

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

Ana Claudia Lausmann

**ANTIFERROMAGNETISMO E ORDEM OCULTA EM UM MODELO DE
ANDERSON**

Santa Maria, RS
2018

Ana Claudia Lausmann

ANTIFERROMAGNETISMO E ORDEM OCULTA EM UM MODELO DE ANDERSON

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

ORIENTADOR: Prof. Eleonir Joao Calegari

Santa Maria, RS
2018

Lausmann, Ana Claudia
Antiferromagnetismo e ordem oculta em um modelo de
Anderson / Ana Claudia Lausmann.- 2018.
116 p.; 30 cm

Orientador: Eleonir João Calegari
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de
Pós-Graduação em Física, RS, 2018

1. Modelo de Anderson 2. Aproximação de campo médio 3.
Férmions pesados 4. Funções de Green 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.

©2018

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

End. Eletr.: hanakadia@gmail.com

Ana Claudia Lausmann

ANTIFERROMAGNETISMO E ORDEM OCULTA EM UM MODELO DE ANDERSON

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

Aprovado em 14 de dezembro de 2018:



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



Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior, PhD. (UFPel)



Fernando Lucas Metz, PhD. (UFRGS)



Leandro Barros da Silva, Dr. (UFSM)



Marcos Andre Carara, Dr. (UFSM)

Santa Maria, RS
2018

DEDICATÓRIA

À minha família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todas as pessoas que de alguma forma colaboraram para a realização deste trabalho e em particular:

- ao professor Eleonir João Calegari, pela orientação, pela sua paciência infinita e pela sua dedicação;

- ao professor Peter Riseborough, pela colaboração e pela orientação no período de doutorado sanduíche realizado na Temple University;

- ao professor Sergio Magalhães, pela colaboração;

- aos meus colegas e amigos do Laboratório de Teoria em Física da Matéria Condensada do Departamento de Física da UFSM;

- ao departamento de Física e aos funcionários da pós-graduação;

- aos meus pais Ana e Cláudio, ao meu irmão Eduardo e ao meu companheiro Leandro, pelo carinho, pelo apoio e pelo incentivo, principalmente nos momentos em que não concordaram comigo, mas respeitaram minhas decisões;

- aos demais familiares;

- às amigas do Santa Maria's friends, pelos momentos compartilhados, pelo incentivo e pela amizade;

- à UFSM, à Fapergs e ao CNPq, que fomentaram minha pesquisa desde a graduação e em especial a Capes¹ que além disso, também propiciou a realização de 6 meses de doutorado sanduíche na Temple University.

¹A autora foi bolsista da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (Capes) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

ANTIFERROMAGNETISMO E ORDEM OCULTA EM UM MODELO DE ANDERSON

AUTORA: Ana Claudia Lausmann
ORIENTADOR: Eleonir Joao Calegari

Na ausência de um campo magnético externo, o composto URu_2Si_2 exibe uma transição de fase de segunda ordem à 17,5 K. Essa transição é marcada por uma anomalia no calor específico, pela existência de uma susceptibilidade magnética anisotrópica e por uma grande perda de entropia. Resultados experimentais mostram que essa transição produz um gap de intensidade entre 5 e 7,5 meV que se desenvolve sobre 40% da superfície de Fermi. Após mais de 30 anos de intensa pesquisa teórica e experimental, a natureza da fase "Ordem Oculta", como é conhecida, permanece uma incógnita. Inicialmente, pensava-se que essa transição era um tipo de transição antiferromagnética. Contudo, à pressão acima de 0,5 GPa o sistema evolui para um estado antiferromagnético via transição de fase de primeira ordem. Recentemente, uma teoria baseada no modelo *Underscreened Anderson Lattice* propôs um parâmetro de ordem para descrever a fase "Ordem Oculta" (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012) do URu_2Si_2 . No presente trabalho, verifica-se que o modelo proposto exibe uma delicada competição entre as fases "Ordem Oculta" e de Neel, e que o mesmo também é capaz de descrever a transição de primeira ordem da fase "Ordem Oculta" para a fase de Neel devido ao aumento da pressão. Os resultados foram obtidos assumindo que a pressão tem como efeito o aumento do *hopping* das bandas d e 5f. Também observou-se que a "Ordem Oculta" aparece somente para alguns números de ocupação. A análise da energia livre de Helmholtz mostra que conforme a largura das bandas aumenta o sistema passa de um estado Neel para "Ordem Oculta", e depois novamente para um estado de Neel. Os limites da fase paramagnética foram obtidos através de instabilidades de segunda ordem. A fase de Neel também foi investigada. Os resultados mostram uma região de transições de primeira ordem entre duas fases antiferromagnéticas, que termina em um ponto crítico. Além disso, há um ponto tri-crítico localizado na região de baixas temperaturas e altos valores de largura de banda. Também verificou-se mudanças na topologia da superfície de Fermi no estado de Neel e a reconstrução de parte da superfície de Fermi. Essa reconstrução acompanha a linha de transição de primeira ordem entre as fases antiferromagnéticas e se estende além do ponto crítico sugerindo que pode existir uma transição de Lifshitz nessa região de parâmetros.

Palavras-chave: Modelo de Anderson. Aproximação de campo médio. Férmions-pesados. Funções de Green.

ABSTRACT

ANTIFERROMAGNETISM AND HIDDEN ORDER IN A ANDERSON MODEL

AUTHOR: Ana Claudia Lausmann

ADVISOR: Eleonir Joao Calegari

In the absence of an external magnetic field, the heavy-fermion compound URu_2Si_2 exhibits a second-order phase transition at 17.5 K. This transition is marked by a mean-field-like anomaly in the specific heat, by the existence of anisotropic magnetic susceptibility, and by a huge loss of entropy. Measurements on URu_2Si_2 show that this transition produces a gap with magnitude between 7.5 and 5 meV which develops over 40% of the Fermi-surface. Despite intensive theoretical and experimental research, even after almost thirty years, the nature of the hidden order phase, as it is called, remains unraveled. Initially, it was thought that this transition was a kind of antiferromagnetic transition. However, pressure measurements showed that a transition to an antiferromagnetic state occurs only above 0,5 GPa. Recently, a theory based in the underscreened Anderson Lattice Model has been proposed to describe the order parameter of the hidden order phase (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012) of URu_2Si_2 . In the present work, we show that the proposed model exhibits a delicate competition between the “Hidden Order” and a Neel antiferromagnetic phase, and that it might also describe the first-order transition in URu_2Si_2 found by applying pressure. We assume that the pressure has the effect of increasing both the tight-binding hopping integrals for the conduction and the 5f bands. We observe that the “Hidden Ordered” state only appears for a very limited range of occupation numbers. The analysis of the Helmholtz Free Energy shows a Neel antiferromagnetic state followed by a “Hidden Order” state and then a second Neel antiferromagnetic state as the band widths are increased. The boundaries of the paramagnetic state are obtained via second-order instabilities. The Neel antiferromagnetic state also was investigated. The results show a region of first order transitions between two antiferromagnetic phases, ending at a critical point. Besides that, there is a tricritical point at the low temperature and high value of band width region. Also, it was verified changes on Fermi surface topology in the Neel antiferromagnetic state and a parcial reconstruction on Fermi surface. This reconstruction follows the line of first order transition between the antiferromagnetic phases and it extends beyond the critical point, suggesting that there may be a Lifshitz transition in this region of parameters.

Keywords: Anderson model. Mean field approximation. Heavy-fermions. Green's Functions.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Calor específico do URu_2Si_2 plotado como C/T em função da temperatura T . Os picos no calor específico indicam duas transições de fases na região de baixas temperaturas.	19
Figura 2.2 – Estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado do URu_2Si_2 . As setas nos átomos de urânio (U) representam pequenos momentos AF.	20
Figura 2.3 – Calor específico do URu_2Si_2 dividido pela temperatura (C/T) em função de T^2 e de T	21
Figura 2.4 – Susceptibilidade magnética (eixo esquerdo) e susceptibilidade inversa (eixo direito) do URu_2Si_2 como função da temperatura, para um campo magnético de 2 T.	22
Figura 2.5 – Diagrama de fases experimental $T(K) \times P(\text{GPa})$ do composto URu_2Si_2	23
Figura 2.6 – Momento magnético em função da pressão para $T=3,0$ K (painel superior) e diagrama de fases experimental $T(K) \times P(\text{kbar})$ (painel inferior).	23
Figura 2.7 – Rede antiferromagnética dividida em duas sub-redes A (setas azuis) e B (setas vermelhas). Todos os vizinhos mais próximos de A estão na sub-rede B e todos os vizinhos mais próximos de B, estão na sub-rede A.	25
Figura 2.8 – Ilustração do campo médio devido aos elétrons com spin \downarrow em função do sítio j	27
Figura 3.1 – A figura abaixo mostra os polos no eixo imaginário e os contornos de integração por $t - t' > 0$ e $t - t' < 0$	39
Figura 3.2 – A figura abaixo ilustra a ideia de campo médio. À esquerda, tem-se um sistema físico real no qual o movimento das N partículas pretas é correlacionado devido a interação entre elas. À direita, o potencial de interação sentido pela partícula preta é substituído por uma interação média devido à densidade média das partículas brancas.	42
Figura 3.3 – Energia livre de Helmholtz F em função do parâmetro de ordem η , para três valores diferentes de temperatura.	44
Figura 3.4 – Energia livre de Helmholtz em função do parâmetro de ordem η , para diversos valores de temperatura. O sistema se encontra sob a ação de um campo magnético.	45
Figura 3.5 – Esboço de um diagrama de fases $T \times P$ contendo uma linha de segunda ordem separada de uma linha de primeira ordem por um ponto tri-crítico.	46
Figura 4.1 – Separação dos níveis eletrônicos de energia em função da distância inter-atômica d	57
Figura 5.1 – Susceptibilidade intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ como função do potencial químico para diversos valores de W e $T=0$. As divergências na susceptibilidade intra-banda indicam a instabilidade do estado PM em relação ao estado de Neel.	82
Figura 5.2 – Parâmetros de ordem m_f^β (a) e m_f^α (b) em função de $k_B T$, para diversos valores de W . Embora os valores de m_f^α e m_f^β sejam diferentes em $T=0$, ambos vão a zero na mesma T_N . Para o caso de $W=1,650$ eV os parâmetros de ordem vão a zero descontinuamente, sugerindo uma transição de primeira ordem para a fase PM. Para os demais casos de W a transição se dá de forma contínua. Observam-se descontinuidades em ambos os parâmetros de ordem na região entre $k_B T=0,0006$ e $0,003$ eV, indicando	

	transições de fase de primeira ordem dentro da fase de Neel.	83
Figura 5.3 –	Parâmetros de ordem m_f^α (a) e m_f^β (b) em função de W , para diversos valores de $k_B T$. Ambos os parâmetros vão a zero na mesma largura de banda crítica W_C . As descontinuidades nos parâmetros de ordem indicam transições de primeira ordem. A região verde marca uma suposta região de transições de primeira ordem entre duas fases AF, que possivelmente termina em um ponto crítico.	84
Figura 5.4 –	Gaps Δ_α e Δ_β em função de W , para diversos valores de $k_B T$. Essas quantidades apresentam comportamento similar ao dos parâmetros de ordem, diferindo apenas na ordem de grandeza. A região verde marca uma suposta região de transições de primeira ordem entre duas fases de Neel, a qual termina, possivelmente, em um ponto crítico.	85
Figura 5.5 –	Diferença $\Delta_\beta - \Delta_\alpha$ em função de W , para diversos valores de $k_B T$. A região verde marca uma suposta região de transições de fase de primeira ordem AF ₁ -AF ₂ , que possivelmente termina em um ponto crítico. A fase AF ₁ corresponde a região em que $\Delta_\beta > \Delta_\alpha > 0$ e a fase AF ₂ corresponde a região em que $\Delta_\alpha > \Delta_\beta > 0$	86
Figura 5.6 –	Δ_α e f_N em função de Δ_β para $T=0$ e $W=1,00$ eV. As linhas horizontais no painel (a) marcam os valores de Δ_α para os quais obteve-se as curvas $f_N \times \Delta_\beta$ mostradas no painel (b).	87
Figura 5.7 –	Energia livre de Helmholtz por número de sítios f_N em função dos gaps de Neel para diversos valores de largura de banda W em $T=0$. Em (a) tem-se a evolução de f_N próximo da transição AF ₁ -AF ₂ e em (b) próximo da transição AF ₂ -PM. Os discos pretos no plano xy indicam as soluções com energia mais baixa. Em ambos os casos tem-se transições de primeira ordem.	88
Figura 5.8 –	Bandas de energia α (linhas pretas) e β (linhas vermelhas) para $k_B T=0$. A linha preta horizontal em $E_\chi^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Conforme a largura de banda W aumenta os gaps diminuem e as bandas passam a interceptar a linha do potencial químico em mais de um ponto. Esse comportamento sugere a reconstrução das superfícies de Fermi.	90
Figura 5.9 –	Bandas de energia α (linhas pretas) e β (linhas vermelhas) para diversas temperaturas e larguras de banda W . A linha preta horizontal em $E_\chi^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. As faixas coloridas (1ª e 2ª coluna) marcam o gap das bandas β . Os pontos vermelhos na 3ª coluna marcam os valores de W para os quais as bandas foram obtidas, para cada valor de temperatura.	91
Figura 5.10 –	Parâmetros de Neel em função da largura de banda W e superfícies de Fermi α (linhas pretas) e β (linhas vermelhas) para $k_B T=0$. Observa-se a reconstrução das superfícies de Fermi α e β e uma mudança na topologia da superfície de Fermi α conforme W aumenta.	92
Figura 5.11 –	DOS α , β e d em função da energia para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV. No painel à direita observa-se em detalhe a região dos gaps.	94
Figura 5.12 –	DOS α , β e d em função da energia para $k_B T=0$ e $W=1,05$ eV. No painel à direita observa-se em detalhe a região dos gaps.	94
Figura 5.13 –	DOS α , β e d em função da energia para $k_B T=0$ e $W=1,67$ eV. No painel à direita observa-se em detalhe a região do gap devido à hibridização	

- entre as bandas α e d 95
- Figura 5.14 – Diagrama de fases $T \times W$. A linha vermelha marca transições de segunda ordem AF_{1,2}-PM. As linhas azuis marcam transições de primeira ordem AF₁-AF₂ e AF₂-PM. A linha azul que separa as fases AF₁ e AF₂ termina em um ponto crítico localizado em $k_B T_c = 0,0038$ eV e $W_c = 0,9826$ eV. Essa linha coincide com a reconstrução da superfície de Fermi β , sinalizada pela linha tracejada. Acima do ponto crítico a reconstrução da superfície de Fermi β continua acontecendo. A linha tracejada próximo de 1,3 eV marca a reconstrução da superfície de Fermi α . A linha azul que separa as fases AF₂ e PM termina em um ponto tri-crítico localizado em $T_{tric} = 0,0011$ eV e $W_{tric} = 1,6410$ eV. 96
- Figura 5.15 – Susceptibilidade intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ (linha vermelha) e inter-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}$ (linha azul) como função do potencial químico. As divergências na susceptibilidade intra-banda indicam a instabilidade do estado PM em relação ao estado de Neel, enquanto a divergência na susceptibilidade inter-banda indica a instabilidade do estado PM em relação ao estado HO. 97
- Figura 5.16 – Parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},-\sigma}$ em função de $k_B T$, para diferentes valores de W . No caso em que $W = 1,20$ eV observa-se uma descontinuidade em $z_{\vec{Q},-\sigma}$ indicando uma transição de primeira ordem HO-PM. Para os demais casos a transição para a fase PM, ocorre de forma contínua. Conforme W aumenta a temperatura crítica de transição T_{HO} diminui. 98
- Figura 5.17 – Gap $\kappa_{\vec{Q},\sigma}$ em função de $k_B T$, para diferentes valores de W . O gap apresenta comportamento similar ao do parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},-\sigma}$, diferindo apenas na ordem de grandeza. A T_{HO} está em acordo com os valores obtidos através do $z_{\vec{Q},-\sigma}$ 99
- Figura 5.18 – Parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},-\sigma}$ em função da largura de banda W , para diferentes valores de $k_B T$. Para o caso em que $T = 0$ a largura de banda $W = 1,20$ eV não é o suficiente para que o sistema evolua para a fase PM. Para $k_B T = 0,002$ eV observa-se uma descontinuidade que sugere uma transição de primeira ordem HO-PM. Nos demais casos a transição para a fase PM ocorre de forma contínua, característica de transições de segunda ordem. Nota-se que conforme T aumenta, a largura de banda crítica de transição W_C diminui. 99
- Figura 5.19 – Bandas de energia para $W = 1,00$ eV e $k_B T = 0$. No painel à esquerda tem-se as bandas β e no painel à direita as bandas α . A linha preta horizontal em $E_X^{(i)}(\mathbf{k}) = 0$ indica o valor do potencial químico do sistema. 100
- Figura 5.20 – Bandas de energia para $W = 1,00$ eV e diversos valores de $k_B T$. No painel à esquerda tem-se as bandas β e no painel à direita as bandas α . A linha preta horizontal em $E_X^{(i)}(\mathbf{k}) = 0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Observa-se a região do gap da fase HO. Conforme a temperatura aumenta o gap diminui. 101
- Figura 5.21 – Bandas de energia para $W = 1,00$ eV e $k_B T = 0,008$ eV. As linhas pretas representam as bandas α e a linha vermelha a banda β . A linha preta horizontal em $E_X^{(i)}(\mathbf{k}) = 0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Observa-se apenas o gap da hibridização α - d . O sistema se encontra na fase PM. 101
- Figura 5.22 – Bandas de energia para $k_B T = 0$ e diversos valores de W . No painel

à esquerda tem-se as bandas β e no painel à direita as bandas α . A linha preta horizontal em $E_{\chi}^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Observa-se a região do *gap* da fase HO. Conforme a largura de banda W aumenta o *gap* diminui. Cada banda intercepta a linha do potencial químico apenas em um único ponto.102

Figura 5.23 – DOS para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV. Observa-se os *gaps* de Neel e o *gap* da hibridização. A linha preta vertical em $\omega=0$ eV marca o valor de potencial químico do sistema.103

Figura 5.24 – DOS para $k_B T=0,008$ eV e $W=1,00$ eV. Observa-se apenas o *gap* devido a hibridização entre as bandas α e d . A linha preta vertical em $\omega=0$ eV marca o valor de potencial químico do sistema.103

Figura 5.25 – Superfícies de Fermi α (linha preta) e β (linha vermelha) relacionadas à banda de caráter d , para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV.104

Figura 5.26 – Superfície de Fermi para $k_B T=0,008$ eV e $W=1,00$ eV. Observa-se a reconstrução total da superfície de Fermi.104

Figura 5.27 – Diagrama de fases $T \times W$. A linha vermelha marca transições de segunda ordem AF-PM. A linha azul, por outro lado, marca transições de segunda ordem HO-PM. Os símbolos pretos sinalizam transições de primeira ordem AF-HO e HO-AF, as quais terminam em pontos bi-críticos. .105

Figura 5.28 – Diagrama de fases experimental da temperatura pela pressão do URu_2Si_2 . As fases HO e LMAF estão separadas por uma linha de primeira ordem terminada em um ponto bi-crítico.105

Figura 5.29 – Diagrama de fases $T \times W$ mostrando apenas a região de 1,00 eV a 1,20 eV, com os mesmos parâmetros da figura 5.27.106

Figura 5.30 – Energia livre de Helmholtz por número de sítios, para as fases HO e AF, como função dos *gaps*, em $k_B T=0$, para diversos valores de largura de banda W . Os círculos no plano xy mostram as soluções com energia mais baixa. A cor vermelha representa a fase AF e a cor azul a fase HO. Observa-se que conforme W cresce o sistema evolui da fase AF para a fase HO e novamente para a fase AF.107

Figura 5.31 – Energia livre de Helmholtz por número de sítios, para as fases HO e AF, como função dos *gaps*, em $k_B T=0,002$ eV, para diversos valores de largura de banda W . Os círculos no plano xy mostram as soluções com energia mais baixa.108

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	ORDEM OCULTA E ANTIFERROMAGNETISMO	19
2.1	ORDEM OCULTA	19
2.1.0.1	<i>Estrutura do composto</i>	20
2.1.0.2	<i>Propriedades termodinâmicas</i>	21
2.1.0.3	<i>Diagrama de fases $T(K) \times P(GPa)$</i>	23
2.1.0.4	<i>Teorias</i>	24
2.2	ANTIFERROMAGNETISMO	25
2.2.0.1	<i>Susceptibilidade Generalizada</i>	28
2.2.0.2	<i>Critério de Stoner</i>	28
3	METODOLOGIA	31
3.1	MODELO	31
3.1.1	Modelo de rede sub-blindada de Anderson	32
3.2	TÉCNICA DAS FUNÇÕES DE GREEN	33
3.2.1	Funções de Green Retardada e Avançada	34
3.2.2	Equações de Movimento	36
3.2.3	Funções de correlação	37
3.2.4	Representação Espectral	38
3.3	APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO	41
3.4	TRANSIÇÃO DE FASE	43
3.4.1	Ponto tri-crítico - Teoria de Landau	45
4	FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	49
4.1	PARTE I - PROBLEMA COMPLETO (HO+AF)	50
4.1.1	A teoria	50
4.1.2	Aproximação de Campo Médio	52
4.1.3	Funções de Green	56
4.1.3.1	<i>Parâmetros de ordem</i>	57
4.2	PARTE II - FASE ANTIFERROMAGNÉTICA	66
4.2.0.1	<i>Parâmetros de ordem da fase antiferromagnética</i>	66
4.2.0.2	<i>Estabilidade da fase antiferromagnética</i>	70
4.2.0.3	<i>Linha de transições de segunda ordem AF-PM</i>	72
4.3	PARTE III- FASE ORDEM OCULTA	74
4.3.0.1	<i>Parâmetro de ordem da fase ordem oculta</i>	75
4.3.0.2	<i>Estabilidade da fase ordem oculta</i>	76
4.3.0.3	<i>Linha de transições de segunda ordem HO-PM</i>	77
4.4	ESTADO PARAMAGNÉTICO	78
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	81
5.1	ESTADO DE NEEL	81
5.2	COMPETIÇÃO ENTRE AS FASES ORDEM OCULTA E ANTIFERROMAGNÉTICA	97
6	CONCLUSÃO	109
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	113

1 INTRODUÇÃO

A descoberta da supercondutividade e o comportamento de férmion pesado observado em alguns compostos como o UBe_{13} e o UPt_3 fez com que muitos outros compostos a base de urânio fossem sintetizados e estudados na busca de comportamentos exóticos (MYDOSH; OPPENEER, 2011). Contudo, um sistema em específico tem intrigado os pesquisadores por mais de três décadas.

Em meados da década de 1980, durante um estudo sistemático dos compostos CeT_2Si_2 e UT_2Si_2 (T é um metal de transição), o URu_2Si_2 chamou a atenção dos pesquisadores (PALSTRA et al., 1985; SCHLABITZ; BAUMANN; POLLIT, 1986). Até então, sabia-se que os sistemas férmions pesados dividiam-se em três grupos: os que apresentam supercondutividade, os que apresentam ordem magnética e os que não apresentam nem supercondutividade, nem ordem magnética. Porém, o URu_2Si_2 parecia apresentar ambas as fases (SCHLABITZ; BAUMANN; POLLIT, 1986). Medidas de calor específico e susceptibilidade magnética nesse composto indicam duas transições sucessivas: uma a $T_{SC} \approx 1,0$ K para uma fase supercondutora e outra a $T=17,5$ K. Acreditava-se que a transição a 17,5 K levava o sistema para um tipo de fase antiferromagnética (AF) (PALSTRA et al., 1985; SCHLABITZ; BAUMANN; POLLIT, 1986; MAPLE et al., 1986). Contudo, o momento magnético observado através de medidas de espalhamento inelástico de nêutrons é muito pequeno para explicar a grande perda de entropia que ocorre durante essa transição (RAMIREZ et al., 1992; OKAZAKI et al., 2011). Além disso, sob pressão, o sistema evolui para uma fase AF, com momentos magnéticos bem desenvolvidos, acima de 0,5 GPa (HASSINGER et al., 2008).

Desde a observação até os dias atuais, uma grande variedade de experimentos têm sido feitos na tentativa de desvendar a fase que aparece abaixo de 17,5 K em pressão ambiente. Contudo, o parâmetro de ordem responsável por essa transição ainda não é conhecido e a fase é denominada ordem oculta ou, em inglês, *Hidden Order* (HO).

Muitas teorias têm sido propostas para explicar a natureza da fase HO, entre as mais recentes estão a ordem multipolar (SANTINI; AMORETTI, 1994), a *spin density wave* não convencional (DAS, 2014), o líquido de spin modulado (PÉPIN et al., 2011; THOMAS et al., 2013), a ordem hastática (CHANDRA P., 2013), entre outras. Essas teorias podem ser separadas em dois grandes grupos de acordo com o modelo utilizado: um que considera os elétrons f localizados e outro que considera os elétrons f itinerantes (MYDOSH; OPPENEER, 2011). Essa dualidade nas teorias deve-se ao fato de que os elétrons $5f$ do URu_2Si_2 apresentam uma natureza dupla, ora são localizados, ora itinerantes. Entretanto, resultados experimentais de densidade de carga radial efetiva dos átomos de urânio sugerem que os elétrons $5f$ tenham um caráter mais itinerante do que localizado (IGA; KASAYA; KASUYA, 1988).

Em 2012, Riseborough, Coqblin e Magalhaes propuseram uma teoria baseada em um modelo itinerante, o modelo de rede sub-blindada de Anderson (UAL) (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2013; COQBLIN et al., 2009), para explicar a fase HO.

No presente trabalho, investiga-se as fases HO e AF do modelo UAL, tendo como um dos principais objetivos verificar se essa teoria, proposta por Riseborough, Coqblin e Magalhaes, é capaz de descrever a delicada competição entre HO e AF que aparece no diagrama experimental $T(K) \times P(\text{GPa})$ do URu_2Si_2 (NIKLOWITZ et al., 2010; HASSINGER et al., 2008).

Sendo a fase AF bem conhecida na física da matéria condensada, deu-se início no trabalho investigando-se os parâmetros de Neel. Esse estudo revelou uma competição entre dois tipos distintos de fases AF no modelo UAL. Embora, até o momento não tenha sido encontrado na literatura nenhum sistema físico AF que apresente esse tipo de comportamento, há outros trabalhos teóricos que reportam resultados similares, como, por exemplo, o artigo de V. P. Mineev e M. E. Zhitomirsky (MINEEV; ZHITOMIRSKY, 2005), no qual é apresentado um diagrama de fases $T \times P$ que mostra uma linha de transições de primeira ordem, a qual separa duas fases *spin density wave* e termina em um ponto crítico.

Há também o trabalho de Katsunori Kubo (KUBO, 2015), no qual investiga-se transições de Lifshitz nas fases magnéticas do modelo periódico de Anderson. Nesse artigo, é mostrado o comportamento do momento AF em função do nível efetivo dos elétrons f , o que equivale a variar a largura de banda no sistema. Observa-se uma transição de primeira ordem entre duas fases AF acompanhada por uma mudança na natureza da superfície de Fermi de elétron para buraco.

No campo experimental, há o diagrama experimental $T(K) \times P(\text{GPa})$ do ferromagneto itinerante UGe_2 (TAUFOUR et al., 2010) que apresenta uma competição entre dois tipos de fases ferromagnéticas (FM) separadas por uma linha de transição de primeira ordem terminada em um ponto crítico. O sistema também apresenta um ponto tri-crítico separando a linha de transições de primeira ordem da linha de transições de segunda ordem FM-PM.

Esta tese está dividida em 4 capítulos e conclusão. No primeiro capítulo, discute-se o histórico da fase HO e faz-se uma breve introdução ao antiferromagnetismo (AF). No segundo, apresenta-se a metodologia utilizada. O terceiro capítulo, denominado formulação do problema, apresenta os resultados analíticos. Os resultados numéricos são apresentados e discutidos no quarto capítulo. E por último, tem-se as considerações finais e perspectivas do trabalho.

2 ORDEM OCULTA E ANTIFERROMAGNETISMO

Neste capítulo, tem-se por objetivo fazer uma breve introdução ao problema da ordem oculta (HO) no URu_2Si_2 e à fase antiferromagnética (AF).

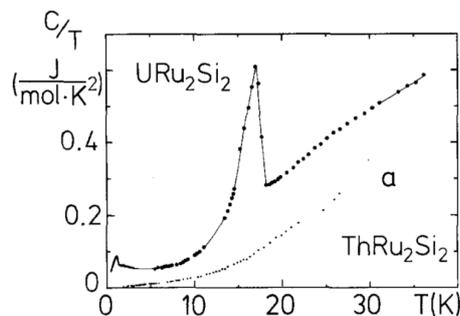
2.1 ORDEM OCULTA

O URu_2Si_2 tem atraído a atenção contínua de diversos pesquisadores por mais de três décadas (MYDOSH; OPPENEER, 2011).

Em 1984, Schlabitz, Baumann e Pollit apresentaram um trabalho em uma conferência na Alemanha mostrando que o composto apresenta duas transições de fase em baixas temperaturas: uma para uma fase supercondutora (SC) e outra para uma suposta fase AF.

A figura 2.1 mostra a curva do calor específico como função da temperatura obtida por Schlabitz, Baumann e Pollit. Pode-se observar dois picos no calor específico, os quais são indícios de duas sucessivas transições de fases.

Figura 2.1 – Calor específico do URu_2Si_2 plotado como C/T em função da temperatura T . Os picos no calor específico indicam duas transições de fases na região de baixas temperaturas.



Fonte: (SCHLABITZ; BAUMANN; POLLIT, 1986).

Os resultados apresentados nessa conferência foram publicados dois anos depois, em 1986. Nessa época, já haviam outras duas publicações (PALSTRA et al., 1985; MAPLE et al., 1986) relatando tais transições de fase no URu_2Si_2 .

