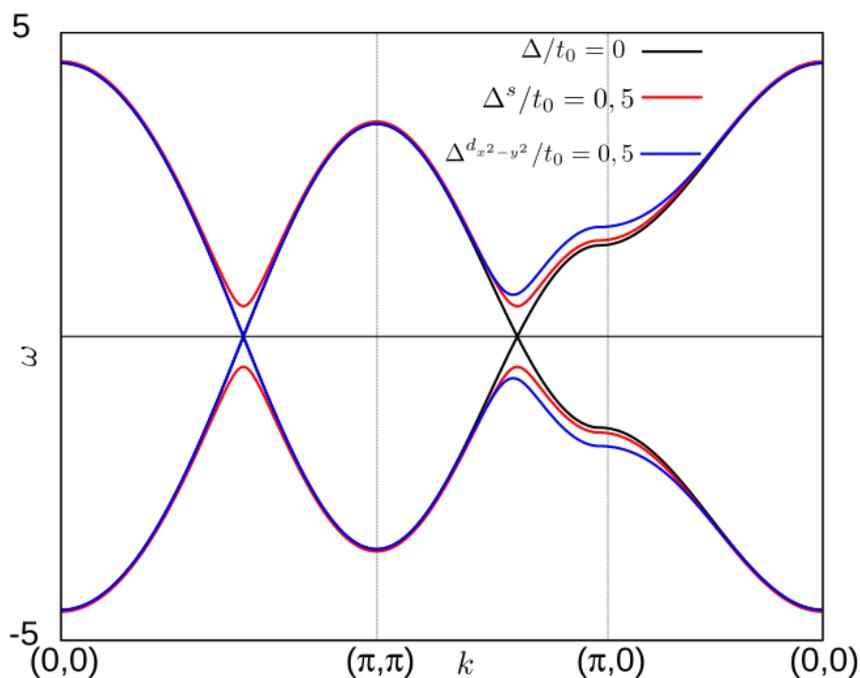
Analisando o painel (c) percebe-se o ponto apresentado na discussão anterior, onde o potencial químico negativo causa a inversão na direção de abertura do gap. Além disso na ausência de  $t_1$ , as bandas não são afetadas pelo vetor  $\mathbf{Q}$ .

Enquanto no painel (d), têm-se o comportamento esperado, ou seja, o ponto de interseção ocorre à direita do ponto  $(\pi, 0)$ , ao contrário da figura 7.1. Isto ocorre devido à presença do  $t_1$ .

Os resultados anteriores foram obtidos utilizando simetria de onda  $s$ . É de interesse também analisar o comportamento das bandas para simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ . Os efeitos da simetria irão se manifestar apenas no estado supercondutor, logo, analisa-se apenas o caso com  $t_1 = 0,250t_0$ ,  $\mu = 1t_0$  e  $\Delta = 0,5t_0$ , evidenciando as simetrias. É mostrado no resultado da 7.3 a linha preta referente ao estado normal, onde as simetrias não alteram o comportamento das bandas.

O efeito mais evidente da simetria  $d_{x^2-y^2}$ , em azul, é a não abertura do gap em  $(\pi/2, \pi/2)$ , causando um aumento do gap na região em torno de  $(\pi, 0)$ , quando compara-se com a simetria  $s$ , representada pela linha vermelha.

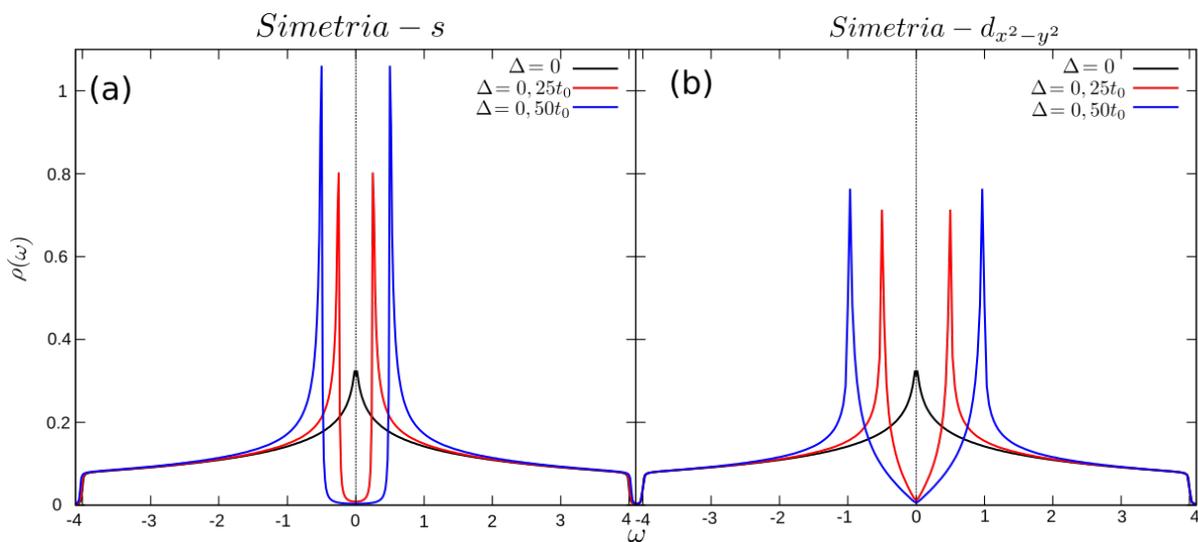
Figura 7.3 – Bandas de energia do estado supercondutor com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Outra quantidade que contém informações sobre o estado supercondutor é a densidade de estados,  $\rho(\omega)$ . Com base nos resultados apresentados para as bandas, onde foi verificado o efeito do  $t_1$ , o qual apenas desloca a abertura do gap, serão apresentados apenas resultados onde varia-se  $\Delta$ , com  $\mu = t_1 = 0$ , para simetria  $d_{x^2-y^2}$  e simetria  $s$ .

Figura 7.4 – Densidade de estados para o estado supercondutor na ausência de correlações fortes com  $V = 2t_0$ ,  $\mu = 0$ ,  $k_B T = 0$  e  $t_1 = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

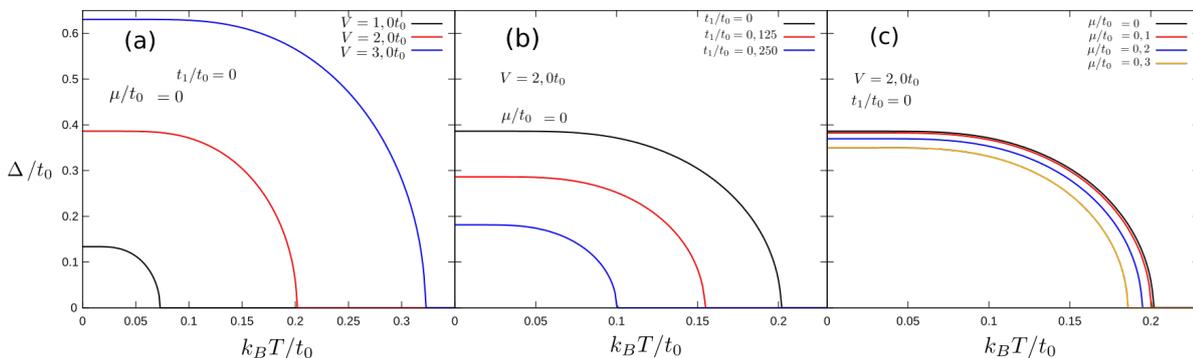
Percebe-se no painel (a) da figura 7.4, referente à simetria  $s$ , a natureza do gap supercondutor, que quando presente, tem forma em "U", contrastando com o gap em "V" da simetria  $d_{x^2-y^2}$ . Ambas simetrias alteram a forma da densidade de estados quando estão no estado supercondutor, com o gap abrindo em torno de  $\omega = 0$ . É possível ver as diferenças na quantidade de estados acessíveis quando o gap supercondutor é aberto.

Na simetria  $s$ , devido à abertura do gap, os estados acessíveis são empilhados nas bordas do gap. O aumento do valor de  $\Delta$  causa um alargamento do gap, e por consequência, um empilhamento maior de estados.

No caso do painel (b) da figura 7.4, obtido utilizando a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , o gap supercondutor também abre em torno de  $\omega = 0$ , contudo, o gap tem a forma aproximada da letra "V", ou seja, os estados previamente acessíveis, foram empilhados formando picos nas extremidades do gap. Contrastando com o caso para simetria  $s$ , o gap total ocorre apenas no ponto  $\omega = 0$ . No caso da simetria  $s$ , há uma região grande em torno de  $\omega = 0$ , onde os estados foram realocados, formando um gap total mais largo. A dimensão da abertura do gap supercondutor aumenta proporcionalmente ao crescimento de  $\Delta$ .

A estrutura dos gaps observados nas densidades de estados estão de acordo com as bandas de energia previamente calculadas, onde para simetria  $s$ , observa-se um gap total das bandas, tanto em  $(\pi, 0)$  quanto em  $(\pi/2, \pi/2)$ , refletidos na densidade de estados pela forma de abertura do gap supercondutor em forma de "U". Enquanto no caso da simetria  $d_{x^2-y^2}$ , uma vez que ocorre uma abertura de um gap apenas na região  $(\pi, 0)$ , a abertura do gap na densidade de estados se dá em forma de "V", demonstrada pela ausência de estados apenas em  $\omega = 0$ , ou seja, o gap total ocorre apenas em  $\omega = \mu$ .

Figura 7.5 – Gap supercondutor na ausência de correlações fortes, para simetria  $s$ . Em (a) foi variado o valor de  $V$  mantendo  $t_1 = \mu = 0$ , em (b) variou-se  $t_1$  com  $V = 2t_0$  fixo e  $\mu = 0$  e em (c) foi variado  $\mu$  com  $V = 2t_0$  e  $t_1 = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

O grande triunfo da teoria BCS está na capacidade de obter de uma maneira relativamente simples uma expressão analítica para o gap supercondutor, grandeza que descreve o ordenamento da fase. Quando  $\Delta \neq 0$ , o sistema encontra-se na fase su-

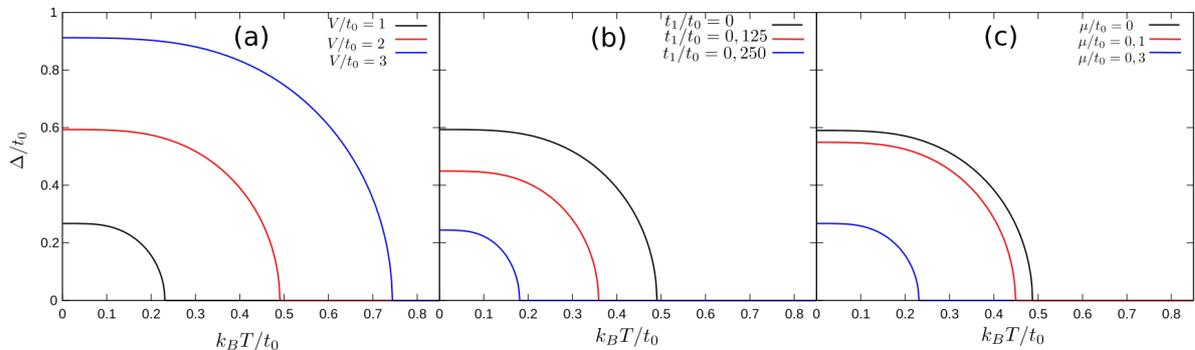
percondutora, logo, o gap é de fundamental importância para definir o estado do sistema no caso supercondutor.

Começando pela simetria  $s$ , são apresentados os efeitos das variações de diferentes parâmetros no comportamento do gap supercondutor. Os parâmetros variados foram, na seguinte ordem,  $V$ ,  $t_1$  e  $\mu$ .

No painel (a) da figura 7.5 foram mantidos fixos  $\mu = t_1 = 0$ , e nos painéis (b) e (c) da mesma figura, foram mantidos fixos  $V = 2t_0$ . Os efeitos da variação do potencial atrativo  $V$  refletem diretamente a dependência do gap em relação à  $V$ , de maneira que o seu crescimento torna a fase supercondutora mais estável, aumentando o seu valor em  $T = 0$ , além de aumentar a temperatura crítica da fase. Isto se dá devido ao fato de que  $V$  é um potencial atrativo, responsável por manter os pares de Cooper estáveis. Logo, o comportamento esperado foi obtido, ou seja, o crescimento do potencial torna a fase supercondutora mais estável.

Para o painel (b) da figura 7.5, foram mantidos fixos  $\mu = 0$  e  $V = 2t_0$ , a fim de estudar os efeitos do *hopping* para segundos vizinhos  $t_1$ . Nota-se uma supressão da fase supercondutora conforme a amplitude aumenta. Os efeitos supressivos são sentidos tanto na amplitude do parâmetro de ordem (valor de  $\Delta$  em  $T = 0$ ) quanto na temperatura crítica  $T_c^{SC}$ . A maior contribuição para a supercondutividade vem da abertura do gap na região do ponto de sela  $(\pi, 0)$  e seus casos equivalentes  $(0, \pi)$ ,  $(-\pi, 0)$ ,  $(0, -\pi)$ . Nestes pontos de sela, as bandas apresentam uma região plana, o que corresponde à uma alta densidade de estados, que quando ocupados favorecem a formação de pares de Cooper responsáveis pela supercondutividade na região em torno de  $\omega = \mu$ . No entanto,  $t_1$  e  $\mu$  tem o papel de deslocar os pontos de sela para longe de  $\omega = \mu$ , causando uma supressão na supercondutividade.

Figura 7.6 – Gap supercondutor na ausência de correlações fortes, com simetria  $d_{x^2-y^2}$ . No painel (a), foi variado  $V$  mantendo  $\mu = t_1 = 0$ , no painel (b) variou-se  $t_1$  com  $V = 2t_0$ ,  $\mu = 0$  e no painel (c) foi variado  $\mu$  com  $V = 2t_0$ ,  $t_1 = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Por fim, no painel (c) da figura 7.5 foram mantidos fixos  $V = 2t_0$  e  $t_1 = 0$ . A energia de *cutoff*  $\varepsilon_c$  está diretamente relacionada ao potencial químico através da relação vista no

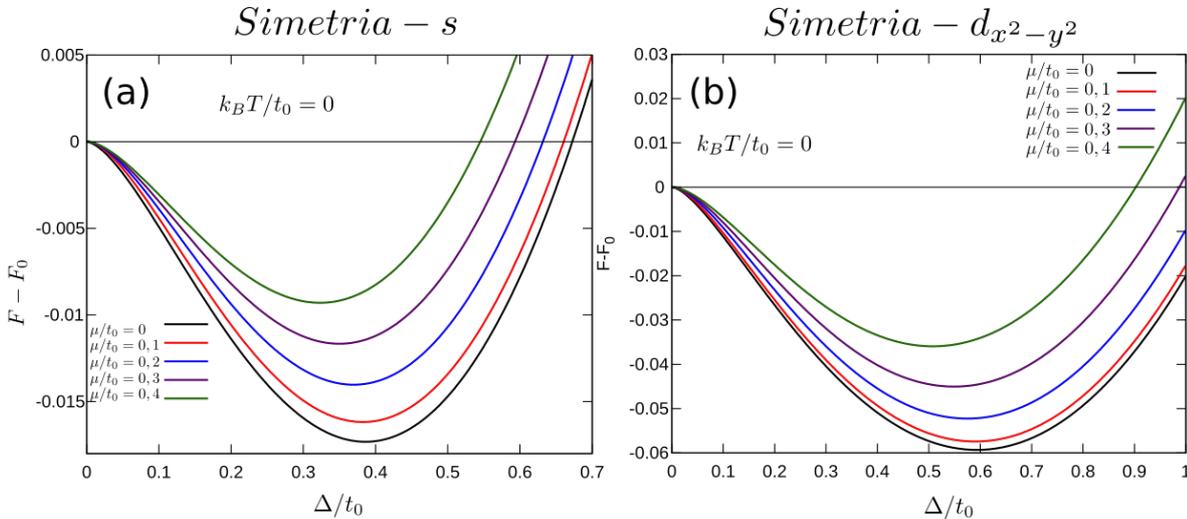
## capítulo 3.

Os resultados apresentados na figura 7.6 foram reproduzidos utilizando a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , mantendo os mesmos parâmetros fixos utilizados na figure 7.5, e variando-os da mesma forma.

Nota-se nos três painéis da figura 7.6 que os efeitos das quantidades são independentes da simetria, porém, a intensidade na qual o gap é afetado pela sua variação para cada uma das quantidades, é muito maior na simetria  $d_{x^2-y^2}$ . Isto está de acordo com o resultado da figura 7.3, onde em torno da região  $(\pi, 0)$  a abertura do gap era menor na simetria  $s$  do que na simetria  $d_{x^2-y^2}$ . Isto ocorre pois na simetria  $s$ ,  $\Delta_k^s = \Delta_s$ , logo,  $(\Delta_k^s)^2 = \Delta_s^2$ , enquanto para simetria  $d_{x^2-y^2}$ ,  $\Delta_k^d = \Delta(\cos(ak_x) - \cos(ak_y))$ , logo, em  $(\pi, 0)$ ,  $(\Delta_k^d)^2 = 4\Delta_d^2$ . Por simplicidade, nesta análise foi desconsiderado o efeito do potencial de corte  $\varepsilon_c$ , ou seja, considerou-se  $\varepsilon_c = 1$ .

É necessário lembrar que os resultados apresentados nesta sub-seção foram obtidos utilizando o modelo 3.4 e suas respectivas relações, ou seja, na ausência de efeitos de  $U$  e do gap CDW.