Os três grupos concordavam que a transição a $T_{SC} \approx 1$ K era uma transição para uma fase SC. No entanto, havia dúvidas quanto a transição a $T_{HO}=17,5$ K. Cada grupo tinha uma interpretação. Palstra et al. acreditavam se tratar de um tipo de AF itinerante fraco, Maple et al. pensavam que se tratava de uma fase *charge-density wave* (CDW) ou *spin-density wave* (SDW) e Schlabitz, Baumann e Pollit achavam que se tratava de uma transição AF causada por uma interação de momentos magnéticos locais nos átomos de

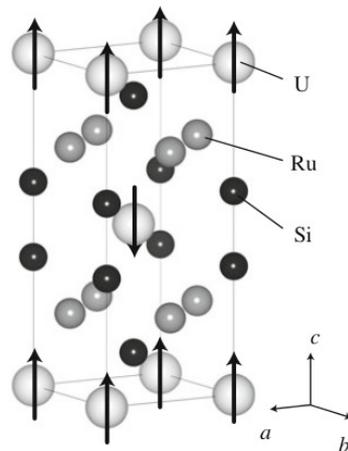
urânio.

Hoje sabe-se que as três interpretações estão incorretas. A transição a 17,5 K não está relacionada com uma ordem magnética de longo alcance e não há indícios de CDW ou SDW (MYDOSH; OPPENEER, 2011). A simetria associada ao parâmetro de ordem por outro lado, continua uma incógnita. Porém, a grande variedade de estudos experimentais tem acrescentado várias características à lista de descrição da HO. A seguir, apresenta-se algumas delas.

2.1.0.1 Estrutura do composto

O URu_2Si_2 é um férmion pesado que apresenta uma estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado, com constantes de rede $a = 0,41279(1)$ nm e $c = 0,95918(7)$ nm a $T=294$ K.

Figura 2.2 – Estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado do URu_2Si_2 . As setas nos átomos de urânio (U) representam pequenos momentos AF.



Fonte: (OKAZAKI, 2013).

A estrutura do URu_2Si_2 pode ser observada na figura 2.2, onde as setas nos átomos de urânio (U) representam pequenos momentos AF indicados em experimentos de espalhamento de nêutrons (BROHOLM et al., 2007). Experimentos mais recentes sugerem que os momentos AF medidos são devido a impurezas nas amostras (NIKLOWITZ et al., 2010; BAEK et al., 2010).

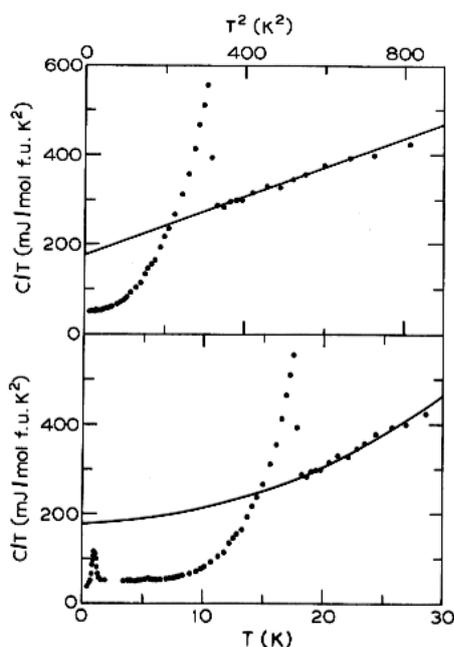
Evidências experimentais indicam que a transição para a fase HO, baixando a temperatura, envolve uma mudança na estrutura tetragonal de corpo centrado para tetragonal simples (HASSINGER et al., 2008; HARIMA; MIYAKE; FLOUQUET, 2010; BUHOT et al., 2014), todavia, acredita-se que a transição para a fase HO é de origem eletrônica e não

necessita de distorções na rede (HARIMA; MIYAKE; FLOUQUET, 2010). Aplicando pressão externa sobre o sistema, a fase HO evolui para uma fase AF com estrutura tetragonal simples e momentos magnéticos bem desenvolvidos (HASSINGER et al., 2008; BUTCH et al., 2010).

2.1.0.2 Propriedades termodinâmicas

Anomalias no calor específico em função da temperatura são indícios de transições de fases (OSTERMANN; PUREUR, 2005). Uma anomalia cujo comportamento se assemelha a letra grega lambda (λ) sugere a ocorrência de uma transição de fase de segunda ordem.

Figura 2.3 – Calor específico do URu_2Si_2 dividido pela temperatura (C/T) em função de T^2 e de T .



Fonte: (PALSTRA et al., 1985).

Na figura 2.3 pode-se observar o calor específico do URu_2Si_2 dividido pela temperatura (C/T) como função de T (painel inferior) e de T^2 (painel superior). Entre 17 K e 2 K, a curva do calor específico pode ser descrita pela expressão

$$C(T) = \gamma T + AT^3 + ae^{-\Delta/T}, \quad (2.1)$$

onde γ e A são características do material, Δ é um *gap* de energia e a é uma constante. Os dois primeiros termos dessa expressão representam o comportamento dos elétrons

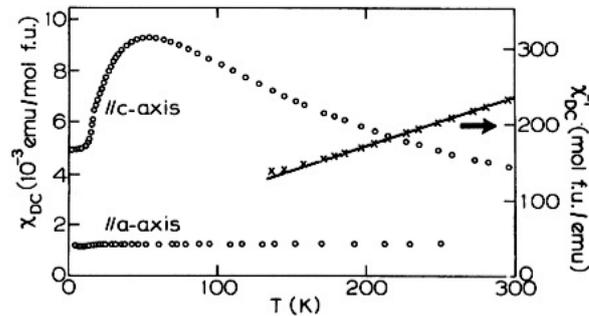
livres e as vibrações da rede cristalina (OSTERMANN; PUREUR, 2005). O terceiro termo representa a contribuição dos elétrons envolvidos na formação da HO (OKAZAKI, 2013). Esse comportamento sugere a abertura de um *gap* em pelo menos parte da superfície de Fermi do URu_2Si_2 a $T_{HO}=17,5$ K (PALSTRA et al., 1985). Acima de T_{HO} , a curva C/T pode ser bem representada pela soma dos dois primeiros termos da equação 2.1, ou seja:

$$C(T)/T = \gamma + AT^2, \quad (2.2)$$

como mostrado pela linha sólida no painel superior.

Embora ainda não se tenha um completo entendimento sobre a fase HO no URu_2Si_2 (MYDOSH; OPPENEER, 2011; BUHOT et al., 2014), o comportamento do calor específico (no painel inferior da figura 2.3) claramente sugere uma transição de fase de segunda ordem em $T_{HO}=17,5$ K, marcada pela presença de uma anomalia tipo lambda.

Figura 2.4 – Susceptibilidade magnética (eixo esquerdo) e susceptibilidade inversa (eixo direito) do URu_2Si_2 como função da temperatura, para um campo magnético de 2 T.



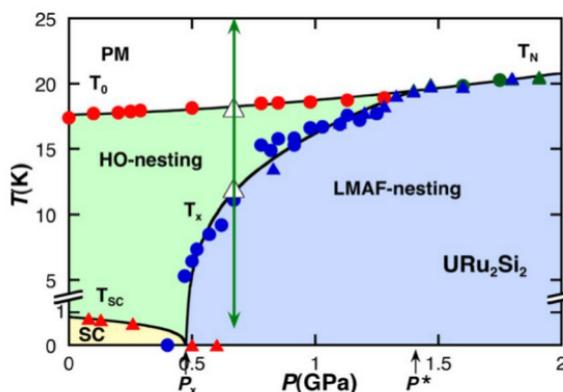
Fonte: (PALSTRA et al., 1985).

Na figura 2.4, observa-se a dependência na temperatura da susceptibilidade magnética (eixo esquerdo) e da susceptibilidade magnética inversa (eixo direito) para um campo de 2 T. Caso a transição a T_{HO} seja considerada uma transição AF, então a temperatura de Neel, definida como sendo o máximo de $d\chi/dT$, ocorre à 17,5 K. Esse valor corresponde exatamente à anomalia no calor específico. Além disso, o comportamento da susceptibilidade inversa, que marca uma temperatura de Curie-Weiss de -65 K, sugere uma ordem AF. Mesmo havendo evidências de uma fase AF abaixo de T_{HO} , esses resultados entram em conflito com a grande perda de entropia associada ao comportamento do calor específico, que não pode ser explicada pelos pequenos momentos AF medidos ($0,01 \sim 0,04 \mu_B$) (BROHOLM et al., 1991; NIKLOWITZ et al., 2010; BROHOLM et al., 2007).

2.1.0.3 Diagrama de fases $T(K) \times P(\text{GPa})$

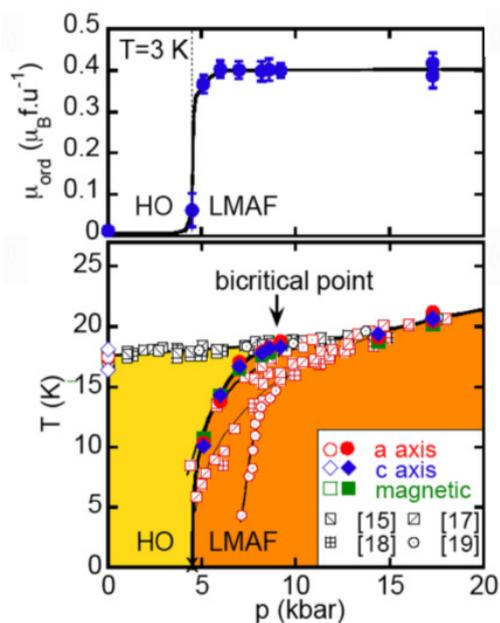
A aplicação de pressão externa sobre o URu_2Si_2 revela uma delicada competição entre a fase HO e uma fase AF. Essa competição é descrita na figura 2.5.

Figura 2.5 – Diagrama de fases experimental $T(K) \times P(\text{GPa})$ do composto URu_2Si_2 .



Fonte: (VILLAUME et al., 2008).

Figura 2.6 – Momento magnético em função da pressão para $T=3,0$ K (painel superior) e diagrama de fases experimental $T(K) \times P(\text{kbar})$ (painel inferior).



Fonte: (NIKLOWITZ et al., 2010).

No diagrama de fases da figura 2.5, percebe-se 4 regiões distintas. À pressão zero, em temperaturas mais altas, o URu_2Si_2 encontra-se na fase paramagnética (PM). Abaixo de 17,5 K tem-se uma transição de segunda ordem para a fase HO e abaixo de 1,0 K, o sistema entra em uma fase SC, sendo essa transição também de segunda ordem. Em

temperatura próxima de 0 K e pressão acima de 0,5 GPa a fase AF emerge. Acima de P^* a fase AF é a única fase estabelecida (para $T < T_N$).

A figura 2.6 mostra o diagrama de fases experimental para URu_2Si_2 apresentado dois anos mais tarde por Niklowitz et al.. Nesse diagrama, também observa-se uma competição entre as fases HO e AF. Estabelece-se que a linha de transições de fase HO-AF é uma linha de transições de primeira ordem, que termina em um ponto bi-crítico. O comportamento do momento magnético em função da pressão é mostrado no painel superior. Pode-se perceber que quando o valor de pressão 4,5 kbar é atingido ocorre um aumento abrupto do momento magnético que coincide com a transição HO-AF.

Em geral os diagramas de fases das figuras 2.5 e 2.6 apresentam comportamento similar.

2.1.0.4 Teorias

Muitas teorias têm sido propostas na tentativa de explicar a HO do URu_2Si_2 . Em geral, essas teorias podem ser classificadas em dois grandes grupos de acordo com o modelo utilizado: localizado ou itinerante.

Entre as teorias pertencentes ao grupo dos modelos localizados tem-se ordem quadrupolar (SANTINI; AMORETTI, 1994), ordem octupolar (KISS; FAZEKAS, 2005), ordem hexadecapolar e líquido de *spin* modulado (PÉPIN et al., 2011; THOMAS et al., 2013).

No grupo das teorias que consideram modelos itinerantes encontram-se *spin density wave* (SDW) não-convencional (IKEDA; OHASHI, 1998; RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012), estado nemático de *spin* (FUJIMOTO, 2011), ondas hibridizadas (DUBI; BALATSKY, 2011) e SDW com momentos locais (MINEEV; ZHITOMIRSKY, 2005), entre outras.

Experimentos de difração de raios-x têm eliminado quadrupolos elétricos de todas as simetrias como possível parâmetro de ordem associado a HO (WALKER et al., 2011). Também, no caso de ondas hibridizadas, essas deveriam ser acompanhadas por *charge density wave* (CDW), que por sua vez poderia ter sido detectada nos experimentos de difração de raio-x com alta resolução (KERNAVANOIS et al., 1999), já realizados.

Devido a ausência de uma identificação das simetrias que são quebradas na transição HO-PM, a natureza da fase permanece uma incógnita (MYDOSH; OPPENEER, 2011), com várias teorias a serem avaliadas.

2.2 ANTIFERROMAGNETISMO

Uma ordem magnética pode ser entendida como um certo padrão local de desequilíbrio de estados com *spin* \uparrow e \downarrow (FAZEKAS, 1999).

Por exemplo: a polarização média de *spin* por sítio j é dada por

$$\langle S_j^z \rangle = \frac{1}{2}(\langle \hat{n}_{j,\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{j,\downarrow} \rangle), \quad (2.3)$$

onde $\langle \hat{n}_{j,\uparrow} \rangle$ é o número médio de ocupação de elétrons com *spin* \uparrow e $\langle \hat{n}_{j,\downarrow} \rangle$ é o número médio de ocupação de elétrons com *spin* \downarrow . Se essa polarização for finita, então diz-se que o sítio j é magnético e tem uma magnetização dada por:

$$\langle M_j^z \rangle = g\mu_B \langle S_j^z \rangle, \quad (2.4)$$

onde μ_B é o magnetão de Bohr. Vale mencionar, que a direção z foi escolhida de forma arbitrária. O momento magnético de *spin* pode apontar em qualquer direção.

Em uma ordem magnética todos os sítios ou um conjunto de sítios tem momento magnético não-nulo.

O tipo mais simples de magnetismo é a ordem ferromagnética, na qual todos os sítios estão polarizados na mesma direção e todos os momentos magnéticos são iguais:

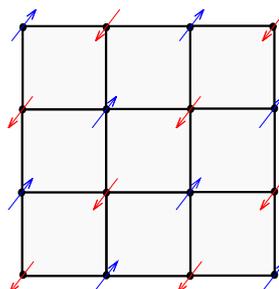
$$\langle \hat{n}_{j,\sigma} \rangle = n_\sigma, \quad (2.5)$$

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow), \quad (2.6)$$

com $n_\uparrow \neq n_\downarrow$.

Outro tipo de ordem magnética conhecida é o antiferromagnetismo. Um arranjo AF simples corresponde ao alinhamento antiparalelo dos *spins* de sítios vizinhos de uma rede cristalina (PUREUR, 2001) como pode-se observar na figura 2.7. A rede mostrada

Figura 2.7 – Rede antiferromagnética dividida em duas sub-redes A (setas azuis) e B (setas vermelhas). Todos os vizinhos mais próximos de A estão na sub-rede B e todos os vizinhos mais próximos de B, estão na sub-rede A.



na figura 2.7 pode ser dividida em duas sub-redes A e B. Todos os vizinhos mais próximos de A estão na sub-rede B e todos os vizinhos mais próximos de B, estão na sub-rede A. Assumindo que os momentos magnéticos são paralelos ao eixo z , essa rede AF pode ser descrita pelas seguintes relações:

$$\langle \hat{n}_{j,\uparrow} \rangle = \begin{cases} \frac{N_T}{2} + m & \text{se } j \text{ é um sítio de } A \\ \frac{N_T}{2} - m & \text{se } j \text{ é um sítio de } B \end{cases} \quad (2.7)$$

e

$$\langle \hat{n}_{j,\downarrow} \rangle = \begin{cases} \frac{N_T}{2} - m & \text{se } j \text{ é um sítio de } A \\ \frac{N_T}{2} + m & \text{se } j \text{ é um sítio de } B. \end{cases} \quad (2.8)$$

Para o caso de uma rede cúbica essas equações podem ser reescritas como

$$\langle \hat{n}_{j,\downarrow} \rangle = \frac{N_T}{2} + \eta(\sigma) m e^{i\vec{Q}\vec{j}} \quad (2.9)$$

onde $\vec{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ é o vetor comensurado da rede, $\eta(\sigma) = \pm 1$ para $\sigma = \uparrow$ e \downarrow , respectivamente, e N_T é a ocupação total por sítio.

A polarização de *spin* da sub-rede é dada por

$$\langle S_j^z \rangle = m e^{i\vec{Q}\vec{j}} = \begin{cases} -m & \text{se } j \text{ é um sítio de } A \\ m & \text{se } j \text{ é um sítio de } B. \end{cases} \quad (2.10)$$

A quantidade m pode ser identificada como o parâmetro de ordem, o qual fornece a magnetização da sub-rede.

Um modelo bem conhecido e que pode ser utilizado para estudar o fenômeno do magnetismo é o modelo de Hubbard. Esse modelo não é capaz de descrever materiais reais, mas fornece uma base sólida para o entendimento de antiferromagnetismo, incluindo o antiferromagnetismo itinerante que ocorre em metais.

O termo de interação do modelo de Hubbard é descrito por (HUBBARD, 1963):

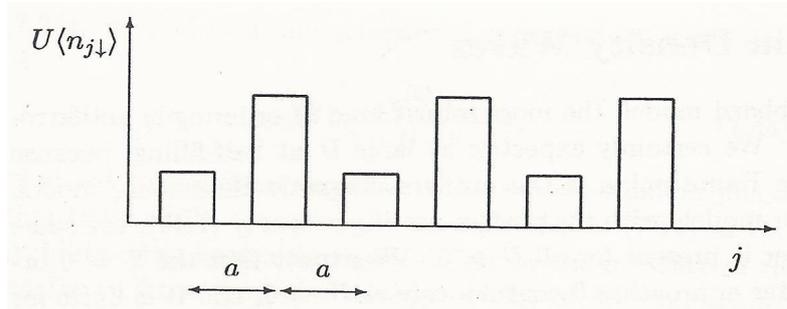
$$U \sum_{\sigma,j} \hat{n}_{j,\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma} \quad (2.11)$$

e após ser tratado por campo médio se torna:

$$U \sum_{\sigma,j} \hat{n}_{j,\sigma} \langle \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle - \sum_j \langle \hat{n}_{j,\downarrow} \rangle \langle \hat{n}_{j,\uparrow} \rangle. \quad (2.12)$$

O potencial percebido por um elétron com spin \uparrow será a superposição do potencial da rede mais o campo médio $U \langle n_{j\downarrow} \rangle$ associado aos elétrons com spin \downarrow . Uma ilustração do campo médio devido aos elétrons com spin \downarrow em função do sítio j para uma rede

Figura 2.8 – Ilustração do campo médio devido aos elétrons com spin \downarrow em função do sítio j .



Fonte: (FAZEKAS, 1999).

unidimensional é mostrado na figura 2.8. Nota-se que a periodicidade da rede magnética é $2a$, ou seja, duas vezes a constante de rede do “cristal”. O potencial periódico da rede cristalina com constante de rede a dá origem à banda *tight-binding* $\epsilon(\vec{k})$. O vetor da rede cristalina \vec{R} e o vetor correspondente da rede recíproca \vec{G} obedecem à seguinte relação (PUREUR, 2001):

$$\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi n, \quad (2.13)$$

onde n deve ser um inteiro. Para $n = 1$, em uma rede unidimensional tem-se:

$$G = \frac{2\pi}{a}. \quad (2.14)$$

Assim, para a rede magnética de constante de rede $2a$

$$\frac{2\pi}{2a} = G. \quad (2.15)$$

Com isso, a primeira zona de Brillouin é dividida pela metade. Logo, parte dos estados da banda original $\epsilon(\vec{k})$ ficarão fora da primeira zona de Brillouin da rede magnética. Para cada vetor \vec{k} dentro da nova primeira zona de Brillouin (NPZB) existe outro vetor \vec{k}' fora da NPZB. Para trazer esses estados para dentro da NPZB deve-se ter $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$. Assim, o número de bandas também é multiplicado por 2, para cada banda $\epsilon(\vec{k})$ existe outra banda $\epsilon(\vec{k} + \vec{G})$ que considera os estados que ficaram de fora da NPZB. Para o modelo de Hubbard tratado por campo médio, e considerando a definição 2.9, os autovalores de energia são dados por (FAZEKAS, 1999):

$$\omega^\pm = \frac{Un}{2} \pm \sqrt{(\epsilon(\vec{k}))^2 + \Delta^2} \quad (2.16)$$

onde considerou-se que a relação

$$\epsilon(\vec{k} + \vec{G}) = -\epsilon(\vec{k}) \quad (2.17)$$

é obedecida e

$$\Delta = Um \quad (2.18)$$

é um gap de energia.

As bandas ω^+ e ω^- comportam-se como duas bandas hibridizadas com um gap $\Delta = Um$ entre elas onde m é o parâmetro de ordem. Quando $m \neq 0$, o sistema encontra-se na fase AF.

2.2.0.1 Susceptibilidade Generalizada

A polarização linear do momento magnético em um sítio i da rede cristalina é dada por:

$$\langle m_i \rangle = \sum_j \chi_{ij} h_j, \quad (2.19)$$

onde h_j é um campo magnético externo aplicado que depende dos sítios j e χ_{ij} é a susceptibilidade estática não-local. A transformada de Fourier no espaço é dada por:

$$\chi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \chi(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)}, \quad (2.20)$$

onde

$$\chi(\vec{q}) = \frac{\chi_0(\vec{q})}{1 - \frac{1}{2}U\chi_0(\vec{q})}, \quad (2.21)$$

com $\chi_0(\vec{q})$ sendo a susceptibilidade estática para $U = 0$ (KAKEHASHI, 2012).

2.2.0.2 Critério de Stoner

Na expressão 2.21, quando $\frac{1}{2}U\chi_0(\vec{q}) \rightarrow 1$, a $\chi(\vec{q})$ diverge indicando que a fase paramagnética se torna instável em relação à fase AF. A fase AF ocorre para

$$\chi_0(\vec{Q}) > \frac{2}{U}, \quad (2.22)$$

onde \vec{Q} é chamado de vetor de *nesting*.

A susceptibilidade não interagente é dada por (KAKEHASHI, 2012):

$$\chi_0(\vec{q}) = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon(\vec{k} + \vec{q})) - f(\epsilon(\vec{k}))}{\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k} + \vec{q})}, \quad (2.23)$$

onde $f(x)$ é a função de Fermi. A análise da expressão para $\chi_0(\vec{q})$ mostra que $\chi_0(\vec{Q})$ diverge quando $\epsilon(\vec{k}) \rightarrow \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})$ já que o denominador $[\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})] \rightarrow 0$. Isso ocorre para um \vec{Q} específico chamado de vetor de *nesting*.

Neste trabalho, as divergências das susceptibilidades serão utilizadas para verificar as estabilidades (critério de Stoner) das fases HO e AF.

3 METODOLOGIA

3.1 MODELO

O modelo de Anderson (ANDERSON, 1961) foi proposto em 1961 por P. W. Anderson com o objetivo de descrever a formação de momentos magnéticos localizados em metais. Esse modelo considera uma impureza magnética localizada em um metal não-magnético. O metal não-magnético é representado por uma banda de condução e a impureza é representada por um nível localizado de um orbital f . Há hibridização entre a banda de condução e a impureza. Em caso de dupla ocupação, existe uma repulsão Coulombiana entre os elétrons de spins opostos (ANDERSON, 1961; FERREIRA, 2000).

O Hamiltoniano do modelo é dado por:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + E_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow} + \sum_{i\sigma} (V_i f_{\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + V_i^* c_{i\sigma}^\dagger f_{\sigma}) \quad (3.1)$$

onde o primeiro termo descreve os elétrons de condução na aproximação *tight-binding*. O operador de criação(aniquilação) $c_{i\sigma}^\dagger(c_{i\sigma})$ cria(aniquila) um elétron no sítio i com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$. A quantidade t é a amplitude do *hopping* de um elétron do sítio i para o sítio j e vice-versa. O segundo e o terceiro representam a impureza, ou seja, descrevem um nível localizado, relativo a um orbital do tipo f , em que há uma energia de ocupação E_f e uma repulsão Coulombiana U interna. Por fim, o último termo representa uma hibridização V entre os elétrons de condução e os elétrons do orbital f .

Quando a impureza apresenta uma valência fixa inteira e um momento magnético diferente de zero, tem-se o caso limite do modelo de Anderson, o modelo de Kondo, o qual foi proposto pelo físico japonês J. Kondo para descrever o fenômeno conhecido como efeito Kondo (FERREIRA, 2000). Esse fenômeno ocorre em um regime de baixas temperaturas, quando os elétrons do metal não-magnético blindam o spin da impureza, anulando seu caráter magnético.

O modelo de Anderson, assim como o modelo de Kondo, é considerado adequado para descrever as propriedades físicas de compostos baseados em actinídeos ou lantanídeos intermetálicos, sistemas que apresentam fortes correlações (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2013; FERREIRA, 2000). Contudo, a descrição apropriada da estrutura eletrônica de compostos a base de urânio parece ser um grande desafio (COQBLIN et al., 2009), uma vez que os elétrons f do urânio apresentam comportamento dual, ora localizados, ora itinerantes (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2013; COQBLIN

et al., 2009).

Na tentativa de melhor descrever os compostos de urânio, cujos elétrons f são menos localizados ou itinerantes, foi sugerido o modelo de rede sub-blindada de Anderson, o qual considera a possibilidade da formação de uma banda- f (COQBLIN et al., 2009).

3.1.1 Modelo de rede sub-blindada de Anderson

O modelo considerado neste trabalho é chamado *Underscreened Anderson Lattice* (UAL), ou modelo de rede sub-blindada de Anderson, e é uma generalização (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012) do modelo de rede sub-blindada de Kondo (UKL).

O modelo UKL foi proposto para descrever sistemas onde há a coexistência entre ordem ferromagnética e efeito Kondo, uma vez que o modelo original de Kondo não é capaz de o fazer (COQBLIN et al., 2009). Contudo, esse modelo falha em descrever alguns compostos de urânio nos quais os elétrons f são menos localizados. Para estudar esses casos, Coqblin et al. sugeriram o modelo UAL, que considera explicitamente a possibilidade de deslocalização dos elétrons f (COQBLIN et al., 2009).

O Hamiltoniano do modelo UAL descreve (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012) duas bandas f degeneradas, hibridizadas com uma banda de condução d :

$$\hat{H} = \hat{H}_f + \hat{H}_d + \hat{H}_{fd}. \quad (3.2)$$

O termo \hat{H}_f descreve os elétrons localizados f e é dado por

$$\begin{aligned} \hat{H}_f = & \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} E_f^\chi(\vec{k}) n_{f, \vec{k}, \sigma}^\chi + \frac{U}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma', \chi, \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma'}^{\chi'} f_{\vec{k}, \sigma}^\chi \\ & + \frac{J}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma', \chi, \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma'}^\chi f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi'}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde $E_f^\chi(\vec{k})$ representa a χ -ésima banda $5f$ do composto. Os índices $\chi = \alpha, \beta$ e $\chi' = \alpha, \beta$ representam dois orbitais f degenerados. O segundo e o terceiro termo descrevem a interação entre os elétrons $5f$ do mesmo orbital f . U é um potencial Coulombiano, J é a interação de troca inter-orbital (ambos têm valores positivos) e N é o número de sítios do sistema. O operador de criação(destruição) $f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \chi} (f_{\vec{k}, \sigma}^\chi)$ cria(destrói) um elétron f no orbital χ com vetor de onda \vec{k} e spin σ , sendo $\sigma = \uparrow, \downarrow$. O termo da interação de troca é necessário para tornar o modelo invariante frente rotação de spins. Essa invariância é esperada ser quebrada apenas por efeito combinado de um acoplamento spin-orbital e uma anisotropia

espacial da rede (RISEBOROUGH; MAGALHAES; CALEGARI, 2015).

Os elétrons de condução são descritos pelo termo

$$\hat{H}_d = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^\dagger d_{\vec{k}, \sigma}, \quad (3.4)$$

onde $\epsilon(\vec{k})$ é a relação de dispersão e $d_{\vec{k}, \sigma}^\dagger$ ($d_{\vec{k}, \sigma}$) é operador de criação (destruição) para os elétrons de condução.

Por fim, o terceiro termo descreve a hibridização entre os elétrons da banda de condução e os elétrons f e é escrito como

$$\hat{H}_{fd} = \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} (V_\chi(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^\dagger d_{\vec{k}, \sigma} + V_\chi^*(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \sigma}^\chi), \quad (3.5)$$

onde V representa a hibridização.

Em 2012, Riseborough, Coqblin e Magalhaes propuseram uma teoria baseada nesse modelo para descrever a ordem oculta (HO) no URu_2Si_2 (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012).

No presente trabalho, essa teoria é abordada com o intuito de descrever a competição entre a HO e a fase antiferromagnética (AF).

3.2 TÉCNICA DAS FUNÇÕES DE GREEN

A técnica das funções de Green se originou em teoria de campos (ABRIKOSOV; GORKOV; DZYALOSHINSKI, 1975) com o trabalho do matemático e físico inglês George Green.

Essa técnica é um método bastante útil e adequado no estudo de sistemas de partículas interagentes (ZUBAREV, 1960) e permite calcular funções de correlação e observáveis físicos, sendo muito utilizada em várias áreas da física, principalmente em física da matéria condensada.

Nesta seção, a técnica das funções de Green é apresentada dentro do formalismo de Zubarev (ZUBAREV, 1960). Primeiro, são introduzidas as funções de Green retardada e avançada e suas respectivas equações de movimento. Depois, as funções de correlação e as representações espectrais. No próximo capítulo, a técnica é aplicada ao modelo de rede sub-blindada de Anderson (*Underscreened Anderson Lattice*) em conjunto com a aproximação de campo médio.

3.2.1 Funções de Green Retardada e Avançada

Na física teórica existem diversas classes de funções de Green. O que as diferencia é a forma de tomar a média sobre os produtos de operadores (FREIRE, 2014). Quando a média é tomada no estado fundamental do sistema, tem-se as funções de Green de teoria de campos. Já se a média é tomada sobre um ensemble estatístico, tem-se as funções de Green da mecânica estatística ou da termodinâmica.