Figura 7.7 – Diferença entre as energias livres para o estado supercondutor,  $F$ , e a energia livre para o estado normal,  $F_0$ , em função de  $\Delta$ , para diferentes valores de  $\mu$ , para simetrias  $s$  e  $d_{x^2-y^2}$ . Manteve-se fixo  $V = 2t_0$  e  $t_1 = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

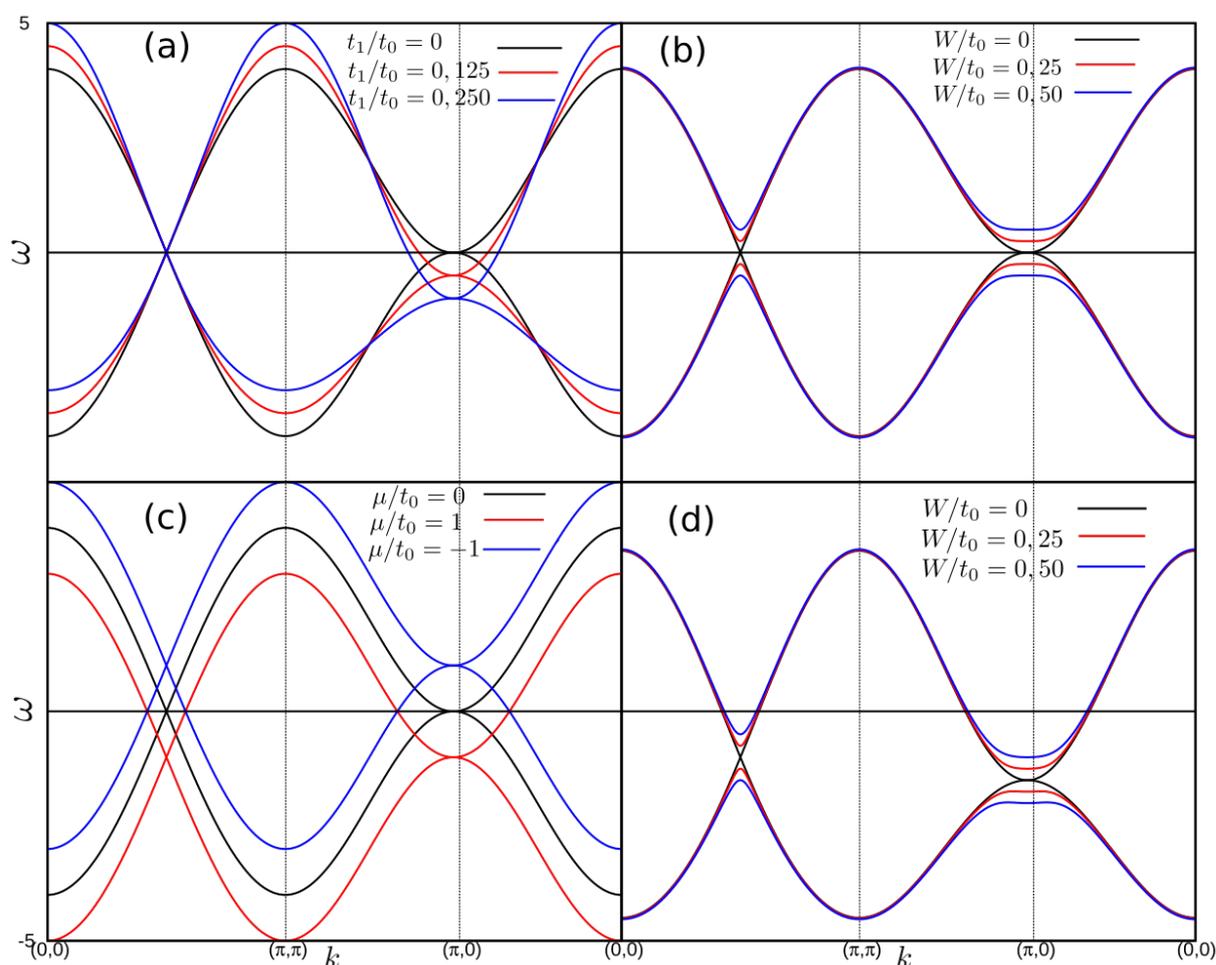
Finalizando a subseção, a figura 7.7 mostra a diferença entre a energia livre para o estado supercondutor  $F$  e a energia livre para o estado normal  $F_0$ , em função de  $\Delta$ . Foi variado o potencial químico, com o intuito de demonstrar que a transição de segunda ordem não tem sua natureza alterada em função da alteração do potencial químico. O aumento do  $\mu$  faz com que o mínimo da energia livre seja deslocado para regiões mais próximas de 0, logo, é possível concluir que o aumento no potencial químico causa uma supressão da fase supercondutora. Este efeito foi apresentado anteriormente através do

gap supercondutor, em ambas as simetrias, o que foi verificado através da energia livre nos painéis acima, já que o painel (a) é referente à simetria  $s$  e o painel (b) à simetria  $d_{x^2-y^2}$ .

### 7.1.2 Charge density wave

No estado *charge density wave*, as bandas de energia são dadas pela relação  $E_{\mathbf{k}}^{\pm} = -\mu + \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right)^2 + W_{\mathbf{k}}^2}$ .

Figura 7.8 – Bandas de energia para o modelo BCS com *charge density wave* na ausência de correlações fortes.



Fonte: Elaborada pelo Autor.

A figura 7.8 foi construída de maneira similar a figura 7.1, ou seja, variou-se os mesmos parâmetros, na mesma ordem.

No painel 7.8(a), foram mantidos  $\mu = W = 0$  fixos, e variou-se  $t_1$ . Diferente do caso supercondutor, o aumento do *hopping* para segundos vizinhos causa um deslocamento

no eixo da energia da região de abertura do gap CDW em torno de  $(\pi, 0)$ , enquanto em  $(\pi/2, \pi/2)$  não houve alteração. Outro ponto interessante é a deformação na estrutura da banda, a amplitude das bandas afetadas pela variação de  $t_1$  é alterada, mas não uniformemente como no caso supercondutor. No caso CDW, é evidente que a presença do termo  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$  é responsável por uma intensificação dos efeitos de  $t_1$ .

Pode ser de interesse reescrever a expressão para  $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$  em termos de  $t_1$  e  $t_0$ , a fim de clarificar o resultado do painel (a):

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} &= -\mu + \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right)^2 + W_{\mathbf{k}}^2} \\ &= \mu + (4t_1 \cos(k_x) \cos(k_y)) \pm \sqrt{(2t_0(\cos(k_x) + \cos(k_y)))^2 + W_{\mathbf{k}}^2}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Com esta nova forma para as bandas, será olhado para as regiões de interesse:  $(\pi, 0)$ ,  $(\pi, \pi)$ ,  $(0, 0)$ ,  $(\pi/2, \pi/2)$ .

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \begin{cases} -\mu + 4t_1 \pm \sqrt{16t_0^2 + W_{\mathbf{k}}^2}, \text{ para } (0, 0) \\ -\mu + 4t_1 \pm \sqrt{16t_0^2 + W_{\mathbf{k}}^2}, \text{ para } (\pi, \pi) \\ -\mu \pm W_{\mathbf{k}}, \text{ para } (\pi/2, \pi/2) \\ -\mu \pm W_{\mathbf{k}}, \text{ para } (\pi/2, \pi/2) \\ -\mu - 4t_1 \pm W_{\mathbf{k}}, \text{ para } (\pi, 0) \end{cases}$$

A análise dos valores de  $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$  nos pontos de interesse revelam um deslocamento das bandas no eixo da energia. Em ambos os pontos  $(0, 0)$  e  $(\pi, \pi)$ , as bandas são deslocadas para energias mais altas, por uma quantidade  $4t_1$ , enquanto para o caso  $(\pi/2, \pi/2)$ , a banda independe de  $t_0$  e  $t_1$ , logo, o deslocamento da mesma depende apenas do potencial químico  $\mu$  e do valor de  $W$ . Além disso, em  $(\pi, 0)$  só depende de  $t_1$  para o deslocamento, o qual será para energias mais baixas, por uma quantidade  $4t_1$ .

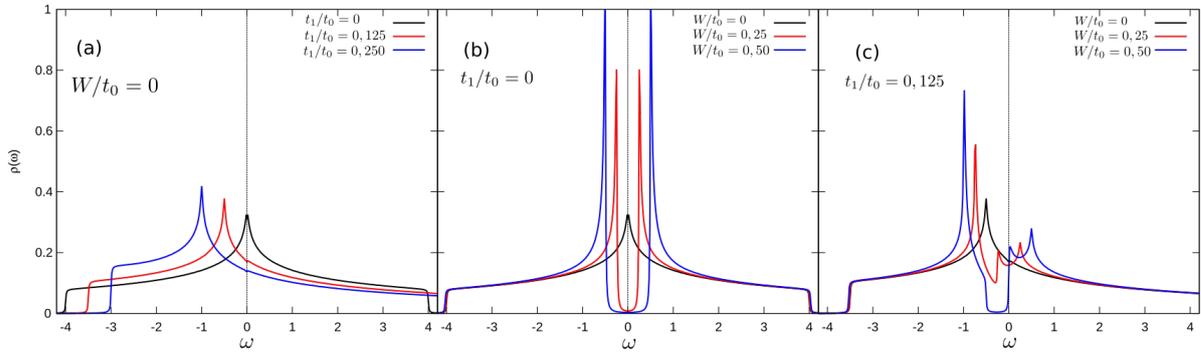
Agora, olhando para o painel 7.8(b), foi variado o valor de  $W$ , com  $t_1 = \mu = 0$ , e percebe-se o comportamento equivalente ao caso supercondutor, onde o gap foi aberto tanto em  $(0, \pi)$  quanto em  $(\pi/2, \pi/2)$ . Dada a equivalência das expressões no caso onde  $t_1 = 0$ , o comportamento foi exatamente o esperado, e segue a mesma interpretação do caso supercondutor.

No painel (c), devido à forma como o potencial químico está presente nas bandas  $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$  na equação 7.2, têm-se apenas um deslocamento das bandas para cima ( $\mu = 1t_0$ ), e para baixo ( $\mu = -1t_0$ ). O ocorrido desta vez é diferente do caso supercondutor, onde  $\mu$  se encontra dentro da raiz quadrada.

Por fim, no painel 7.8(d), foi mantido fixo  $\mu = 1t_0$ ,  $t_1 = 0.125t_0$  e variou-se, novamente,  $W$ . Os efeitos foram os mesmos do painel 7.8(b), porém, deslocados verticalmente em relação ao caso onde  $t_1 = 0$ . Diferentemente do caso supercondutor, aqui não há uma

alteração comportamental dos efeitos de abertura do gap nas bandas. Ambas as regiões  $(\pi/2, \pi/2)$  e  $(0, 0)$  foram afetadas.

Figura 7.9 – Densidade de estados para o caso charge density wave na ausência de correlações fortes para  $T = 0$ ,  $V = 2t_0$  e  $\mu = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

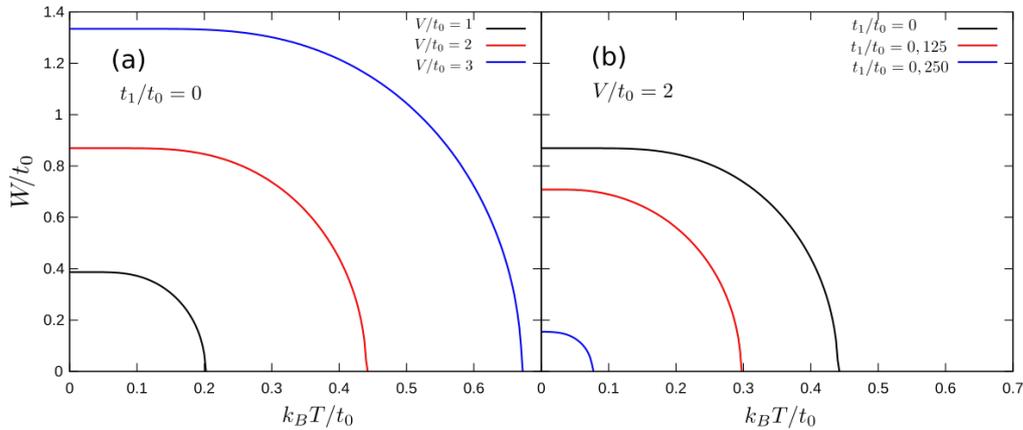
Olhando agora para a densidade de estados, diferentemente do caso supercondutor, é necessário analisar o caso para o estado normal com  $t_1$  variando no painel 7.9 (a). Como verificado na análise das bandas, o que ocorre é um simples deslocamento do pico originalmente localizado em torno de  $\omega = 0$ , acompanhado de uma leve deformação na sua estrutura. E assim como no caso supercondutor para simetria  $s$ , um aumento no gap  $W$  causa uma abertura de um gap total em torno da região de  $\omega = \mu$ .

A análise do painel (c) revela a abertura parcial do gap em torno de  $\omega = 0$  quando  $W = 0,25t_0$ , ou seja, os efeitos de  $t_1$  são muito mais intensos no caso CDW, já que para  $W = 0,5t_0$  há a abertura do gap total, como esperado. A presença do vetor de *nesting* no problema cria diferentes comportamentos com uma leve variação de parâmetros, como visto no painel 7.9(c), onde fixou-se  $t_1 = 0,125t_0$ , e a estrutura da densidade de estados foi totalmente alterada, com a criação de novos picos, contrastando com o caso livre de  $t_1$ , para os mesmo parâmetros.

A análise das bandas na figura 7.8(d) permite entender melhor a estrutura dos gaps na densidade de estados no painel 7.9(c). Como foi mostrado anteriormente em  $(\pi, 0)$  apenas  $t_1$  atua deslocando as bandas para energias maiores. Como consequência, o gap também é deslocado para energias mais baixas. Por outro lado, em  $(\pi/2, \pi/2)$ , a posição do gap não é afetada, já que independe de  $t_0$  e  $t_1$ . Como consequência, para valores pequenos de  $W$ , os gaps em  $(\pi/2, \pi/2)$  não coincidem em energia, portanto, ocorrem apenas gap parciais na densidade de estados. Em contraste, para  $W$  grande, existem regiões dos gaps em  $(\pi/2, \pi/2)$  e  $(\pi, 0)$  que coincidem, possuindo assim um gap total nestas regiões de energia.

Assim como no caso supercondutor, olha-se para o *gap* CDW.

Figura 7.10 – Gap CDW em função da temperatura para diferentes valores de  $t_1$  e  $V$ . No painel (a) é mantido fixo  $t_1 = \mu = 0$ , variando  $V$ . No painel (b), tem-se  $V = 2t_0$  e  $\mu = 0$  fixos.



Fonte: Elaborada pelo Autor.

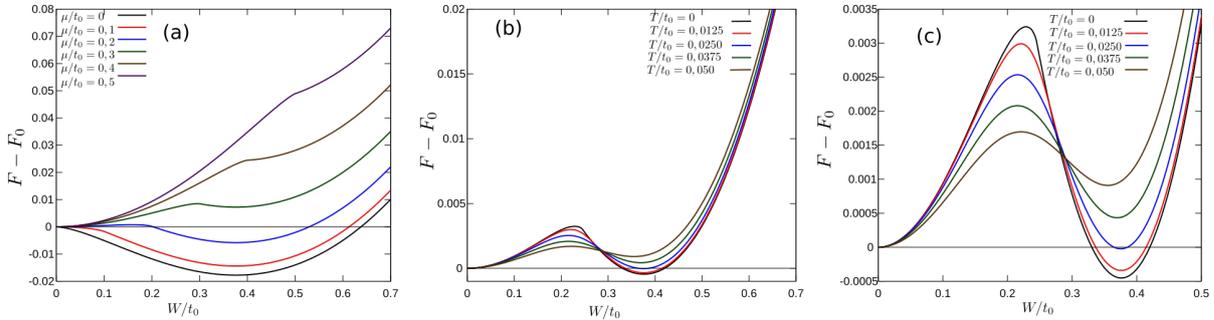
Assim como no caso supercondutor, os efeitos de  $V$  e  $t_1$ , vistos, respectivamente, nos painéis (a) e (b) da figura 7.10 são semelhantes. A interação atrativa  $V$  tem um papel diferente na fase CDW, já que aqui não há a formação de pares de Cooper. Nesta fase a interação serve como um mediador entre elétrons e os fônons da rede, de maneira a estabilizar a fase. Ou seja, partindo do princípio de que a fase *charge density wave* é uma distorção da rede periodicamente modulada,  $V$  atua de maneira semelhante ao caso supercondutor, formando um par elétron-fônon (WATANABE; SEKI; YUNOKI, 2015). Por causa disso, um aumento em  $V$  aumenta a temperatura crítica  $T_c^{CDW}$  e a amplitude do gap *charge density wave*.

Novamente, de maneira análoga ao gap supercondutor, o *hopping* de segundos vizinhos, quando aumentado, causa um deslocamento nas posições dos gaps em  $(\pi/2, \pi/2)$ , prejudicando a fase CDW, conforme foi discutido no resultado da figura 7.9(c).

Outra grandeza de interesse na fase CDW, e que é de grande importância para o estudo da natureza da transição é a energia livre de Helmholtz.

No painel 7.11(a), foi mantido fixo  $T = t_1 = 0$ , e variou-se o potencial químico  $\mu$ . É possível perceber que há uma mudança na ordem da transição com o aumento de  $\mu$ . Isto se evidencia pela posição do mínimo não trivial da curva, que para  $\mu < 0$ ,  $2t_0$  é um mínimo global, ou seja, a energia do estado *charge density wave* é menor que a energia do estado normal, logo, é o estado mais estável.

Figura 7.11 – Diferença entre a energia livre do estado CDW e a energia livre do estado normal  $F_0$ , em função de  $W$ . No painel (a), foi calculado  $F - F_0$  para diferentes valores de  $\mu$  com  $T = 0$ , onde  $V = 2t_0$  e  $t_1 = 0$  foram mantidos fixos. Nos painéis (b) e (c), manteve-se fixo  $\mu = 0,245t_0$  e variou-se  $T$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor

Por outro lado, para  $\mu > 0,3t_0$  o mínimo não trivial se localiza acima de 0, indicando uma transição de primeira ordem, gerando uma descontinuidade no parâmetro de ordem. Uma transição de primeira ordem pode ser causada pela variação de diferentes parâmetros, como por exemplo, via efeitos de temperatura, que é o caso do painel 7.11(b).

Nos painéis 7.11(b) e 7.11(c), foi mantido  $\mu = 0,245t_0$  fixo, e variou-se a temperatura. A escolha do valor para  $\mu$  foi feita com a intenção de demonstrar o papel da temperatura na transição descontinua.

O aumento na temperatura fez com que acontecesse o mesmo fenômeno do painel 7.11(a), ou seja, o mínimo global se deslocou para a região acima de  $F = 0$ , tornando a transição de primeira ordem. No painel 7.11(c) foi colocado em destaque a região onde os mínimos não triviais se localizam, a fim de explicitar o comportamento mencionado.

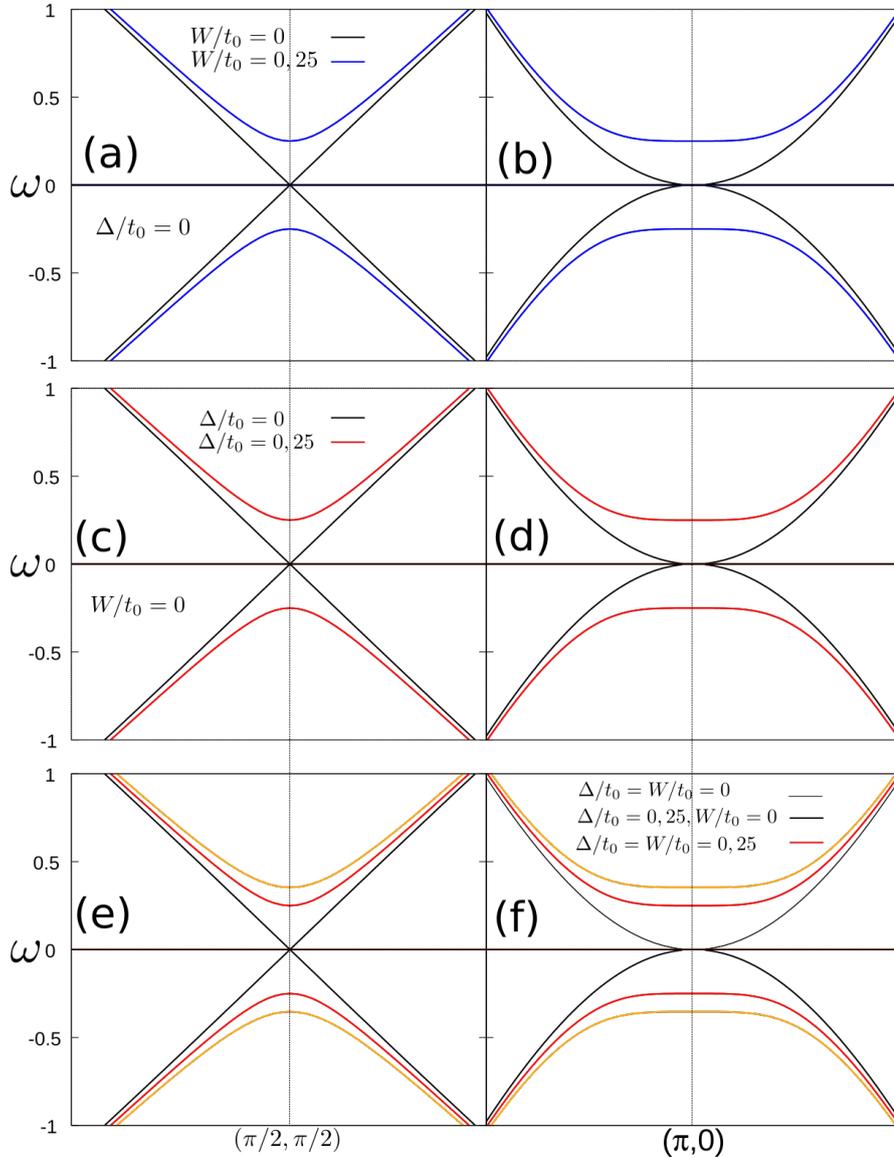
### 7.1.3 Coexistência de supercondutividade e *charge density wave*

No regime de coexistência, as equações para os parâmetros de ordem e para as bandas sofrem alterações. A principal alteração é a presença do vetor de *nesting* nas equações para a supercondutividade, efeito direto da coexistência com a fase CDW. Ambos o gap supercondutor e CDW serão afetados igualmente quando a simetria do gap supercondutor for  $s$ , e com  $t_1 = 0$ . A distinção em relação aos casos puros vem da presença do vetor de *nesting*  $\mathbf{Q}$ , que agora afeta a supercondutividade.

A figura 7.12 mostra os efeitos de ambos os gaps nas regiões  $(\pi, 0)$  (painéis à esquerda) e  $(\pi/2, \pi/2)$  (painéis à direita), com  $t_1 = 0$ .

Os painéis (a) e (b) da figura 7.12 mostram os efeitos de  $W$  (em azul), nas bandas, mantendo  $\Delta = 0$ . É possível perceber que recupera-se os efeitos do caso CDW puro, apresentado na figura 7.8 (b).

Figura 7.12 – Bandas de energia na região de abertura dos gaps para o estado CDW, supercondutor e coexistência das duas fases com  $t_1 = \mu = 0$  em  $T = 0$ . Nos painéis (a) e (b), são apresentados os efeitos de  $W$ , no painel (c) e (d) os efeitos de  $\Delta$  e nos painéis (e) e (f), a coexistência.



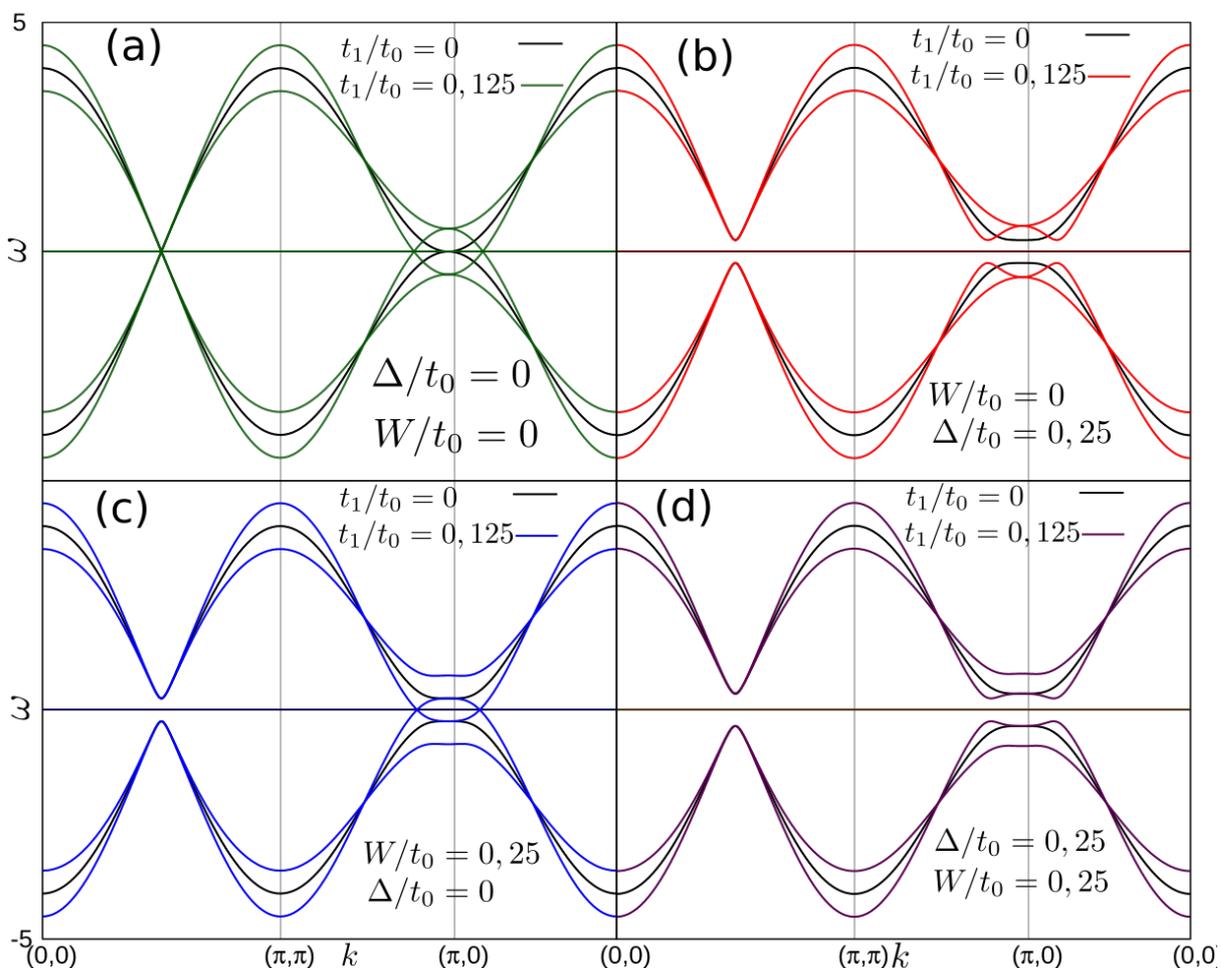
Fonte: Elaborada pelo Autor

Nos painéis 7.12 (c) e 7.12 (d), são mostrados os efeitos para  $W = 0$  e  $\Delta = 0,25t_0$ . Fica claro que neste caso recupera-se a estrutura de gap mostrada na seção 7.1.1 para o caso supercondutor puro com simetria de onda  $s$ .

Nos painéis 7.12 (e) e 7.12 (f), foi mantido  $W = \Delta = 0,25t_0$ , e notou-se um aumento na largura do gap devido à superposição dos gaps supercondutor e *charge density wave*.

Na figura 7.13,  $t_1$  foi analisado o efeito de  $t_1$  nas bandas no regime de coexistência. Analisou-se cada caso separadamente, ou seja, supercondutor puro, *charge density wave* e a coexistência.

Figura 7.13 – Bandas de energia para o modelo completo para diferentes valores de  $\Delta$ ,  $W$  e  $t_1$ .  $V = 2t_0$  e  $\mu = k_B T = 0$  são mantidos fixos.



Fonte: Elaborada pelo Autor

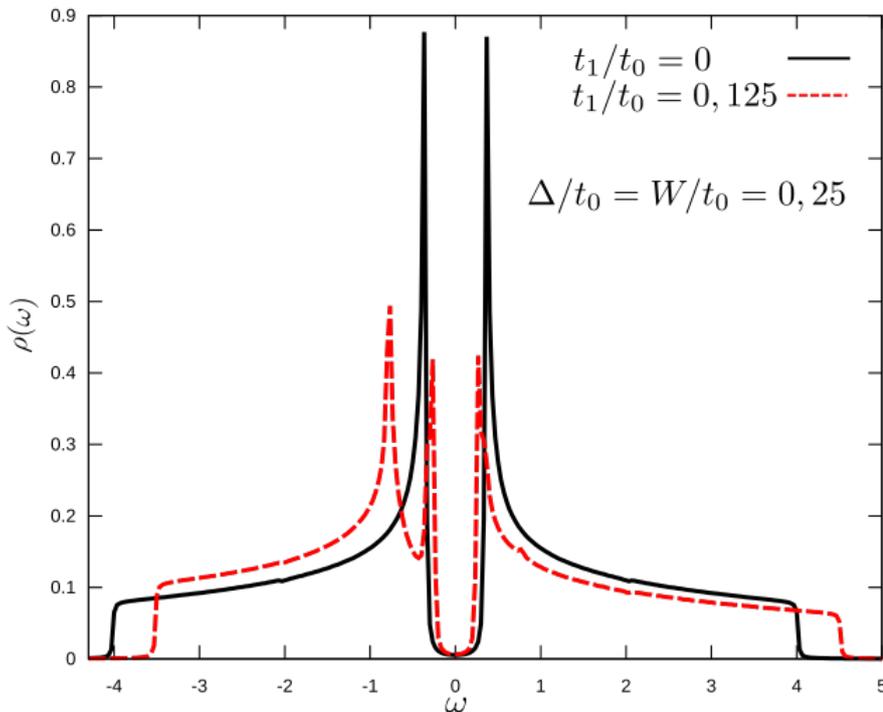
No painel 7.13(a), referente ao estado normal, nota-se a distorção das bandas pelo efeito de  $t_1$ , além de levantar a degenerescência observada em  $t_1 = 0$ . A região  $(\pi/2, \pi/2)$  não sofreu alterações, porém, os efeitos de  $t_1$  são notáveis nas regiões  $(\pi, \pi)$  e  $(\pi/2, \pi/2)$ , as quais sofreram deformações semelhantes ao ocorrido no caso da superposição das bandas com potencial químico negativo para o caso supercondutor puro. Para o painel 7.13 (b), novamente não há alteração na região  $(\pi/2, \pi/2)$ , com os efeitos sentidos no gap supercondutor em  $(\pi, 0)$ .

Devido ao vetor de *nesting*  $\mathbf{Q}$ , o gap supercondutor  $\Delta_k$  ocorre à esquerda do ponto de sela  $(\pi, 0)$  e o gap  $\Delta_{k+\mathbf{Q}}$  ocorre à direita do ponto de sela. No entanto, ambos possuem a mesma largura.

Os efeitos sentidos no caso *charge density wave*, apresentados no painel (c) são semelhantes aos apresentados para o caso supercondutor, porém, a estrutura do gap em  $(\pi, \pi)$  é diferente, mas obedece ao mesmo padrão, da separação de duas para quatro bandas, além da superposição das bandas ao longo das regiões de alta simetria.

E finalmente, no painel (d), ocorre a coexistência de ambas as fases, resultando em uma intensificação dos efeitos apresentados anteriormente. Em torno da região  $(\pi, \pi)$ , a estrutura do gap é resultado da combinação das duas fases, indicando sim uma coexistência, onde há uma deformação estrutural provinda do caso supercondutor, e uma separação das bandas entre si, resultado da presença de  $W_{\mathbf{k}}$ .

Figura 7.14 – Densidade de estados para o estado de coexistência entre supercondutividade e *charge density wave* com  $W = \Delta = 0,25t_0$ ,  $\mu = 0$  e  $V = 2t_0$  com  $T = 0$  e com simetria  $s$  para o gap supercondutor.

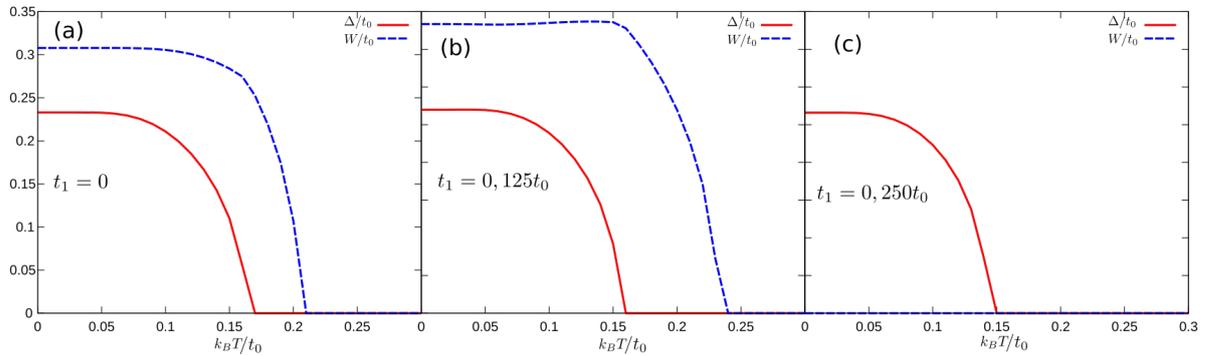


Fonte: Elaborada pelo Autor.

Para a análise da densidade de estados, variou-se o valor do *hopping* de segundos vizinhos  $t_1$  para o caso com coexistência. Para  $t_1 = 0$ , ambos  $\Delta$  e  $W$  atuam de maneira equivalente, abrindo um gap em  $\omega = 0$ , comportamento apresentado anteriormente nos painéis (e) e (f) da figura 7.12, e verificado na densidade de estados. Quando considera-se  $t_1 = 0,125t_0$ , a natureza do gap em torno de  $\omega = 0$ , é mantida. No entanto, observa-se um gap parcial em  $\omega < \mu$  associado ao gap CDW observado na região  $(\pi, 0)$  quando  $t_1 \neq 0$ , como visto na figura 7.12 (d).

A consistência da estrutura do gap em torno de  $\omega = 0$  é consequência da natureza das fases, as quais são moduladas como elétrons acoplados através de fônons via um potencial de interação  $V$ . O regime de coexistência apresenta as mesmas regras de simetria dos gaps apresentadas nos casos puros, com exceção da supercondutividade agora ser afetada pelo vetor de *nesting*  $\mathbf{Q}$ , assim como a CDW.

Figura 7.15 – Gaps supercondutor e CDW com coexistência em função da temperatura para diferentes valores de  $t_1$  com  $V = 2t_0$ ,  $\mu = 0$  com simetria  $s$  para o gap supercondutor.



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Diferentemente dos casos puros, aqui são calculados os parâmetros de ordem  $W$  e  $\Delta$  simultaneamente. No painel 7.15(a) é apresentado o caso de coexistência para  $t_1 = 0$ , onde o comportamento de ambos  $\Delta$  e  $W$  são consistentes com os casos puros. No entanto, devido aos efeitos de  $\Delta$  em  $W$ , observa-se uma leve supressão de  $W$  em temperaturas mais baixas, onde  $\Delta \neq 0$ . Este comportamento está de acordo com outros resultados teóricos que abordam o problema através de outras técnicas.

Para o painel 7.15(b), com  $t_1 = 0, 125t_0$  ocorre uma mudança no comportamento de  $W$ , caracterizado por uma aparecimento de dois pontos de inflexão, responsáveis por gerar uma região, onde, para menores temperaturas, há uma leve supressão da fase, seguida de um favorecimento desta. Este comportamento é consistente com resultados apresentados em diferentes trabalhos (ZHENG; FENG, 2019; FAYE; SÉNÉCHAL, 2017; CEA; BENFATTO, 2014; SYKORA; HÜBSCH; BECKER, 2009).

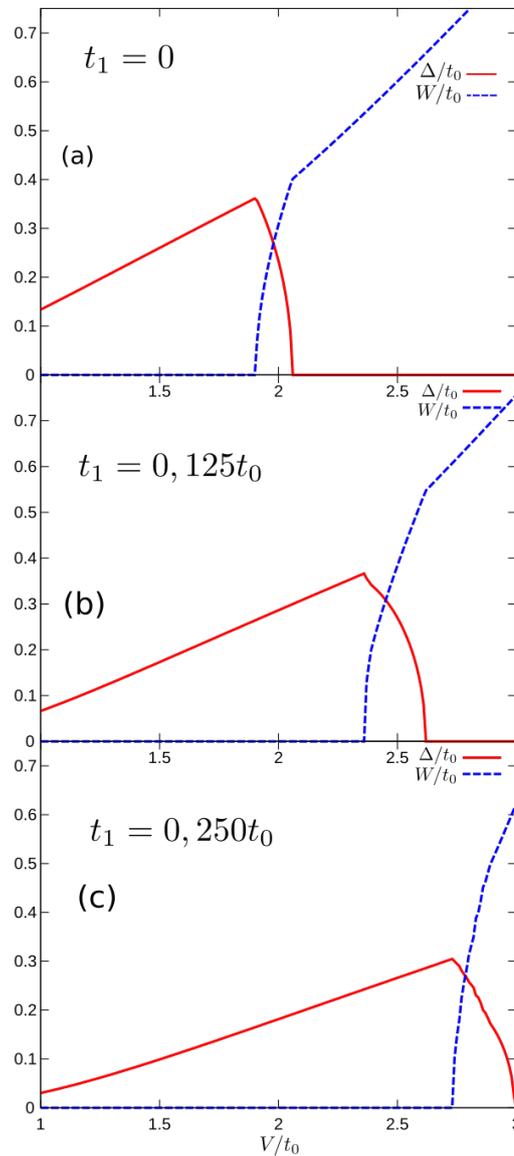
No painel (c), com  $t_1 = 0, 250t_0$  a fase CDW não está presente, tendo apenas a fase supercondutora. Isto indica uma robustez da fase supercondutora em relação aos efeitos de  $t_1$ .

Como observado nos resultados apresentados nas figuras 7.13 e 7.14, o  $t_1$  tem a função de deslocar os pontos de sela para longe de  $(\pi, 0)$ , causando assim a supressão de ambas as fases, porém, o gap CDW sente os efeitos de maneira mais intensa, o que implica uma robustez da fase supercondutora em relação à variação desta quantidade.

A seguir na figura 7.16, são mostrados  $\Delta$  e  $W$  em função de  $V$ , simultaneamente, para  $T = 0$ , e diferentes valores de  $t_1$ . A faixa de valores de  $V$  foi escolhida com o intuito de demonstrar a região de coexistência, objeto de interesse deste trabalho.

De maneira semelhante ao trabalho publicado por Balseiro e Falicov (1979), são apresentados os diagramas de  $\Delta$  e  $W$  em função de  $V$ .

Figura 7.16 – Gap das fases supercondutora e CDW em função da interação  $V$  para diferentes valores de  $t_1$  com simetria  $s$ , usando  $k_B T = \mu = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

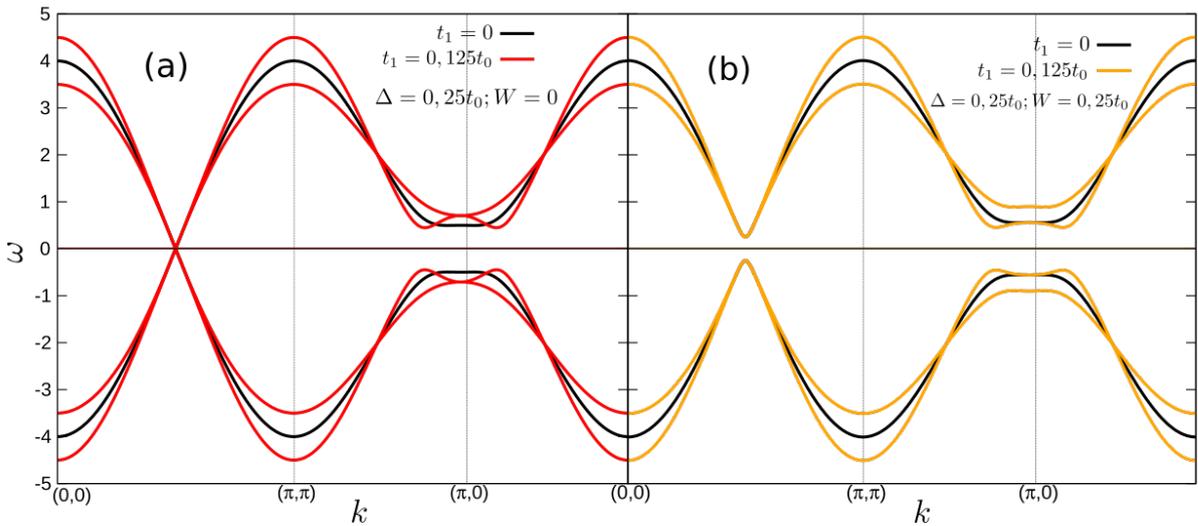
Percebe-se o deslocamento da região de coexistência, e por consequência do aparecimento da fase CDW, para regiões de maiores valores de  $V$ , corroborando a hipótese anterior, onde um aumento na energia necessária para que o elétron realize o salto para o próximo sítio requer um aumento no potencial  $V$ , a fim de formar o par elétron-fônon.

Um resultado relevante apresentado nos cálculos do gap CDW, em relação à fase supercondutora, é a sua maior temperatura crítica no regime de coexistência. Este resultado teórico está de acordo com resultados experimentais, onde há a presença da fase CDW em temperaturas muito maiores do que o regime supercondutor (ZHENG; FENG, 2019; FAYE; SÉNÉCHAL, 2017).