Neste trabalho, são utilizadas as funções de Green da mecânica estatística, as quais dependem do tempo e da temperatura. A média é tomada sobre o ensemble grande canônico. A escolha desse ensemble estatístico faz-se conveniente, pois permite variar o número de partículas do sistema.

Tanto na mecânica estatística, como na teoria de campos, pode-se considerar diferentes tipos de funções de Green. Entre elas as funções de Green avançada e retardada, as quais são discutidas nesta seção.

As funções de Green retardada $G_r(t, t')$ e avançada $G_a(t, t')$ dependem de dois tempos, t e t' , e são definidas como:

$$G_r(t, t') = \ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_r = -i\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle \quad (3.6)$$

e

$$G_a(t, t') = \ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_a = i\theta(t' - t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle, \quad (3.7)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica uma média sobre o ensemble grande canônico e $\ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_{r,a}$ é uma notação para as funções de Green.

A função $\theta(\tau)$ é a função degrau e satisfaz as condições:

$$\theta(\tau) = \begin{cases} 1 & \text{se } \tau > 0 \\ 0 & \text{se } \tau < 0, \end{cases} \quad (3.8)$$

onde $\tau = t - t'$.

Devido à função degrau, as funções de Green $G_r(t, t')$ e $G_a(t, t')$ não são definidas para $t = t'$. Por outro lado, quando $t \neq t'$ tem-se dois casos:

$$G_r(t, t') = 0 \quad \text{se } t < t', \quad (3.9)$$

$$G_a(t, t') = 0 \quad \text{se } t > t'. \quad (3.10)$$

A função de Green retardada é definida somente para $t > t'$. Representa uma informação que foi emitida no tempo t' sendo recebida no instante t , posterior a t' . A função de Green avançada por sua vez, é definida apenas para $t < t'$ e representa uma informação que foi emitida num tempo t' e que é recebida no instante t , anterior a t' (FREIRE, 2014).

A quantidade $[\hat{A}, \hat{B}]$ que aparece nas equações 3.6 e 3.7 indica um comutador ou

anti-comutador:

$$[\hat{A}, \hat{B}]_\eta = \hat{A}\hat{B} - \eta\hat{B}\hat{A} \quad (3.11)$$

com $\eta = \pm 1$. O sinal de η depende se \hat{A} e \hat{B} são operadores que obedecem à estatística de Fermi-Dirac ($\eta = -1$) ou de Bose-Einstein ($\eta = +1$). A escolha desses operadores é determinada pelas condições do problema.

Os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t')$ podem ser expressos na representação de Heisenberg da seguinte forma (em um sistema com unidades de $\hbar = 1$):

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

e

$$\hat{B}(t') = e^{i\hat{\mathcal{H}}t'} \hat{A} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}. \quad (3.13)$$

O Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ é descrito como:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu\hat{N} \quad (3.14)$$

onde \hat{H} é um operador Hamiltoniano independente do tempo, \hat{N} é o operador número de partículas e μ é o potencial químico.

O potencial químico é definido como a variação na energia de um sistema físico que ocorre devido à variação no número total de partículas N (CALLEN, 1985), ou como

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_{S,V}. \quad (3.15)$$

Ao reescrever as equações 3.6 e 3.7 em conjunto com a equação 3.11 obtém-se as funções de Green na seguinte forma:

$$G_r(t, t') = -i\theta(t - t') \{ \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle \} \quad (3.16)$$

e

$$G_a(t, t') = i\theta(t' - t) \{ \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle \}. \quad (3.17)$$

No equilíbrio termodinâmico, essas funções de Green dependem de t e t' somente através da diferença $(t - t')$. Para demonstrar tal afirmação considera-se um operador \hat{O} qualquer. A média de uma variável física representada pelo operador \hat{O} é definida pela seguinte expressão:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr}\{\hat{O}e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\}}{Z}, \quad (3.18)$$

sendo $Z = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\}$ a função de partição para o ensemble grande canônico, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, T a temperatura e k_B a constante de Boltzmann (SALINAS, 2005).

Da mesma forma, $\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle$ é definido como:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t'} \hat{B} e^{-i\hat{H}t'} e^{-\beta\hat{H}} \}. \quad (3.19)$$

Dentro da operação traço pode-se trocar ciclicamente os operadores:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ e^{i\hat{H}(t-t')} \hat{A} e^{-i\hat{H}(t-t')} \hat{B} e^{-\beta\hat{H}} \}. \quad (3.20)$$

Logo,

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ \hat{A}(t-t') \hat{B} e^{-\beta\hat{H}} \}. \quad (3.21)$$

Consequentemente, as funções Green podem ser escritas como:

$$\ll \hat{A}(t)\hat{B}(t') \gg = \ll \hat{A}(t-t'); \hat{B}(0) \gg, \quad (3.22)$$

ou ainda,

$$G_r(t, t') = G_r(t-t') \quad (3.23)$$

$$G_a(t, t') = G_a(t-t'), \quad (3.24)$$

ficando claro que as mesmas dependem de t e t' apenas através da diferença $(t-t')$. Esse resultado torna possível fazer a transformada de Fourier em $G(t-t')$ e obter $G(E)$.

3.2.2 Equações de Movimento

Dentro da representação de Heisenberg os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t)$ satisfazem equações de movimento da forma (ZUBAREV, 1960):

$$i \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \hat{A}(t)\hat{H} - \hat{H}\hat{A}(t), \quad (3.25)$$

com $\hbar = 1$. Ou ainda,

$$i \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}]. \quad (3.26)$$

Fazendo uso da equação 3.26 pode-se derivar as funções de Green 3.6 e 3.7 em relação ao tempo t e chegar a seguinte equação de movimento :

$$i \frac{d}{dt} G_{r,a} = i \frac{d}{dt} \ll \hat{A}(t), \hat{B}(t') \gg = \frac{d}{dt} \theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll [\hat{A}(t), \hat{H}]; \hat{B}(t') \gg \quad (3.27)$$

que é válida para ambas as funções de Green, desde que $\frac{d\theta(-t)}{dt} = -\frac{d\theta(t)}{dt}$ (ZUBAREV, 1960).

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

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t') dt' \quad (3.28)$$

é possível reescrever a equação 3.27 na forma:

$$i \frac{d}{dt} G_{r,a} = i \frac{d}{dt} \ll \hat{A}(t), \hat{B}(t') \gg = \delta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}]; \hat{B}(t') \gg . \quad (3.29)$$

Nota-se que a equação de movimento da função de Green $G_{r,a}$ de dois operadores depende de uma nova função de Green de pelo menos três operadores (considerando que existe o termo interação em $\hat{\mathcal{H}}$), ou seja, de uma função de Green de ordem superior. Se tal função de Green for diferenciada para obter sua respectiva equação de movimento, surgirá uma outra função de Green, de ordem maior ainda. Se esse processo for repetido infinitas vezes, será gerado um conjunto infinito de equações acopladas. Dessa forma, é necessário fazer algum tipo de aproximação para tratar as equações de movimento e reduzi-las a um conjunto finito.

Neste trabalho, utiliza-se a aproximação de campo médio, discutida na seção 3.3, para desacoplar as equações de movimento. A aproximação de campo médio pode ser feita tanto na equação de movimento, como no modelo. Optou-se por tratar o modelo.

3.2.3 Funções de correlação

A média no ensemble grande canônico do produto de operadores na representação de Heisenberg dada por

$$F_{BA}(t, t') = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle \quad (3.30)$$

ou

$$F_{AB}(t, t') = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle \quad (3.31)$$

é denominada função de correlação. No equilíbrio termodinâmico, F_{AB} e F_{BA} dependem de t e t' somente através de $\tau = t - t'$ (assim como as funções de Green). Porém, as funções de correlação não contém o fator $\theta(\tau)$ de descontinuidade, sendo definidas quando $t = t'$, o que resulta em:

$$F_{BA}(t - t') = F_{BA}(0) = \langle \hat{B}(t) \hat{A}(t) \rangle = \langle \hat{B}(0) \hat{A}(0) \rangle \quad (3.32)$$

e

$$F_{AB}(t - t') = F_{AB}(0) = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t) \rangle = \langle \hat{A}(0) \hat{B}(0) \rangle. \quad (3.33)$$

Através dessas médias, pode-se obter os valores médios de várias quantidades físicas

importantes, como o número médio de ocupação $\langle \hat{N} \rangle$, a susceptibilidade magnética χ e o valor médio de energia total $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$ do sistema.

3.2.4 Representação Espectral

A representação espectral é uma ferramenta matemática importante para a análise de propriedades matemáticas das funções de correlação e das funções de Green.

Para as funções de correlação, a representação espectral é dada por

$$F_{BA}(\tau) = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (3.34)$$

e

$$F_{AB}(\tau) = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\omega\beta} e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (3.35)$$

onde $J(\omega)$ é a intensidade espectral, a qual pode ser obtida através das funções de Green reescritas na representação espectral. O que é feito a seguir.

Considerando que $G_r(E)$ é a componente de Fourier de $G_r(\tau)$ tem-se:

$$G_r(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E) e^{-iE\tau} dE \quad (3.36)$$

e

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau) e^{iE\tau} d\tau. \quad (3.37)$$

Substituindo a equação 3.16 na equação 3.37 chega-se a:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE\tau} \theta(\tau) \{ \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle \}. \quad (3.38)$$

Pode-se reescrever a equação 3.38 usando a representação espectral das funções de correlação $F_{BA}(\tau)$ e $F_{AB}(\tau)$:

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

A função descontínua $\theta(t)$ presente na equação 3.39 pode ser escrita na forma de integral:

$$\theta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\varepsilon} dx \quad (3.40)$$

onde x é uma variável complexa e $\varepsilon > 0$ ($\varepsilon \rightarrow 0$). A integral definida nessa equação (3.40) é executada sobre o contorno mostrado na figura 2.1. O integrando tem um polo no semi-plano inferior onde $x = -i\varepsilon$. Quando $\tau > 0$ o contorno deve ser fechado pelo semi-plano

Figura 3.1 – A figura abaixo mostra os polos no eixo imaginário e os contornos de integração por $t - t' > 0$ e $t - t' < 0$.

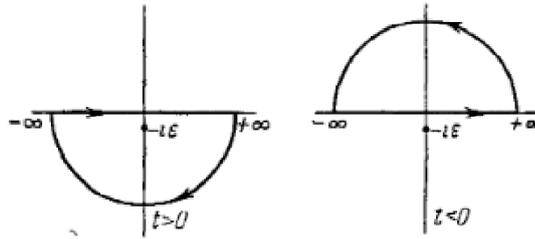


FIG. 1

Fonte: (ZUBAREV, 1960).

inferior, encerrando a singularidade em $-i\varepsilon$, nesse caso a integral da equação 3.40 é igual a um. Já quando $\tau < 0$, o contorno deve ser fechado pelo semi-plano superior, resultando em $\theta(\tau) = 0$.

Definindo a integral em t como:

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)t} \theta(t) \quad (3.41)$$

e usando a definição de $\theta(t)$ dada na equação 3.40 em conjunto com a definição da função delta $\delta(x)$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} dt, \quad (3.42)$$

obtém-se o seguinte resultado para a integral em t :

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\delta(E - \omega - x)}{x + i\varepsilon}. \quad (3.43)$$

Depois, executando a integral em x na 3.43 tem-se:

$$I = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon}. \quad (3.44)$$

Utilizando essa expressão na equação 3.39 pode-se reescrever $G_r(E)$ na representação espectral:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\omega\beta} - \eta) \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon}. \quad (3.45)$$

Similarmente, para $G_a(E)$, a componente de Fourier de $G_a(\tau)$, tem-se:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\omega\beta} - \eta) \frac{1}{E - \omega - i\varepsilon}. \quad (3.46)$$

As equações 3.45 e 3.46 podem ser reescritas na seguinte forma:

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\varepsilon} \quad (3.47)$$

onde o índice r corresponde ao sinal $+$ e o índice a ao sinal $-$.

Assumindo E como uma variável complexa, ou seja, $E = E \pm i\varepsilon$ obtém-se:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} = \begin{cases} G_r(E) & \text{Im}E > 0 \\ G_a(E) & \text{Im}E < 0. \end{cases} \quad (3.48)$$

Dessa forma a função $G_{r,a}$ pode ser considerada como sendo uma função analítica no plano complexo com uma singularidade no eixo real. As componentes de Fourier $G_r(E)$ e $G_a(E)$ podem ser consideradas como componentes de uma mesma função da variável complexa E .

Tendo a expressão para a função $G(E)$ pode-se obter a intensidade espectral $J(\omega)$ por meio da seguinte relação:

$$G_r(\omega + i\varepsilon) - G_a(\omega - i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E\beta} - \eta) J(E) \left[\frac{1}{\omega - E + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - E - i\varepsilon} \right] dE. \quad (3.49)$$

Pelo uso da representação

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right] \quad (3.50)$$

para a função δ , e considerando que $x = \omega - E$, tem-se

$$2\pi i \delta(\omega - E) = - \left[\frac{1}{\omega - E + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - E - i\varepsilon} \right]. \quad (3.51)$$

Combinando a expressão da equação 3.51 com a equação 3.49, pode-se escrever:

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E\beta} - \eta) J(E) [-i\delta(\omega - E)] dE. \quad (3.52)$$

Por fim, integrando a relação 3.52 em E , obtém-se o seguinte resultado:

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = -i(e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega), \quad (3.53)$$

ou ainda, isolando $J(\omega)$, tem-se

$$J(\omega) = i \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta}, \quad (3.54)$$

onde ω é uma variável real.

Com a equação 3.54 é possível escrever as funções de correlação em termos das componentes de Fourier das funções de Green. Dessa forma,

$$F_{BA}(\tau) = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} e^{-i\omega\tau} d\omega. \quad (3.55)$$

e

$$F_{AB}(\tau) = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} e^{\omega\beta} e^{-i\omega\tau} d\omega, \quad (3.56)$$

onde

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\omega\beta} - \eta}, \quad (3.57)$$

considerando o caso em que $\eta = -1$, é a distribuição de Fermi-Dirac.

Tendo o modelo, pode-se usar esse formalismo para obter as funções de Green, as quais podem ser expressas em termos de frações parciais:

$$G = \sum_i \frac{Z_i}{\omega - E_i}, \quad (3.58)$$

onde Z_i são os pesos espectrais e E_i são as bandas de energia. Dessa forma, a integral em ω que aparece nas equações 3.55 e 3.56 pode ser feita analiticamente utilizando a seguinte identidade

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{E - \omega} \mp i\pi\delta(E - \omega), \quad (3.59)$$

onde P denota o valor principal da integral.

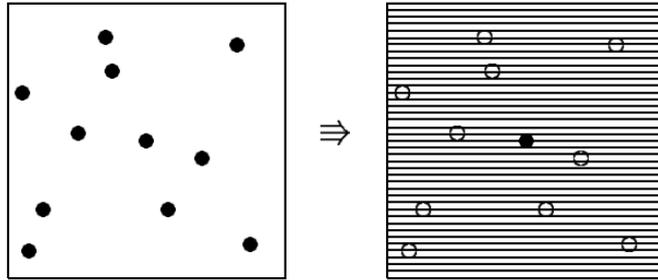
3.3 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Dentro da física da matéria condensada são frequentes problemas envolvendo partículas interagentes, os quais podem ser bastantes complexos.

Um exemplo é o caso de um sistema de partículas carregadas interagindo por forças de Coulomb, cujo movimento de uma partícula depende do movimento de todas as outras com as quais ela interage. Ou seja, o movimento é correlacionado (BRUUS; FLENSBERG, 2002).

Embora esse tipo de problema seja complicado, existem casos onde um tratamento mais simples, desconsiderando algumas correlações, pode fornecer uma boa descrição do sistema. Nesses casos, pode-se por exemplo, considerar uma média das correlações de todas as partículas agindo sob uma delas, como um campo médio ou uma densidade média. Dessa forma o problema de partículas interagentes passa a ser o problema de uma partícula sob o efeito de um campo médio, que, a princípio, pode ser solucionado (BRUUS; FLENSBERG, 2002). Tal ideia é ilustrada na figura 3.2.

Figura 3.2 – A figura abaixo ilustra a ideia de campo médio. À esquerda, tem-se um sistema físico real no qual o movimento das N partículas pretas é correlacionado devido a interação entre elas. À direita, o potencial de interação sentido pela partícula preta é substituído por uma interação média devido à densidade média das partículas brancas.



Fonte: (BRUUS; FLENSBERG, 2002).

Essa teoria é conhecida como teoria de campo médio e tem sido utilizada com sucesso para descrever vários fenômenos físicos (BRUUS; FLENSBERG, 2002).

Nesta seção, com o intuito de introduzir a estrutura matemática da teoria de campo médio, a mesma é aplicada ao termo de interação do modelo de Hubbard \hat{H}_{int} :

$$\hat{H}_{int} = U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}. \quad (3.60)$$

onde U é um potencial Coulombiano e $\hat{n}_{j\sigma}$ é o operador número.

Primeiro, reescreve-se o termo de interação como (FAZEKAS, 1999):

$$\hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} = (\hat{n}_{j\uparrow} - \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle) (\hat{n}_{j\downarrow} - \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle) \quad (3.61)$$

ou

$$\begin{aligned} &= (\hat{n}_{j\uparrow} - \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle) \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle + (\hat{n}_{j\downarrow} - \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle) \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle \\ &+ \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle + (\hat{n}_{j\uparrow} - \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle) (\hat{n}_{j\downarrow} - \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle). \end{aligned} \quad (3.62)$$

A ideia básica da teoria de campo médio é considerar que quantidades físicas apresentem apenas pequenas flutuações em torno de seu valor médio (FAZEKAS, 1999). Ou seja, sendo

$$\Delta \hat{n}_{j,\sigma} = (\hat{n}_{j,\sigma} - \langle \hat{n}_{j,\sigma} \rangle) \quad (3.63)$$

a flutuação em torno do valor médio de $\hat{n}_{j,\sigma}$, considera-se que $\Delta \hat{n}_{j,\sigma}$ é uma quantidade muito pequena (FAZEKAS, 1999) e que $\Delta \hat{n}_{j,\uparrow} \Delta \hat{n}_{j,\downarrow}$ é menor ainda, assim pode-se desprezar o último termo da equação 3.62. Dessa forma tem-se:

$$\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow} = (\hat{n}_{j\uparrow} - \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle) \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle + (\hat{n}_{j\downarrow} - \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle) \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle \quad (3.64)$$

ou

$$n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} = n_{j\uparrow} \langle n_{j\downarrow} \rangle + n_{j\downarrow} \langle n_{j\uparrow} \rangle - \langle n_{j\downarrow} \rangle \langle n_{j\uparrow} \rangle . \quad (3.65)$$

que é o resultado da aproximação de campo médio aplicada ao termo de interação do modelo de Hubbard.

Assim, o problema de interação entre duas partículas se torna um problema mais simples: o problema de uma partícula sob a ação de um "campo externo".

No próximo capítulo essa aproximação é utilizada para tratar o modelo UAL abordado neste trabalho.

3.4 TRANSIÇÃO DE FASE

Quando um sistema sofre uma quebra de simetria diz-se que ocorreu uma transição de fase. A quantidade física que descreve essa transição de fase é chamada de parâmetro de ordem, o qual deve ser nulo no estado mais simétrico (estado desordenado) e finito no estado menos simétrico (estado ordenado) (FAZEKAS, 1999).

As fases de um sistema podem ser observadas em um diagrama de fases e são delimitadas por linhas de coexistência: em cima dessas linhas observa-se a coexistência de duas fases. O sistema será estável em uma região do diagrama de fases se a energia livre de Helmholtz (F) for mínima (REICHL, 1998).

É possível estudar transições de fase utilizando a mecânica estatística. Dessa forma, as informações estatísticas de um sistema podem ser obtidas através da função de partição (Z). A função de partição se relaciona com F através da seguinte expressão (SALINAS, 2005):

$$F = -k_B T \ln(Z), \quad (3.66)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Por conseguinte, calculando F , pode-se obter todas as propriedades termodinâmicas de um sistema, desde que sejam usadas as derivadas apropriadas.

Pela transformada de Legendre, a F é dada por:

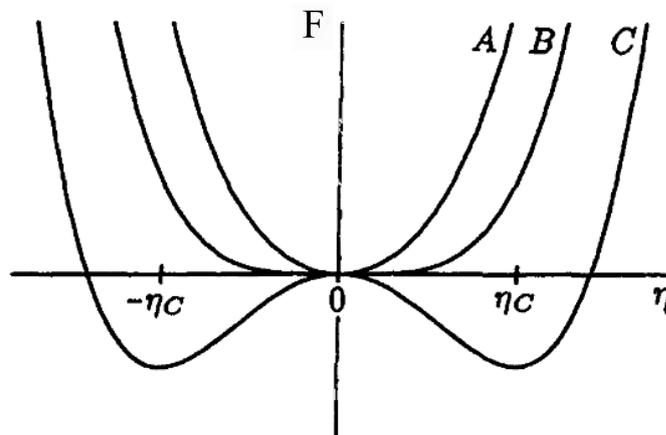
$$F = E - TS, \quad (3.67)$$

onde E é a energia interna e S é a entropia do sistema.

Uma forma de identificar a natureza de uma transição de fase é avaliar o comportamento da F em função do parâmetro de ordem. Por exemplo, considerando que η é o parâmetro de ordem de uma fase ferromagnética (FM), que ocorre abaixo de uma temperatura crítica T_C , e que as curvas A, B, e C, mostradas na figura 3.3, foram obtidas para três temperaturas diferentes: A corresponde a $T > T_C$, B corresponde a $T = T_C$ e C corresponde a $T < T_C$. Em C, o sistema se encontra na fase FM: a F apresenta uma solução não-trivial (valor de parâmetro de ordem) associada ao mínimo global, além da solução trivial, que é um máximo. Conforme a temperatura aumenta, a solução associada ao mínimo global na curva C, se aproxima continuamente da solução trivial. Na curva B, tem-se $T = T_C$ e percebe-se que a solução não-nula tem mesmo valor de F que a solução trivial, o que significa que o sistema se encontra sobre a linha de transição. Para $T > T_C$, a F , representada pela curva A, apresenta apenas um mínimo, associado à solução trivial, ou seja, o parâmetro de ordem é nulo e o sistema está na fase PM.

O comportamento da energia livre de Helmholtz observado na figura 3.3 é típico de transições de segunda ordem: o parâmetro de ordem vai continuamente a zero passando para o estado PM.

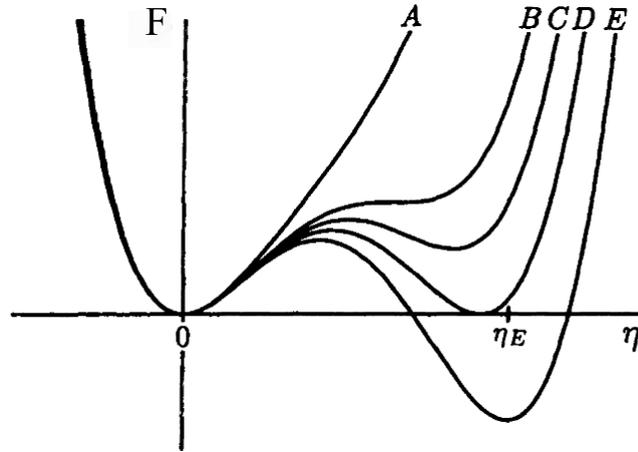
Figura 3.3 – Energia livre de Helmholtz F em função do parâmetro de ordem η , para três valores diferentes de temperatura.



Fonte: (REICHL, 1998).

No caso de transições de primeira ordem, a solução (valor de parâmetro de ordem) associada ao mínimo global da F muda abruptamente de uma solução não-trivial para uma solução trivial, como pode-se observar na figura 3.4 pelo comportamento das curvas E, D e C. Em E, o sistema se encontra na fase FM e a solução trivial é um mínimo local, ou seja, não-estável. Em D, a solução trivial e a solução não-trivial correspondem ao mesmo valor de F , logo o sistema se encontra sobre a linha de transição. Já em C, ambas as soluções continuam existindo, porém a solução trivial passa a ser mais estável que a solução não-trivial, se tornando um mínimo global. Essa mudança abrupta na solução associada ao

Figura 3.4 – Energia livre de Helmholtz em função do parâmetro de ordem η , para diversos valores de temperatura. O sistema se encontra sob a ação de um campo magnético.



Fonte: (REICHL, 1998).

estado de menor energia gera uma descontinuidade no parâmetro de ordem, indicando que o sistema passou por uma transição de primeira ordem FM-PM. Em B, novamente observa-se a solução não-nula e a solução trivial, estando essa última associada ao mínimo global. Em A, observa-se apenas a solução trivial. É importante mencionar que nessa figura o sistema em questão se encontra sob a ação de um campo magnético, por isso a F não é simétrica como no caso da figura 3.3.

3.4.1 Ponto tri-crítico - Teoria de Landau

Landau fez uma série de considerações para aproximar a energia livre de Helmholtz de um sistema. Tal procedimento é composto de alguns passos essenciais. Define-se o parâmetro de ordem da fase. Assume-se que a energia livre é determinada pela minimização da energia funcional

$$\tilde{F}(T, \eta) = F_0(T) + F_L(T, \eta), \quad (3.68)$$

onde F_0 é uma função analítica da temperatura e $F_L(T, \eta)$ contém toda a dependência no parâmetro de ordem η . A função de Landau, $F_L(T, \eta)$ é assumida como sendo uma função analítica do parâmetro de ordem que obedece as possíveis simetrias associadas ao parâmetro de ordem e é uma expansão polinomial:

$$F_L(T, \eta) = \frac{A}{2}\eta^2 + \frac{B}{4}\eta^4 + \frac{C}{6}\eta^6 + \dots \quad (3.69)$$

Nessa expansão não há o termo de primeira ordem em η , pois se houvesse isso garantiria um valor de η não nulo acima do ponto de transição (REICHL, 1998). O termo cúbico no

parâmetro de ordem também é desconsiderado, isso porque o parâmetro de ordem em questão neste trabalho é a magnetização. A magnetização é um vetor e sofre uma mudança de sinal sob reversão de tempo. Contudo, a energia livre deve ser invariante sob reversão de tempo, logo para garantir essa invariância é necessário desprezar o termo cúbico no parâmetro de ordem (REICHL, 1998). Também assume-se que toda a dependência não-trivial na temperatura está na ordem mais baixa da expansão de F_L . As constantes que aparecem na expansão também têm dependência com a temperatura, mas se essa dependência é fraca ela pode ser desprezada próximo da transição de fase. O que é consistente no caso de uma transição de segunda ordem e é uma aproximação no caso de uma transição de primeira ordem.

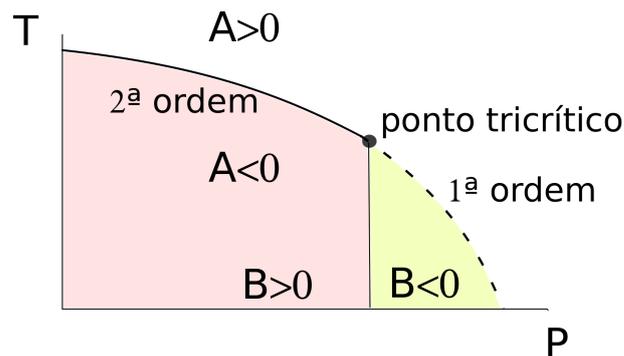
A teoria de Landau pode ser utilizada para definir a natureza de transições de fase e também para calcular um ponto tri-crítico que aparece em um diagrama de fases. O ponto tri-crítico é o ponto que separa uma linha de transições de segunda ordem de uma linha de transições de primeira ordem. Quando o sistema está em um ponto tri-crítico o coeficiente B da expressão 3.69 deve ser nulo.

Na equação 3.69 o coeficiente C é positivo e o coeficiente A se relaciona com a temperatura através da expressão (REICHL, 1998)

$$A = a(T - T_C), \quad (3.70)$$

onde a é uma constante positiva.

Figura 3.5 – Esboço de um diagrama de fases $T \times P$ contendo uma linha de segunda ordem separada de uma linha de primeira ordem por um ponto tri-crítico.



Fonte: Autora.

A análise da expressão 3.69 mostra que se $B > 0$ as transições de fase serão de segunda ordem. Nesse caso, quando $A < 0$ o sistema encontra-se na fase mais ordenada que corresponde a $T < T_C$. Para $A = 0$, tem-se $T = T_C$ e as duas fases coexistem. No caso de $A > 0$, tem-se $T > T_C$ e o sistema encontra-se na fase menos ordenada. Por outro lado, no caso de $B < 0$, a ordem da transição de fase muda para primeira ordem. Os critérios para o coeficiente A continuam os mesmos que da transição de segunda ordem.

Sendo assim, o ponto tri-crítico, que marca a mudança na ordem da transição, pode ser determinado assumindo as seguintes condições:

$$A = 0 \quad (3.71)$$

$$B = 0. \quad (3.72)$$

A condição $B = 0$ indica o ponto onde a transição muda de ordem, enquanto que $A = 0$ indica o ponto onde a transição de fase ocorre.

A figura 3.5 mostra de forma genérica o sinal algébrico de A e B , sendo que $A=0$ e $B=0$ só ocorrem exatamente no ponto tri-crítico.

4 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O composto de URu_2Si_2 comporta-se como um férmion pesado e apresenta duas transições de fase em baixas temperaturas: a primeira, a $T_{SC} \approx 1,0$ K para uma fase supercondutora e a segunda a $T_{HO}=17,5$ K para uma fase conhecida como ordem oculta (HO). A fase HO recebeu essa denominação devido a grande dificuldade em identificar a natureza de seu parâmetro de ordem, permanecendo desde sua descoberta até os dias atuais como uma questão em aberto na física dos férmions pesados (HASSINGER et al., 2008; MYDOSH; OPPENEER, 2011; BAREILLE et al., 2014; CALEGARI; MAGALHAES; RISEBOROUGH, 2017).