Os resultados até aqui apresentados nesta subseção foram todos calculados utili-

zando a simetria  $s$  para a supercondutividade. Agora, será discutido o caso com simetria de  $d_{x^2-y^2}$  para o gap supercondutor. É importante destacar que neste trabalho o gap CDW sempre possui simetria de onda  $s$ . Portanto, quando a discussão abordar diferentes simetrias de gap, a mesma é referente ao gap supercondutor.

Figura 7.17 – Bandas de energia para o estado supercondutor, no painel (a), e de coexistência no painel (b), em  $T = 0$ ,  $\mu = 0$  e  $V = 2t_0$  com simetria  $d_{x^2-y^2}$  para a supercondutividade, com diferentes valores de  $t_1$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

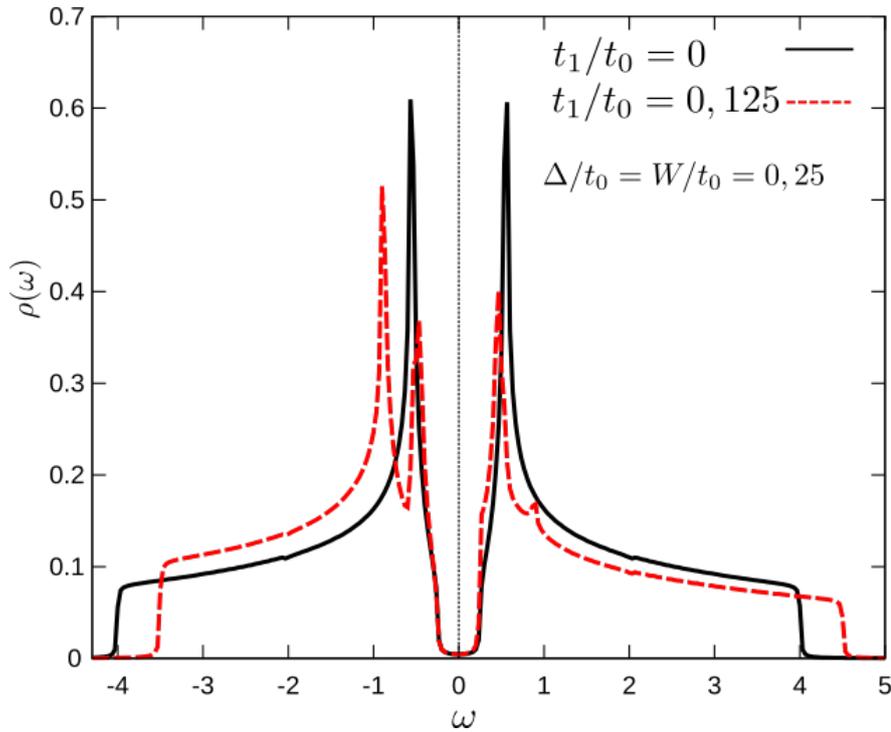
Ao contrário do caso com simetria  $s$ , e para o caso supercondutor puro, há uma abertura do gap supercondutor, apresentado na figura 7.17(a), apenas na região  $(\pi, 0)$ .

A discussão aplicada para a simetria  $s$ , para o regime de coexistência também é válida para este caso, ou seja há uma combinação dos efeitos de ambas as fases, produzindo uma distorção das bandas nas regiões dos gaps. A principal diferença em relação à simetria  $s$  é a abertura do gap em  $(\pi/2, \pi/2)$  devido aos efeitos de CDW, enquanto para simetria  $s$ , havia efeitos de  $W$  e  $\Delta$ .

A densidade de estados para o caso da coexistência também será apresentada para a simetria  $d_{x^2-y^2}$ .

O gap em formato de "V" em torno de  $\omega = 0$  na densidade de estados está presente novamente, em virtude da simetria  $d_{x^2-y^2}$ . E de maneira equivalente ao caso com simetria  $s$ , os efeitos das fases são combinados, criando um gap de maior intensidade na densidade de estados. No entanto, neste caso há um gap total na região em torno de  $\omega = \mu$ , e não apenas no ponto  $\omega = \mu$ , como ocorre no caso supercondutor puro. Isto é um efeito da combinação do gap com simetria  $s$  no caso CDW e do gap supercondutor com simetria  $d_{x^2-y^2}$ .

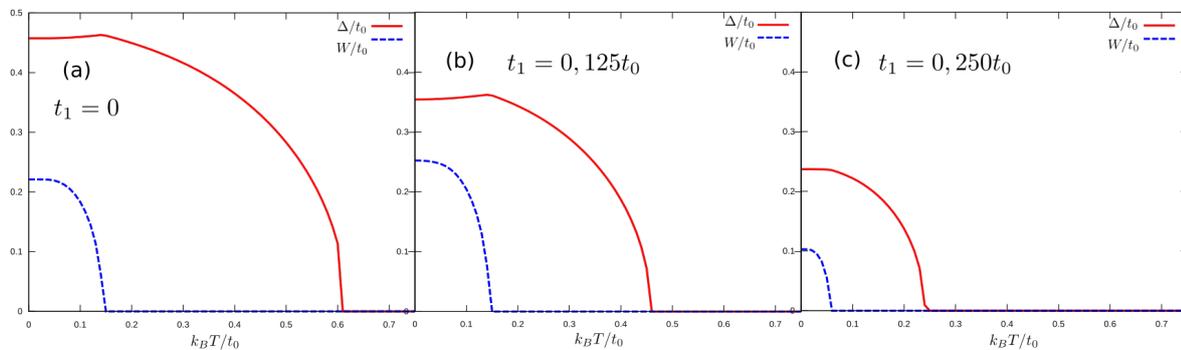
Figura 7.18 – Densidade de estados para a coexistência com simetria  $d_{x^2-y^2}$  para a supercondutividade para diferentes valores de  $t_1$  com  $\mu = k_B T = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Para  $t_1 = 0,125t_0$ , há uma maior deformação na estrutura da DOS, porém, mantendo a largura do gap em  $\omega = 0$ . Uma característica importante da DOS nesse caso é o surgimento do gap parcial em  $\omega \approx 0,7t_0$ , o qual foi observado também no caso da simetria  $s$  para o gap supercondutor, e está associada ao gap CDW na região do ponto de sela  $(\pi, 0)$  como visto na figura 7.17(b).

Figura 7.19 – Gaps supercondutor e CDW com coexistência em função da temperatura para diferentes valores de  $t_1$  com simetria  $d_{x^2-y^2}$  usando  $V = 2t_0$  e  $\mu = 0$ .



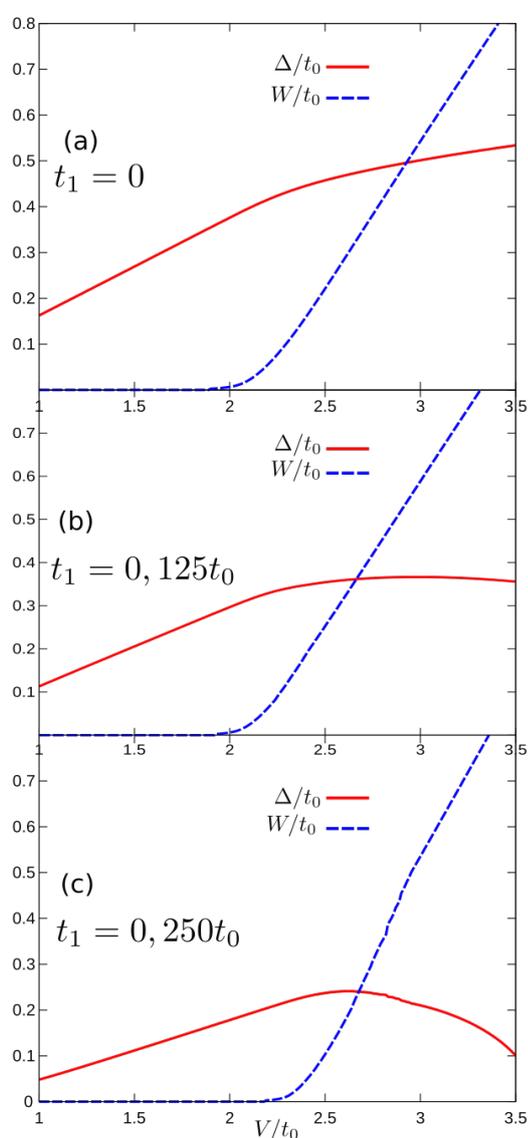
Fonte: Elaborada pelo Autor.

A fim de melhor explorar a coexistência das fases, foi calculado  $\Delta$  e  $W$  simultaneamente em função da temperatura, para diferentes valores de  $t_1$ . Os resultados são

apresentados na figura 7.19.

Contrastando com o caso para simetria  $s$ , aqui, a fase supercondutora é a fase mais robusta, apresentando os pontos de inflexão os quais eram presentes no gap  $W$ . Os efeitos de simetria implicam uma maior estabilidade da fase supercondutora em relação à fase CDW, fazendo com que a fase seja estável até valores maiores de  $T$ , ultrapassando o regime de coexistência. Outro ponto relevante é o aparecimento dos pontos de inflexão no gap supercondutor, comportamento que pode ser considerado anômalo (CAIXEIRO; TROPER, 2009), visto o tratamento BCS para o gap em  $t_1 = 0, 250t_0$ .

Figura 7.20 – Gaps para a fase supercondutora e CDW em função da interação  $V$  para diferentes valores de  $t_1$  com simetria  $d_{x^2-y^2}$  usando  $T = 0$  e  $\mu = 0$ .

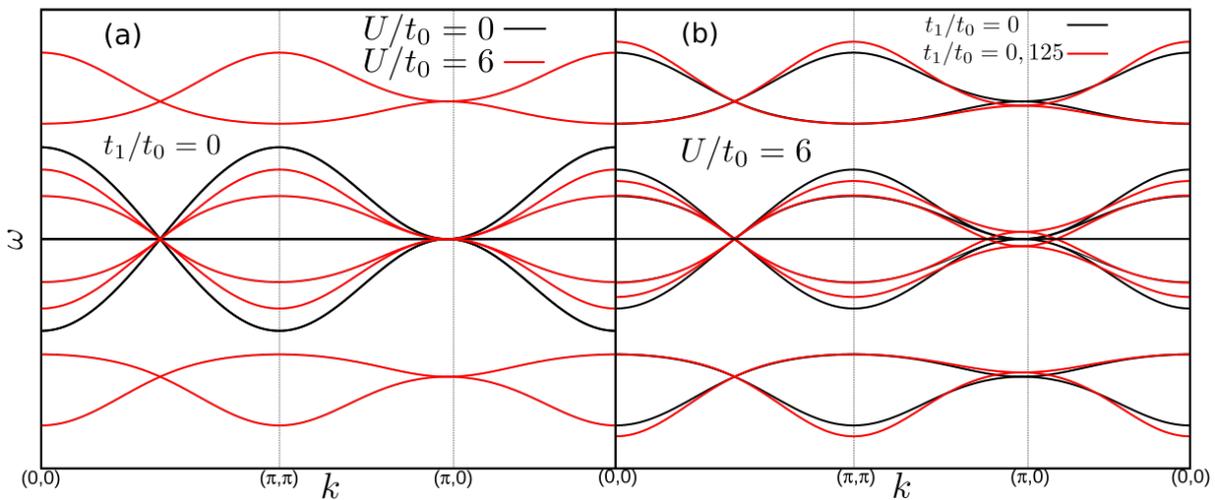


Fonte: Elaborada pelo Autor.

## 7.2 REGIME CORRELACIONADO

Para o caso onde  $U \neq 0$ , serão apresentados resultados que mostram os efeitos de  $U$  nas grandezas calculadas, ou seja, nas bandas de energia  $E_{\mathbf{k}}$ , no gap supercondutor  $\Delta$ , no gap CDW  $W$ , e na DOS.

Figura 7.21 – Bandas de Energia para o estado normal ( $\Delta = W = 0$ ) na presença de correlações, para diferentes valores de  $t_1$ , com  $k_B T = \mu = 0$ , e  $V = 2t_0$ .



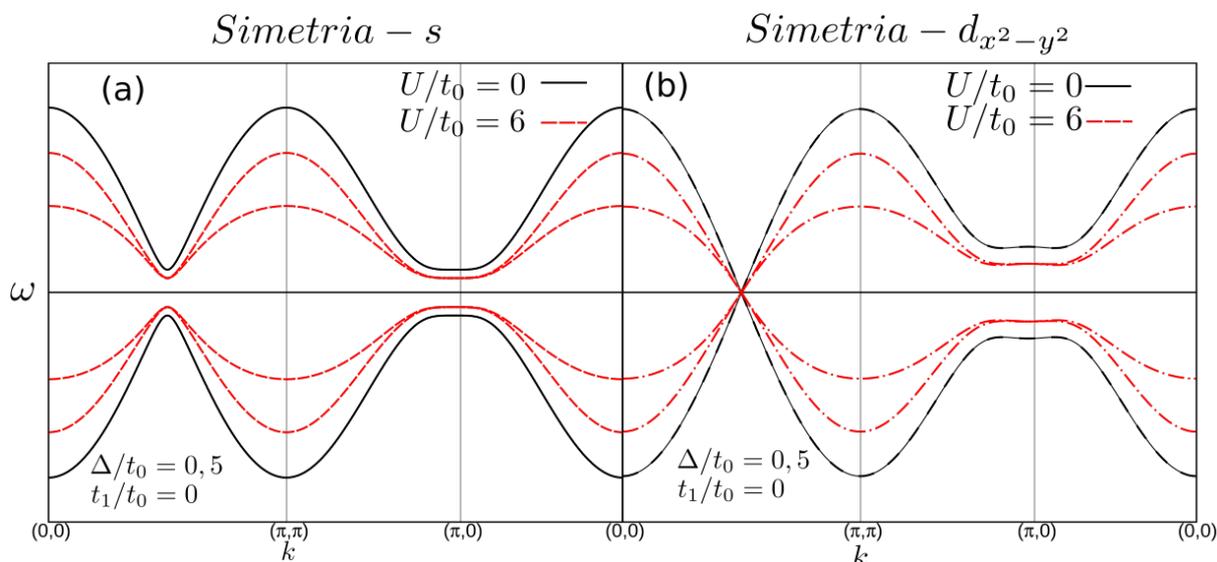
Fonte: Elaborada pelo Autor.

No painel 7.21 (a), têm-se as bandas para o estado normal ( $\Delta = W = 0$ ) com  $t_1 = 0$ , tanto para o regime não correlacionado (em preto) quanto para o regime com correlações (em vermelho). A principal diferença em relação ao estado não correlacionado ( $U = 0$ ) é o aparecimento de quatro novas bandas, resultado do efeito da interação  $U$ . A interação  $U$  quebra uma degenerescência presente quando o problema é tratado na sua forma completa (BCS + U), onde das 8 raízes, haviam apenas 4 possíveis raízes múltiplas, ou seja, duas inferiores e duas superiores. Em sistemas fortemente correlacionados, a interação  $U$  é responsável por separar a banda em dois níveis, que serão chamados de "banda superior de Hubbard" e "banda inferior de Hubbard". Logo, no problema tratado,  $U$  realiza esta separação de quatro para oito bandas distintas, sendo quatro superiores e quatro inferiores. Na presença de correlações ( $U \neq 0$ ) um elétron na banda inferior com energia  $\epsilon_k$  tem um custo de energia  $U$  para acessar a banda superior, com energia  $\epsilon_k + U$ .

No painel 7.21 (b), são apresentados resultados para dois valores de  $t_1$ . Nota-se nestes resultados que  $t_1$  causa uma distorção na estrutura das bandas, principalmente nas regiões  $(\pi, \pi)$ ,  $(\pi, 0)$  e  $(0, 0)$ , sem alteração no ponto  $(\pi/2, \pi/2)$ . Uma vez que para este resultado o sistema se encontra no estado normal, os efeitos de  $W$  e  $\Delta$  são desprezados, e mesmo assim, observa-se que a região de abertura dos gap são alteradas drasticamente por  $t_1$ .

A partir de agora, serão apresentadas apenas as quatro bandas centrais (mais próximas de  $\omega = 0$ ), já que as outras duas bandas superiores e as duas inferiores pouco contribuem para a fase supercondutora e CDW, uma vez que estão muito distantes do potencial químico o qual se encontra do nível de Fermi  $\omega = \mu$ .

Figura 7.22 – Bandas de Energia para o estado supercondutor na presença de correlações, com  $t_1 = 0$ , para ambas simetrias  $s$  e  $d_{x^2-y^2}$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

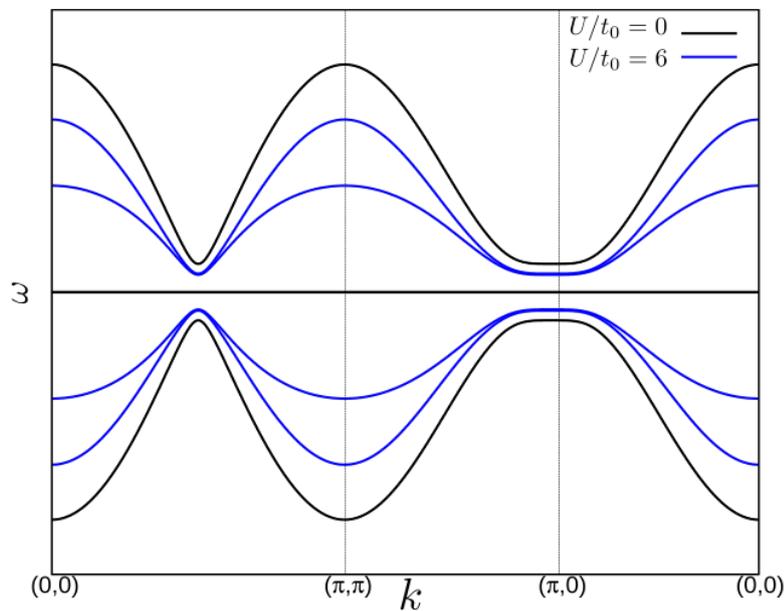
Como mencionado anteriormente, têm-se aqui apenas as bandas centrais representadas. No painel 7.22 (a), são apresentados os resultados para o estado supercondutor puro na presença de correlações com simetria  $s$  e com  $t_1 = 0$ . Para fins de comparação, o caso não correlacionado ( $U = 0$ ), também é apresentado. O comportamento apresentado na figura 7.1(b) ocorre novamente, ou seja, abre um gap na região  $(\pi/2, \pi/2)$  e em  $(\pi, 0)$ . Novamente ocorre a quebra da degenerescência, com o aparecimento de duas novas bandas, uma inferior e uma superior, as quais, na região de abertura do gap, assumem o mesmo valor, implicando uma dependência maior na simetria do gap supercondutor, a qual rege a estrutura das bandas.

Já, para o painel 7.22 (b), tem-se as bandas com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ . Assim como no caso para simetria  $s$  apresentado anteriormente, há o aparecimento de duas novas bandas as quais convergem nas regiões  $(\pi/2, \pi/2)$  e  $(\pi, 0)$ , recuperando a degenerescência. A diferença principal nas bandas, entre as simetrias para o caso supercondutor com  $t_1 = 0$ , é a não abertura do gap em  $(\pi/2, \pi/2)$ .

Os painéis da figura 7.22 há uma diminuição da largura do gap supercondutor em  $(\pi, 0)$ , na presença de correlações. Esta região tem maior contribuição para a estabilidade da fase supercondutora. Isto indica uma supressão da fase supercondutora na presença de correlações fortes.

Analogamente ao caso de coexistência no regime sem correlações fortes, o caso CDW puro apresenta o mesmo comportamento do estado supercondutor puro com simetria  $s$  quando  $t_1 = 0$ . Isto ocorre devido ao fato de que em  $t_1 = 0$  e em  $\mu = 0$ , a expressão para as bandas do caso supercondutor puro com simetria  $s$  são iguais às expressões para as bandas do caso CDW puro, o qual também possui simetria de onda  $s$ , com a única diferença sendo a dependência em  $\Delta_{\mathbf{k}}$  ou  $W_{\mathbf{k}}$ . Neste caso, a discussão para o resultado da figura 7.22 (a) aplica-se também à figura 7.23

Figura 7.23 – Bandas de Energia para o estado CDW na presença de correlações com  $t_1 = \mu = k_B T = 0$ .



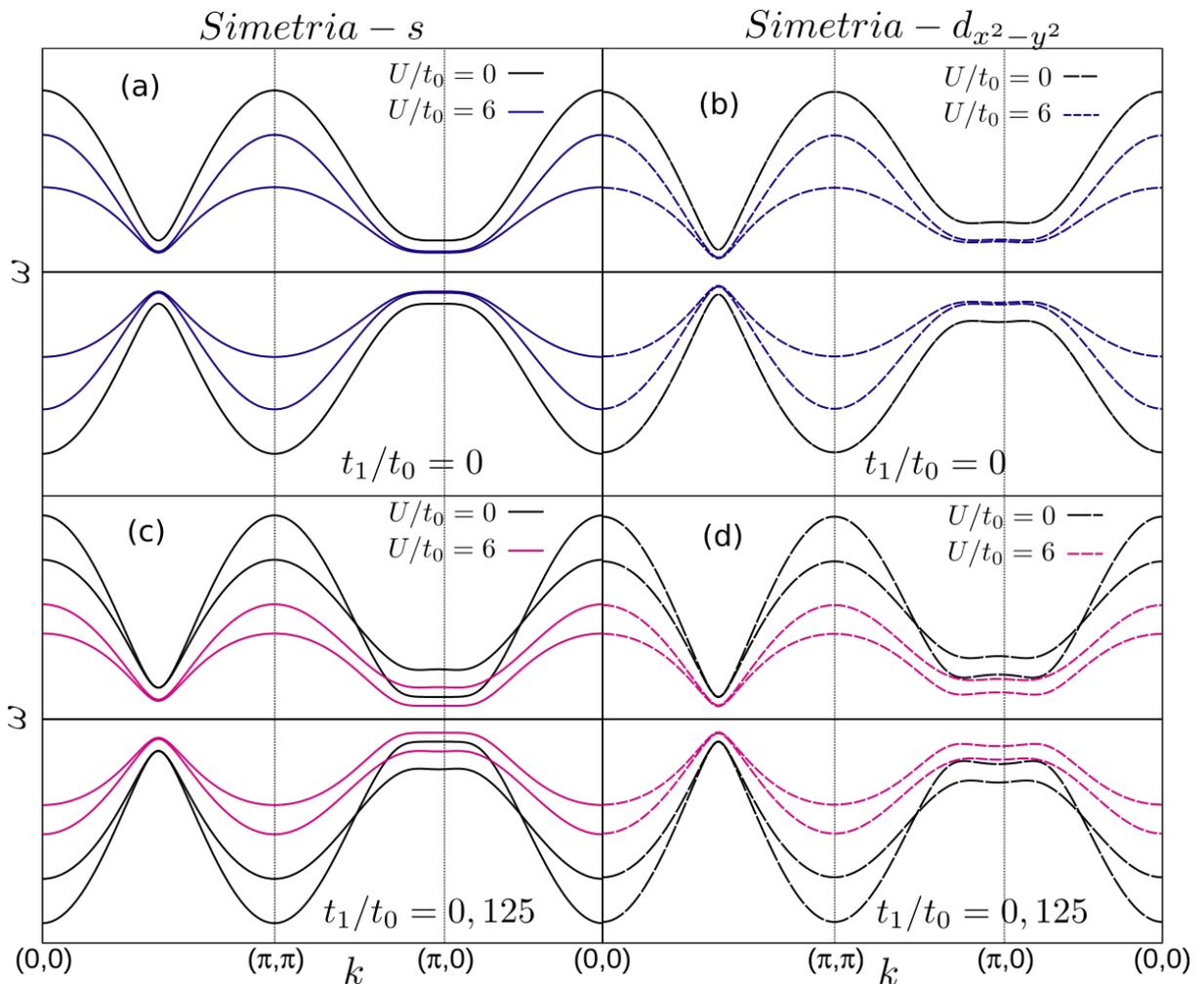
Fonte: Elaborada pelo Autor.

Na figura 7.24 são apresentados os resultados para o regime de coexistência na presença de correlações fortes. Os painéis 7.24 (a), para simetria  $s$  e (b) para simetria  $d_{x^2-y^2}$ , apresentam as bandas com  $\Delta = W = 0,25t_0$  e  $t_1 = 0$ . Nota-se que o efeito do  $U$  é o mesmo do que nos casos puros correlacionados mostrados nas figuras 7.22 e 7.23, porém em combinação, como foi verificado nas figuras 7.13 (d) e 7.17 (b), que apresentaram o regime de coexistência não correlacionado. Ou seja,  $U$  tem o efeito de quebra na degenerescência das bandas, resultando no aparecimento de duas novas bandas inferior e superior, novamente diminuindo a largura do gap em  $(\pi, 0)$ , indicando assim uma supressão dos gaps, e implicando uma diminuição da estabilidade da coexistência.

Olhando agora para o painel 7.24 (c), referente ao caso completo com simetria  $s$ , mas com  $t_1 = 0,125t_0$ , percebe-se que a degenerescência da banda correlacionada em  $(\pi, 0)$  é quebrada pelo efeito de  $t_1$ , o qual cria a distinção entre  $\Delta_{\mathbf{k}}$  e  $\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ , assim como em  $W_{\mathbf{k}}$  e  $W_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ . Aqui, o  $t_1$  tem o papel de afastar os gaps do ponto  $(\pi, 0)$ , afetando assim o gap de energia para abertura das fases, supercondutora e CDW.

E por fim, para o painel 7.24 (d), que apresenta o caso de coexistência com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$  para o gap supercondutor na presença de correlações com  $t_1 = 0, 125t_0$ . Novamente, o  $t_1$  tem o papel de quebrar a degenerescência na região  $(\pi, 0)$ , afetando os gaps  $W$  e  $\Delta$ , distanciando-os do nível de Fermi. Novamente, ocorre a diminuição da largura do gap, causada pelo efeito de  $U$ , indicando uma supressão nas fases CDW e supercondutora. Pode-se concluir que o principal papel de  $U$  nas bandas, em ambas as simetrias, é de diminuir a largura do gap em  $(\pi, 0)$ , suprimindo assim ambas as fases supercondutora e CDW, e por consequência, suprimindo a coexistência das mesmas.

Figura 7.24 – Bandas de Energia para o estado de coexistência na presença de correlações, para diferentes valores de  $t_1$  e com simetria  $s$  e  $d_{x^2-y^2}$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

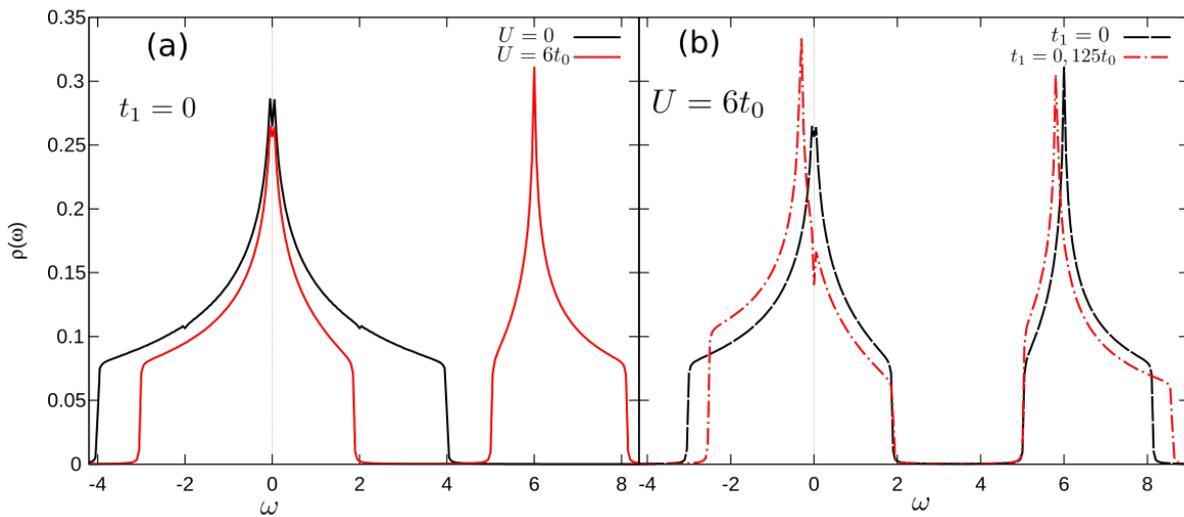
As densidades de estados para o estado normal, apresentadas na figura 7.25 têm como principal consequência do efeito de  $U$  a separação dos estados em duas regiões, resultado direto do efeito de separação das bandas superiores e inferiores pela interação  $U$ . Isto altera os estados acessíveis em torno de  $\omega = \mu$ .

O painel 7.25 (a) mostra resultados para  $t_1 = 0$ , logo, a única alteração na sua

estrutura vem dos efeitos de  $U$ . Contudo, no painel 7.25 (b),  $t_1 = 0,125t_0$ . Mas assim como para os casos sem correlação apresentados anteriormente, como por exemplo em 7.9 (a),  $t_1$  tem o papel de deslocar os picos em torno de  $\omega = \mu$  e  $\omega = 6t_0$ .

As densidades de estados para a coexistência na presença de correlações com simetria  $s$  para o gap supercondutor estão apresentadas na figura 7.26. E assim como no caso com  $U = 0$ , os efeitos de  $\Delta$  e  $W$  são apenas combinados. Porém, há a abertura de um gap total em  $\omega = 6t_0$ , semelhantemente ao gap aberto em  $\omega = \mu$ , que foi reduzido em largura devido ao efeito de  $U$ , o qual desloca estados para a banda de Hubbard superior, causando assim uma certa supressão das fases supercondutora e CDW.

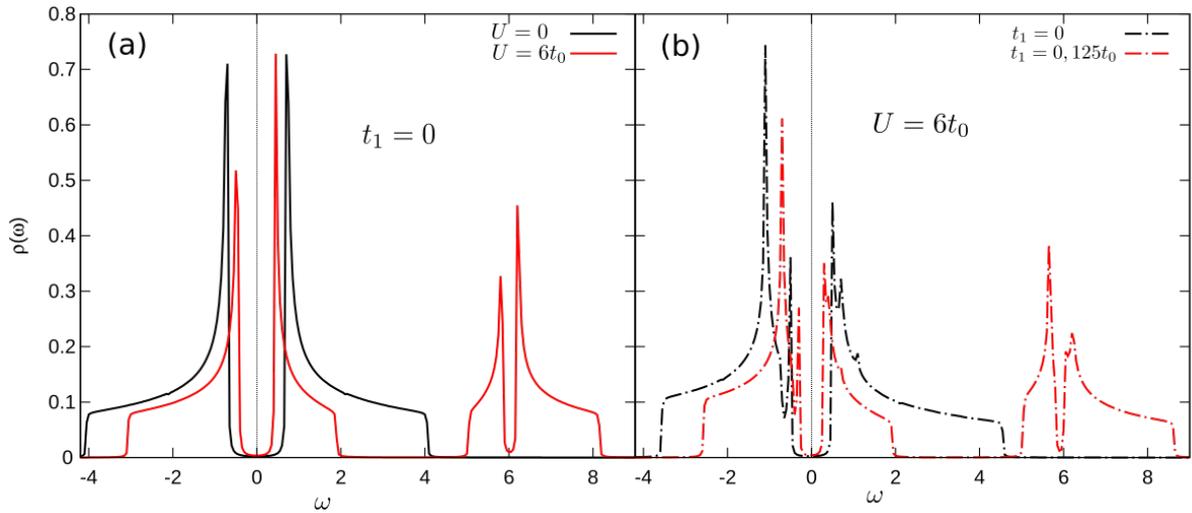
Figura 7.25 – Densidade de estados para o estado normal ( $\Delta = W = 0$ ) na presença de correlações para diferentes valores de  $t_1$ , usando  $k_B T = \mu = 0$  e  $V = 2t_0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

No painel 7.26 (b),  $t_1 = 0,125t_0$  é fixo, o que faz com que ocorra uma distorção na estrutura da DOS, causada pela combinação dos efeitos de  $U, t_1, \Delta$  e  $W$ . É relevante mencionar o gap parcial próximo de  $\omega = \mu$ , causado pelos efeitos de  $t_1$ , assim como ocorrido na figura 7.18. Devido à simetria do gap supercondutor ser  $s$ , os gaps em torno de  $\omega = \mu$  e  $\omega = 6t_0$  tem forma da letra "U", assim como no caso sem correlações.

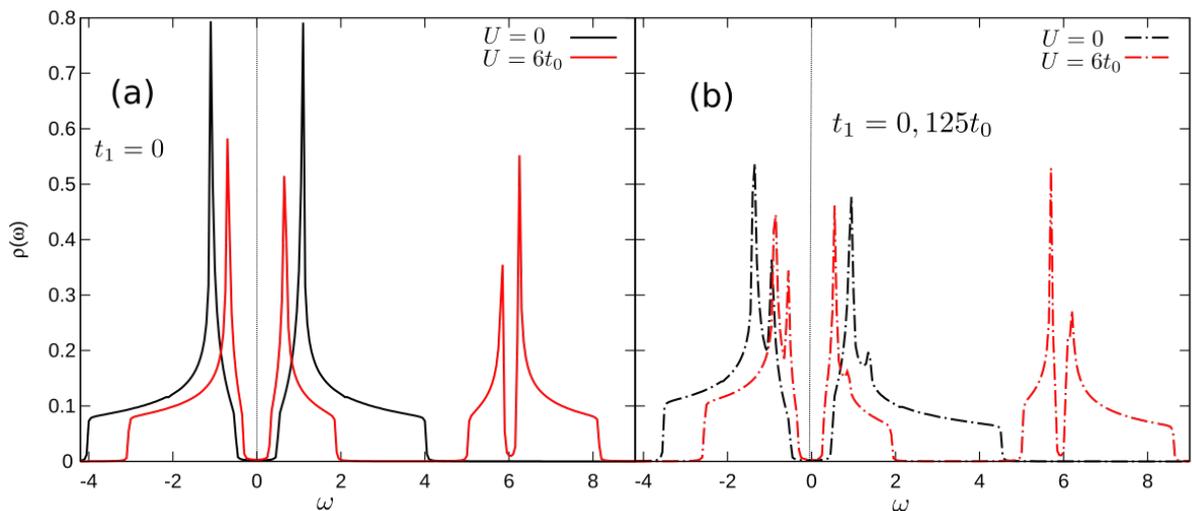
Figura 7.26 – Densidade de estados para o estado de coexistência na presença de correlações para diferentes valores de  $t_1$  e com simetria  $s$ , usando  $k_B T = \mu = 0$  e  $V = 2t_0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

A figura 7.27 apresenta os resultados para as densidades de estados correlacionadas com simetria  $d_{x^2-y^2}$  para a supercondutividade. Assim como nos casos anteriores, pode ser visto no painel 7.27 (a) que ocorre apenas uma combinação de efeitos, ou seja, a estrutura da DOS para o caso não correlacionado com simetria  $d_{x^2-y^2}$ , neste caso já verificada em 7.18, se mantém, porém, ocorre novamente a separação em duas regiões, uma em torno de  $\omega = \mu$  e outra em torno de  $\omega = 6t_0$ . Contudo, para o painel 7.27 (b), a presença do  $t_1$ , juntamente com  $U$  causa a abertura de gaps parciais, principalmente em torno da região  $\omega = \mu$ , diminuindo a largura do gap.

Figura 7.27 – Densidade de estados para o estado normal na presença de correlações para diferentes valores de  $t_1$  e com simetria  $d_{x^2-y^2}$ , usando  $k_B T = \mu = 0$  e  $V = 2$ .

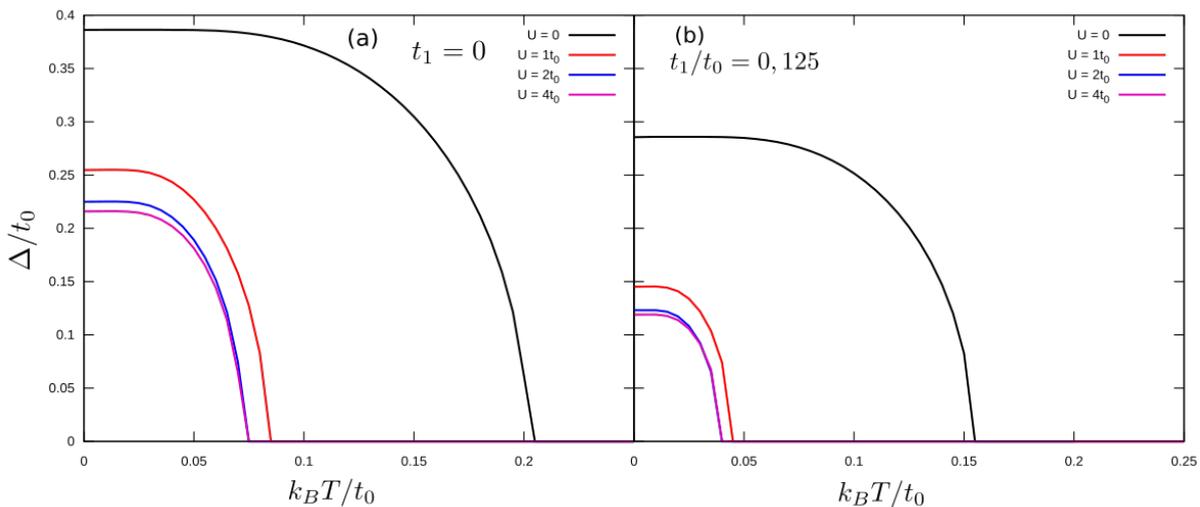


Fonte: Elaborada pelo Autor.

Na figura 7.28 são apresentados os resultados para o gap supercondutor em função da temperatura com simetria de onda  $s$ . Imediatamente, no painel 7.28 (a), com  $t_1 = 0$ , nota-se a supressão parcial da fase supercondutora na presença de correlações. Porém, os efeitos de  $U$  começam a saturar a partir de  $U = 2t_0$ . Mesmo havendo esta supressão parcial, o decaimento suave com a temperatura se mantém. Ambos  $T_c^{SC}$  e  $\Delta(T = 0)$  são atenuados na presença de  $U$ .

No painel 7.28 (b),  $t_1 = 0, 125t_0$  é fixo. E como visto no resultado 7.5,  $t_1$  tem o papel de suprimir a supercondutividade devido ao afastamento parcial dos estados acessíveis para longe de  $\omega = \mu$ , desfavorecendo assim a supercondutividade. Logo, a combinação de  $t_1$  com  $U$  faz com que ocorra um maior desfavorecimento da supercondutividade, mas novamente com uma saturação para os efeitos de  $U$ .