Medidas de espalhamento inelástico de nêutrons mostram a existência de momentos magnéticos presentes na fase ordem oculta (HO) do URu_2Si_2 , o que poderia sugerir uma fase AF, porém os mesmos são muito pequenos ($10^{-2}\mu_B$) para explicar a grande perda de entropia que ocorre durante a transição da fase paramagnética (PM) para a HO (RAMIREZ et al., 1992; OKAZAKI et al., 2011). Alguns estudos também sugerem que os momentos magnéticos existentes na fase HO são puramente devido a impurezas nas amostras (NIKLOWITZ et al., 2010). Por outro lado, medidas a pressão finita mostram que acima de 0,5G Pa ocorre uma transição de fase de primeira ordem (NIKLOWITZ et al., 2010) da HO para uma fase antiferromagnética (AF) com momentos magnéticos bem desenvolvidos. Essa competição entre as fases HO e AF no composto URu_2Si_2 é descrita no diagrama experimental apresentado na figura 2.5.

Riseborough, Coqblin e Magalhaes propuseram uma teoria baseada no modelo de rede sub-blindada de Anderson (UAL) para descrever a HO no URu_2Si_2 . Uma maneira de avaliar essa teoria é verificar se a mesma consegue descrever a competição entre a fase HO e a fase AF que aparece no diagrama experimental da figura 2.5.

Nesse capítulo, são apresentadas as funções de Green calculadas para as fases HO e AF do modelo UAL introduzido no capítulo 3. Por meio das funções de Green pode-se obter quantidades físicas importantes para o estudo do modelo (ZUBAREV, 1960; NAZARENO, 1986), como os parâmetros de ordem, as bandas renormalizadas e o potencial químico, entre outras.

Este capítulo está dividido em quatro partes. Na primeira parte, apresentam-se as funções de Green para o problema completo (HO+AF): os parâmetros de ordem de ambas as fases são finitos. Contudo, devido a grande dificuldade analítica e numérica em trabalhar com ambos parâmetros não nulos, calcula-se as funções de Green para cada fase separadamente. Sendo assim, na segunda parte deste capítulo, o estudo é direcionado para a fase AF, uma vez que a mesma já é bem conhecida. Nesse caso, tem-se o parâmetro de ordem da fase HO nulo. Na terceira parte, são apresentadas as expressões necessárias para investigar a fase HO, considerando-se então os parâmetros de ordem da fase AF

como nulos. Por fim, apresenta-se as funções de Green e funções de correlação do estado PM. Nesse caso, os parâmetros da duas fases são nulos.

4.1 PARTE I - PROBLEMA COMPLETO (HO+AF)

4.1.1 A teoria

Riseborough, Coqblin e Magalhaes propuseram uma teoria baseada no modelo *Underscreened Anderson Lattice* (UAL) para descrever a HO no URu₂Si₂ (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012). Esse modelo é uma generalização do modelo *Underscreened Kondo Lattice* (UKL) que foi utilizado para descrever a competição entre efeito Kondo e ferromagnetismo observada em compostos de urânio e neptúnio (PERKINS et al., 2007).

No presente trabalho, investiga-se a competição entre as fases HO e AF do modelo UAL no âmbito da teoria proposta por Riseborough, Coqblin e Magalhaes.

O modelo UAL consiste de duas bandas f degeneradas, denominadas α e β , que hibridizam com uma banda de condução. Os elétrons $5f$ interagem por meio de interação de Coulomb U e de *exchange* J . O Hamiltoniano do modelo já foi introduzido na seção 3.1.1 e é dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_f + \hat{H}_d + \hat{H}_{fd} - \mu\hat{N}, \quad (4.1)$$

sendo

$$\hat{H}_f = \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} E_f^\chi(\vec{k}) n_{f, \vec{k}, \sigma}^\chi + \hat{H}_{int}, \quad (4.2)$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} = & \frac{U}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma', \chi, \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma'}^{\chi'} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} \\ & + \frac{J}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma', \chi, \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma'}^{\chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi'}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

O termo associado aos elétrons de condução é dado por:

$$\hat{H}_d = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^\dagger d_{\vec{k}, \sigma}, \quad (4.4)$$

sendo $\epsilon(\vec{k}) = -2t_d(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$ a relação de dispersão da banda d , t_d o *hopping* dos elétrons da banda d e a o parâmetro da rede cúbica.

O termo de hibridização é expresso por:

$$\hat{H}_{fd} = \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} (V_\chi(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \chi} d_{\vec{k}, \sigma} + V_\chi^*(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \sigma}^\chi). \quad (4.5)$$

Nota-se que há um quarto termo nesse Hamiltoniano (equação 4.1), relacionado ao potencial químico μ , o qual não está presente na versão do modelo introduzido no capítulo 3. A adição desse termo é uma forma de deixar claro que as funções Green são calculadas no ensemble grande canônico, o que permite a variação do número de partículas do sistema. Entretanto, durante os cálculos o potencial químico aparece explicitamente apenas na função de Fermi.

A inovação na teoria proposta por Riseborough, Coqblin e Magalhaes consiste na identificação de um parâmetro de ordem para a HO.

O parâmetro de ordem proposto é dado pelo valor médio do operador

$$\hat{z}_{\vec{q}, \sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^\alpha. \quad (4.6)$$

Esse operador fornece uma medida do acoplamento entre os dois tipos de banda f (relativas aos orbitais α e β) e, em baixas temperaturas, leva o sistema para uma fase que pode ser descrita como um tipo de *spin-density-wave* inter-orbital, na qual ocorre uma quebra de simetria sem a formação de momentos magnéticos (CALEGARI; MAGALHAES; RISEBOROUGH, 2017).

Na referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012) também foi introduzido o operador densidade de carga para os orbitais $5f$ dado por:

$$\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^\chi = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^\chi, \quad (4.7)$$

cujo valor médio é a função de correlação:

$$n_{\vec{q}, \sigma}^\chi = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^\chi \rangle. \quad (4.8)$$

Levando em consideração esses dois operadores e o objetivo do estudo, torna-se conve-

niente reescrever o termo de interação \hat{H}_{int} como:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} &= \frac{U - J}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma}^{\chi'} \\ &\quad + \frac{U}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi, \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\chi'} \\ &\quad + \frac{J}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\chi}.\end{aligned}\quad (4.9)$$

A seguir, o termo de interação \hat{H}_{int} será tratado utilizando a aproximação de campo médio apresentada no capítulo anterior (ver seção 3.3).

4.1.2 Aproximação de Campo Médio

Nesta seção, o termo de interação, \hat{H}_{int} (equação 4.9), do modelo UAL é tratado utilizando a aproximação de campo médio, que foi discutida no capítulo 3.

Primeiro, reescreve-se \hat{H}_{int} em termos dos operadores $\hat{z}_{\vec{q}, \sigma}$ e $\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}$ introduzidos na seção anterior:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} &= \frac{N(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma}^{\chi'} \\ &\quad + \frac{NU}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi, \chi'} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\chi'} \\ &\quad + \frac{NJ}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \chi'} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\chi},\end{aligned}\quad (4.10)$$

lembrando que \vec{k} é o vetor de onda, $\chi = \alpha, \beta$, $\chi' = \alpha, \beta$ e N é o número de sítios da rede.

O primeiro termo de \hat{H}_{int} pode ser escrito tanto em termos de $\hat{z}_{\vec{q}, \sigma}$, quanto em termos de $\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}$. Dessa forma, antes de fazer a aproximação de campo médio, opta-se por reescrevê-lo fazendo uso de ambas as definições apresentadas nas equações 4.6 e 4.7.

Para isso, executa-se a soma em χ :

$$\begin{aligned}\frac{(U - J)}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma}^{\chi'} &= \frac{(U - J)}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \alpha} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}', \sigma}^{\alpha} \\ &\quad + \frac{(U - J)}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \beta} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta},\end{aligned}\quad (4.11)$$

e reorganiza-se os termos na forma:

$$\begin{aligned} \frac{(U - J)}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma}^{\chi'} &= -\frac{(U - J)}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \alpha} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta} \\ &+ \frac{(U - J)}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \beta} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta} \end{aligned} \quad (4.12)$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{(U - J)}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma}^{\chi'} &= -\frac{N(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \alpha} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} \\ &\times \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta} + \frac{N(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \beta} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Assim, é possível escrever \hat{H}_{int} em termos dos operadores $\hat{z}_{\vec{q}, \sigma}$ e $\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}$:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{N(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma} (-\hat{z}_{\vec{q}, \sigma} \hat{z}_{-\vec{q}, \sigma} + \hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha} \hat{n}_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta}) + \frac{NU}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi, \chi'} \hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} \hat{n}_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi} \\ &+ \frac{NJ}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} \hat{z}_{\vec{q}, \sigma} \hat{z}_{-\vec{q}, -\sigma}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

A ideia básica da aproximação de campo médio, como já discutido no capítulo 3, é considerar que quantidades físicas apresentam apenas pequenas flutuações em torno de seu valor médio (FAZEKAS, 1999). Ou seja, se

$$\Delta \hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} = \hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} - n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} \quad (4.15)$$

e

$$\Delta \hat{z}_{\vec{q}, \sigma} = \hat{z}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} - z_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} \quad (4.16)$$

são as flutuações em torno do valor médio de $\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}$ e de $\hat{z}_{\vec{q}, \sigma}$, respectivamente, então pode-se afirmar que $\Delta \hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}$ e $\Delta \hat{z}_{\vec{q}, \sigma}$ são quantidades muito pequenas (FAZEKAS, 1999).

Levando isso em consideração, reescreve-se \hat{H}_{int} como:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{N(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma} [-(\hat{z}_{\vec{q}, \sigma} - z_{\vec{q}, \sigma} + z_{\vec{q}, \sigma})(\hat{z}_{-\vec{q}, \sigma} - z_{-\vec{q}, \sigma} + z_{-\vec{q}, \sigma}) \\ &\quad + (\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha} - n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha} + n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha})(\hat{n}_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta} - n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta} + n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta})] \\ &+ \frac{NU}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi, \chi'} (\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} - n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} + n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi})(\hat{n}_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi} - n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi} + n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi}) \\ &+ \frac{NJ}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} (\hat{z}_{\vec{q}, \sigma} - z_{\vec{q}, \sigma} + z_{\vec{q}, \sigma})(\hat{z}_{-\vec{q}, -\sigma} - z_{-\vec{q}, -\sigma} + z_{-\vec{q}, -\sigma}), \end{aligned} \quad (4.17)$$

o que permite obter o termo de interação expresso em termos das flutuações $\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi$ e $\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}$:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} = & \frac{N(U-J)}{2} \sum_{\vec{q},\sigma} [-(\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma} + z_{\vec{q},\sigma})(\Delta\hat{z}_{-\vec{q},\sigma} + z_{-\vec{q},\sigma}) \\ & + (\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\alpha + n_{\vec{q},\sigma}^\alpha)(\Delta\hat{n}_{-\vec{q},\sigma}^\beta + n_{-\vec{q},\sigma}^\beta)] \\ & + \frac{NU}{2} \sum_{\vec{q},\sigma,\chi,\chi'} (\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi + n_{\vec{q},\sigma}^\chi)(\Delta\hat{n}_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'} + n_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'}) \\ & + \frac{NJ}{2} \sum_{\vec{q},\sigma,\chi \neq \chi'} (\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma} + z_{\vec{q},\sigma})(\Delta\hat{z}_{-\vec{q},-\sigma} + z_{-\vec{q},-\sigma}).\end{aligned}\quad (4.18)$$

Então, executando-se as multiplicações tem-se:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} = & \frac{N(U-J)}{2} \sum_{\vec{q},\sigma} (-\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}\Delta\hat{z}_{-\vec{q},\sigma} - \Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},\sigma} - \Delta\hat{z}_{-\vec{q},\sigma}z_{\vec{q},\sigma} - z_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},\sigma} \\ & + \Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\alpha\Delta\hat{n}_{-\vec{q},\sigma}^\beta + \Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\alpha n_{-\vec{q},\sigma}^\beta + \Delta\hat{n}_{-\vec{q},\sigma}^\beta n_{\vec{q},\sigma}^\alpha + n_{\vec{q},\sigma}^\alpha n_{-\vec{q},\sigma}^\beta) \\ & + \frac{NU}{2} \sum_{\vec{q},\sigma,\chi,\chi'} (\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi\Delta\hat{n}_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'} + \Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi n_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'} + \Delta\hat{n}_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'} n_{\vec{q},\sigma}^\chi + n_{\vec{q},\sigma}^\chi n_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'}) \\ & + \frac{NJ}{2} \sum_{\vec{q},\sigma,\chi \neq \chi'} (\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}\Delta\hat{z}_{-\vec{q},-\sigma} + \Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},-\sigma} + \Delta\hat{z}_{-\vec{q},-\sigma}z_{\vec{q},\sigma} + z_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},-\sigma}).\end{aligned}\quad (4.19)$$

Como $\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi$ e $\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}$ são quantidades muito pequenas assume-se que os produtos $\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi$ e $\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}^\chi\Delta\hat{z}_{-\vec{q},\sigma}^\chi$ são desprezíveis quando comparados com os outros termos de \hat{H}_{int} , logo podem ser desconsiderados. Dessa forma, \hat{H}_{int} se torna:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} = & \frac{N(U-J)}{2} \sum_{\vec{q},\sigma} (-\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},\sigma} - \Delta\hat{z}_{-\vec{q},\sigma}z_{\vec{q},\sigma} - z_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},\sigma} \\ & + \Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\alpha n_{-\vec{q},\sigma}^\beta + \Delta\hat{n}_{-\vec{q},\sigma}^\beta n_{\vec{q},\sigma}^\alpha + n_{\vec{q},\sigma}^\alpha n_{-\vec{q},\sigma}^\beta) \\ & + \frac{NU}{2} \sum_{\vec{q},\sigma,\chi,\chi'} (\Delta\hat{n}_{\vec{q},\sigma}^\chi n_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'} + \Delta\hat{n}_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'} n_{\vec{q},\sigma}^\chi + n_{\vec{q},\sigma}^\chi n_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi'}) \\ & + \frac{NJ}{2} \sum_{\vec{q},\sigma,\chi \neq \chi'} (\Delta\hat{z}_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},-\sigma} + \Delta\hat{z}_{-\vec{q},-\sigma}z_{\vec{q},\sigma} + z_{\vec{q},\sigma}z_{-\vec{q},-\sigma})\end{aligned}\quad (4.20)$$

ou

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int} = & \frac{N(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma} (-(\hat{z}_{\vec{q}, \sigma} - z_{\vec{q}, \sigma})z_{-\vec{q}, \sigma} - (\hat{z}_{-\vec{q}, \sigma} - z_{-\vec{q}, \sigma})z_{\vec{q}, \sigma} - z_{\vec{q}, \sigma}z_{-\vec{q}, \sigma}) \\
& + (\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha} - n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha})n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta} + (\hat{n}_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta} - n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta})n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha} + n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha}n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta}) \\
& + \frac{NU}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi, \chi'} ((\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} - n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi})n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'} + (\hat{n}_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'} - n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'})n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} + n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'}) \\
& + \frac{NJ}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} ((\hat{z}_{\vec{q}, \sigma} - z_{\vec{q}, \sigma})z_{-\vec{q}, -\sigma} + (\hat{z}_{-\vec{q}, -\sigma} - z_{-\vec{q}, -\sigma})z_{\vec{q}, \sigma} + z_{\vec{q}, \sigma}z_{-\vec{q}, -\sigma}) \quad (4.21)
\end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int} = & \frac{(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma} (-\sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} z_{-\vec{q}, \sigma} - \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta} z_{\vec{q}, \sigma} + z_{-\vec{q}, \sigma}z_{\vec{q}, \sigma}) \\
& + \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta} + \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta} n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha} - n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta}n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha}) \\
& + \frac{U}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi, \chi'} (\sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'} + \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\chi'} n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} - n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'}n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}) \\
& + \frac{J}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} (\sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} z_{-\vec{q}, -\sigma} + \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\beta} z_{\vec{q}, \sigma} - z_{-\vec{q}, -\sigma}z_{\vec{q}, \sigma}). \quad (4.22)
\end{aligned}$$

Por fim, obtém-se o seguinte Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{CM} = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} d_{\vec{k}, \sigma} + \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} (V_{\chi}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \chi} d_{\vec{k}, \sigma} + V_{\chi}^*(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi}) + \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} E_f^{\chi}(\vec{k}) n_{\vec{q}, \vec{k}, \sigma}^{\chi} \\
& + \frac{(U - J)}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma} (-\sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} z_{-\vec{q}, \sigma} - \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta} z_{\vec{q}, \sigma} + z_{-\vec{q}, \sigma}z_{\vec{q}, \sigma}) \\
& + \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta} + \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \sigma}^{\beta} n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha} - n_{-\vec{q}, \sigma}^{\beta}n_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha}) \\
& + \frac{U}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi, \chi'} (\sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'} + \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\chi'} n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi} - n_{-\vec{q}, -\sigma}^{\chi'}n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}) \\
& + \frac{J}{2} \sum_{\vec{q}, \sigma, \chi \neq \chi'} (\sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} z_{-\vec{q}, -\sigma} + \sum_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}, -\sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}', -\sigma}^{\beta} z_{\vec{q}, \sigma} - z_{-\vec{q}, -\sigma}z_{\vec{q}, \sigma}). \quad (4.23)
\end{aligned}$$

onde $z_{\vec{q}, \sigma}$ e $n_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}$ são os valores médios dos operadores $\hat{z}_{\vec{q}, \sigma}$ e $\hat{n}_{\vec{q}, \sigma}^{\chi}$, respectivamente.

O Hamiltoniano \hat{H}_{CM} será utilizado para o cálculo das funções de Green das fases HO e AF.

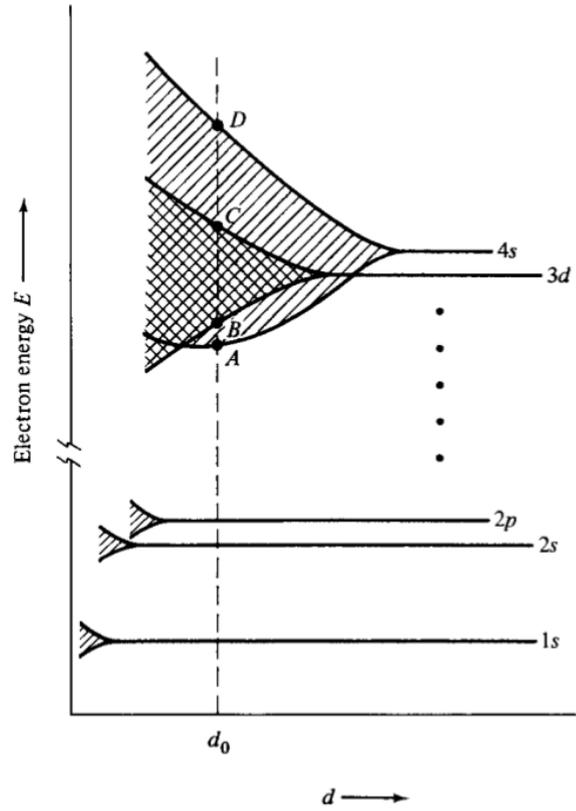
4.1.3 Funções de Green

Nesta seção, são apresentadas as funções de Green para o estudo do problema completo, envolvendo HO e antiferromagnetismo. As funções de Green foram obtidas utilizando o Hamiltoniano do modelo UAL, H_{CM} , tratado com a aproximação de campo médio.

Uma das quantidades físicas mais importantes no estudo desse problema é o parâmetro de ordem. Como discutido no capítulo 3, o parâmetro de ordem descreve uma quebra de simetria no sistema, ou seja, uma transição de fase. Por exemplo, quando o parâmetro de ordem da fase HO é diferente de zero o sistema se encontra na fase HO. Por outro lado, quando o parâmetro de ordem é igual a zero, o sistema está no estado paramagnético (PM). O conjunto de parâmetros para o qual o parâmetro de ordem se torna nulo marca uma transição de fase no sistema. Outra quantidade física importante é o número médio de ocupação $\langle n_\sigma \rangle$. O parâmetro de ordem e o número médio de ocupação permitem obter, numericamente, o potencial químico, as bandas de energia, as densidades de estado, as superfícies de Fermi, a energia livre de Helmholtz, etc. Resumindo todas essas informações é possível construir o diagrama de fases da temperatura (T) pela meia largura da banda dos elétrons de condução (W_d) para investigar a evolução das fases HO e AF, sob os efeitos da pressão e da temperatura. Esse diagrama pode ser comparado, qualitativamente, com o diagrama de fases experimental mostrado na figura 2.5. Para simplificar a notação, será considerado que $W = W_d/2$. Vale lembrar que neste trabalho os efeitos da pressão sobre o sistema são simulados por meio da variação da largura da banda W .

Para melhor entender a relação entre variação da largura de banda e pressão é necessário lembrar da teoria de bandas para um sólido. Com esse intuito, considera-se o caso de um sistema de apenas dois átomos de ferro, inicialmente distantes um do outro. Os níveis de energia $1s$ de cada átomo possuem dois elétrons com *spins* opostos (princípio de Pauli) e com a mesma energia. Caso esses átomos sejam aproximados um do outro suas nuvens eletrônicas começarão a se sobrepor. Porém, o princípio de Pauli impede que um mesmo nível $1s$ tenha quatro elétrons. Assim, o nível $1s$ será separado em dois níveis contendo dois elétrons cada. Para o caso de N átomos, inicialmente livres, sendo aproximados para formar um sólido, cada nível de cada átomo livre deverá se separar em N níveis, formando uma banda de energia (CALEGARI; MAGALHAES, 2005). Considerando apenas a distância inter-atômica, pode-se dizer que essa banda de energia será mais larga quanto mais próximos estão os átomos, como pode ser visto na figura 4.1. Ao aplicar pressão sobre um sólido os átomos são aproximados uns dos outros. Dessa forma, é possível simular efeitos da pressão externa sobre um sistema variando a largura de banda.

Figura 4.1 – Separação dos níveis eletrônicos de energia em função da distância interatômica d .



Fonte: (CULLITY, 1972)

4.1.3.1 Parâmetros de ordem

O parâmetro de ordem e o número médio de ocupação são funções de correlação. Como o visto no capítulo 3, as funções de correlação estão diretamente relacionadas as funções de Green. No caso do número médio de ocupação, as funções de Green de interesse são:

$$G_{ff,\sigma}^{\beta,\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^{\beta}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \quad (4.24)$$

e

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha,\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle. \quad (4.25)$$

Já os parâmetros de ordem estão relacionados às funções de Green

$$G_{ff,\sigma}^{\beta,\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) = \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma}^{\beta}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \quad (4.26)$$

e

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha,\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) = \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma}^{\alpha}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle, \quad (4.27)$$

onde assume-se $\chi' = \alpha, \beta$.

Para calcular essas funções de Green usa-se a equação de movimento das funções de Green (ZUBAREV, 1960):

$$\omega \langle \langle \hat{B}; \hat{A} \rangle \rangle = \langle [\hat{B}, \hat{A}]_+ \rangle + \langle \langle [\hat{B}, \hat{H}]_-; \hat{A} \rangle \rangle, \quad (4.28)$$

onde \hat{H} , nesse caso, é o Hamiltoniano do modelo UAL tratado com a aproximação de campo médio, definido como \hat{H}_{CM} .

Para a função de Green $G_{ff,\sigma}^{\beta,\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$, tem-se que $\hat{B} = \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta$ e $\hat{A} = \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'}$.

Os operadores $\hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta$ e $\hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'}$ obedecem às relações de comutação para férmions. Sendo assim, o anti-comutador $[\hat{B}, \hat{A}]_+$ resulta em:

$$[\hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta, \hat{f}_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger\chi'}]_+ = \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta \hat{f}_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger\chi'} + \hat{f}_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger\chi'} \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\beta\chi'} \quad (4.29)$$

e o comutador $[\hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta, \hat{H}_{CM}]_-$ em:

$$\begin{aligned} [\hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta, \hat{H}_{CM}]_- &= V_\beta(\vec{k}) \hat{d}_{\vec{k},\sigma} + E_f^\beta(\vec{k}) \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta + \frac{U-J}{2} \left(- \sum_{\vec{q}} z_{-\vec{q},\sigma} \hat{f}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^\alpha + \sum_{\vec{q}} n_{\vec{q},\sigma}^\alpha \hat{f}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\beta \right) \\ &+ \frac{U}{2} \left(\sum_{\vec{q},\chi''} n_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi''} \hat{f}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^\beta \sum_{\vec{q},\chi} n_{\vec{q},\sigma}^\chi \hat{f}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\beta \right) + \frac{J}{2} \left(\sum_{\vec{q}} z_{-\vec{q},-\sigma} \hat{f}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^\alpha + \sum_{\vec{q}} z_{\vec{q},-\sigma} \hat{f}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\alpha \right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Esses resultados levam à seguinte equação de movimento para $G_{ff,\sigma}^{\beta,\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$:

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle &= \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\beta,\chi'} + V_\beta(\vec{k}) \langle \langle \hat{d}_{\vec{k},\sigma}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + E_f^\beta(\vec{k}) \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \\ &+ \frac{U-J}{2} \left(- \sum_{\vec{q}} z_{-\vec{q},\sigma} \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^\alpha; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + \sum_{\vec{q}} n_{\vec{q},\sigma}^\alpha \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \right) \\ &+ \frac{U}{2} \left(\sum_{\vec{q},\chi''} n_{-\vec{q},-\sigma}^{\chi''} \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + \sum_{\vec{q},\chi} n_{\vec{q},\sigma}^\chi \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \right) \\ &+ \frac{J}{2} \left(\sum_{\vec{q}} z_{-\vec{q},-\sigma} \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^\alpha; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + \sum_{\vec{q}} z_{\vec{q},-\sigma} \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\alpha; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \right). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Executando-se a soma sobre χ, χ'' e \vec{q} tem-se

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle &= \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\beta,\chi'} + V_\beta(\vec{k}) \langle \langle \hat{d}_{\vec{k},\sigma}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + E_f^\beta(\vec{k}) \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \\ &+ \frac{U-J}{2} \left(z_{-\vec{Q},\sigma} \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\alpha; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + n_{f,\sigma}^\alpha \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \right) \\ &+ \frac{U}{2} \left(n_{f,-\sigma}^\alpha \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + n_{f,-\sigma}^\beta \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \right. \\ &\quad \left. + n_{f,\sigma}^\alpha \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + n_{f,\sigma}^\beta \langle \langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^\beta; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \right) \\ &+ \frac{J}{2} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma} \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\alpha; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle + z_{\vec{Q},-\sigma} \langle \langle \hat{f}_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma}^\alpha; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle \rangle \right). \end{aligned} \quad (4.32)$$

A soma sobre \vec{q} foi feita considerando um conjunto específico de vetores de *nesting* dado por \vec{Q} .

Seguindo a referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012), define-se as seguintes quantidades:

$$E_{f,\sigma}^{\chi}(\vec{k}) = E_f^{\chi}(\vec{k}) + \sum_{\chi'} [(U - J)n_{f,\sigma}^{\chi'}(1 - \delta^{\chi,\chi'}) + Un_{f,-\sigma}^{\chi'}], \quad (4.33)$$

que é a relação de dispersão da banda f para a aproximação de campo médio e

$$\kappa_{\vec{Q},\sigma} = Jz_{\vec{Q},-\sigma} - (U - J)z_{\vec{Q},\sigma} \quad (4.34)$$

é o gap da fase HO. A quantidade $\delta^{\chi,\chi'}$ é a delta de Kronecker, logo se $\chi = \chi'$, $\delta^{\chi,\chi'} = 1$ e se $\chi \neq \chi'$, $\delta^{\chi,\chi'} = 0$.

Utilizando essas definições pode-se reescrever a equação de movimento para $G_{ff,\sigma}^{\beta,\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$ (4.32) como:

$$(\omega - E_{f,\sigma}^{\beta}(\vec{k}))\langle\langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^{\beta}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{\beta,\chi'} + V_{\beta}(\vec{k})\langle\langle \hat{d}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle + \kappa_{\vec{Q},-\sigma}\langle\langle \hat{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle. \quad (4.35)$$

Usando esse mesmo procedimento, obteve-se $G_{ff,\sigma}^{\alpha,\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$:

$$(\omega - E_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k}))\langle\langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{\alpha,\chi'} + V_{\alpha}(\vec{k})\langle\langle \hat{d}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle + \kappa_{\vec{Q},\sigma}\langle\langle \hat{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\alpha}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle. \quad (4.36)$$

Analisando as equações 4.35 e 4.36, nota-se que ambas dependem de $G_{df,\sigma}^{\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \langle\langle \hat{d}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle$. Logo, fez-se necessário calcular a equação de movimento para $G_{df,\sigma}^{\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$:

$$(\omega - \epsilon(\vec{k}))\langle\langle \hat{d}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle = V_{\alpha}^*(\vec{k})\langle\langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle + V_{\beta}^*(\vec{k})\langle\langle \hat{f}_{\vec{k},\sigma}^{\beta}; \hat{f}_{\vec{k}',\sigma}^{\dagger\chi'} \rangle\rangle. \quad (4.37)$$

Nas equações de movimento das funções de Green é possível notar a presença dos parâmetros de ordem relacionados à fase HO, $z_{\vec{Q},\sigma}$ e $z_{\vec{Q},-\sigma}$ (ver equação 4.34). Contudo, os parâmetros de ordem para a fase AF ainda não aparecem de forma explícita.