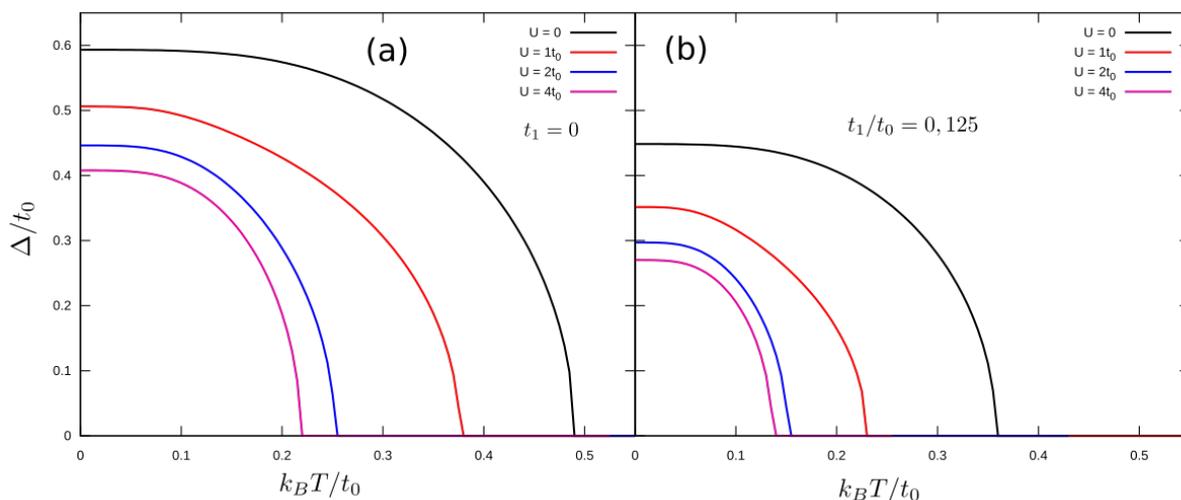
Figura 7.28 – Gap supercondutor em função da temperatura para simetria de onda  $s$  com  $V = 2t_0$ ,  $\mu = 0$  e diferentes valores de  $U$ , usando  $t_1 = 0$  no painel (a). No painel (b),  $t_1 = 0, 125t_0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

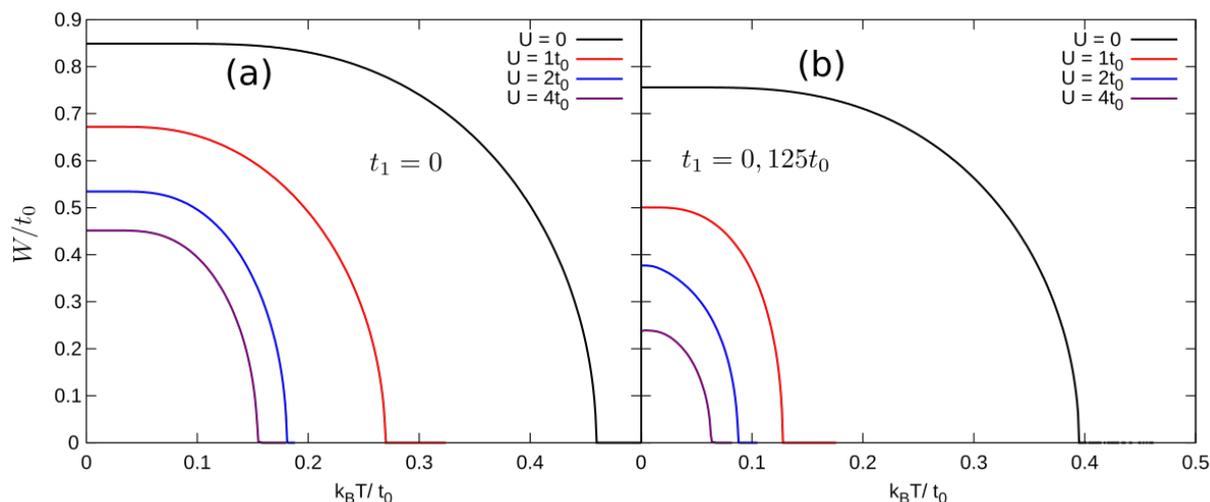
Assim como visto na figura 7.6, a simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$  é mais robusta à efeitos de variação de certos parâmetros do modelo. Logo, na figura 7.29 é possível, novamente, observar que há a supressão parcial da fase supercondutora devido aos efeitos de  $U$ , porém, o gap supercondutor nesta simetria não sente os efeitos de  $U$  de maneira tão intensa quanto para a simetria  $s$  apresentada na figura 7.28. Isto pode ser reforçado pela saturação dos efeitos de  $U$ , que agora ocorre mais lentamente. No painel 7.29 (b),  $t_1 = 0, 125t_0$ , o que causa, em conjunto com  $U$ , um desfavorecimento da fase supercondutora.

Figura 7.29 – Gap supercondutor em função da temperatura para simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$  com  $V = 2t_0$ ,  $\mu = 0$  e diferentes valores de  $U$ , usando  $t_1 = 0$  no painel (a). No painel (b),  $t_1 = 0, 125t_0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Figura 7.30 – Gap CDW em função da temperatura com  $V = 3t_0$ ,  $\mu = 0$  e diferentes valores de  $U$ , usando  $t_1 = 0$  no painel (a). No painel (b),  $t_1 = 0, 125t_0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Na figura 7.30 é mostrado o efeito do  $U$  no gap CDW  $W$ . Foi necessário o uso de  $V = 3t_0$  para este resultado, uma vez que para  $V = 2t_0$ , a fase CDW é suprimida pelos efeitos de  $U$ . Logo, para ser possível realizar a análise, foi aumentado o valor de  $V$  para  $V = 3t_0$ , a fim de estabilizar a fase CDW na presença de  $U$  e  $t_1$ . No painel 7.30 (a),  $t_1 = 0$ , para vários valores de  $U$ . O gap CDW apresenta um comportamento semelhante ao caso supercondutor da figura 7.28, onde ocorre uma supressão da fase devido aos efeitos da

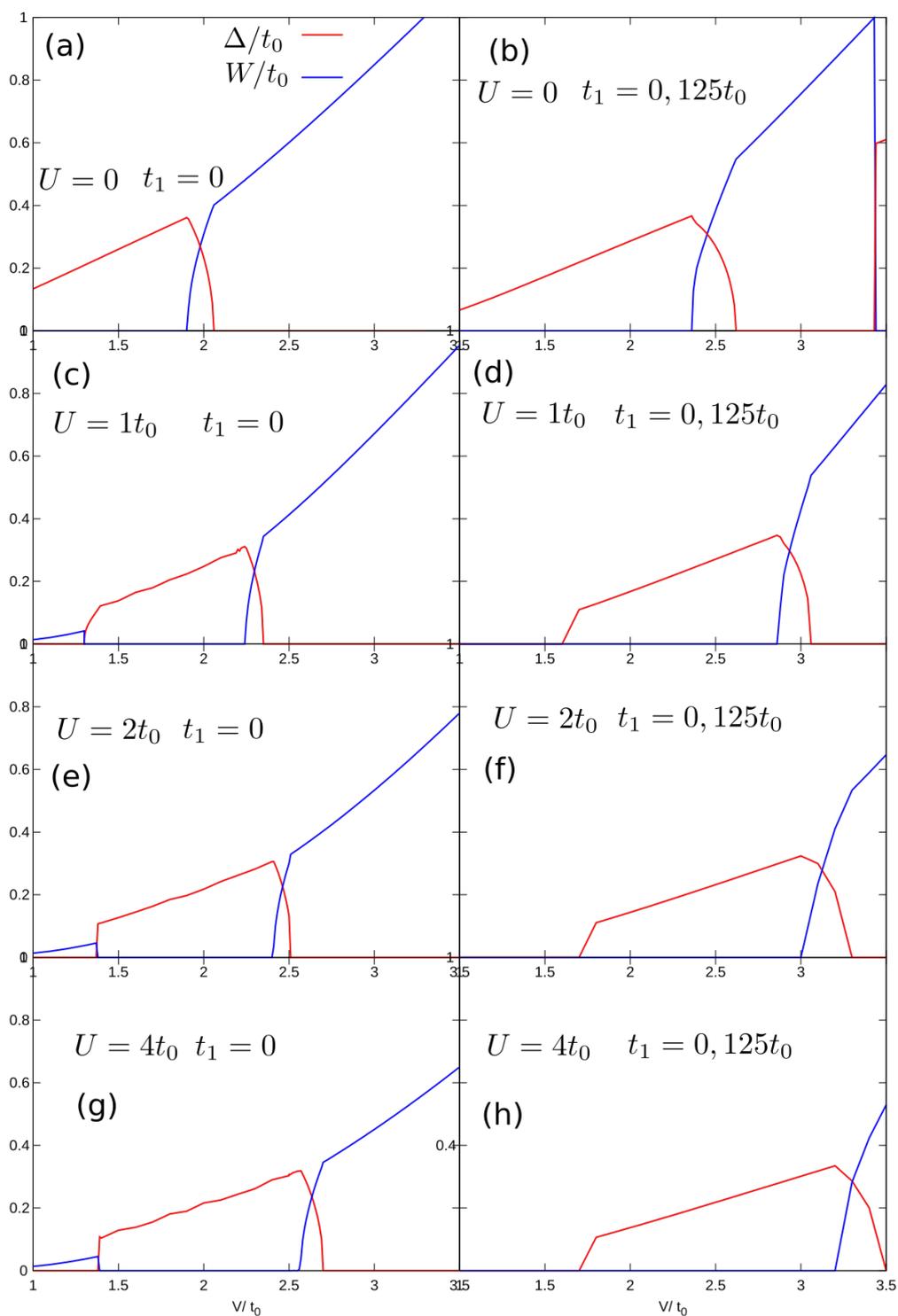
interação  $U$ . Escolheu-se os mesmos valores de  $U$  do estudo para o caso supercondutor, uma vez que as duas fases sofrem os efeitos de maneira semelhante.

Por fim, no painel 7.30 (b), foi utilizado  $t_1 = 0,125t_0$ , onde observa-se, uma supressão parcial da fase CDW intensificada pelos efeitos de  $t_1$  na presença de  $U$ . Este resultado permite verificar os efeitos supressores de  $U$  em ambas as fases separadamente, sendo que esses efeitos são intensificados pelo  $t_1$ .

Da mesma maneira que foi feito para o caso não correlacionado nos resultados apresentados nas figuras 7.16 e 7.20, analisa-se o comportamento dos gaps em função de  $V$ , em  $T = 0$ , a fim de estudar a coexistência de  $\Delta$  e  $W$ .

Variou-se  $V$  com  $T = 0$ ,  $\mu = 0$  e simetria  $s$ , a fim de encontrar as regiões de coexistência. Os resultados estão apresentados na figura 7.31. Os painéis da esquerda são referentes ao caso com  $t_1 = 0$  e os da direita com  $t_1 = 0,125t_0$ .

Figura 7.31 – Gaps superconductor e CDW em função da interação  $V$  para  $k_B T/t_0 = \mu = 0$ , e diferentes valores de  $t_1$  e  $U$ .

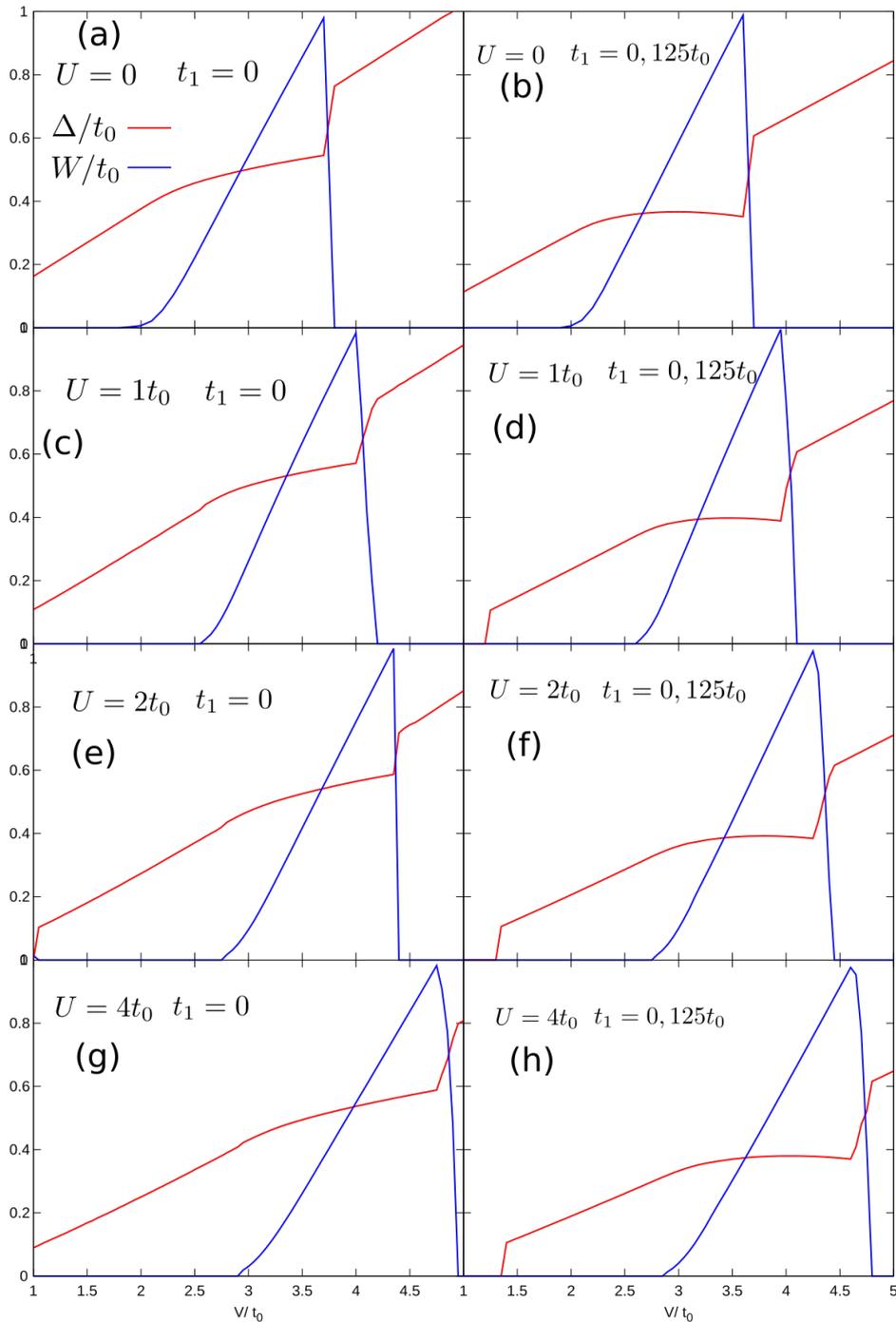


Fonte: Elaborada pelo Autor.

É possível perceber o efeito da interação  $U$  na região de coexistência, movendo-a para regiões de  $V$  maiores, ou seja,  $t_1$  e  $U$  desempenham um papel semelhante sobre a região de coexistência, assim como foi visto nos resultados 7.16 e 7.20, em que um au-

mento de  $t_1$  desloca a região de coexistência para uma valores maiores de  $V$ . Novamente percebe-se um desfavorecimento em ambas as fases, consequência do efeito de  $U$ , que assim como nos casos puros, satura a partir de um determinado valor.

Figura 7.32 – Gaps supercondutor e CDW em função da interação coulombiana  $U$  para  $k_B T/t_0 = \mu = 0$ , e diferentes valores de  $t_1$  e  $V$ , com simetria  $d_{x^2-y^2}$  para o gap supercondutor.



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Embora, principalmente  $\Delta$  tende à saturação devido ao efeito de  $U$ , a região de

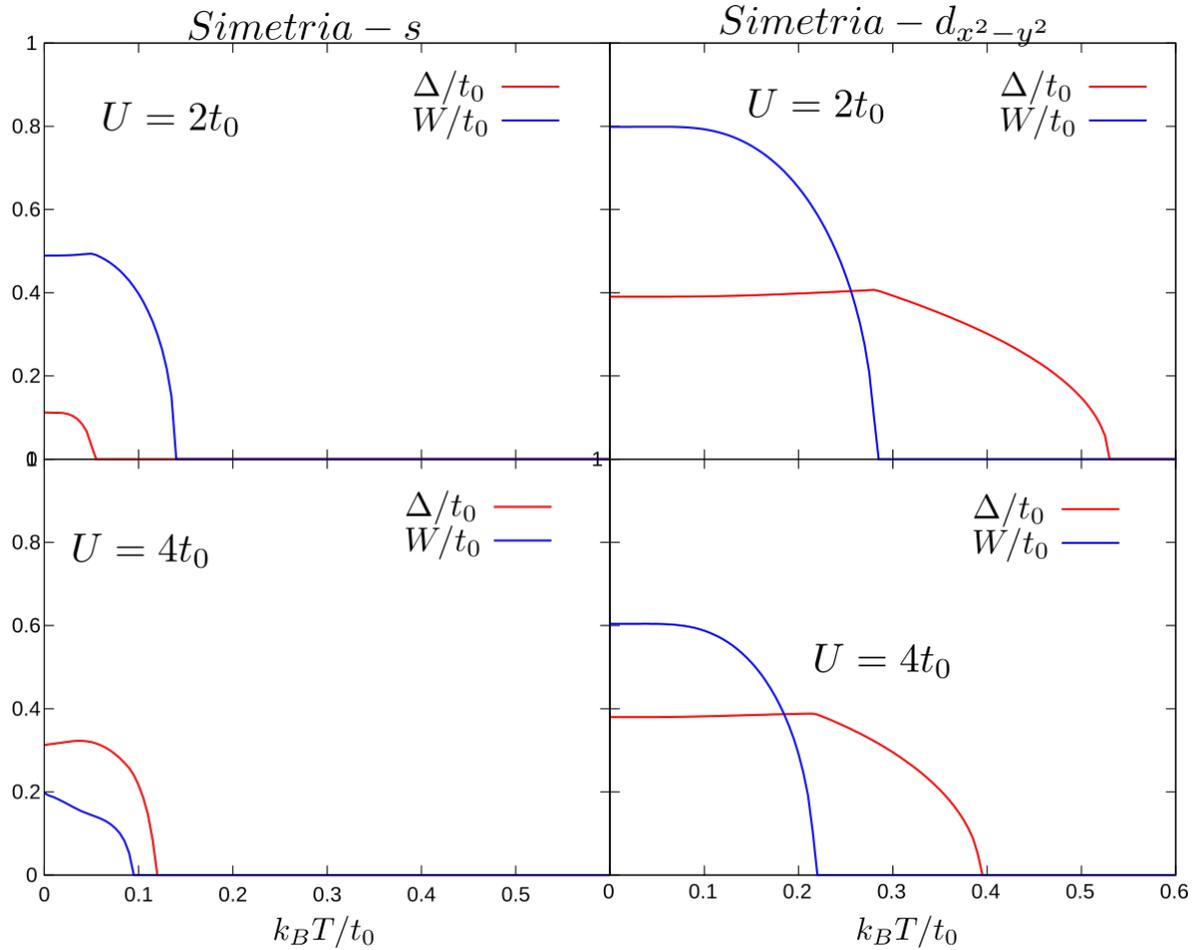
coexistência continua se movendo para valores maiores de  $V$ , conforme há um acréscimo em  $U$ . Este fenômeno ocorre para as duas simetrias.

Para o gap supercondutor com simetria  $d_{x^2-y^2}$ , o efeito da interação coulombiana na região de coexistência para  $T = 0$  é análogo ao caso para simetria  $s$ . No entanto, como visto na figura 7.32, para simetria  $d_{x^2-y^2}$ , a região de coexistência é maior, e o gap  $\Delta$  é maior quando comparado ao gap supercondutor com simetria  $s$ , indicando uma maior robustez da fase supercondutora com  $d_{x^2-y^2}$  também no regime correlacionado.

Nos painéis da figura 7.32 com  $t_1 = 0,125t_0$ , um decréscimo nos valores de  $\Delta$ , devido ao efeito de  $t_1$ , o qual já foi discutido exaustivamente nos resultados anteriores. Assim como no caso da simetria  $s$ ,  $t_1$  e  $U$  atuam de maneira semelhante, deslocando a região de coexistência para regiões de  $V$  maior. Por mais que as regiões de coexistência ocorram em um intervalo maior de  $V$  em comparação ao caso com simetria  $s$ , a região de  $V$  onde a coexistência está presente se desloca pra valores maiores, conforme  $U$  e  $t_1$  aumentam.

Assim como visto anteriormente ao longo deste trabalho, o gap supercondutor com simetria  $d_{x^2-y^2}$  é mais robusto aos efeitos de  $U$ , e por consequência, torna a coexistência de ambas as fases também mais robusta.

Figura 7.33 – Gaps supercondutor e CDW em função da temperatura para diferentes valores de  $U$ , com  $V = 2,6t_0$ ,  $t_1 = 0,125t_0$  e  $\mu = 0$  para ambas simetrias  $s$  e  $d_{x^2-y^2}$ .



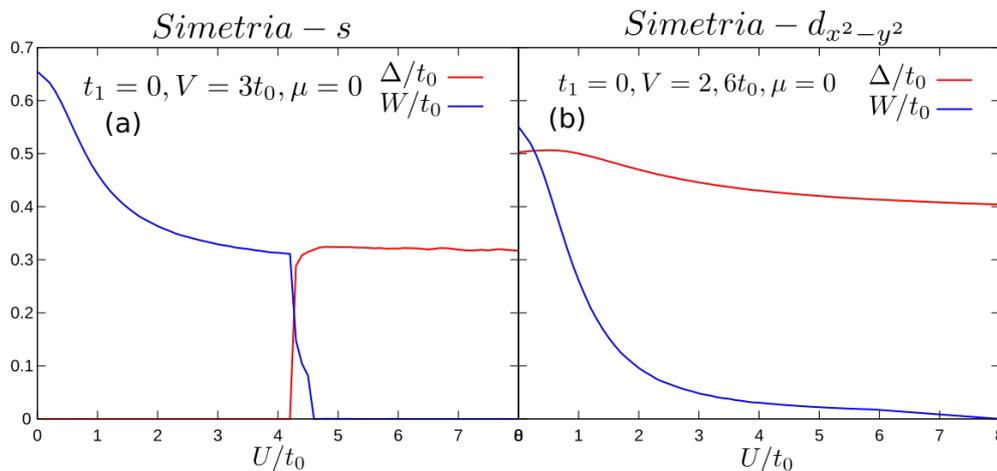
Fonte: Elaborada pelo Autor.

Como pode ser visto na figura 7.33, foi calculado os gaps  $\Delta$  e  $W$  em função da temperatura para dois valores de  $U$  com  $t_1 = 0,125t_0$ . No caso com simetria  $s$ , o aumento de  $U$  causou um desfavorecimento de ambas as fases, e por consequência, da sua coexistência.

É relevante apontar os pontos de inflexão presentes em  $\Delta$  quando a simetria usada é  $d_{x^2-y^2}$ , de maneira que  $U$  não é responsável pela distorção da forma do gap supercondutor, mas afeta a sua intensidade.

De maneira geral, como já foi verificado anteriormente,  $U$  tem apenas o papel de desfavorecer a supercondutividade e a CDW. Reitera-se aqui a robustez da simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ , a qual sofre efeitos menos intensos de  $U$ .

Figura 7.34 – Gaps supercondutor e CDW em função da interação  $V$  para  $k_B T/t_0 = \mu = 0$ , e diferentes valores de  $t_1$  e  $U$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

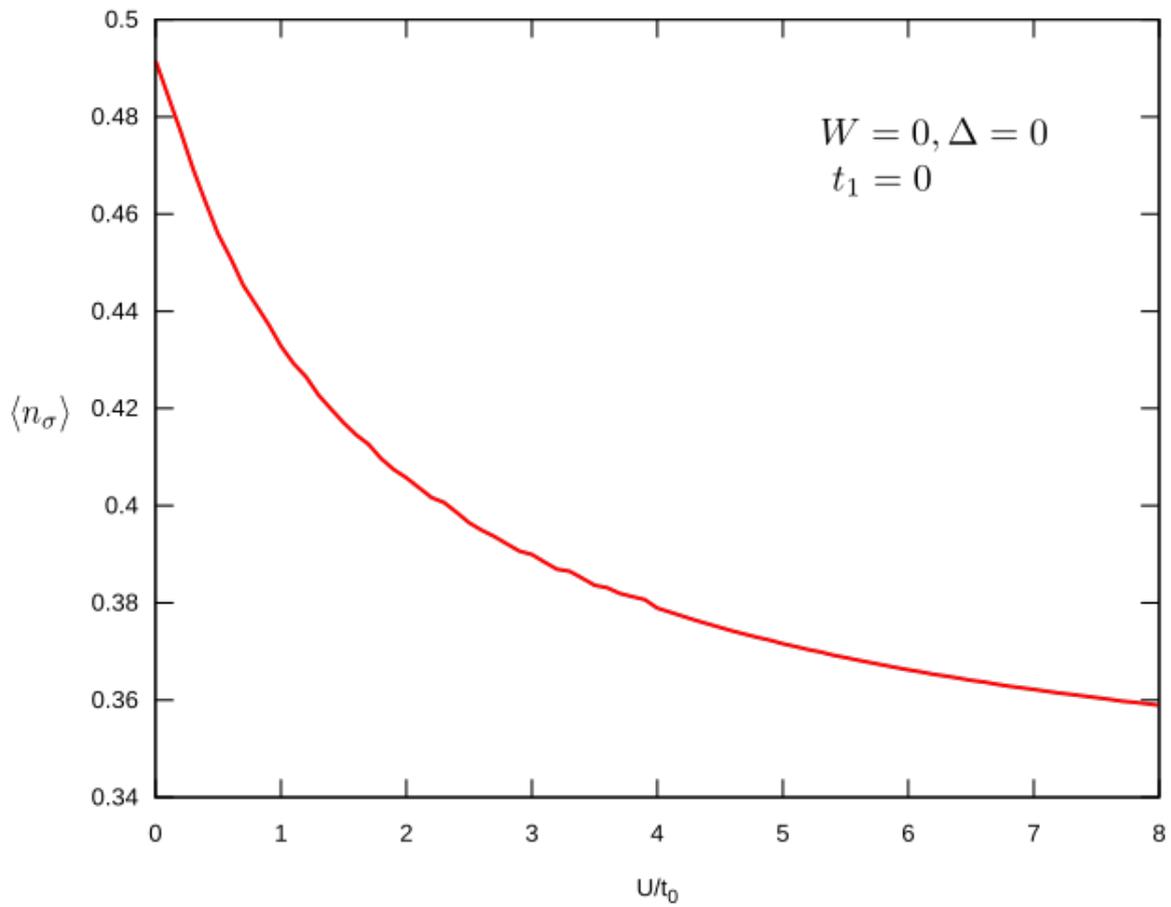
Na figura 7.34 são apresentados os gaps supercondutor e CDW com  $k_B T = \mu = 0$ , em função de  $U$ . No painel 7.34 (a), onde a simetria de onda para o gap supercondutor é a simetria  $s$ , é possível perceber uma pequena região de coexistência em torno de  $U = 4, 5t_0$ , assim como uma inversão nas fases para valores mais altos de  $U$ , ou seja, assim como no caso para  $U$  fixo e  $V$  variando, apresentado na figura 7.31, ocorre a abertura da região de coexistência, seguida de uma inversão da fase dominante.

Observa-se no painel 7.34 (b), com simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$  para o gap supercondutor, que a região de coexistência das fases é muito maior, praticamente em toda a faixa de valores apresentados para  $U$ . Assim como visto nos resultados anteriores da figura 7.32, esta simetria é mais estável, sendo responsável por uma maior e mais estável região de coexistência.

Para ambas as simetrias, ocorre uma tendência de saturação dos efeitos de  $U$ , conforme há um acréscimo no valor do mesmo.

Como pode ser visto na figura 7.35, a ocupação média por spin por sítio  $\langle n_\sigma \rangle$  estabiliza no limite de  $U$  muito grande, ou seja, quando todos os estados estão ocupados por um único elétron, ou vazios. Isto é uma consequência de  $U$  ser uma interação que atua apenas em elétrons de spins opostos localizados em um mesmo sítio.

Figura 7.35 – Ocupação média por spin para o estado normal em função da interação coulombiana  $U$  com  $k_B T = \mu = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo Autor.

## 8 CONCLUSÃO

Neste trabalho foram estudadas as fases *charge density wave* e supercondutora nos seus estados puros e na ausência de correlações ( $U = 0$ ), assim como no regime de coexistência. Também foi estudado o caso correlacionado ( $U \neq 0$ ), tanto para as fases puras quanto para o regime de coexistência.

Na seção 7.1.1 foi verificado o comportamento da fase supercondutora no estado não correlacionado. Constatou-se os efeitos do *hopping* de segundos vizinhos  $t_1$ , do potencial químico  $\mu$  e do potencial atrativo  $V$ , no comportamento do gap  $\Delta$ . Verificou-se que  $t_1$  e  $\mu$  têm efeitos supressivos no gap supercondutor, uma vez que são responsáveis por deslocar os pontos de sela  $(\pi, 0)$  da banda, afastando-os da energia  $\omega = 0$ , desfavorecendo assim a fase supercondutora. Este efeito foi observado tanto para simetria de onda  $s$  quanto para a simetria de onda  $d_{x^2-y^2}$ , porém, para esta última, a fase apresentou-se mais robusta perante os efeitos de  $t_1$  e  $\mu$ . Uma análise simples mostrou que  $\Delta^d = 2\Delta^s$  na região do ponto de sela  $(\pi, 0)$ , o qual tem maior contribuição para o estado supercondutor. Esse é o principal motivo por trás da robustez do estado supercondutor com simetria  $d_{x^2-y^2}$ .

O estudo da fase CDW foi realizado na seção 7.1.2, onde o comportamento das bandas, quando  $t_1 = 0$ , muito se assemelhou ao regime de simetria  $s$  do caso supercondutor. A presença do vetor de *nesting*  $\mathbf{Q}$  é responsável pelo aparecimento de diversos fenômenos interessantes, tais como um gap parcial na densidade de estados para valores pequenos de  $W$  quando  $t_1 \neq 0$ , assim como as transições de primeira ordem, no regime de potencial químico finito. Assim como no caso supercondutor,  $\mu$  e  $t_1$  têm efeito supressivo, já que estes também afastam as bandas da região  $(\pi, 0)$ , em  $\omega = \mu$ , suprimindo a fase CDW.

Para os casos puros, as fases CDW e supercondutora se comportam de maneira semelhante no que se refere à maneira como respondem aos efeitos de  $t_1$  e  $\mu$ . No entanto, algumas diferenças são observadas, a principal é o aparecimento de transições de primeira ordem para valores mais altos de  $\mu$ , efeito que deve ser melhor investigado em trabalhos futuros.

A coexistência em um regime não correlacionado foi estudada na seção 7.1.3, onde analisou-se a coexistência de ambas as fases, e a sua resposta aos efeitos de  $t_1$  e  $V$ . Os efeitos do potencial químico foram desprezados por simplicidade, visto que o possível aparecimento de transições de primeira ordem tornaria o problema mais complexo, dada a necessidade da análise da energia livre de Helmholtz para o caso combinado.

Foi possível observar que as fases CDW e supercondutora causam alteração comportamental uma na outra. Um exemplo disto foi mostrado nos resultados das figuras 7.15 e 7.19, onde observou-se pontos de inflexão para o gap CDW, no caso da simetria  $s$ , de

maneira semelhante ao caso com simetria  $d_{x^2-y^2}$ , onde os pontos de inflexão estão presentes no gap supercondutor. Quando  $t_1 = 0$ , o gap supercondutor com simetria  $s$  e o gap CDW se comportam de maneira análoga, e no regime de coexistência, a supercondutividade é afetada pelo gap da fase CDW. Quando  $t_1 \neq 0$ , há a explicitação de duas novas bandas, uma inferior e outra superior, resultado da quebra de degenerescência causada pelos efeitos de  $t_1$ .

Para a simetria  $d_{x^2-y^2}$  na região de coexistência, notou-se o aparecimento de pontos de inflexão no gap supercondutor. Isto ocorre devido aos efeitos do gap da fase CDW, a qual compete com a fase supercondutora. Na região de coexistência, ambos os gaps tendem a suprimir um ao outro.

A partir deste conjunto de resultados, conclui-se, que para  $U = 0$ , o aumento de  $t_1$  faz com que seja necessário um valor maior de  $V$ , para que a coexistência das fases ocorra. O potencial atrativo  $V$  tem papel fundamental na existência da coexistência, principalmente para o caso de simetria  $s$  para o gap supercondutor.

O regime correlacionado ( $U > 0$ ) foi estudado na seção 7.2, tanto para o caso supercondutor quanto para o caso *charge density wave*. Notou-se, em geral, que  $U$  exerce um papel supressor sobre ambas as fases na região de parâmetros considerada neste trabalho.

O regime de coexistência na presença de correlação foi estudado com  $\mu = 0$ , por motivos de simplicidade. Foi possível observar que os efeitos de  $t_1$  na coexistência na ausência de correlações aparecem aqui novamente, ou seja, um desfavorecimento das fases. Constatou-se que os efeitos de  $U$  para os casos puros também são consistentes com a coexistência, onde  $U$  tem um papel supressor sobre as fases supercondutora e CDW, e por consequência, sobre a coexistência das mesmas.

Outro efeito constatado é o deslocamento da região de coexistência para valores de  $V$  maiores, conforme  $U$  aumenta. O aumento do valor de  $V$  é necessário para que seja possível observar os gaps em coexistência, dado que o papel de  $V$  consiste em estabilizar ambas as fases, supercondutora, e CDW. Foi possível observar o papel semelhante de  $U$  e  $t_1$  na coexistência, onde ambos desfavorecem as fases supercondutora e *charge density wave*, e deslocam a região de coexistência para valores de  $V$  maiores.

Os resultados apresentados neste trabalho, de maneira geral, concordam qualitativamente com a literatura (BALSEIRO; FALICOV, 1979; EKINO et al., 2011; DASH; SÉNÉCHAL, 2021; PUDLEINER et al., 2019; GABOVICH; VOITENKO, 2009). A introdução dos efeitos de  $U$  torna o problema mais complexo, aumentando o interesse sobre o mesmo. Os resultados aqui obtidos servem de ponto de partida para estudos posteriores, uma vez que o ferramental utilizado permite a combinação de técnicas mais avançadas, tal como a aproximação de  $n$ -polos (ROTH, 1969), que considera as correlações antiferromagnéticas, as quais acredita-se que podem ser responsáveis pelo pseudogap observado nos cupratos (DOIRON-LEYRAUD et al., 2017; BORISENKO et al., 2008; MORINARI, 2019).

As perspectivas futuras englobam a possível utilização de uma aproximação que leve em consideração as correlações antiferromagnéticas, com o intuito de introduzir o *pseudogap* no problema, o qual acredita-se estar conectado com a supercondutividade de altas temperaturas críticas. Além disso, pretende-se também considerar a fase spin density wave, semelhante a fase CDW, porém, com uma modulação periódica de spins, onde para o caso CDW a modulação está relacionada com a carga. Também pode-se considerar a utilização de um modelo de Hubbard estendido (PUDLEINER et al., 2019; CAIXEIRO; TROPER, 2009), a fim de estudar os efeitos da competição entre as interações com maior detalhe.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BALSEIRO, C. A.; FALICOV, L. M. Superconductivity and charge-density waves. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 20, p. 4457–4464, Dec 1979. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.20.4457>>.

BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 108, p. 1175–1204, Dec 1957. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>>.

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>>.

BORISENKO, S. et al. Pseudogap and charge density waves in two dimensions. **Physical review letters**, APS, v. 100, n. 19, p. 196402, 2008.

BOSCHINI, F. et al. Emergence of pseudogap from short-range spin-correlations in electron-doped cuprates. **npj Quantum Materials**, Nature Publishing Group, v. 5, n. 1, p. 1–7, 2020.

BRUUS, H.; FLENSBERG, K. **Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction**. [S.l.]: Oxford university press, 2004.

CAHN, R.; HAASEN, P. **Physical Metallurgy**. Elsevier Science, 1996. (Physical Metallurgy, v. 1). ISBN 9780080538945. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=-uj80fqU8LEC>>.

CAIXEIRO, E.; TROPER, A. Superconductivity in a correlated two-dimensional hubbard model: A theoretical study. **Physica B: Condensed Matter**, Elsevier, v. 404, n. 19, p. 3102–3105, 2009.

CALEGARI, E.; RODRÍGUEZ-NÚÑEZ, 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>>.

CEA, T.; BENFATTO, L. Nature and raman signatures of the higgs amplitude mode in the coexisting superconducting and charge-density-wave state. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 90, p. 224515, Dec 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.224515>>.

DASH, S. S.; SÉNÉCHAL, D. Charge-and pair-density-wave orders in the one-band hubbard model from dynamical mean field theory. **Physical Review B**, APS, v. 103, n. 4, p. 045142, 2021.

DOIRON-LEYRAUD, N. et al. Pseudogap phase of cuprate superconductors confined by fermi surface topology. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 8, n. 1, p. 1–7, 2017.

DOMAŃSKI, T.; WYSOKIŃSKI, K. I. Superconducting phases in the presence of coulomb interaction: From weak to strong correlations. **Physical Review B**, APS, v. 59, n. 1, p. 173, 1999.

EKINO, T. et al. d-wave superconductivity and s-wave charge density waves: Coexistence between order parameters of different origin and symmetry. **Symmetry**, Molecular Diversity Preservation International, v. 3, n. 4, p. 699–749, 2011.

FAYE, J. P. L.; SÉNÉCHAL, D. Interplay between *d*-wave superconductivity and a bond-density wave in the one-band hubbard model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 95, p. 115127, Mar 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.115127>>.

FULDE, P. Electron correlation in molecules and solids. **Progress of Theoretical Physics Supplement - PROG THEOR PHYS SUPPL**, v. 80, p. 47–61, 01 1984.

GABOVICH, A. M.; VOITENKO, A. I. Model for the coexistence of d-wave superconducting and charge-density-wave order parameters in high-temperature cuprate superconductors. **Physical Review B**, APS, v. 80, n. 22, p. 224501, 2009.

GEBHARD, F. **The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods**. Springer Berlin Heidelberg, 1997. (Springer Tracts in Modern Physics). ISBN 9783540614814. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=uCPgHgEKnwEC>>.

GONZALEZ, J. et al. **Quantum Electron Liquids and High-Tc Superconductivity**. Springer Berlin Heidelberg, 2008. (Lecture Notes in Physics Monographs). ISBN 9783540476788. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=z7oPBwAAQBAJ>>.

GREINER, M.; LU, Z.-H. Thin-film metal oxides in organic semiconductor devices: Their electronic structures, work functions and interfaces. **NPG Asia Materials**, v. 5, 07 2013.

GRÜNER, G. The dynamics of charge-density waves. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 60, p. 1129–1181, Oct 1988. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.60.1129>>.

GRUNER, G. **Density Waves In Solids**. Avalon Publishing, 2000. (Advanced book program: Addison-Wesley). ISBN 9780201626544. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=6GksAAAAYAAJ>>.

GUPTA, R. et al. Superconducting and charge density wave transition in single crystalline LaPt<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 29, n. 25, p. 255601, may 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F1361-648x%2Faa70a7>>.

HAYWARD, L. E. et al. Angular fluctuations of a multicomponent order describe the pseudogap of YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub>. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 343, n. 6177, p. 1336–1339, 2014.

HOFMANN, J. S.; BERG, E.; CHOWDHURY, D. Superconductivity, pseudogap, and phase separation in topological flat bands. **Physical Review B**, APS, v. 102, n. 20, p. 201112, 2020.

HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, The Royal Society, v. 276, n. 1365, p. 238–257, 1963. ISSN 00804630. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2414761>>.

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>>.

JOSEPHSON, B. Possible new effects in superconductive tunnelling. **Physics Letters**, v. 1, n. 7, p. 251 – 253, 1962. ISSN 0031-9163. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031916362913690>>.

Kamerlingh Onnes, H. Further experiments with Liquid Helium G. On the electrical resistance of Pure Metals etc. VI. On the Sudden Change in the Rate at which the Resistance of Mercury Disappears. **Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen Proceedings Series B Physical Sciences**, v. 14, p. 818–821, jan. 1912.