O modelo UAL descreve duas bandas $5f$ degeneradas. Considerando que essas bandas, denominadas de banda α e β , possuem uma ocupação média definida como (FAZEKAS, 1999):

$$n_{\vec{q},\sigma}^{\chi} = \frac{n_f^{\chi}}{2}\delta_{\vec{q},0} + m_f^{\chi}\eta(\sigma)\delta_{\vec{q},\pm\vec{Q}}, \quad (4.38)$$

onde $n_f^{\chi} = n_{f,\uparrow}^{\chi} + n_{f,\downarrow}^{\chi}$, m_f^{χ} é a magnetização associada à banda χ , $\chi = \alpha, \beta$, $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\eta(\uparrow) = 1$ e $\eta(\downarrow) = -1$. Pode-se reescrever a equação 4.33 como:

$$E_{f,\sigma}^{\chi}(\vec{k}) = \sum_{\chi'} \left[(U - J) \left(\frac{n_f^{\chi'}}{2} + m_f^{\chi'} \eta(\sigma) \right) (1 - \delta^{\chi,\chi'}) + U \left(\frac{n_f^{\chi'}}{2} + m_f^{\chi'} \eta(-\sigma) \right) \right] + E_f^{\chi}(\vec{k}) \quad (4.39)$$

ou:

$$E_{f,\sigma}^{\chi}(\vec{k}) = \tilde{E}_{f,\sigma}^{\chi}(\vec{k}) + M_{\sigma}^{\chi}, \quad (4.40)$$

onde

$$\tilde{E}_{f,\sigma}^{\chi}(\vec{k}) = E_f^{\chi}(\vec{k}) + \sum_{\chi'} \left[(U - J) \frac{n_f^{\chi'}}{2} (1 - \delta^{\chi,\chi'}) + U \frac{n_f^{\chi'}}{2} \right], \quad (4.41)$$

e

$$M_{\sigma}^{\chi} = \sum_{\chi'} [(U - J) m_f^{\chi'} \eta(\sigma) (1 - \delta^{\chi,\chi'}) + U m_f^{\chi'} \eta(-\sigma)]. \quad (4.42)$$

A quantidade M_{σ}^{χ} representa o *gap* da fase AF e é uma mistura das magnetizações relacionadas às bandas α e β . Para o caso em que $\chi = \alpha$, o *gap* é escrito como:

$$\begin{aligned} M_{\uparrow}^{\alpha} &= -J m_f^{\beta} - U m_f^{\alpha} \\ M_{\downarrow}^{\alpha} &= J m_f^{\beta} + U m_f^{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Para o caso em que $\chi = \beta$ tem-se:

$$\begin{aligned} M_{\uparrow}^{\beta} &= -J m_f^{\alpha} - U m_f^{\beta} \\ M_{\downarrow}^{\beta} &= J m_f^{\alpha} + U m_f^{\beta}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Essas equações mostram que M_{\uparrow}^{χ} difere de M_{\downarrow}^{χ} apenas por um sinal negativo. Logo,

$$M_{\uparrow}^{\alpha} = -M_{\downarrow}^{\alpha} \quad (4.45)$$

e

$$M_{\uparrow}^{\beta} = -M_{\downarrow}^{\beta}. \quad (4.46)$$

A magnetização m_f^{χ} associada a banda χ é dada por:

$$m_f^{\chi} = \frac{1}{2} (n_{f,\vec{Q},\uparrow}^{\chi} - n_{f,\vec{Q},\downarrow}^{\chi}), \quad (4.47)$$

onde $n_{f,\vec{Q},\sigma}^\chi$ é o número médio de ocupação de elétrons da banda χ com spin σ e vetor de onda \vec{Q} .

Utilizando a equação 4.40 pode-se reescrever as equações de movimento das funções de Green (equações 4.35 e 4.36) como:

$$\begin{aligned} (\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}))G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) &= \delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} + V_\beta(\vec{k})G_{df,\sigma}^{\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) + \\ &+ \kappa_{\vec{Q},-\sigma}G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} - \vec{Q}, \vec{k}', \omega) + M_\sigma^\beta G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} - \vec{Q}, \vec{k}', \omega) \end{aligned} \quad (4.48)$$

e

$$\begin{aligned} (\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k}))G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) &= \delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} + V_\alpha(\vec{k})G_{df,\sigma}^{\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) + \\ &+ \kappa_{\vec{Q},\sigma}G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) + M_\sigma^\alpha G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega), \end{aligned} \quad (4.49)$$

onde pode-se perceber a presença dos parâmetros de ordem da fase AF através dos *gaps* M_σ^χ .

Substituindo a expressão da função de Green $G_{df,\sigma}^{\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$, dada pela equação 4.37, nas equações de movimento 4.48 e 4.49, obtém-se os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \left(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}) - \frac{|V_\beta(\vec{k})|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k})} \right) G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) - \kappa_{\vec{Q},-\sigma} G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} - \vec{Q}, \vec{k}', \omega) + \\ - M_\sigma^\beta G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} - \vec{Q}, \vec{k}', \omega) - \frac{V_\beta(\vec{k})V_\alpha^*(\vec{k})}{\omega - \epsilon(\vec{k})} G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'}, \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} \left(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k}) - \frac{|V_\alpha(\vec{k})|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k})} \right) G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) - \kappa_{\vec{Q},\sigma} G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) + \\ - M_\sigma^\alpha G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) - \frac{V_\alpha(\vec{k})V_\beta^*(\vec{k})}{\omega - \epsilon(\vec{k})} G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Essas equações de movimento permitem obter as ocupações médias das bandas 5f. Contudo, para obter as expressões analíticas para os parâmetros de ordem faz-se necessário calcular as equações de movimento para as funções de Green $G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega)$ e $G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega)$. Como essas funções de Green diferem das funções de Green $G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$ e $G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$ apenas por um índice (ver equações 4.26 e 4.27), basta substituir o vetor de onda \vec{k} por $\vec{k} + \vec{Q}$ nas equações de movimento dadas nas equações

4.50 e 4.51. Assim tem-se:

$$\begin{aligned}
& -M_\sigma^\alpha G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) + \left(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k} + \vec{Q}) - \frac{|V_\alpha(\vec{k} + \vec{Q})|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})} \right) G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) + \\
& -\kappa_{\vec{Q},\sigma} G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) - \frac{V_\beta(\vec{k})V_\alpha^*(\vec{k})}{\omega - \epsilon(\vec{k})} G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) = \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} \quad (4.52)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& -\kappa_{\vec{Q},-\sigma} G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) - \frac{V_\beta(\vec{k})V_\alpha^*(\vec{k})}{\omega - \epsilon(\vec{k})} G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) - M_\sigma^\beta G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) + \\
& + \left(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k} + \vec{Q}) \right) G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) = \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} \quad (4.53)
\end{aligned}$$

Agora, substituindo \vec{k} por $\vec{k} + 2\vec{Q}$ na equação 4.50 obtém-se

$$\begin{aligned}
& -\kappa_{\vec{Q},-\sigma} G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) - \frac{V_\beta(\vec{k})V_\alpha^*(\vec{k})}{\omega - \epsilon(\vec{k})} G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) - M_\sigma^\beta G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) + \\
& + \left(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}) \right) G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (4.54)
\end{aligned}$$

As equações 4.51, 4.52, 4.53 e 4.54 permitem montar um sistema de equações com a seguinte representação matricial :

$$\mathbf{AG} = \mathbf{B}, \quad (4.55)$$

onde \mathbf{G} é a matriz das funções de Green, ou mais explicitamente:

$$\begin{bmatrix} E_1^\alpha & -M_\sigma^\alpha & -\kappa_{\vec{Q},\sigma} & 0 \\ -M_\sigma^\alpha & E_2^\alpha & 0 & -\kappa_{\vec{Q},\sigma} \\ -\kappa_{-\vec{Q},\sigma} & 0 & E_2^\beta & -M_\sigma^\beta \\ 0 & -\kappa_{-\vec{Q},\sigma} & -M_\sigma^\beta & E_1^\beta \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) \\ G_{ff,\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) \\ G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) \\ G_{ff,\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \\ \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} \\ \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} \\ \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \end{bmatrix}, \quad (4.56)$$

com

$$E_1^\alpha = \left(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k}) - \frac{|V_\alpha(\vec{k})|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k})} \right), \quad (4.57)$$

$$E_2^\alpha = \left(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k} + \vec{Q}) - \frac{|V_\alpha(\vec{k} + \vec{Q})|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})} \right), \quad (4.58)$$

$$E_1^\beta = (\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k})) \quad (4.59)$$

e

$$E_2^\beta = (\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k} + \vec{Q})). \quad (4.60)$$

As expressões 4.59 e 4.60 foram obtidas assumindo-se, como feito na referência (RISEBOROUGH; COQBILIN; MAGALHAES, 2012), que não há hibridização na banda β , ou seja, $V_\beta(\vec{k}) = 0$.

Para obter \mathbf{G} é necessário calcular a inversa da matriz \mathbf{A} , uma vez que:

$$\mathbf{A}\mathbf{G} = \mathbf{B}, \quad (4.61)$$

ou

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{G} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} \quad (4.62)$$

então:

$$\mathbf{G} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}. \quad (4.63)$$

Como \mathbf{A} é uma matriz quadrada é possível calcular \mathbf{A}^{-1} .

Existe mais de uma forma de obter a matriz inversa de \mathbf{A} . Aqui utiliza-se o método de inversão por matriz adjunta:

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{\overline{\mathbf{A}}}{|\mathbf{A}|}, \quad (4.64)$$

sendo $\overline{\mathbf{A}}$ e $|\mathbf{A}|$, respectivamente, a matriz adjunta e o determinante de \mathbf{A} .

O determinante $|\mathbf{A}|$ é calculado usando o teorema de Laplace:

$$\begin{aligned} |\mathbf{A}| = & E_1^\alpha E_2^\alpha E_1^\beta E_2^\beta - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 (2M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta + E_1^\alpha E_2^\beta + E_1^\beta E_2^\alpha - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2) - (M_\sigma^\alpha)^2 (M_\sigma^\beta)^2 \\ & - (M_\sigma^\alpha)^2 E_1^\beta E_2^\beta - (M_\sigma^\beta)^2 E_1^\alpha E_2^\alpha. \end{aligned} \quad (4.65)$$

A matriz adjunta $\overline{\mathbf{A}}$ é equivalente a matriz de cofatores de \mathbf{A} transposta, \mathbf{C}^T . Cada um dos elementos de \mathbf{A} possui um respectivo cofator dado por:

$$C_{ij} = (-1)^{i+j} D_{ij}, \quad (4.66)$$

onde os índices i e j indicam, nessa ordem, a linha e a coluna e D_{ij} é o determinante menor complementar do elemento a_{ij} da matriz \mathbf{A} . Assim, utilizando a equação 4.66 obtém-se \mathbf{C} :

$$\begin{aligned} C_{11} &= -|\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_2^\beta + E_2^\alpha (E_1^\beta E_2^\beta - (M_\sigma^\beta)^2) \\ C_{12} &= -(M_\sigma^\beta)^2 M_\sigma^\alpha + M_\sigma^\alpha E_1^\beta E_2^\beta + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\beta \\ C_{13} &= \kappa_{-\vec{Q}\sigma} (M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta + E_1^\beta E_2^\alpha - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{14} &= \kappa_{-\vec{Q}\sigma}(E_2^\beta M_\sigma^\alpha + E_2^\alpha M_\sigma^\beta) \\
C_{21} &= M_\sigma^\alpha(E_1^\beta E_2^\beta - (M_\sigma^\beta)^2) + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\beta \\
C_{22} &= -(M_\sigma^\beta)^2 E_1^\alpha - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_1^\beta + E_1^\alpha E_1^\beta E_2^\beta \\
C_{23} &= \kappa_{-\vec{Q}\sigma}(E_1^\beta M_\sigma^\alpha + E_1^\alpha M_\sigma^\beta) \\
C_{24} &= \kappa_{-\vec{Q}\sigma}(E_1^\alpha E_2^\beta + M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2) \\
C_{31} &= \kappa_{\vec{Q}\sigma}(M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta + E_2^\alpha E_1^\beta - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2) \\
C_{32} &= \kappa_{\vec{Q}\sigma}(E_1^\beta M_\sigma^\alpha + E_1^\alpha M_\sigma^\beta) \\
C_{33} &= -|\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_1^\alpha - E_1^\beta((M_\sigma^\alpha)^2 - E_1^\alpha E_2^\alpha) \\
C_{34} &= -M_\sigma^\beta((M_\sigma^\alpha)^2 - E_1^\alpha E_2^\alpha) + M_\sigma^\alpha |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 \\
C_{41} &= \kappa_{\vec{Q}\sigma}(E_2^\beta M_\sigma^\alpha + E_2^\alpha M_\sigma^\beta) \\
C_{42} &= \kappa_{\vec{Q}\sigma}(E_1^\alpha E_2^\beta + M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2) \\
C_{43} &= -M_\sigma^\beta((M_\sigma^\alpha)^2 - E_1^\alpha E_2^\alpha) + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\alpha \\
C_{44} &= E_2^\beta(E_1^\alpha E_2^\alpha - (M_\sigma^\alpha)^2) - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_2^\alpha.
\end{aligned} \tag{4.67}$$

A matriz transposta de \mathbf{C} é dada por:

$$\mathbf{C}^T = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{21} & C_{31} & C_{41} \\ C_{12} & C_{22} & C_{32} & C_{42} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{43} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} \end{bmatrix}. \tag{4.68}$$

Dessa forma, é possível obter \mathbf{G} :

$$\mathbf{G} = \frac{\mathbf{C}^T \cdot \mathbf{B}}{|\mathbf{A}|} \tag{4.69}$$

$$\mathbf{G} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \begin{bmatrix} C_{11}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} + C_{21}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{31}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{41}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \\ C_{12}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} + C_{22}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{32}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{42}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \\ C_{13}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} + C_{23}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{33}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{43}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \\ C_{14}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} + C_{24}\delta_{\alpha,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{34}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k}+\vec{Q},\vec{k}'} + C_{44}\delta_{\beta,\chi'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \end{bmatrix}. \tag{4.70}$$

Utilizando as definições de 4.67, tem-se:

$$\begin{aligned}
G_{ff\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = & \frac{1}{|\mathbf{A}|} \{ [-|\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_2^\beta + E_2^\alpha (E_1^\beta E_2^\beta - (M_\sigma^\beta)^2)] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\
& + [M_\sigma^\alpha (E_1^\beta E_2^\beta - (M_\sigma^\beta)^2) + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\beta] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [\kappa_{\vec{Q}\sigma} (M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta + E_2^\alpha E_1^\beta - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2)] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [\kappa_{\vec{Q}\sigma} (E_2^\beta M_\sigma^\alpha + E_2^\alpha M_\sigma^\beta)] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \}, \quad (4.71)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{ff\sigma}^{\alpha\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) = & \frac{1}{|\mathbf{A}|} \{ [-(M_\sigma^\beta)^2 M_\sigma^\alpha + M_\sigma^\alpha E_1^\beta E_2^\beta + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\beta] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\
& + [-(M_\sigma^\beta)^2 E_1^\alpha - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_1^\beta + E_1^\alpha E_1^\beta E_2^\beta] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [\kappa_{\vec{Q}\sigma} (E_1^\beta M_\sigma^\alpha + E_1^\alpha M_\sigma^\beta)] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [\kappa_{\vec{Q}\sigma} (E_1^\alpha E_2^\beta + M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2)] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \}, \quad (4.72)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{ff\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}', \omega) = & \frac{1}{|\mathbf{A}|} \{ [\kappa_{-\vec{Q}\sigma} (M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta + E_1^\beta E_2^\alpha - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2)] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\
& + [\kappa_{-\vec{Q}\sigma} (E_1^\beta M_\sigma^\alpha + E_1^\alpha M_\sigma^\beta)] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [-|\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_1^\alpha - E_1^\beta ((M_\sigma^\alpha)^2 - E_1^\alpha E_2^\alpha)] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [-M_\sigma^\beta ((M_\sigma^\alpha)^2 - E_1^\alpha E_2^\alpha) + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\alpha] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \}, \quad (4.73)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
G_{ff\sigma}^{\beta\chi'}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = & \frac{1}{|\mathbf{A}|} \{ [\kappa_{\vec{Q}\sigma} (E_2^\beta M_\sigma^\alpha + E_2^\alpha M_\sigma^\beta)] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\
& + [\kappa_{\vec{Q}\sigma} (E_1^\alpha E_2^\beta + M_\sigma^\alpha M_\sigma^\beta - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2)] \delta_{\alpha,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [-M_\sigma^\beta ((M_\sigma^\alpha)^2 - E_1^\alpha E_2^\alpha) + M_\sigma^\alpha |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k} + \vec{Q}, \vec{k}'} \\
& + [E_2^\beta (E_1^\alpha E_2^\alpha - (M_\sigma^\alpha)^2) - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 E_2^\alpha] \delta_{\beta,\chi'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \}. \quad (4.74)
\end{aligned}$$

Para obter o parâmetro de ordem m_f^χ é necessário calcular $n_{f,\vec{Q},\sigma}^\chi$, como mostra a equação 4.47. Entretanto, $n_{f,\vec{Q},\sigma}^\chi$ depende das funções de Green $G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ e $G_{ff,\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$, que são obtidas, respectivamente, através das equações 4.71 e 4.74:

$$G_{ff\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{1}{|\mathbf{A}|} [M_\sigma^\alpha (E_1^\beta E_2^\beta - (M_\sigma^\beta)^2) + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\beta] \quad (4.75)$$

e

$$G_{ff\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{1}{|\mathbf{A}|} [M_\sigma^\beta (E_1^\alpha E_2^\alpha - (M_\sigma^\alpha)^2) + |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2 M_\sigma^\alpha] \quad (4.76)$$

O parâmetro de ordem da fase HO está relacionado à função de Green $G_{ff,\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ que também é fornecida pela equação 4.71

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{1}{|\mathbf{A}|} [\kappa_{\vec{Q}\sigma} (M_{\sigma}^{\alpha} M_{\sigma}^{\beta} + E_2^{\alpha} E_1^{\beta} - |\kappa_{\vec{Q}\sigma}|^2)]. \quad (4.77)$$

Vale lembrar que as funções de Green estão relacionadas às funções de correlação pela equação 3.55.

Até esse ponto os parâmetros de ordem, tanto para a fase HO, como para a fase AF, são diferentes de zero, o que acarreta em resolver um polinômio de grau 6 em ω (ver equação 4.65). Além disso, seria necessário resolver uma auto-consistência com os três parâmetros de ordem mais o potencial químico. Devido ao alto nível de dificuldade numérica e analítica, decidiu-se trabalhar com as fases HO e AF separadamente. É importante mencionar, que a princípio, os resultados experimentais não mostram uma coexistência das fases AF e HO, como pode-se observar na figura 2.5.

4.2 PARTE II - FASE ANTIFERROMAGNÉTICA

Nesta seção, são apresentadas as funções de Green e os parâmetros de ordem para a fase AF, considerando o parâmetro da fase HO nulo.

As expressões para verificar se a condição do critério de Stoner é satisfeita e para obter a linha de transição de segunda ordem AF-PM no diagrama de fases, também são introduzidas.

4.2.0.1 Parâmetros de ordem da fase antiferromagnética

A magnetização m_f^{χ} é o parâmetro de ordem da fase AF e é dada pela equação 4.47. Logo, nota-se que é necessário calcular $n_{f,\vec{Q},\sigma}^{\chi}$. A função de correlação $n_{f,\vec{Q},\sigma}^{\chi}$ está relacionada às funções de Green $G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ e $G_{ff,\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$, que são obtidas, respectivamente, através das equações 4.71 e 4.74 considerando $\kappa_{\vec{Q}\sigma}=0$:

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{M_{\sigma}^{\alpha}}{[E_1^{\alpha} E_2^{\alpha} - (M_{\sigma}^{\alpha})^2]} \quad (4.78)$$

ou

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{M_{\sigma}^{\alpha}(\omega - \epsilon(\vec{k}))(\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}))}{D_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)}, \quad (4.79)$$

com

$$D_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = -(M_{\sigma}^{\alpha})^2(\omega - \epsilon(\vec{k}))(\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})) + ((\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k}))(\omega - \epsilon(\vec{k})) - |V_{\alpha}(\vec{k})|^2) \times ((\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k} + \vec{Q}))(\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}))) - |V_{\alpha}(\vec{k} + \vec{Q})|^2). \quad (4.80)$$

E também

$$G_{ff,\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{M_{\sigma}^{\beta}}{[E_1^{\beta} E_2^{\beta} - (M_{\sigma}^{\beta})^2]} \quad (4.81)$$

ou

$$G_{ff,\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{M_{\sigma}^{\beta}}{(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^{\beta}(\vec{k}))(\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q})) - (M_{\sigma}^{\beta})^2}. \quad (4.82)$$

Como já mencionado, as funções de Green estão relacionadas às funções de correlação pela equação 3.55. Essa equação contém uma integral em ω , que pode ser resolvida analiticamente pelo uso da identidade dada na equação 3.59. No entanto, para que seja possível utilizar essa identidade é necessário separar as funções de Green em frações parciais. Para a equação 4.82 tem-se:

$$G_{ff,\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = M_{\sigma}^{\beta} \left[\frac{A_{\beta,\sigma}^{+}}{\omega - E_{\beta,\sigma}^{+}} + \frac{A_{\beta,\sigma}^{-}}{\omega - E_{\beta,\sigma}^{-}} \right], \quad (4.83)$$

onde $A_{\beta,\sigma}^{\pm}$ são os pesos espectrais e $E_{\beta,\sigma}^{\pm}$ são as bandas de energia β . Essas quantidades são dadas por:

$$A_{\beta,\sigma}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{\pm M_{\sigma}^{\beta}}{E_{\beta,\sigma}^{+} - E_{\beta,\sigma}^{-}} \quad (4.84)$$

e

$$E_{\beta,\sigma}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^{\beta}(\vec{k}) + \tilde{E}_{f,\sigma}^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^{\beta}(\vec{k}) - \tilde{E}_{f,\sigma}^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q})}{2} \right]^2 + (M_{\sigma}^{\beta})^2}. \quad (4.85)$$

Utilizando a equação 3.55 em conjunto com a identidade da equação 3.59 e executando a integral em ω chega-se à seguinte expressão para $n_{f,\vec{Q},\uparrow}^{\beta}$:

$$n_{f,\vec{Q},\uparrow}^{\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [f(E_{\beta,\uparrow}^{+}(\vec{k}))A_{\beta,\uparrow}^{+}(\vec{k}) + f(E_{\beta,\uparrow}^{-}(\vec{k}))A_{\beta,\uparrow}^{-}(\vec{k})] \quad (4.86)$$

ou

$$n_{f,\vec{Q},\uparrow}^{\beta} = M_{\beta} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{f(E_{\beta,\uparrow}^{+}(\vec{k})) - f(E_{\beta,\uparrow}^{-}(\vec{k}))}{E_{\beta,\uparrow}^{+}(\vec{k}) - E_{\beta,\uparrow}^{-}(\vec{k})} \right]. \quad (4.87)$$

Para $n_{f,\vec{Q},\downarrow}^\beta$ tem-se:

$$n_{f,\vec{Q},\downarrow}^\beta = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [f(E_{\beta,\downarrow}^+(\vec{k}))A_{\beta,\downarrow}^+(\vec{k}) + f(E_{\beta,\downarrow}^-(\vec{k}))A_{\beta,\downarrow}^-(\vec{k})] \quad (4.88)$$

ou

$$n_{f,\vec{Q},\downarrow}^\beta = -M_\beta \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{f(E_{\beta,\downarrow}^+(\vec{k})) - f(E_{\beta,\downarrow}^-(\vec{k}))}{E_{\beta,\downarrow}^+(\vec{k}) - E_{\beta,\downarrow}^-(\vec{k})} \right]. \quad (4.89)$$

onde $f(E_{\beta}^\pm(\vec{k}))$ é a função de Fermi e M_β representa um *gap*. A notação padrão para o *gap* é o Δ . Portanto, com o intuito de usar a notação padrão define-se (ver equações 4.43,4.44):

$$\Delta_\beta = Jm_f^\alpha + Um_f^\beta. \quad (4.90)$$

E para o caso da banda α :

$$\Delta_\alpha = Jm_f^\beta + Um_f^\alpha \quad (4.91)$$

Esse sistema de equações leva às seguintes relações:

$$m_f^\alpha = \frac{\Delta_\alpha U - \Delta_\beta J}{U^2 - J^2} \quad (4.92)$$

e

$$m_f^\beta = \frac{\Delta_\beta U - \Delta_\alpha J}{U^2 - J^2}. \quad (4.93)$$

Com isso, a equação 4.85 pode ser reescrita como:

$$E_{\beta,\sigma}^\pm(\vec{k}) = \frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}) + \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k} + \vec{Q})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}) - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k} + \vec{Q})}{2} \right]^2 + (\Delta_\beta)^2}. \quad (4.94)$$

Seguindo a referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012) assume-se que a relação de dispersão $\tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k})$ é homotética com a banda de condução, ou seja:

$$\tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}) = t_\beta \epsilon(\vec{k}), \quad (4.95)$$

onde t_β é a amplitude do *hopping* dos elétrons da banda β , e que pela condição de *nesting*

$$\tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}) = -\tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k} + \vec{Q}). \quad (4.96)$$

Com essas considerações pode-se notar que as bandas de energia $E_{\beta,\sigma}^\pm$ não dependem mais de σ e portanto m_f^β pode ser reescrito como

$$m_f^\beta = \Delta_\beta \chi_f^{\beta\beta}(\Delta_\beta), \quad (4.97)$$

onde a susceptibilidade $\chi_f^{\beta\beta}(\Delta_\beta)$ é dada por:

$$\chi_f^{\beta\beta}(\Delta_\beta) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{f(E_\beta^+(\vec{k})) - f(E_\beta^-(\vec{k}))}{E_\beta^+(\vec{k}) - E_\beta^-(\vec{k})} \right], \quad (4.98)$$

ou, usando as expressões 4.94

$$\chi_f^{\beta\beta}(\Delta_\beta) = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{f(E_\beta^+(\vec{k})) - f(E_\beta^-(\vec{k}))}{\sqrt{(t_\beta \epsilon(\vec{k}))^2 + (\Delta_\beta)^2}} \right]. \quad (4.99)$$

O mesmo procedimento é utilizado para calcular m_f^α . Para facilitar os cálculos, escreva-se $G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ na forma:

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = M_\sigma^\alpha F_\sigma^\alpha(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega), \quad (4.100)$$

onde

$$F_\sigma^\alpha(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{(\omega - \epsilon(\vec{k}))(\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}))}{D_\sigma^\alpha(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)}. \quad (4.101)$$

A quantidade $F_\sigma^\alpha(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ é separada em frações parciais:

$$F_\sigma^\alpha(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{A_{1,\vec{k}}^\alpha}{\omega - E_\alpha^{(1)}(\vec{k})} + \frac{A_{2,\vec{k}}^\alpha}{\omega - E_\alpha^{(2)}(\vec{k})} + \frac{A_{3,\vec{k}}^\alpha}{\omega - E_\alpha^{(3)}(\vec{k})} + \frac{A_{4,\vec{k}}^\alpha}{\omega - E_\alpha^{(4)}(\vec{k})}, \quad (4.102)$$

com pesos espectrais

$$A_{1,\vec{k}}^\alpha = \frac{(E_\alpha^{(1)}(\vec{k}))^2 - (\epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}))E_\alpha^{(1)}(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k})\epsilon(\vec{k} + \vec{Q})}{(E_\alpha^{(1)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(2)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(1)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(3)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(1)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(4)}(\vec{k}))}, \quad (4.103)$$

$$A_{2,\vec{k}}^\alpha = \frac{(E_\alpha^{(2)}(\vec{k}))^2 - (\epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}))E_\alpha^{(2)}(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k})\epsilon(\vec{k} + \vec{Q})}{(E_\alpha^{(2)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(1)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(2)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(3)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(2)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(4)}(\vec{k}))}, \quad (4.104)$$

$$A_{3,\vec{k}}^\alpha = \frac{(E_\alpha^{(3)}(\vec{k}))^2 - (\epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}))E_\alpha^{(3)}(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k})\epsilon(\vec{k} + \vec{Q})}{(E_\alpha^{(3)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(1)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(3)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(2)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(3)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(4)}(\vec{k}))}, \quad (4.105)$$

e

$$A_{4,\vec{k}}^\alpha = \frac{(E_\alpha^{(4)}(\vec{k}))^2 - (\epsilon(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}))E_\alpha^{(4)}(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k})\epsilon(\vec{k} + \vec{Q})}{(E_\alpha^{(4)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(1)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(4)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(2)}(\vec{k}))(E_\alpha^{(4)}(\vec{k}) - E_\alpha^{(3)}(\vec{k}))}. \quad (4.106)$$

O denominador da quantidade $F_\sigma^\alpha(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ é um polinômio de grau 4 em ω (dado pela equação 4.80) por isso, para simplificar o trabalho analítico, as bandas de energia $E_\alpha^{(i)}$ foram calculadas (usando expressões analíticas) por meio de um programa em linguagem fortran 95. Portanto, nesse caso, as expressões para as bandas não serão apresentadas.

Utilizando as equações 3.55 e 3.59, e resolvendo a integral em ω , pode-se escrever m_f^α

como:

$$m_f^\alpha = \Delta_\alpha \chi_f^{\alpha\alpha}(\Delta_\alpha). \quad (4.107)$$

sendo Δ_α dado pela equação 4.91 e a susceptibilidade $\chi_f^{\alpha\alpha}(\Delta_\alpha)$ dada por:

$$\chi_f^{\alpha\alpha}(\Delta_\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [f(E_\alpha^{(1)}(\vec{k}))A_{1,\vec{k}}^\alpha + f(E_\alpha^{(2)}(\vec{k}))A_{2,\vec{k}}^\alpha + f(E_\alpha^{(3)}(\vec{k}))A_{3,\vec{k}}^\alpha + f(E_\alpha^{(4)}(\vec{k}))A_{4,\vec{k}}^\alpha],$$

onde $f(E_{\beta,\sigma}^{(i)}(\vec{k}))$ é função de Fermi.

Assumindo que a relação de dispersão para a banda α também é homotética com a banda de condução, tem-se

$$\tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k}) = t_\alpha \epsilon(\vec{k}), \quad (4.108)$$

onde t_α é a amplitude do *hopping* dos elétrons da banda α , e que pela condição de *nesting*

$$\tilde{E}_f^\alpha(\vec{k}) = -\tilde{E}_f^\alpha(\vec{k} + \vec{Q}). \quad (4.109)$$

Dessa forma, os pesos espectrais $A_{i,\vec{k}}^\alpha$ e as bandas de energia $E_\alpha^{(i)}(\vec{k})$ também não dependem de σ . Essa afirmação pode ser feita, mesmo sem as expressões analíticas das bandas, pela análise do denominador dado na equação 4.80. O único termo que continua dependendo de σ é o *gap* M_σ^α e esse difere apenas por um sinal para $\sigma = \uparrow$ ou $\sigma = \downarrow$, como esse termo sempre aparece elevado ao quadrado não faz diferença considerar o *spin*.

4.2.0.2 Estabilidade da fase antiferromagnética

Além de calcular os parâmetros de ordem para a fase AF, também é importante obter as expressões para verificar a estabilidade da fase AF em relação a fase PM. Segundo o critério de Stoner (ver capítulo 2), pode-se obter a instabilidade da fase PM frente à fase de Neel quando a susceptibilidade AF, na condição em que $\Delta_\beta=0$ e $\Delta_\alpha=0$, diverge.

No caso da banda β , $\chi_f^{\beta\beta}(\Delta_\beta = 0)$ é dada por:

$$\chi_f^{\beta\beta}(0) = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{f(E_\beta^+(\vec{k})) - f(E_\beta^-(\vec{k}))}{t_\beta \epsilon(\vec{k})} \right], \quad (4.110)$$

onde $E_\beta^+(\vec{k}) = \tilde{E}_f^\beta(\vec{k})$ e $E_\beta^-(\vec{k}) = \tilde{E}_f^\beta(\vec{k} + \vec{Q})$.

No caso da banda α as expressões são mais complexas. Para $\Delta_\alpha = 0$, a equação 4.80

se torna

$$D_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = ((\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k}))(\omega - \epsilon(\vec{k})) - |V_{\alpha}(\vec{k})|^2) \\ \times ((\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k} + \vec{Q}))(\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})) - |V_{\alpha}(\vec{k} + \vec{Q})|^2), \quad (4.111)$$

portanto, a quantidade $F_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k} + \vec{Q}, \omega)$, dada pela equação 4.101, pode ser escrita como:

$$F_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q})}{(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k}))(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q}))} + \frac{A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q})}{(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k}))(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q}))} \\ + \frac{A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q})}{(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k}))(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q}))} + \frac{A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q})}{(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k}))(\omega - E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q}))}, \quad (4.112)$$

onde os pesos espectrais $A_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})$ e as bandas $E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})$ são:

$$A_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})}{\sqrt{[\tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})]^2 + 4|V_{\alpha}(\vec{k})|^2}} \right] \quad (4.113)$$

e

$$E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})}{2} \right]^2 + |V_{\alpha}(\vec{k})|^2}. \quad (4.114)$$

Utilizando a igualdade

$$\frac{1}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})} \times \frac{1}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k} + \vec{Q})} = \frac{1}{E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k}) - E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k} + \vec{Q})} \\ \times \left(\frac{1}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})} - \frac{1}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k} + \vec{Q})} \right), \quad (4.115)$$

pode-se reescrever 4.112 da seguinte maneira:

$$F_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q})}{E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k}) - E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q})} + \frac{A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q})}{E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k}) - E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q})} \\ + \frac{A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q})}{E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k}) - E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k} + \vec{Q})} + \frac{A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k})A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q})}{E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k}) - E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k} + \vec{Q})} \quad (4.116)$$

e finalmente obtém-se:

$$\chi_f^{\alpha\alpha}(0) = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}, \pm, \mp} [A_{\alpha}^{\pm}(\vec{k} + \vec{Q})A_{\alpha}^{\mp}(\vec{k})] \left(\frac{f(E_{\alpha}^{\pm}(\vec{k} + \vec{Q})) - f(E_{\alpha}^{\mp}(\vec{k}))}{E_{\alpha}^{\mp}(\vec{k}) - E_{\alpha}^{\pm}(\vec{k} + \vec{Q})} \right). \quad (4.117)$$

A divergência nas susceptibilidades $\chi_f^{\beta\beta}(0)$ e $\chi_f^{\alpha\alpha}(0)$ foi verificada através de um pro-

grama computacional escrito na linguagem fortran 95 e os resultados numéricos são apresentados no capítulo 5.

4.2.0.3 Linha de transições de segunda ordem AF-PM

As expressões 4.99 e 4.117, além de serem usadas para verificar a estabilidade da fase AF, também permitem obter uma expressão para calcular as temperaturas de transições de fase de segunda ordem AF-PM.

Considerando as expressões para as magnetizações m_f^α e m_f^β dadas nas equações 4.92, 4.93, 4.97 e 4.107 chega-se ao seguinte conjunto de equações:

$$\frac{\Delta_\alpha U - \Delta_\beta J}{U^2 - J^2} = \Delta_\alpha \chi_f^{\alpha\alpha}(\Delta_\alpha) \quad (4.118)$$

e

$$\frac{\Delta_\beta U - \Delta_\alpha J}{U^2 - J^2} = \Delta_\beta \chi_f^{\beta\beta}(\Delta_\beta). \quad (4.119)$$

Da equação 4.118 tem-se:

$$\Delta_\alpha = \frac{-\Delta_\beta J}{\chi_f^{\alpha\alpha}(\Delta_\alpha)[U^2 - J^2] - U} \quad (4.120)$$

e com a equação 4.119 obtém-se:

$$\Delta_\alpha = \frac{-\Delta_\beta}{J} \{ \chi_f^{\beta\beta}(\Delta_\beta)[U^2 - J^2] - U \} \quad (4.121)$$

e por fim, igualando 4.120 e 4.121 encontra-se a seguinte expressão:

$$(1 - U \chi_f^{\alpha\alpha}(0))(1 - U \chi_f^{\beta\beta}(0)) = J^2 \chi_f^{\alpha\alpha}(0) \chi_f^{\beta\beta}(0). \quad (4.122)$$

A temperatura que satisfaz a equação acima quando $\Delta_\alpha = \Delta_\beta = 0$, marca a transição AF-PM para uma dada largura de banda W . Utilizando a equação 4.122 foi possível obter a linha de transição de segunda ordem AF-PM, por meio de métodos numéricos, para o diagrama de fases $T \times W$ apresentado no capítulo 5. Contudo, essa expressão só é válida para transições em que o parâmetro de ordem vai continuamente a zero, como é o caso das transições de segunda ordem.

Para obter a linha de transições de primeira ordem HO-AF foi necessário comparar a energia livre de Helmholtz F das duas fases.

No caso da fase AF, F_N é dada por (RISEBOROUGH S. G. MAGALHAES, 2014):

$$F_N = -k_B T \sum_{\gamma, \vec{k}} \ln(1 + \exp[-\beta(E^\gamma - \mu)]) + \mu N_t + \frac{N}{U^2 - J^2} (U[\Delta_\alpha^2 + \Delta_\beta^2] - 2J\Delta_\alpha\Delta_\beta) \quad (4.123)$$

onde E^γ são as relações de dispersão para as bandas α e β obtidas, respectivamente, de

$$|\Delta_\alpha|^2 (\omega - \epsilon(\vec{k})) (\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})) = ((\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k})) (\omega - \epsilon(\vec{k})) - |V_\alpha(\vec{k})|^2) \\ \times ((\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k} + \vec{Q})) (\omega - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})) - |V_\alpha(\vec{k} + \vec{Q})|^2) \quad (4.124)$$

e

$$|\Delta_\beta|^2 = (\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k})) (\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k} + \vec{Q})), \quad (4.125)$$

que são os denominadores das funções de Green $G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ e $G_{ff,\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k} + \vec{Q}, \omega)$.

PONTO TRI-CRÍTICO

Com o objetivo de verificar a existência de pontos tri-críticos no diagrama de fases $T \times W$ da fase AF, foi feita a análise dos coeficientes da expansão da energia livre F_N , com base na teoria de Landau introduzida na seção 3.4.1.

Reescrevendo F_N como:

$$F_N = F_{ln} + F_{\alpha\beta}, \quad (4.126)$$

onde

$$F_{ln} = -k_B T \sum_{\gamma, \vec{k}} \ln(1 + \exp[-\beta(E^\gamma - \mu)]) + \mu N_t \quad (4.127)$$

e

$$F_{\alpha\beta} = \frac{N}{U^2 - J^2} (U[\Delta_\alpha^2 + \Delta_\beta^2] - 2J\Delta_\alpha\Delta_\beta), \quad (4.128)$$

e expandindo em uma série de Taylor de duas variáveis, onde nesse caso, as variáveis são m_α e m_β e mantendo apenas os termos de segunda e quarta ordem, tem-se

$$F_N(m_\alpha, m_\beta) = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\beta^2} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} + U \right] m_\beta^2 + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\alpha^2} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} + U \right] m_\alpha^2 + \\ \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4}{\partial m_\beta^4} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} m_\beta^4 + \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4}{\partial m_\alpha^4} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} m_\alpha^4 + \dots \quad (4.129)$$

Comparando essa expressão com a energia livre de Landau dada na equação 3.68,

tem-se

$$A_\alpha = U + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\alpha^2} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0}, \quad (4.130)$$

$$A_\beta = U + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\beta^2} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} \quad (4.131)$$

e

$$B_\alpha = \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\alpha^4} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} \quad (4.132)$$

$$B_\beta = \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\beta^4} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0}. \quad (4.133)$$

Adaptando para o caso de duas variáveis, a discussão feita na seção 3.4.1, no ponto tri-crítico deve-se ter $A_\alpha=A_\beta=0$ e $B_\alpha=B_\beta=0$. No entanto, devido à relação entre os parâmetros de ordem m_α e m_β , é suficiente analisar apenas um conjunto de equações, como por exemplo para A_α e B_α . Assim, obtém-se:

$$A_\alpha = U + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\alpha^2} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} = 0 \quad (4.134)$$

e

$$B_\alpha = \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^2}{\partial m_\alpha^4} F_{ln} \right)_{m_{\alpha,\beta}=0} = 0. \quad (4.135)$$

A solução auto-consistente dessas duas equações acopladas fornece o par de parâmetros (T_{Tric} e W_{Tric}) que são, respectivamente, os valores da temperatura e da largura de banda no ponto tri-crítico do diagrama de fases $T \times W$.

4.3 PARTE III- FASE ORDEM OCULTA

Nesta seção, apresentam-se as funções de Green e os parâmetros de ordem para a fase HO. Nessa parte do trabalho, considera-se que o parâmetro da fase AF é nulo. Também são introduzidas as expressões para verificar a estabilidade da HO e para obter a linha de transição de segunda ordem HO-PM.

4.3.0.1 Parâmetro de ordem da fase ordem oculta

Como visto na seção 4.1, o parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},\sigma}$ está relacionado à função de Green $G_{ff,\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ fornecida pela equação 4.71:

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{1}{|\mathbf{A}|} [\kappa_{\vec{Q},\sigma} (M_{\sigma}^{\alpha} M_{\sigma}^{\beta} + E_2^{\alpha} E_1^{\beta} - |\kappa_{\vec{Q},\sigma}|^2)].$$

Considerando $M_{\sigma}^{\alpha} = M_{\sigma}^{\beta} = 0$, tem-se:

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{\kappa_{\vec{Q},\sigma}}{E_1^{\alpha} E_2^{\beta} - |\kappa_{\vec{Q},\sigma}|^2}, \quad (4.136)$$

onde

$$E_1^{\alpha} = \frac{(\omega - \tilde{E}_f^{\alpha}(\vec{k}))(\omega - \epsilon(\vec{k})) - |V_{\alpha}(\vec{k})|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k})} \quad (4.137)$$

e

$$E_2^{\beta} = \omega - \tilde{E}_f^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q}). \quad (4.138)$$

Logo, pode-se escrever:

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \kappa_{\vec{Q},\sigma} D_{\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega), \quad (4.139)$$

sendo

$$D_{\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{1}{E_1^{\alpha} E_2^{\beta} - |\kappa_{\vec{Q},\sigma}|^2} \quad (4.140)$$

ou, separando em frações parciais:

$$D_{\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \frac{A_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k})} + \frac{A_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k})} + \frac{A_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k})} \quad (4.141)$$

onde os pesos espectrais são:

$$A_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}) = \frac{E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})}{(E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}) - E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k}))(E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}) - E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k}))}, \quad (4.142)$$

$$A_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k}) = \frac{E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})}{(E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k}) - E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}))(E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k}) - E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k}))} \quad (4.143)$$

e

$$A_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k}) = \frac{E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})}{(E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k}) - E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}))(E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k}) - E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k}))}. \quad (4.144)$$

As bandas de energia $E_{\alpha\beta}^{(i)}(\vec{k})$ foram calculadas (usando expressões analíticas) por meio de um programa em linguagem fortran 95, logo não serão apresentadas neste texto.

Lembrando que o parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},\sigma}$ está relacionado à $G_{ff\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ através da equação 3.55, tem-se:

$$z_{\vec{Q},\sigma} = i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \kappa_{\vec{Q}\sigma} [D_{\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega + i\epsilon) - D_{\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega - i\epsilon)]. \quad (4.145)$$

Utilizando-se novamente a identidade 3.59 e resolvendo a integral em ω , pode-se escrever:

$$z_{\vec{Q},\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \kappa_{\vec{Q}\sigma} [f(E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k})) A_{1,\vec{k}}^{\alpha\beta} + f(E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k})) A_{2,\vec{k}}^{\alpha\beta} + f(E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k})) A_{3,\vec{k}}^{\alpha\beta}], \quad (4.146)$$

ou:

$$z_{\vec{Q},\sigma} = \kappa_{\vec{Q}\sigma} \chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(\kappa_{\vec{Q}\sigma}) \quad (4.147)$$

onde $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(\kappa_{\vec{Q}\sigma})$ é a susceptibilidade inter-banda

$$\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(\kappa_{\vec{Q}\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [f(E_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k})) A_{1,\vec{k}}^{\alpha\beta} + f(E_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{k})) A_{2,\vec{k}}^{\alpha\beta} + f(E_{\alpha\beta}^{(3)}(\vec{k})) A_{3,\vec{k}}^{\alpha\beta}] \quad (4.148)$$

e $f(E_{\alpha\beta}^{(i)}(\vec{k}))$ é a função de Fermi.

4.3.0.2 Estabilidade da fase ordem oculta

Similarmente ao caso da fase AF, utiliza-se o critério de Stoner (FAZEKAS, 1999) para verificar a instabilidade da fase PM frente à fase HO.

Para isso foi necessário obter a expressão da susceptibilidade inter-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(\kappa_{\vec{Q}\sigma})$ considerando $\kappa_{\vec{Q}\sigma} = 0$. Nesse caso, a equação 4.140 pode ser reescrita na forma:

$$D_{\sigma}^{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k} + \vec{Q}, \omega) = \left[\frac{A_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^{+}(\vec{k})} + \frac{A_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^{-}(\vec{k})} \right] \frac{1}{(\omega - E_f^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q}))}. \quad (4.149)$$

Os pesos espectrais $A_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})$ e as bandas de energia $E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})$ são dados pelas equações, 4.113 e 4.114. E, por conseguinte, obtém-se:

$$\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(0) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \pm} A_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k}) \left[\frac{f(E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})) - f(E_f^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q}))}{E_f^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q}) - E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})} \right]. \quad (4.150)$$

Quando $\tilde{E}_f^{\beta}(\vec{k} + \vec{Q}) \rightarrow E_{\alpha,\sigma}^{\pm}(\vec{k})$, a susceptibilidade $\chi_f^{\alpha\beta}(0)$ diverge e o estado PM torna-se instável em relação ao estado HO. Isso ocorre para um valor específico de potencial químico, conforme será discutido no capítulo 5.

4.3.0.3 Linha de transições de segunda ordem HO-PM

A equação 4.150, obtida para verificar a estabilidade da fase HO, também permite obter a expressão para calcular as temperaturas de transições de fase de segunda ordem HO-PM.

Da equação 4.34 tem-se:

$$\kappa_{\vec{Q},\sigma} = Jz_{\vec{Q},-\sigma} - (U - J)z_{\vec{Q},\sigma} \quad (4.151)$$

e

$$\kappa_{\vec{Q},-\sigma} = Jz_{\vec{Q},\sigma} - (U - J)z_{\vec{Q},-\sigma}. \quad (4.152)$$

Substituindo 4.147 nas expressões acima, obtém-se:

$$\kappa_{\vec{Q},-\sigma} = \frac{J\kappa_{\vec{Q},\sigma}\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(0)}{1 + (U - J)\chi_{f,-\sigma}^{\alpha\beta}(0)} \quad (4.153)$$

e

$$\kappa_{\vec{Q},-\sigma} = \frac{\kappa_{\vec{Q},\sigma}[1 + (U - J)\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(0)]}{J\chi_{f,-\sigma}^{\alpha\beta}(0)}. \quad (4.154)$$

Igualando as equações 4.153 e 4.154 chega-se a seguinte expressão:

$$[1 - (U - J)\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(0)][1 - (U - J)\chi_{f,-\sigma}^{\alpha\beta}(0)] = J^2\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}(0)\chi_{f,-\sigma}^{\alpha\beta}(0). \quad (4.155)$$

A temperatura que satisfaz a equação acima quando $\kappa_{\vec{Q},\sigma}^{\beta\alpha} = 0$, marca a transição HO-PM para uma dada largura de banda W . Contudo, a equação 4.155 só pode ser usada para marcar transições de segunda ordem. Sendo assim, para obter a linha de primeira ordem HO-AF, como discutido na seção anterior, utiliza-se a energia livre de Helmholtz. Para a fase HO, a energia livre de Helmholtz, definida como F_{HO} , é dada por (RISEBOROUGH S. G. MAGALHAES, 2014):

$$F_{HO} = -k_B T \sum_{\vec{k}} \sum_{\gamma=1}^3 \ln(1 + \exp[-\beta(E^\gamma - \mu)]) + \mu N_t - N \sum_{\sigma} z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha\beta} \kappa_{\vec{Q},\sigma}^{\beta\alpha}, \quad (4.156)$$

onde $E_{\alpha\beta}^\gamma(\vec{k} + \vec{Q})$ são as soluções do polinômio que aparece no denominador da equação 4.136:

$$\left[\frac{(\omega - E_f^\alpha(\vec{k}))(\omega - \epsilon(\vec{k})) - |V_\alpha(\vec{k})|^2}{\omega - \epsilon(\vec{k})} \right] (\omega - E_f^\beta(\vec{k} + \vec{Q})) - |\kappa_{\vec{Q},\sigma}|^2 = 0. \quad (4.157)$$

As expressões obtidas nessa parte do trabalho foram usadas em um código escrito em linguagem fortran 95 para investigar a fase HO.

4.4 ESTADO PARAMAGNÉTICO

No estado paramagnético (PM) os *gaps* M_σ^X e $\kappa_{\vec{Q}\sigma}$ são iguais a zero, o que torna as funções de Green muito mais simples.

Para calcular o potencial químico μ é preciso obter as expressões para as ocupações médias das bandas f (α e β) e d . Durante todo o processo numérico o potencial químico é calculado no estado PM.

Para as bandas f , as funções de Green são calculadas a partir das equações 4.71 e 4.74:

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega) = \frac{\omega - \epsilon(\vec{k})}{[\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k})][\omega - \epsilon(\vec{k}) - |V_\alpha(\vec{k})|^2]} \quad (4.158)$$

e

$$G_{ff,\sigma}^{\beta\beta}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k})}. \quad (4.159)$$

Separando a equação 4.158 em frações parciais, como foi feito para as demais funções de Green nas seções anteriores, tem-se:

$$G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega) = \frac{A_{\alpha,\sigma}^+(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^+(\vec{k})} + \frac{A_{\alpha,\sigma}^-(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha,\sigma}^-(\vec{k})} \quad (4.160)$$

onde os pesos espectrais $A_{\alpha,\sigma}^\pm(\vec{k})$ e bandas de energia $E_{\alpha,\sigma}^\pm(\vec{k})$ são dados pelas equações 4.113 e 4.114.

Utilizando a equação 3.55, pode escrever $n_{f,\sigma}^\alpha$ como:

$$n_{f,\sigma}^\alpha = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) [G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega + i\epsilon) - G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega - i\epsilon)] \quad (4.161)$$

e resolvendo integral em ω , com o auxílio da identidade 3.59 obtém-se:

$$n_{f,\sigma}^\alpha = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [f(E_{\alpha,\sigma}^+(\vec{k}))A_{\alpha,\sigma}^+(\vec{k}) + f(E_{\alpha,\sigma}^-(\vec{k}))A_{\alpha,\sigma}^-(\vec{k})] \quad (4.162)$$

e similarmente, $n_{f,\sigma}^\beta$ pode ser escrito como:

$$n_{f,\sigma}^\beta = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}))}{\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\beta(\vec{k})}. \quad (4.163)$$

Para obter a ocupação média $n_{d,\sigma}$ foi necessário calcular a função $G_{dd}(\vec{k}, \omega)$. Pela equa-

ção de movimento das funções de Green, introduzida na equação 4.164

$$\omega \langle \langle \hat{B}; \hat{A} \rangle \rangle = \langle [\hat{B}, \hat{A}]_+ \rangle + \langle \langle [\hat{B}, \hat{H}]_-; \hat{A} \rangle \rangle$$

obtém-se:

$$G_{dd,\sigma}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\vec{k})} + \frac{V_\alpha^2 G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega)}{(\omega - \epsilon(\vec{k}))^2}. \quad (4.164)$$

Substituindo $G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega)$ na equação 4.164, chega-se a seguinte expressão:

$$G_{dd,\sigma}(\vec{k}, \omega) = \frac{\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k})}{[\omega - \tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k})][\omega - \epsilon(\vec{k}) - |V_\alpha(\vec{k})|^2]}, \quad (4.165)$$

na qual nota-se que $G_{ff,\sigma}^{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega)$ e $G_{dd,\sigma}(\vec{k}, \omega)$ compartilham o mesmo denominador e, portanto, as mesmas expressões para as bandas de energia $E_{\alpha,\sigma}^\pm(\vec{k})$, sendo essas últimas dadas pela equação 4.114.

Reescrevendo a equação 4.165 em frações parciais obtém-se:

$$G_{dd,\sigma}(\vec{k}, \omega) = \frac{B_\sigma^+(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha\sigma}^+(\vec{k})} + \frac{B_\sigma^-(\vec{k})}{\omega - E_{\alpha\sigma}^-(\vec{k})}, \quad (4.166)$$

onde os pesos espectrais são:

$$B_\sigma^\pm(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left[1 \mp \frac{\tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})}{\sqrt{[\tilde{E}_{f,\sigma}^\alpha(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k})]^2 + 4|V_\alpha(\vec{k})|^2}} \right]. \quad (4.167)$$

Por fim, seguindo o procedimento usado nos casos das ocupações médias $n_{f,\sigma}^\alpha$ e $n_{f,\sigma}^\beta$, tem-se:

$$n_{d,\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [f(E_\sigma^+(\vec{k}))B_\sigma^+(\vec{k}) + f(E_\sigma^-(\vec{k}))B_\sigma^-(\vec{k})]. \quad (4.168)$$

O número de ocupação eletrônica média total das bandas f e d é dado por:

$$N_T = n_{d,\uparrow} + n_{d,\downarrow} + n_{f,\uparrow}^\alpha + n_{f,\downarrow}^\alpha + n_{f,\uparrow}^\beta + n_{f,\downarrow}^\beta, \quad (4.169)$$

logo, o potencial químico deve satisfazer a seguinte condição:

$$\frac{N_T}{2} - n_{d,\uparrow} - n_{f,\uparrow}^\alpha - n_{f,\uparrow}^\beta = 0, \quad (4.170)$$

uma vez que no estado paramagnético $n_\uparrow = n_\downarrow$.

Com essas expressões analíticas torna-se possível calcular o potencial químico do sistema através de um programa computacional. É válido esclarecer que as equações acima dependem do potencial químico μ apenas através da função Fermi $f(E)$.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

No presente trabalho, estudou-se as fases ordem oculta (HO) e antiferromagnética (AF) do modelo de rede sub-blindada de Anderson (UAL) no âmbito da teoria proposta por Riseborough, Coqblin e Magalhaes na referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012).

O modelo UAL foi investigado usando uma aproximação de campo médio em conjunto com a técnica das funções de Green.

Nesse capítulo, são apresentados e discutidos os resultados numéricos obtidos através de um programa computacional desenvolvido em linguagem fortran 95.

Seguindo a referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012), todos os resultados foram obtidos usando $J=U/5$, $U=0,165$ eV, $N_T=1,609$, $t_d=W/6$ eV, $t_f=W/20$ eV, $W_f/W=0,30$, onde $W = W_d/2$. Também assumiu-se que $V_\alpha(\vec{k})=V_\alpha=1/10$ eV e que o valor efetivo do nível de energia $5f$ é $E_f=0,30$ eV. A variação da largura da banda W simula os efeitos da pressão sobre o sistema.

5.1 ESTADO DE NEEL

ESTABILIDADE DO ESTADO DE NEEL

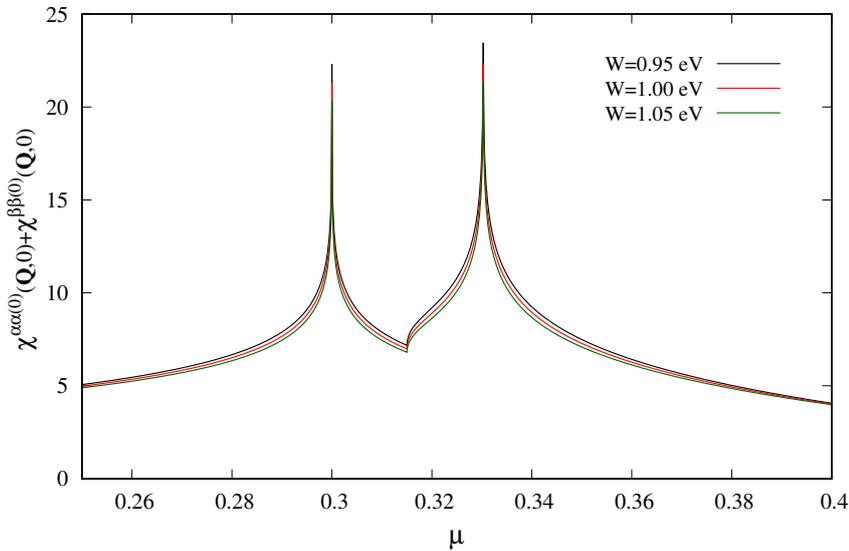
Uma questão de grande importância é a estabilidade do estado de Neel frente a fase paramagnética (PM). Na referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHAES, 2012) essa análise é feita através da susceptibilidade intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$, considerando o critério de Stoner (ver seção 2.2.0.2). Neste trabalho, o resultado de tal análise foi reproduzido. A susceptibilidade intra-banda foi calculada em função do potencial químico μ para $T=0$ e diferentes valores de largura de banda W .

Pelo critério de Stoner, a região onde aparece uma divergência na susceptibilidade $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ é a região em que o estado paramagnético (PM) torna-se instável em relação ao AF.

A figura 5.1 mostra que no intervalo de potencial químico entre 0,29 eV a 0,34 eV, a susceptibilidade intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ apresenta duas divergências. O primeiro pico está relacionado com a banda β e o segundo com a banda α . Analisando a expressão de $\chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ (equação 4.110) nota-se que a susceptibilidade diverge quando a superfície de Fermi se aproxima da condição de *nesting* $\mu = E_{f,\sigma}^\beta(\vec{k}) = E_{f,\sigma}^\beta(\vec{k} + \vec{Q})$ em 0,30 eV. Esse resultado mostra que para determinados valores de potencial químico a fase de Neel é mais estável que a fase a PM.

O resultado da figura 5.1 também mostra que as divergências em $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ não de-

Figura 5.1 – Susceptibilidade intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ como função do potencial químico para diversos valores de W e $T=0$. As divergências na susceptibilidade intra-banda indicam a instabilidade do estado PM em relação ao estado de Neel.



Fonte: Autora.

pendem da largura de banda W .

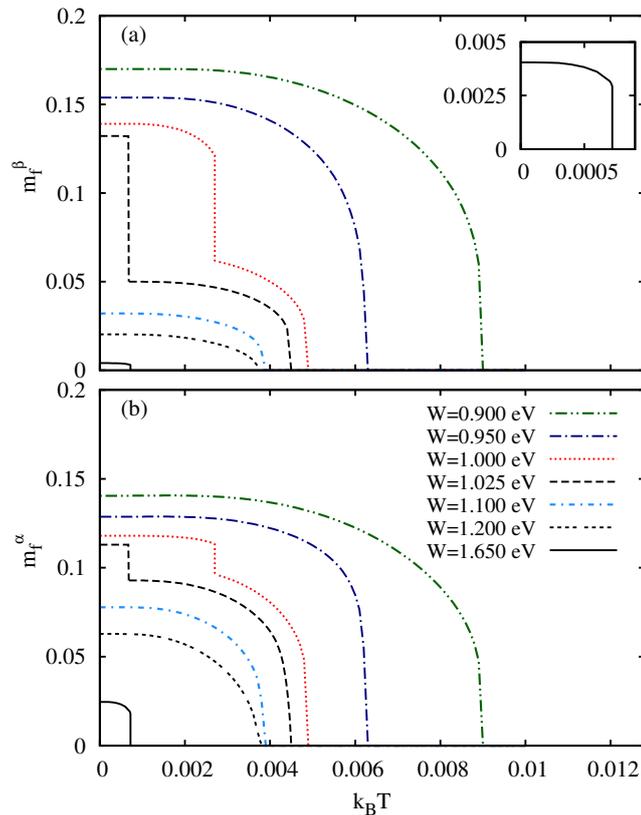
PARÂMETROS DE ORDEM DE NEEL

Como discutido no capítulo 3, quando ocorre uma quebra de simetria em uma rede magnética, o parâmetro de ordem do sistema passa a ter um valor diferente de zero, levando a uma transição de fase. Sendo assim, o parâmetro de ordem que descreve a fase de Neel deve ser finito quando o sistema se encontra na fase AF e nulo caso contrário. Investigando o comportamento de um parâmetro de ordem pode-se obter algumas informações bastante relevantes, como temperatura crítica, pressão crítica, tipo de transição: de primeira ou segunda ordem. Essas informações fazem do parâmetro de ordem uma quantidade física importante para o estudo de um sistema.