KEIMER, B. et al. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 518, n. 7538, p. 179–186, 2015.

KUDO, K.; NISHIKUBO, Y.; NOHARA, M. Coexistence of superconductivity and charge density wave in srpt2as2. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 79, n. 12, p. 123710, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JPSJ.79.123710>>.

LEE, J.; JIN, K.-H.; YEOM, H. W. Distinguishing a mott insulator from a trivial insulator with atomic adsorbates. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 126, p. 196405, May 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.126.196405>>.

LERIDON, B. et al. Protected superconductivity at the boundaries of charge-density-wave domains. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 22, n. 7, p. 073025, 2020.

LINGANNAN, G. et al. Pressure-dependent modifications in the  $\text{LaAuSb}_2$  charge density wave system. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 103, p. 195126, May 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.195126>>.

LORET, B. et al. Universal relationship between the energy scales of the pseudogap phase, the superconducting state, and the charge-density-wave order in copper oxide superconductors. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 101, p. 214520, 06 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.214520>>.

MAHAN, G. D. **Many-particle physics**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.

MATSUBARA, T. A new approach to quantum-statistical mechanics. **Progress of theoretical physics**, Oxford University Press, v. 14, n. 4, p. 351–378, 1955.

MILLER, J. H. et al. Correlated quantum transport of density wave electrons. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 108, p. 036404, Jan 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.036404>>.

MORINARI, T. Short-range antiferromagnetic correlation effect on conduction electrons in two-dimensional strongly correlated electron systems. **Journal of the Physical Society of Japan**, The Physical Society of Japan, v. 88, n. 10, p. 104707, 2019.

MOTT, N. F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. **Proceedings of the Physical Society. Section A**, v. 62, n. 7, p. 416, 1949. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0370-1298/62/i=7/a=303>>.

NAMBU, Y. Quasi-particles and gauge invariance in the theory of superconductivity. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 117, p. 648–663, Feb 1960. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.117.648>>.

PEIERLS, R. et al. **Quantum Theory of Solids**. Clarendon Press, 1955. (International series of monographs on physics). ISBN 9780198507819. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=WvPcBUuSJBAC>>.

PERRIN, C. L. **Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Scientific Computing, Volume 2 (3 CD-ROMs and Manual)** By William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. Cambridge University Press: New York, 1996. [S.l.]: ACS Publications, 1997.

PUDLEINER, P. et al. Competition between antiferromagnetic and charge density wave fluctuations in the extended hubbard model. **Physical Review B**, APS, v. 100, n. 7, p. 075108, 2019.

RODRIGUEZ-NÚÑEZ, J.; SCHMIDT, A. Superconducting critical temperature, for s-wave symmetry order parameter, for intermediate correlated electron systems. **Physica C: Superconductivity**, Elsevier, v. 350, n. 1-2, p. 88–96, 2001.

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

SHIN, D. et al. Identification of the mott insulating charge density wave state in  $1T-TaS_2$ . **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 126, p. 196406, May 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.126.196406>>.

SYKORA, S.; HÜBSCH, A.; BECKER, K. W. Coexistence of superconductivity and charge-density waves in a two-dimensional holstein model at half-filling. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 85, n. 5, p. 57003, mar 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1209/0295-5075/85/57003>>.

TU, W.-L.; LEE, T.-K. Evolution of pairing orders between pseudogap and superconducting phases of cuprate superconductors. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 9, n. 1, p. 1–13, 2019.

WANG, Y.; AGTERBERG, D. F.; CHUBUKOV, A. Coexistence of charge-density-wave and pair-density-wave orders in underdoped cuprates. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 114, p. 197001, May 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.197001>>.

WATANABE, H.; SEKI, K.; YUNOKI, S. Charge-density wave induced by combined electron-electron and electron-phonon interactions in  $1t - tise_2$ : A variational monte carlo study. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 91, p. 205135, May 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.205135>>.

ZHENG, F.; FENG, J. Electron-phonon coupling and the coexistence of superconductivity and charge-density wave in monolayer  $nbse_2$ . **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 99, p. 161119, Apr 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.161119>>.

ZUBAREV, D. N. Double-time green functions in statistical physics. **Soviet Physics Uspekhi**, v. 3, n. 3, p. 320, 1960. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0038-5670/3/i=3/a=R02>>.

## APÊNDICE A – APÊNDICE A

Os pesos espectrais das funções de Green  $G^{12}(\mathbf{k}, z)$  e  $G^{13}(\mathbf{k}, z)$  são apresentados neste apêndice. Ambos foram obtidos da mesma maneira, ou seja, houve a decomposição em frações parciais do polinômio do numerador, e após isto, aplica-se a raiz correspondente ao termo do peso espectral. O que resulta nas expressões para os pesos espectrais  $Z_j^{12}$ , para a função de Green  $G^{12}(\mathbf{k}, z)$ , cuja correlação é equivalente ao gap supercondutor. Assumindo  $z_i$  como as raízes do polinômio do denominador, e  $\alpha_i$  os coeficientes do polinômio do numerador, têm-se:

$$Z_1^{12} = \frac{\alpha_0 + \alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_1^2 + \alpha_3 z_1^3 + \alpha_4 z_1^4 + \alpha_5 z_1^5 + \alpha_6 z_1^6}{(z - z_1)(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)(z_1 - z_5)(z_1 - z_6)(z_1 - z_7)(z_1 - z_8)} \quad (\text{A.1})$$

$$Z_2^{12} = \frac{-\alpha_0 - \alpha_1 z_2 - \alpha_2 z_2^2 - \alpha_3 z_2^3 - \alpha_4 z_2^4 - \alpha_5 z_2^5 - \alpha_6 z_2^6}{(z - z_2)(z_1 - z_2)(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)(z_2 - z_5)(z_2 - z_6)(z_2 - z_7)(z_2 - z_8)} \quad (\text{A.2})$$

$$Z_3^{12} = \frac{-\alpha_0 - \alpha_1 z_3 - \alpha_2 z_3^2 - \alpha_3 z_3^3 - \alpha_4 z_3^4 - \alpha_5 z_3^5 - \alpha_6 z_3^6}{(z - z_3)(z_1 - z_3)(z_3 - z_2)(z_3 - z_4)(z_3 - z_5)(z_3 - z_6)(z_3 - z_7)(z_3 - z_8)} \quad (\text{A.3})$$

$$Z_4^{12} = \frac{-\alpha_0 - \alpha_1 z_4 - \alpha_2 z_4^2 - \alpha_3 z_4^3 - \alpha_4 z_4^4 - \alpha_5 z_4^5 - \alpha_6 z_4^6}{(z - z_4)(z_1 - z_4)(z_4 - z_2)(z_4 - z_3)(z_4 - z_5)(z_4 - z_6)(z_4 - z_7)(z_4 - z_8)} \quad (\text{A.4})$$

$$Z_5^{12} = \frac{-\alpha_0 - \alpha_1 z_5 - \alpha_2 z_5^2 - \alpha_3 z_5^3 - \alpha_4 z_5^4 - \alpha_5 z_5^5 - \alpha_6 z_5^6}{(z - z_5)(z_1 - z_5)(z_5 - z_2)(z_5 - z_3)(z_5 - z_4)(z_5 - z_6)(z_5 - z_7)(z_5 - z_8)} \quad (\text{A.5})$$

$$Z_6^{12} = \frac{-\alpha_0 - \alpha_1 z_6 - \alpha_2 z_6^2 - \alpha_3 z_6^3 - \alpha_4 z_6^4 - \alpha_5 z_6^5 - \alpha_6 z_6^6}{(z - z_6)(z_1 - z_6)(z_6 - z_2)(z_6 - z_3)(z_6 - z_4)(z_6 - z_5)(z_6 - z_7)(z_6 - z_8)} \quad (\text{A.6})$$

$$Z_7^{12} = \frac{-\alpha_0 - \alpha_1 z_7 - \alpha_2 z_7^2 - \alpha_3 z_7^3 - \alpha_4 z_7^4 - \alpha_5 z_7^5 - \alpha_6 z_7^6}{(z - z_7)(z_1 - z_7)(z_7 - z_2)(z_7 - z_3)(z_7 - z_4)(z_7 - z_5)(z_7 - z_6)(z_7 - z_8)} \quad (\text{A.7})$$

$$Z_8^{12} = \frac{-\alpha_0 - \alpha_1 z_8 - \alpha_2 z_8^2 - \alpha_3 z_8^3 - \alpha_4 z_8^4 - \alpha_5 z_8^5 - \alpha_6 z_8^6}{(z - z_8)(z_1 - z_8)(z_8 - z_2)(z_8 - z_3)(z_8 - z_4)(z_8 - z_5)(z_8 - z_6)(z_8 - z_7)} \quad (\text{A.8})$$

E para a função de Green  $G^{13}(\mathbf{k}, z)$ , referente ao gap *charge density wave*, com os coeficientes do polinômio do numerador dados por  $\phi_i$ :

$$Z_1^{13} = \frac{\phi_0 + \phi_1 z_1 + \phi_2 z_1^2 + \phi_3 z_1^3 + \phi_4 z_1^4 + \phi_5 z_1^5}{(z - z_1)(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)(z_1 - z_5)(z_1 - z_6)(z_1 - z_7)(z_1 - z_8)} \quad (\text{A.9})$$

$$Z_2^{13} = \frac{-\phi_0 - \phi_1 z_2 - \phi_2 z_2^2 - \phi_3 z_2^3 - \phi_4 z_2^4 - \phi_5 z_2^5}{(z - z_2)(z_1 - z_2)(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)(z_2 - z_5)(z_2 - z_6)(z_2 - z_7)(z_2 - z_8)} \quad (\text{A.10})$$

$$Z_3^{13} = \frac{-\phi_0 - \phi_1 z_3 - \phi_2 z_3^2 - \phi_3 z_3^3 - \phi_4 z_3^4 - \phi_5 z_3^5}{(z - z_3)(z_1 - z_3)(z_3 - z_2)(z_3 - z_4)(z_3 - z_5)(z_3 - z_6)(z_3 - z_7)(z_3 - z_8)} \quad (\text{A.11})$$

$$Z_4^{13} = \frac{-\phi_0 - \phi_1 z_4 - \phi_2 z_4^2 - \phi_3 z_4^3 - \phi_4 z_4^4 - \phi_5 z_4^5}{(z - z_4)(z_1 - z_4)(z_4 - z_2)(z_4 - z_3)(z_4 - z_5)(z_4 - z_6)(z_4 - z_7)(z_4 - z_8)} \quad (\text{A.12})$$

$$Z_5^{13} = \frac{-\phi_0 - \phi_1 z_5 - \phi_2 z_5^2 - \phi_3 z_5^3 - \phi_4 z_5^4 - \phi_5 z_5^5}{(z - z_5)(z_1 - z_5)(z_5 - z_2)(z_5 - z_3)(z_5 - z_4)(z_5 - z_6)(z_5 - z_7)(z_5 - z_8)} \quad (\text{A.13})$$

$$Z_6^{13} = \frac{-\phi_0 - \phi_1 z_6 - \phi_2 z_6^2 - \phi_3 z_6^3 - \phi_4 z_6^4 - \phi_5 z_6^5}{(z - z_6)(z_1 - z_6)(z_6 - z_2)(z_6 - z_3)(z_6 - z_4)(z_6 - z_5)(z_6 - z_7)(z_6 - z_8)} \quad (\text{A.14})$$

$$Z_7^{13} = \frac{-\phi_0 - \phi_1 z_7 - \phi_2 z_7^2 - \phi_3 z_7^3 - \phi_4 z_7^4 - \phi_5 z_7^5}{(z - z_7)(z_1 - z_7)(z_7 - z_2)(z_7 - z_3)(z_7 - z_4)(z_7 - z_5)(z_7 - z_6)(z_7 - z_8)} \quad (\text{A.15})$$

$$Z_8^{13} = \frac{-\phi_0 - \phi_1 z_8 - \phi_2 z_8^2 - \phi_3 z_8^3 - \phi_4 z_8^4 - \phi_5 z_8^5}{(z - z_8)(z_1 - z_8)(z_8 - z_2)(z_8 - z_3)(z_8 - z_4)(z_8 - z_5)(z_8 - z_6)(z_8 - z_7)} \quad (\text{A.16})$$

## APÊNDICE B – APÊNDICE B

Figura B.1 – Fluxograma do algoritmo da bissecção.

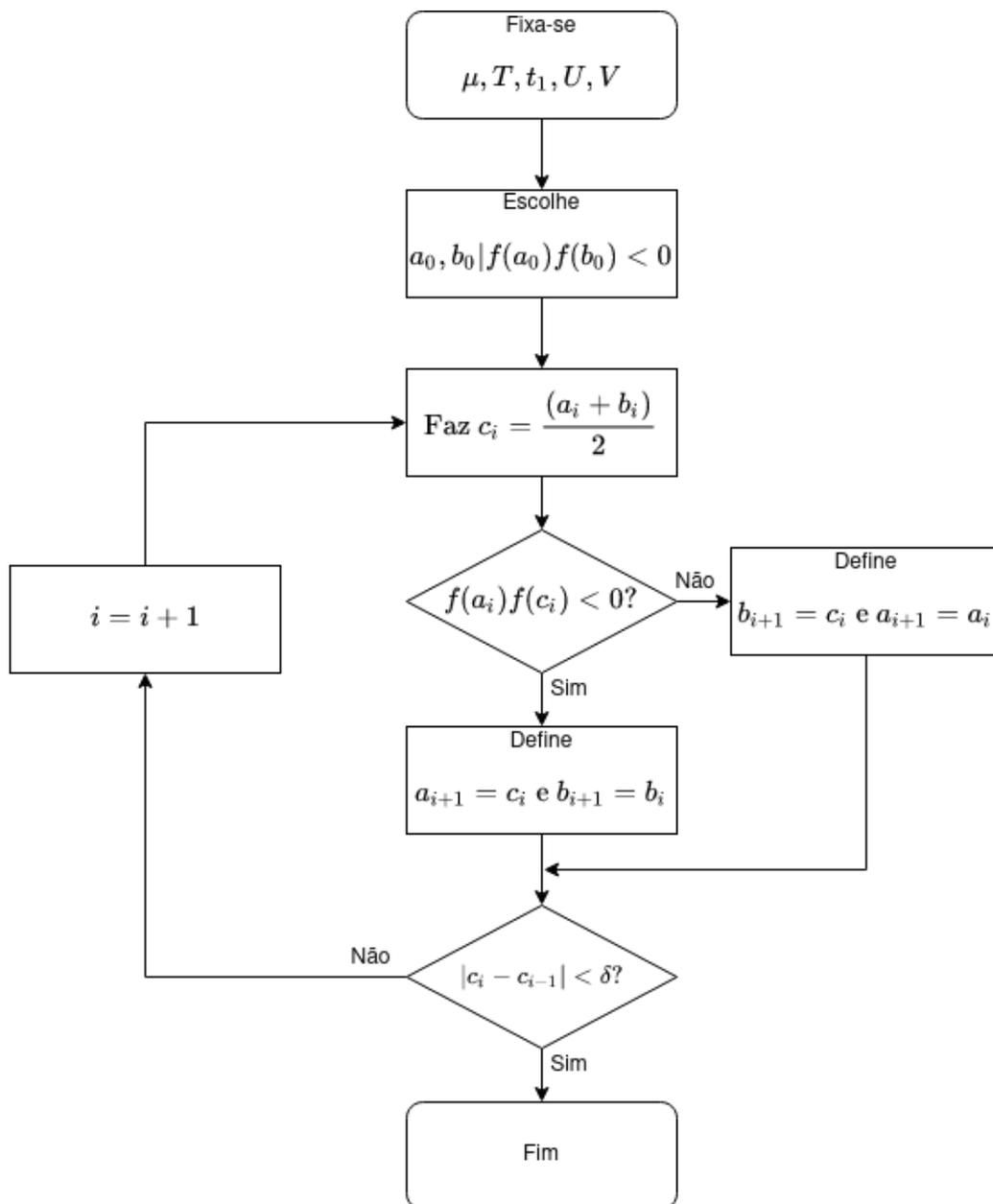
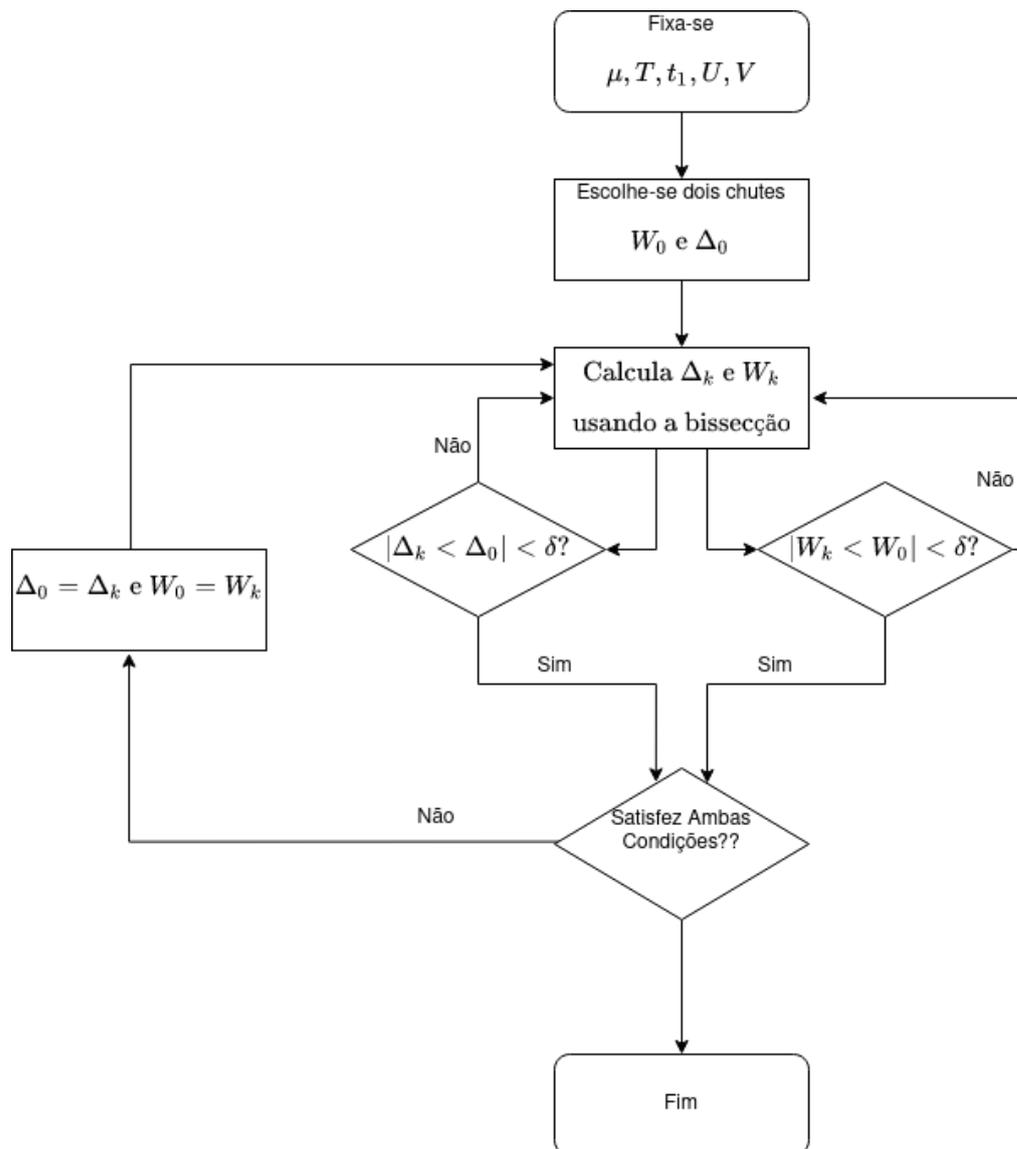


Figura B.2 – Fluxograma do algoritmo da auto consistência.



Fonte: Elaborada pelo Autor.