Neste trabalho, investigou-se o comportamento dos parâmetros de Neel em função da temperatura e da largura de banda W . O parâmetro de ordem m_f^α é a magnetização associada a banda α e o parâmetro de ordem m_f^β a magnetização associada a banda β . O comportamento de m_f^α e m_f^β em função da temperatura, para diferentes larguras de banda W , é mostrado na figura 5.2.

Observa-se, tanto para m_f^α como para m_f^β , que conforme a largura de banda aumenta a temperatura crítica de transição T_N diminui. Também nota-se que embora as amplitudes dos parâmetros de ordem sejam diferentes em $T=0$, ambos vão a zero na mesma T_N , para os diversos valores de W . Para valores de largura de banda W abaixo de 1,650 eV os parâmetros de ordem vão a zero continuamente. Esse comportamento sugere que a

Figura 5.2 – Parâmetros de ordem m_f^β (a) e m_f^α (b) em função de $k_B T$, para diversos valores de W . Embora os valores de m_f^α e m_f^β sejam diferentes em $T=0$, ambos vão a zero na mesma T_N . Para o caso de $W=1,650$ eV os parâmetros de ordem vão a zero descontinuamente, sugerindo uma transição de primeira ordem para a fase PM. Para os demais casos de W a transição se dá de forma contínua. Observam-se descontinuidades em ambos os parâmetros de ordem na região entre $k_B T=0,0006$ e $0,003$ eV, indicando transições de fase de primeira ordem dentro da fase de Neel.

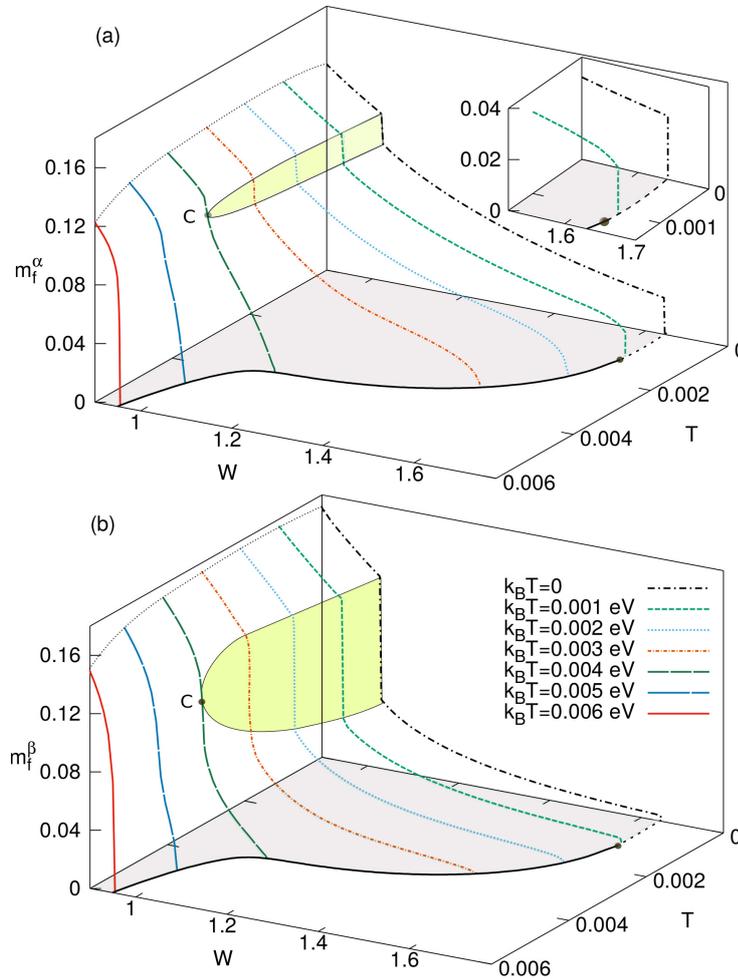


Fonte: Autora.

transição do estado de Neel para o estado PM é uma transição de segunda ordem. No caso em que $W=1,650$ eV (mostrado em detalhe na figura 5.2 (a)) observa-se uma descontinuidade nos parâmetros de ordem, sugestiva de uma transição de primeira ordem. Nas curvas para $W=1,000$ eV e $W=1,025$ eV também são observadas descontinuidades na região entre $k_B T=0,0006$ e $0,003$ eV, o que indica outras transições de primeira ordem, contudo, após essas possíveis transições de fase os parâmetros de ordem ainda são finitos, o que significa que o sistema ainda se encontra na fase de Neel.

O comportamento dos parâmetros de ordem m_f^α e m_f^β como função da largura de banda W para diversos valores de temperatura também foi analisado. Nas figuras 5.3 (a) e (b), observa-se que os parâmetros de ordem decrescem conforme a largura de banda W aumenta. Quanto mais alta a temperatura, menor o valor de largura de banda W necessário para destruir o estado de Neel. Para $k_B T=0$ e $k_B T=0,001$ eV a transição para o estado PM é marcada por uma descontinuidade. Isso sugere que essa transição de fase é uma

Figura 5.3 – Parâmetros de ordem m_f^α (a) e m_f^β (b) em função de W , para diversos valores de $k_B T$. Ambos os parâmetros vão a zero na mesma largura de banda crítica W_C . As descontinuidades nos parâmetros de ordem indicam transições de primeira ordem. A região verde marca uma suposta região de transições de primeira ordem entre duas fases AF, que possivelmente termina em um ponto crítico.

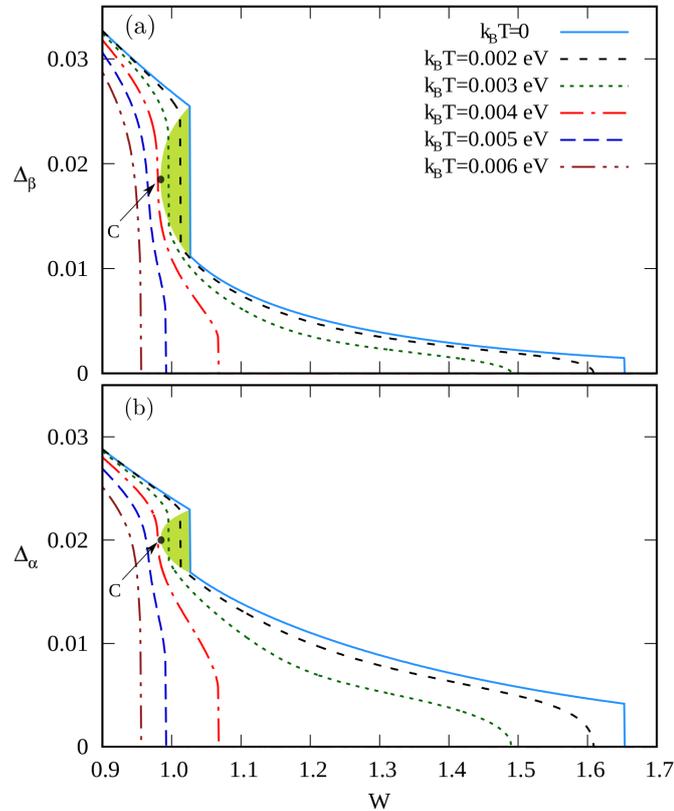


Fonte: Autora.

transição de primeira ordem. Para os demais valores de $k_B T$ a transição AF-PM ocorre de forma contínua, característica de transições de segunda ordem. Esses resultados indicam que há uma mudança no tipo de transição AF-PM e também sugerem a existência de um ponto tri-crítico. Também observa-se a presença de outras descontinuidades nos parâmetros de Neel, para diversos valores de $k_B T$, após as quais m_f^α e m_f^β permanecem finitos, o que indica que o sistema continua no estado AF. Um comportamento similar é observado na figura 5.2. Aparentemente existe uma região de transições de fase de primeira ordem dentro da fase de Neel que termina em um ponto crítico localizado em $k_B T_c = 0,0038$ eV e $W_c = 0,9826$ eV. A região de cor verde na figura 5.3 marca essa suposta região de transições de primeira ordem e o ponto C representa um ponto crítico.

A natureza das transições observadas nas figuras 5.3 (a) e (b) é investigada mais adi-

Figura 5.4 – *Gaps* Δ_α e Δ_β em função de W , para diversos valores de $k_B T$. Essas quantidades apresentam comportamento similar ao dos parâmetros de ordem, diferindo apenas na ordem de grandeza. A região verde marca uma suposta região de transições de primeira ordem entre duas fases de Neel, a qual termina, possivelmente, em um ponto crítico.



Fonte: Autora.

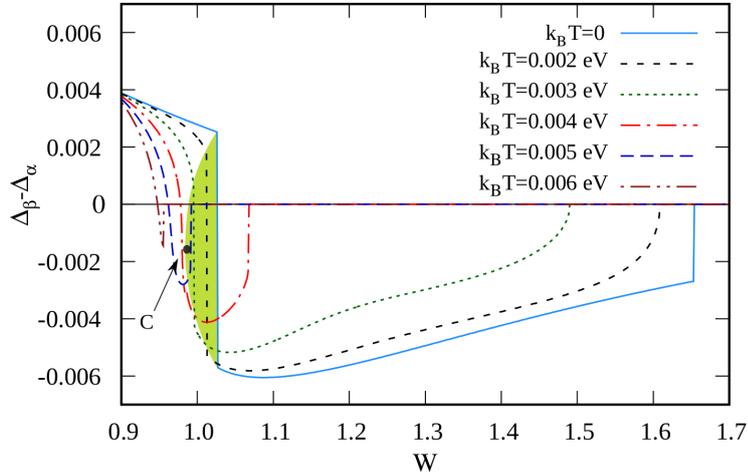
ante pela análise da energia livre de Helmholtz.

Outras quantidades importantes a serem investigadas são os *gaps* de Neel, Δ_α e Δ_β , os quais estão diretamente relacionados aos parâmetros de ordem através das equações 4.90 e 4.91 e podem ser observados na figura 5.4. Os *gaps* de Neel exibem comportamento similar ao dos parâmetros de ordem, diferindo apenas na ordem de grandeza. Nesses resultados, assim como na figura 5.3, observa-se novamente a presença de descontinuidades na região entre $W=0,98$ e $W=1,03$ eV (marcada pela região de cor verde), o que também corrobora com os resultados apresentados na figura 5.2. Conforme a temperatura aumenta a descontinuidade se desloca para esquerda. Para valores de $k_B T$ acima de 0,0038 eV a descontinuidade não é mais observada.

Essa descontinuidade observada nos *gaps* e nos parâmetros de ordem sugere a existência de duas fases de Neel, definidas neste trabalho como AF_1 e AF_2 , cujos parâmetros de ordem apresentam valor finito simultaneamente.

Também é possível notar nesses resultados uma distinção relacionada à amplitude dos

Figura 5.5 – Diferença $\Delta_\beta - \Delta_\alpha$ em função de W , para diversos valores de $k_B T$. A região verde marca uma suposta região de transições de fase de primeira ordem AF_1 - AF_2 , que possivelmente termina em um ponto crítico. A fase AF_1 corresponde a região em que $\Delta_\beta > \Delta_\alpha > 0$ e a fase AF_2 corresponde a região em que $\Delta_\alpha > \Delta_\beta > 0$.



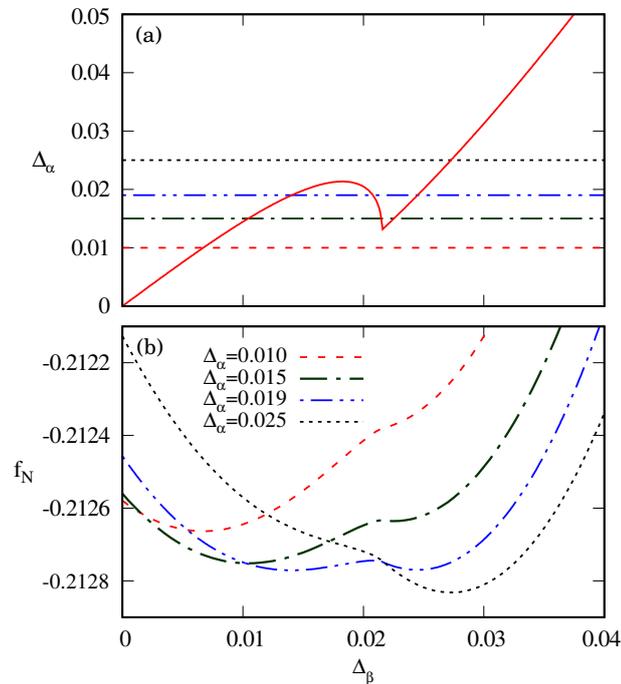
Fonte: Autora.

parâmetros de ordem, ou dos *gaps*. À esquerda da transição, Δ_β tem maior amplitude que Δ_α . Após a transição, Δ_α passa a ter a maior amplitude. Esse comportamento fica bem evidente na figura 5.5, onde tem-se $\Delta_\beta - \Delta_\alpha$ em função da largura de banda W para diversos valores de $k_B T$. Inicialmente a diferença $\Delta_\beta - \Delta_\alpha$ é maior que 0, logo nessa região $\Delta_\beta > \Delta_\alpha$. Conforme a largura de banda aumenta a diferença vai diminuindo até que eventualmente passa a ser menor que zero, indicando uma nova condição em que $\Delta_\beta < \Delta_\alpha$.

Dessa forma, considerando a possibilidade de duas fases de Neel distintas, AF_1 e AF_2 , separadas por uma transição de primeira ordem, definiu-se que a fase AF_1 corresponde a situação em que $\Delta_\beta > \Delta_\alpha > 0$, enquanto AF_2 representa a região em que $\Delta_\alpha > \Delta_\beta > 0$.

Com o objetivo de entender melhor a relação entre os *gaps* de Neel, olhou-se para o comportamento do *gap* Δ_α em função do *gap* Δ_β . O resultado é mostrado na figura 5.6 (a) e foi obtido para $T=0$ e $W=1,00$ eV. Pode-se observar que a relação entre essas quantidades é uma relação não-monotônica, ou seja, para certos valores de Δ_α , há mais de um valor de Δ_β correspondente. Também verificou-se o comportamento da energia livre de Helmholtz por número de sítios, f_N . Na figura 5.6 (b), pode-se observar f_N em função de Δ_β para valores distintos de Δ_α . Os valores de Δ_α foram escolhidos pensando na região de múltiplas soluções. Tem-se um valor abaixo dessa região, dois valores dentro da região de múltiplas soluções e um acima, marcados pelas linhas horizontais presentes na figura 5.6 (a). Pode-se observar que abaixo e acima da região de múltiplas soluções a energia livre apresenta apenas um mínimo, além da solução trivial. Esse mínimo está associado ao mínimo global. Por outro lado, no caso da região de múltiplas soluções a energia livre é

Figura 5.6 – Δ_α e f_N em função de Δ_β para $T=0$ e $W=1,00$ eV. As linhas horizontais no painel (a) marcam os valores de Δ_α para os quais obteve-se as curvas $f_N \times \Delta_\beta$ mostradas no painel (b).



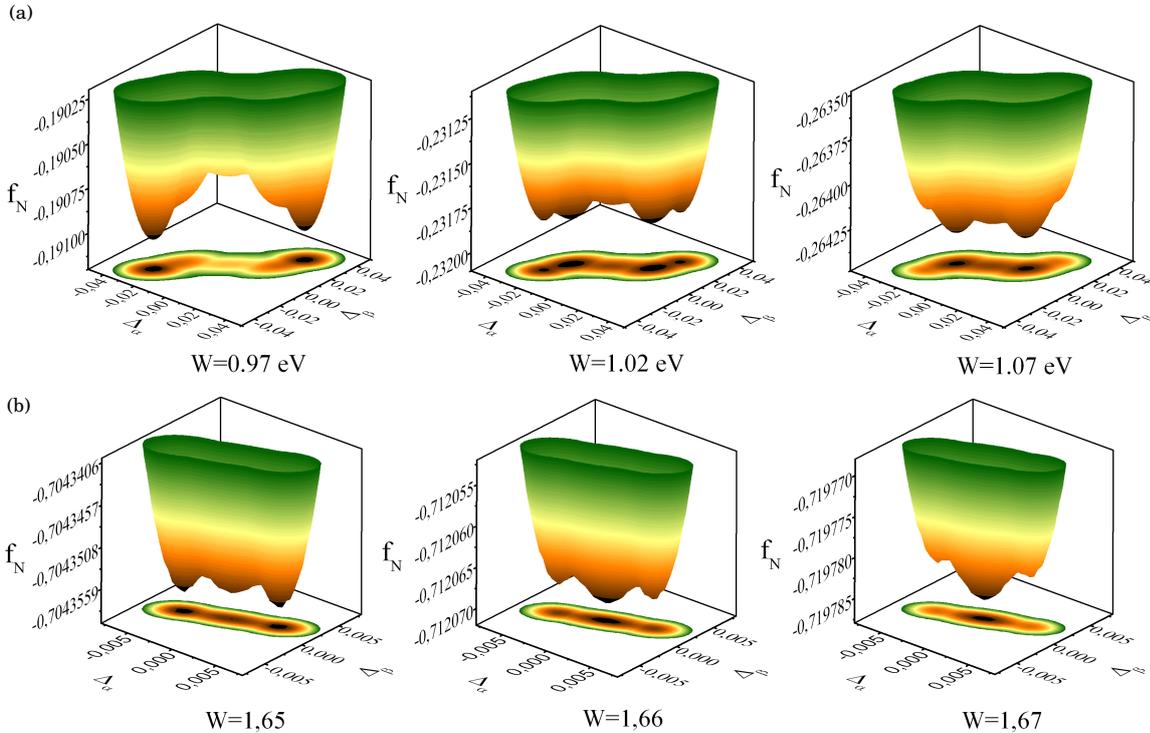
Fonte: Autora.

marcada por dois mínimos e um máximo, além da solução trivial. A solução que apresenta o mínimo com menor energia é a que está relacionada ao mínimo global. Nota-se que antes da transição, a solução associada ao mínimo global se encontra à esquerda, e após a transição, à direita. No caso da curva azul, tem-se os dois mínimos com praticamente o mesmo valor de energia, estando, portanto, muito próximo da transição. O comportamento apresentado por f_N indica a existência de uma transição de primeira ordem nos *gaps* de Neel, o que é condizente com o comportamento dos parâmetros de ordem mostrados nos resultados anteriores.

ENERGIA LIVRE DE HELMHOLTZ

A figura 5.7 apresenta a energia Livre de Helmholtz por número de sítios, f_N , para o estado de Neel em função dos *gaps* Δ_α e Δ_β . Em 5.7(a) tem-se a evolução de f_N para três valores de W próximos da transição AF_1 - AF_2 observada nos parâmetros de Neel em $k_B T=0$. Os discos pretos marcados no plano xy indicam as soluções com energia mais baixa. É possível notar nesses resultados que a região dos $\Delta_{\alpha,\beta} > 0$ e a região dos $\Delta_{\alpha,\beta} < 0$ são simétricas. Sendo assim, optou-se por analisar as soluções que estão relacionadas aos valores positivos de Δ_α e Δ_β . Para $W=0,97$ eV, à esquerda da transição, existe a solução trivial e uma solução não-trivial. A solução não-trivial apresenta menor

Figura 5.7 – Energia livre de Helmholtz por número de sítios f_N em função dos *gaps* de Neel para diversos valores de largura de banda W em $T=0$. Em (a) tem-se a evolução de f_N próximo da transição AF_1 - AF_2 e em (b) próximo da transição AF_2 -PM. Os discos pretos no plano xy indicam as soluções com energia mais baixa. Em ambos os casos tem-se transições de primeira ordem.



Fonte: Autora.

energia que a solução trivial, sendo um mínimo global e se encontra distante da origem. Em $W=1,02$ eV, quando o sistema está muito próximo da transição, nota-se a existência de 2 mínimos, os quais são soluções não-triviais e apresentam praticamente o mesmo valor de energia. Essas soluções têm menor valor de energia do que a solução trivial. Em cima de uma transição deve-se observar todas as soluções (parâmetros de Neel) com a mesma energia. Por último, para $W=1,07$ eV, à direita da transição, observa-se novamente a presença de um mínimo e da solução trivial. Esse mínimo é um mínimo global e está associado à solução não-trivial, que por sua vez se encontra bem próxima da origem. O que significa que houve um “salto” após a transição: à esquerda da transição o mínimo global está associado às soluções mais distantes da origem, à direita da transição passa a estar associado às soluções mais próximas da origem. Contudo, no intervalo de largura de banda W considerado, o mínimo global sempre está associado a uma solução não-trivial, logo o sistema se encontra no estado AF. Por outro lado, o comportamento apresentado pela energia livre é característico de transições de primeira ordem, o que, nesse caso, confirma a existência de uma transição descontínua AF_1 - AF_2 e corrobora com os resultados mostrados para os parâmetros de Neel.

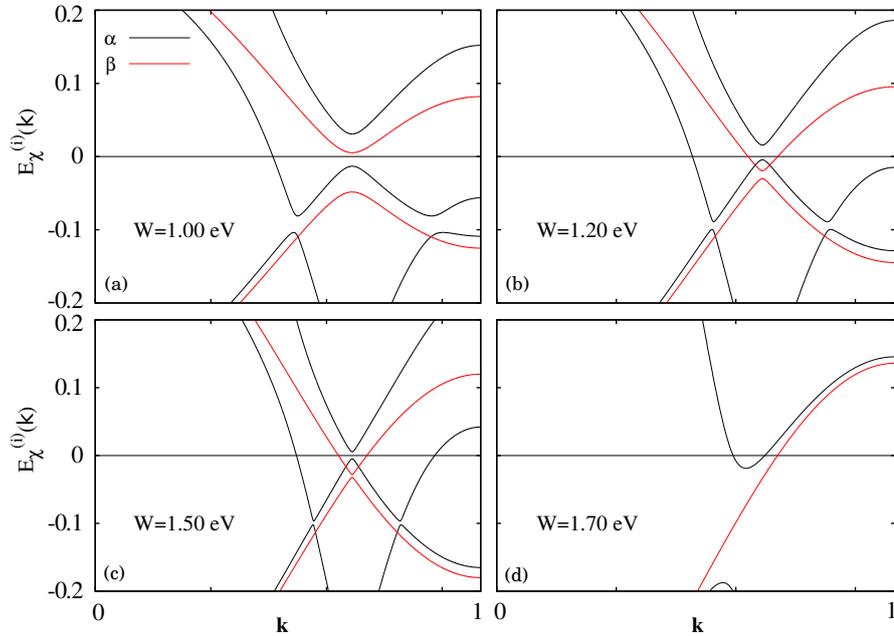
A figura 5.7(b) tem por objetivo verificar a transição descontínua AF₂-PM que também aparece na curva para $k_B T=0$ nas figuras 5.3 e 5.4. É possível notar que para $W=1,65$ eV o mínimo global está associado aos valores de Δ_α e Δ_β não nulos. Para $W=1,66$ eV as soluções não-triviais têm um valor de energia muito próximo do valor de energia da solução trivial. E por fim, para $W=1,67$ o mínimo global passa a estar associado a solução trivial, embora ainda existam soluções não-triviais. Esses resultados confirmam que a transição AF₂-PM em $k_B T=0$ também é uma transição de primeira ordem.

BANDAS DE ENERGIA

As bandas de energia fornecem informações relevantes para o estudo desse problema. Nessas quantidades também é possível observar a influência da variação da largura de banda e da temperatura nos *gaps* de Neel. As estruturas de bandas α e β para $k_B T=0$ e diferentes valores de W são mostradas na figura 5.8. Vale lembrar que α e β são bandas degeneradas e que a banda α está hibridizada com a banda dos elétrons de condução. As funções de Green referentes a banda α possuem 4 polos (ver a equação 4.80), enquanto que as funções de Green relacionadas à banda β possuem apenas dois (ver equação 4.82). Essa diferença deve-se ao termo de hibridização, uma vez que $V_\alpha \neq 0$ e $V_\beta = 0$. Cada polo das funções de Green corresponde a uma banda de energia. As estruturas de bandas α e β foram obtidas ao longo da diagonal $(-\pi, -\pi, 0) - (0, 0, 0) - (\pi, \pi, 0)$ considerando a primeira zona de Brillouin tridimensional. Para construir as figuras das bandas considerou-se que $(-\pi, -\pi, 0)$ corresponde a $\vec{k}=-1$, $(0, 0, 0)$ corresponde a $\vec{k}=0$ e $(\pi, \pi, 0)$ corresponde a $\vec{k}=1$. As linhas vermelhas representam as bandas β e as pretas as α . A linha preta horizontal, em $E_\chi^{(i)}(\mathbf{k})=0$, indica a posição do potencial químico.

Na figura 5.8 (a), tem-se as estruturas de bandas para o caso em que $W=1,00$ eV. Percebe-se a existência de *gaps* nas bandas α e β , significando que o sistema se encontra no estado de Neel. Também observa-se que a linha do potencial químico está localizada dentro de ambos os *gaps*, sendo interceptada apenas em um ponto por uma banda α . Isso indica que para o caso de $W=1,00$ eV existe apenas uma superfície de Fermi relacionada à banda α e não há superfícies de Fermi β . Contudo, ao analisar a estrutura de bandas para os demais valores de W nota-se que conforme este cresce a amplitude dos *gaps* diminui, ao mesmo tempo as bandas β são deslocadas para baixo passando a interceptar a linha do potencial químico. As bandas α também são deslocadas. Para $W=1,50$ eV a banda α intercepta a linha do potencial químico em um segundo ponto. Esse cenário indica uma reconstrução das superfícies de Fermi α e β . Para o caso em que $W=1,70$ eV, apenas o *gap* da hibridização permanece aberto, o que significa que o sistema se encontra no estado PM. Esses resultados mostram que o aumento da largura de banda W desfavorece o estado de Neel. Após um certo valor denominado valor crítico, W_C , a fase AF é destruída e o sistema evolui para o estado PM, o que vai ao encontro dos resultados apresentados

Figura 5.8 – Bandas de energia α (linhas pretas) e β (linhas vermelhas) para $k_B T=0$. A linha preta horizontal em $E_{\chi}^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Conforme a largura de banda W aumenta os *gaps* diminuem e as bandas passam a interceptar a linha do potencial químico em mais de um ponto. Esse comportamento sugere a reconstrução das superfícies de Fermi.

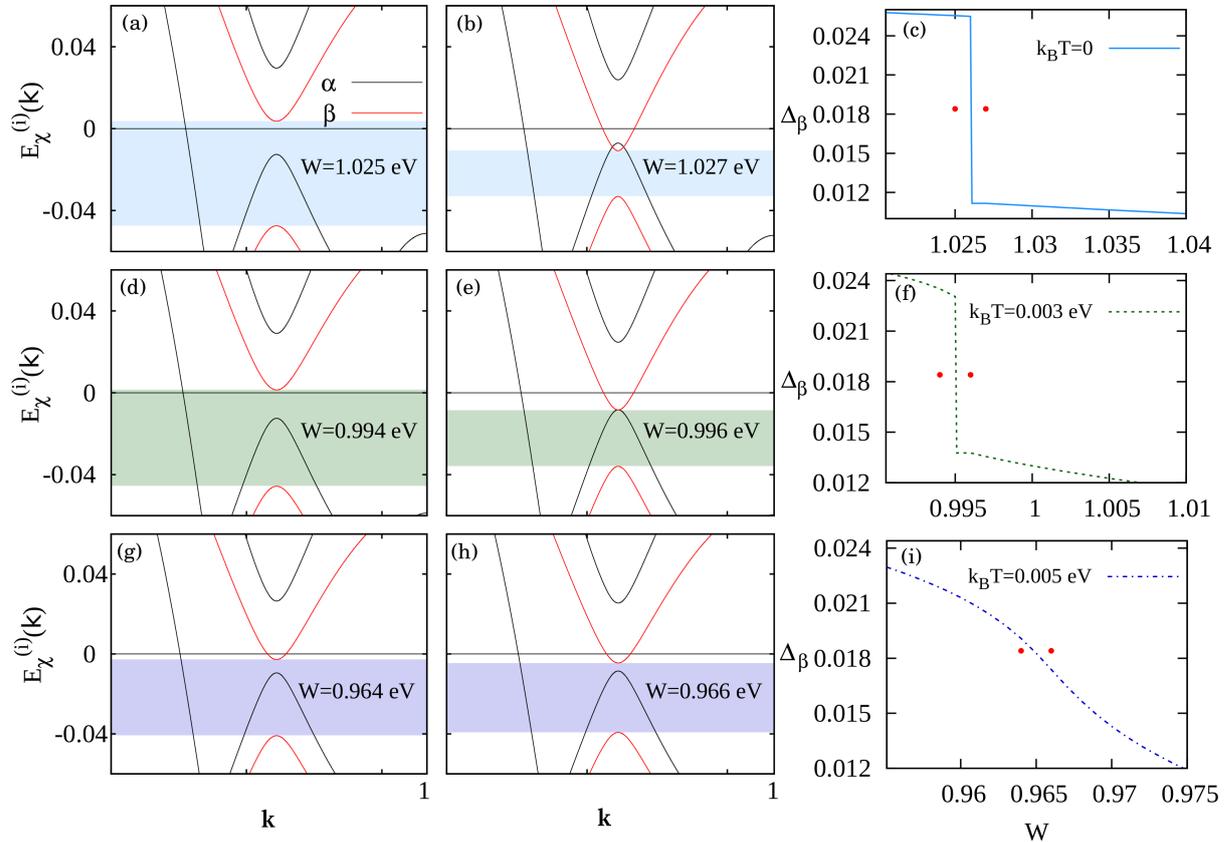


Fonte: Autora.

para os parâmetros de ordem e *gaps* até o momento.

A evolução das bandas sob o efeito da temperatura é mostrada na figura 5.9. Novamente, as linhas vermelhas representam as bandas β e as pretas as α . Nessa figura, tem-se as bandas de energia para três temperaturas diferentes. Para $k_B T=0$ e $k_B T=0,003$ eV os parâmetros de Neel apresentam uma descontinuidade em torno de 1,026 e 0,995 eV, respectivamente. Isso pode ser observado na terceira coluna da figura, onde é mostrado o *gap* da banda β como função da largura de bandas para as três temperaturas escolhidas. No caso de $k_B T=0,005$ eV, a descontinuidade não é mais observada. Os pontos vermelhos nas figuras da terceira coluna indicam os valores de largura de banda para os quais obteve-se as bandas de energia para cada temperatura. A ideia é verificar se o efeito da transição de primeira ordem pode ser notado no comportamento das bandas. As figuras (a) e (b) mostram as estruturas de bandas de energia obtidas para $k_B T=0$. Essas estruturas de bandas estão relacionadas aos pontos vermelho da figura (c). A figura (a) refere-se ao ponto vermelho da esquerda e a figura (b) ao ponto vermelho da direita. A faixa colorida marca a largura do *gap* da banda β . Com o aumento da largura de banda W , o sistema passa por uma transição de primeira ordem AF_1 - AF_2 . É possível notar que em um pequeno intervalo de largura de banda W , no sentido de (a) para (b), o *gap* nas bandas β perde mais de 50% de sua amplitude, como consequência a banda β intercepta o potencial químico

Figura 5.9 – Bandas de energia α (linhas pretas) e β (linhas vermelhas) para diversas temperaturas e larguras de banda W . A linha preta horizontal em $E_{\chi}^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. As faixas coloridas (1ª e 2ª coluna) marcam o *gap* das bandas β . Os pontos vermelhos na 3ª coluna marcam os valores de W para os quais as bandas foram obtidas, para cada valor de temperatura.



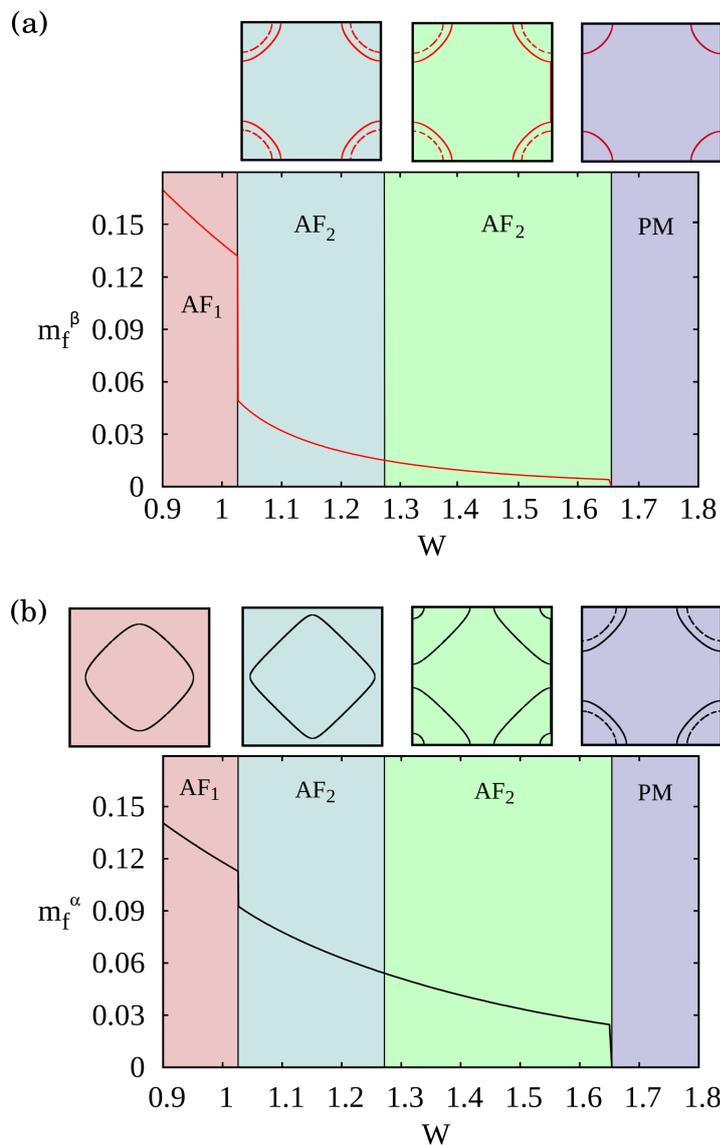
Fonte: Autora.

μ , resultando na reconstrução da superfície de Fermi β . Essa diminuição na amplitude do *gap* β era esperada considerando o comportamento de Δ_{β} em (c). As demais figuras seguem o mesmo esquema de organização. Nos casos (d) e (e) observa-se as bandas obtidas para $k_B T = 0,003$ eV. Novamente, a amplitude do *gap* decresce visivelmente, a quase metade do valor, estando em acordo com a figura (f). Mais uma vez, ocorre a reconstrução da superfície de Fermi β . Por fim, nos casos (g) e (h), embora seja possível notar um decréscimo no *gap* das bandas β , o mesmo é muito mais sutil. A figura (i) mostra que nesse caso o sistema não passa por uma transição de fase no intervalo considerado. A análise dos resultados apresentados para esses três casos de temperatura, leva a concluir que a transição de primeira ordem pode ser verificada na evolução das bandas de energia, uma vez que quando há transição os *gaps* sofrem um decréscimo muito mais acentuado em torno da região da transição. As bandas α também apresentam comportamento similar.

SUPERFÍCIES DE FERMI

Na figura 5.10, observa-se os parâmetros de Neel em função da largura de banda W para $k_B T=0$. Como verificado na figura 5.7, para essa temperatura os parâmetros de ordem m_f^α e m_f^β , apresentam duas transições de fase de primeira ordem: uma, AF_1 - AF_2 ,

Figura 5.10 – Parâmetros de Neel em função da largura de banda W e superfícies de Fermi α (linhas pretas) e β (linhas vermelhas) para $k_B T=0$. Observa-se a reconstrução das superfícies de Fermi α e β e uma mudança na topologia da superfície de Fermi α conforme W aumenta.



Fonte: Autora.

próximo a $W=1,03$ eV e outra, AF_2 - PM , próximo de $W=1,66$ eV.

A figura 5.10 está dividida em 4 regiões: AF_1 , AF_2 com reconstrução da superfície de Fermi β , AF_2 com reconstrução da superfície de Fermi α e estado PM . Em cada região

pode-se ver as respectivas superfícies de Fermi. As superfícies são mostradas para o plano $k_z=0$ e estão centradas em $(0,0,0)$. Assim como na figura 5.8, as linhas vermelhas estão associadas ao caso β (painel (a)) e as linhas pretas ao caso α (painel (b)).

No caso da região AF_1 , nota-se que há uma superfície de Fermi α e não há superfície de Fermi β . Esse resultado já havia sido previsto na discussão sobre as bandas de energia. A superfície de Fermi α aparece devido a hibridização da banda α com a banda dos elétrons de condução. Na região AF_2 , tem-se uma reconstrução da superfície de Fermi β . Essa reconstrução coincide com a transição de primeira ordem AF_1 - AF_2 . Na segunda região de AF_2 verifica-se uma mudança na topologia da superfície de Fermi α : a superfície de Fermi do tipo elétron centrada em $(0,0,0)$ muda para o tipo buraco centrada em $(\pi,\pi,0)$ conforme W cresce. Todavia, essa mudança na natureza da superfície de Fermi α não coincide com a descontinuidade nos parâmetros de ordem. Por fim, na quarta região, o sistema se encontra na fase PM. Uma nova mudança, associada a transição AF_2 -PM, é observada nas superfícies de Fermi.

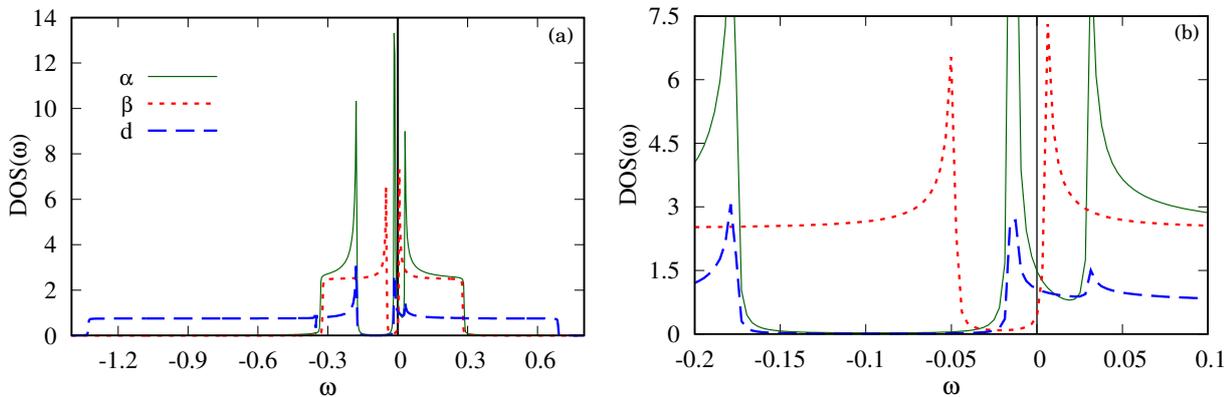
Em um trabalho teórico (KUBO, 2015), no qual investiga-se transições de Lifshitz em fases magnéticas do modelo Periódico de Anderson, foi reportado um comportamento similar na topologia das superfícies de Fermi. Porém, nessa referência, a mudança na natureza da superfície de Fermi coincide com uma transição de fase de primeira ordem entre duas fases AF do modelo Periódico de Anderson. No entanto, no trabalho de Kubo considera-se apenas uma banda de condução hibridizada com um nível de elétrons f e o sistema se encontra no limite da interação Coulombiana $U \rightarrow \infty$. Nesta tese, além de serem consideradas duas bandas $5f$, uma delas hibridizadas com uma banda de condução, considera-se um limite de fracas interações em que $U=0,165$ eV, o que pode explicar essa diferença entre os resultados de Kubo e os apresentados aqui.

DENSIDADES DE ESTADOS

A evolução da densidade de estados (DOS) do sistema para $k_B T=0$ e diversos valores de W é apresentada a seguir.

Na figura 5.11 observa-se as densidades de estados para $W=1,00$ eV. O painel (b) mostra em detalhe a região dos *gaps*. Para esse conjunto de parâmetros, valor de largura de banda e temperatura, o sistema se encontra na fase AF_1 . O potencial químico é marcado pela linha preta vertical em $\omega=0$. No intervalo de ω entre -0,17 e -0,02 eV, as DOS α (linha verde) e d (linha azul tracejada) são marcadas pelo *gap* da hibridização. O *gap* de Neel, Δ_α , abre ao lado, no intervalo de -0,02 a 0,04 eV. Na densidade de estados β (linha vermelha tracejada), observa-se o *gap* Δ_β entre -0,05 e 0,01 eV. Percebe-se que os *gaps* de Neel encontram-se deslocados um em relação ao outro. Também nota-se que o *gap* α não está completamente aberto. Esses dois comportamentos estão relacionados a presença do *gap* de hibridização $\alpha-d$. A posição da linha que marca o potencial químico, em relação

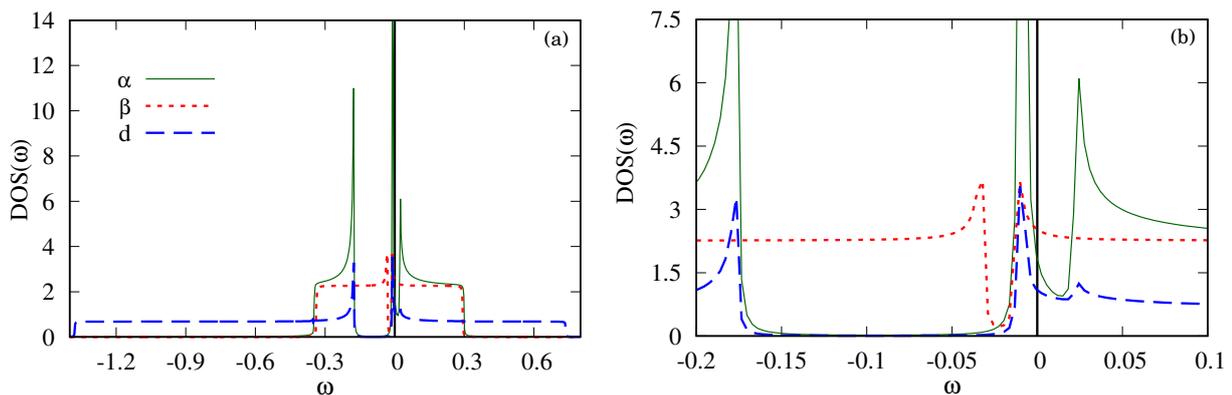
Figura 5.11 – DOS α , β e d em função da energia para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV. No painel à direita observa-se em detalhe a região dos *gaps*.



Fonte: Autora.

aos *gaps*, fornece informações sobre as superfícies de Fermi. No caso da densidade de estados β , o potencial químico se encontra dentro do *gap*, nesse caso não há superfície de Fermi. A linha do potencial químico também se encontra dentro do *gap* Δ_α , mas devido a hibridização, o mesmo não está completamente aberto, então deve-se observar superfície de Fermi de caráter α . Esse cenário está em cordo com o comportamento observado na estrutura de bandas e nas superfícies de Fermi para a região anterior a transição AF_1 - AF_2 .

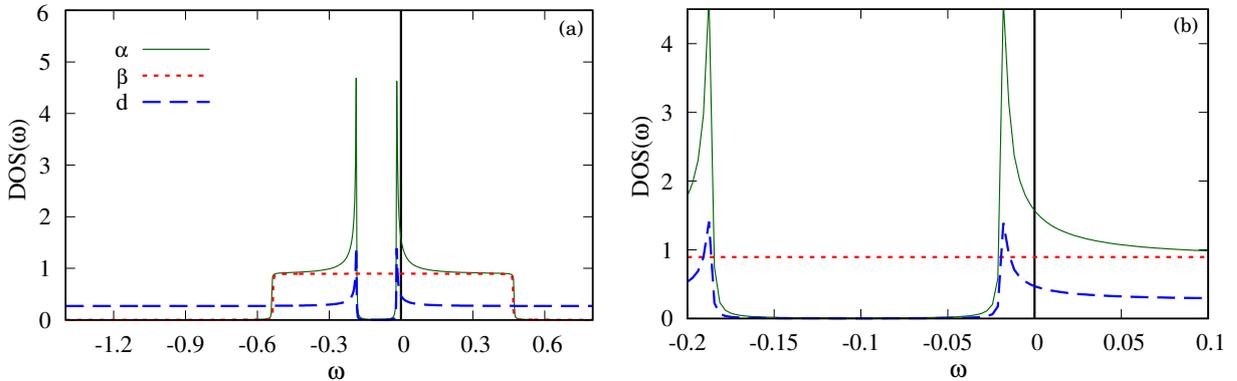
Figura 5.12 – DOS α , β e d em função da energia para $k_B T=0$ e $W=1,05$ eV. No painel à direita observa-se em detalhe a região dos *gaps*.



Fonte: Autora.

As densidades de estados para $W=1,05$ eV são apresentadas na figura 5.12. Nesse caso o sistema já evoluiu para fase AF_2 . A reconstrução da superfície de Fermi β é confirmada pela posição do potencial químico, o qual agora, se encontra fora do *gap* β . Isso significa que existem estados ocupados próximos à região do potencial químico na densidade de estados β , o que leva a reconstrução da superfície de Fermi β . Tanto os *gaps* de

Figura 5.13 – DOS α , β e d em função da energia para $k_B T=0$ e $W=1,67$ eV. No painel à direita observa-se em detalhe a região do *gap* devido à hibridização entre as bandas α e d .



Fonte: Autora.

Neel como o *gap* da hibridização permanecem abertos. Novamente, a linha do potencial químico se encontra dentro do *gap* Δ_α .

As densidades de estados mostradas na figura 5.13 foram obtidas para $W=1,67$ eV. Em $k_B T=0$ e $W=1,67$ eV os parâmetros de Neel são nulos. Portanto, o sistema se encontra no estado PM. Na figura 5.13, observa-se que os *gaps* de Neel estão fechados, restando apenas o *gap* da hibridização, como esperado para o estado PM.

DIAGRAMA DE FASES

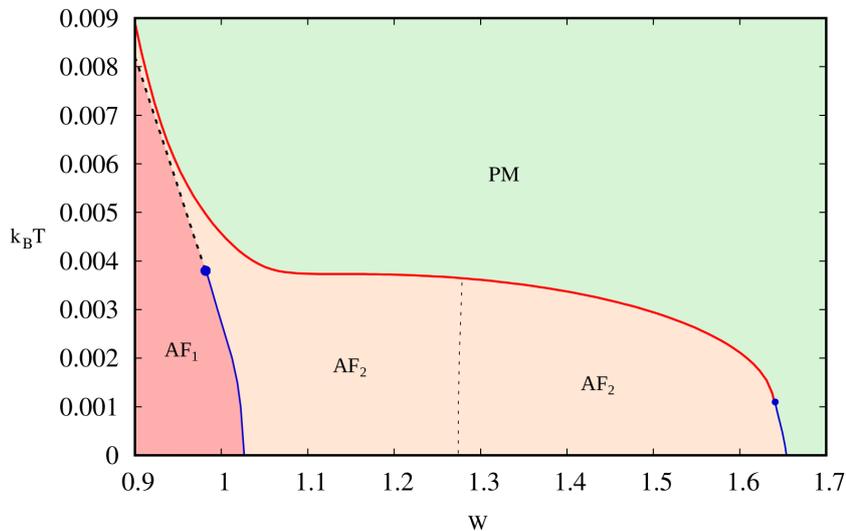
As informações reunidas até esse momento sobre as fases de Neel podem ser resumidas na forma do diagrama $T \times W$ apresentado na figura 5.14.

A linha vermelha (obtida utilizando a equação 4.122) representa transições de segunda ordem entre as fases de Neel e a fase PM. As linhas azuis marcam regiões de transições de primeira ordem, tanto entre as fases de Neel, AF_1 e AF_2 , como entre as fases AF_2 e PM. Analisando os resultados apresentados nas figuras 5.2 e 5.3 é possível verificar que os mesmos estão em acordo com as linhas de transições desse diagrama. A linha azul que separa a fase PM e a fase AF_2 foi marcada usando a energia livre de Helmholtz (equação 4.123) e apresenta um ponto tri-crítico localizado em $T_{tric}=0,0011$ eV e $W_{tric}=1,6410$ eV. O ponto tri-crítico marca uma mudança na natureza das transições. Para temperaturas acima de T_{tric} e valores de largura de banda abaixo de W_{tric} as transições AF_2 -PM são de segunda ordem, enquanto que para temperaturas abaixo de T_{tric} e larguras de banda acima de W_{tric} essas transições são descontínuas, ou seja, de primeira ordem. A presença do ponto tri-crítico foi confirmada pela expansão da energia livre até quarta ordem conforme discutido no capítulo 3.

No diagrama de fases também observam-se linhas tracejadas de cor preta. Essas li-

nhas simbolizam as reconstruções das superfícies de Fermi e foram marcadas através da análise das bandas de energia. A linha azul que separa as fases de Neel e termina em um ponto crítico localizado em $k_B T_c = 0,0038$ eV e $W_c = 0,9826$ eV coincide com a linha tracejada que representa a reconstrução da superfície de Fermi β . Essa linha azul foi marcada utilizando os parâmetros de Neel. É possível notar que a reconstrução da superfície de Fermi de caráter β continua ocorrendo, mesmo quando não há mais a transição AF_1 - AF_2 . Mais à direita, próximo de $W = 1,28$ eV percebe-se outra linha tracejada que representa a reconstrução da superfície de Fermi α . As reconstruções da superfície de Fermi podem estar associadas a transições de Lifshitz, no entanto a confirmação das transições de Lifshitz necessita de mais estudos.

Figura 5.14 – Diagrama de fases $T \times W$. A linha vermelha marca transições de segunda ordem $AF_{1,2}$ -PM. As linhas azuis marcam transições de primeira ordem AF_1 - AF_2 e AF_2 -PM. A linha azul que separa as fases AF_1 e AF_2 termina em um ponto crítico localizado em $k_B T_c = 0,0038$ eV e $W_c = 0,9826$ eV. Essa linha coincide com a reconstrução da superfície de Fermi β , sinalizada pela linha tracejada. Acima do ponto crítico a reconstrução da superfície de Fermi β continua acontecendo. A linha tracejada próximo de 1,3 eV marca a reconstrução da superfície de Fermi α . A linha azul que separa as fases AF_2 e PM termina em um ponto tri-crítico localizado em $T_{tric} = 0,0011$ eV e $W_{tric} = 1,6410$ eV.



Fonte: Autora.

O diagrama de fases $T \times W$ obtido para as fases de Neel neste trabalho, é bastante similar ao diagrama de fases $T \times P$ teórico apresentado por Mineev e Zhitomirsky na referência (MINEEV; ZHITOMIRSKY, 2005), no qual há uma competição entre duas fases AF, separadas por uma linha de transição de primeira ordem que termina em um ponto crítico. O mesmo tipo de comportamento é observado no diagrama da figura 5.14.

No campo experimental, a referência (TAUFOUR et al., 2010) apresenta um diagrama de fases $T(K) \times P(GPa)$ para o ferromagneto itinerante UGe_2 , no qual observa-se uma competição entre duas fases ferromagnéticas (FM). A linha de transições de primeira or-

dem, que separa as fases FM, termina em um ponto crítico. O sistema também apresenta um ponto tri-crítico separando a linha de transições de primeira ordem da linha de transições de segunda ordem FM-PM. O diagrama da figura 5.14 descreve um cenário bem parecido para as fases de Neel. Contudo, ainda não foi encontrado na literatura nenhum sistema físico AF que apresente esse tipo de comportamento.

Alguns dos resultados apresentados nesta seção foram publicados na referência (LAUSMANN et al., 2018).

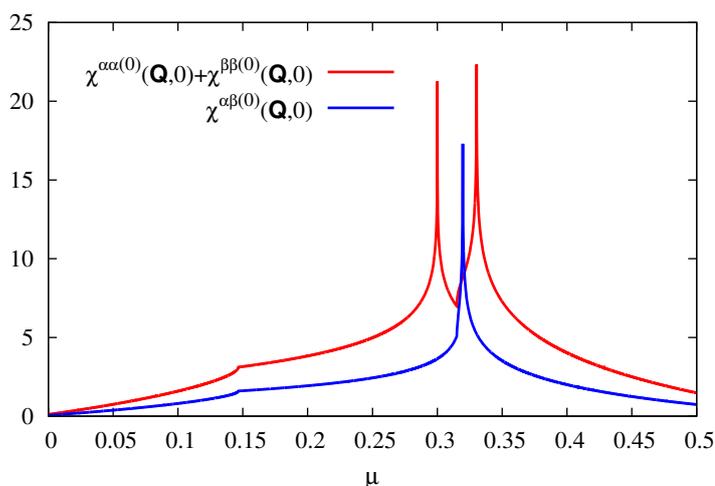
5.2 COMPETIÇÃO ENTRE AS FASES ORDEM OCULTA E ANTIFERROMAGNÉTICA

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos para fase HO. Um dos principais resultados é o diagrama de fases $T \times W$ que contém informações das fases AF e HO e pode ser comparado com o diagrama experimental da figura 2.5.

ESTABILIDADE DA FASE HO

Como feito anteriormente para as fases AF, também verificou-se a estabilidade da fase HO. Novamente, seguindo o procedimento efetuado na referência (RISEBOROUGH; COQ-

Figura 5.15 – Susceptibilidade intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ (linha vermelha) e inter-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}$ (linha azul) como função do potencial químico. As divergências na susceptibilidade intra-banda indicam a instabilidade do estado PM em relação ao estado de Neel, enquanto a divergência na susceptibilidade inter-banda indica a instabilidade do estado PM em relação ao estado HO.



Fonte: Autora.

BLIN; MAGALHAES, 2012), obteve-se a susceptibilidade inter-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}$ em função do potencial químico μ para $T=0$ e $W=1,00$ eV. As susceptibilidades intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ e

inter-banda foram sobrepostas na figura 5.15 para que se pudesse verificar a estabilidade da fase HO.

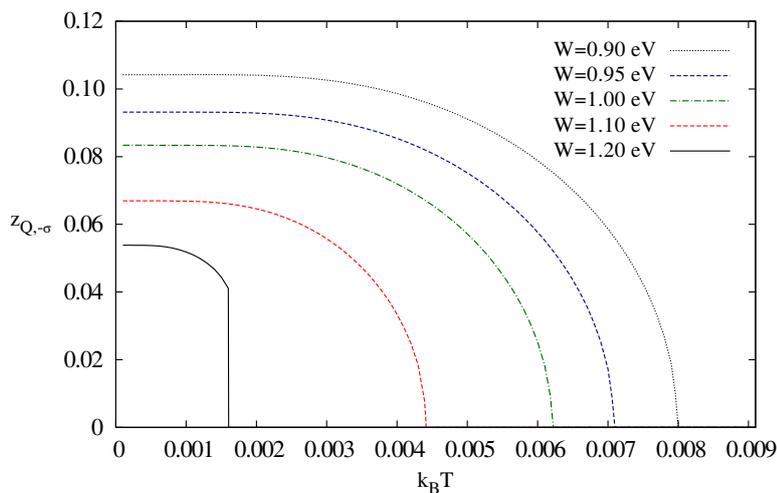
Como visto anteriormente, no intervalo de μ de 0,29 a 0,34 eV, a susceptibilidade intra-banda apresenta duas divergências, as quais, segundo o critério de Stoner (FAZEKAS, 1999) indicam a instabilidade da fase PM em relação a fase de Neel. Dentro desse intervalo, em torno de 0,32 eV, ocorre uma divergência na susceptibilidade inter-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\beta}$. Portanto, para esse valor de potencial químico a fase paramagnética é instável em relação a fase HO. Isso significa que o modelo é capaz de garantir a estabilidade tanto da fase AF, como da HO e garante que há uma região de μ , entre as divergências da susceptibilidade intra-banda, em que a fase HO é estável frente as fases AF e PM.

PARÂMETRO DE ORDEM DA FASE HO

Investigou-se o comportamento do parâmetro de ordem, $z_{\vec{Q},-\sigma}$, proposto por Riseborough, Coqblin e Magalhaes para descrever a fase HO.

Na figura 5.16 pode-se observar $z_{\vec{Q},-\sigma}$ como função da temperatura para diferentes larguras de banda W . Nota-se que conforme a temperatura aumenta o parâmetro de ordem decresce continuamente até zero, exceto no caso de $W=1,20$ eV. Para esse valor de W ocorre uma transição descontínua para o estado PM. Para confirmar essa transição de primeira ordem é necessário avaliar a energia livre de Helmholtz.

Figura 5.16 – Parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},-\sigma}$ em função de $k_B T$, para diferentes valores de W . No caso em que $W=1,20$ eV observa-se uma descontinuidade em $z_{\vec{Q},-\sigma}$ indicando uma transição de primeira ordem HO-PM. Para os demais casos a transição para a fase PM, ocorre de forma contínua. Conforme W aumenta a temperatura crítica de transição T_{HO} diminui.

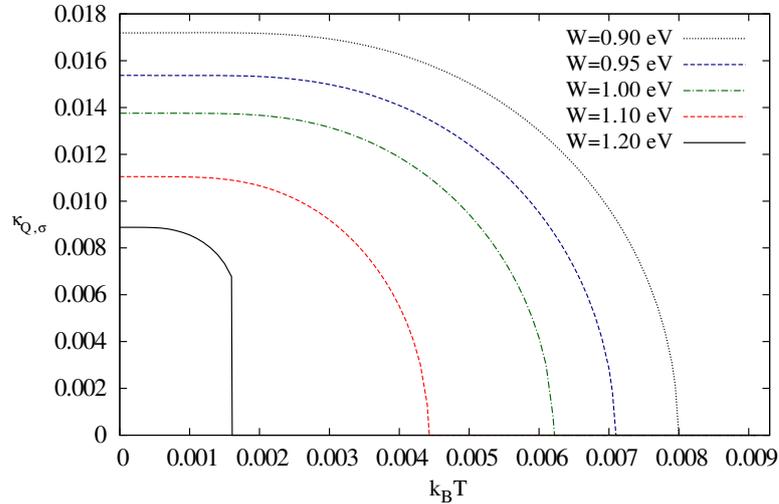


Fonte: Autora.

Também percebe-se que na medida que W aumenta a temperatura crítica de transição, T_{HO} , diminui. O mesmo comportamento foi observado para os parâmetros de Neel na

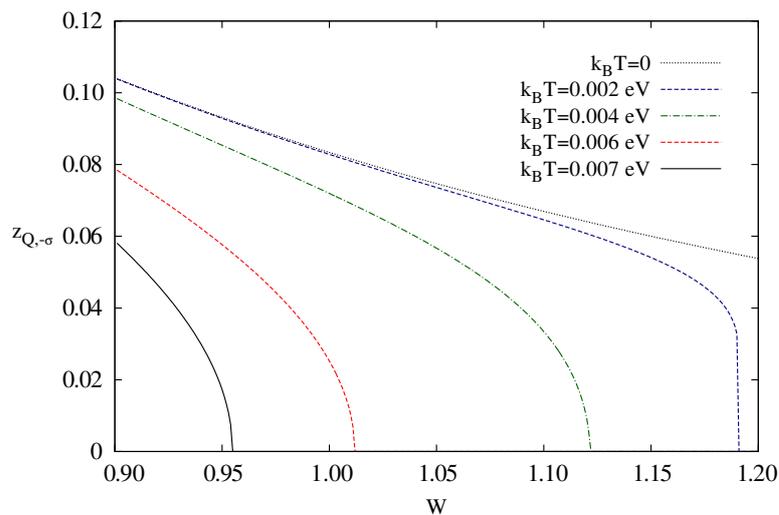
figura 5.2.

Figura 5.17 – *Gap* $\kappa_{\vec{Q},\sigma}$ em função de $k_B T$, para diferentes valores de W . O *gap* apresenta comportamento similar ao do parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},-\sigma}$, diferindo apenas na ordem de grandeza. A T_{HO} está em acordo com os valores obtidos através do $z_{\vec{Q},-\sigma}$.



Fonte: Autora.

Figura 5.18 – Parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},-\sigma}$ em função da largura de banda W , para diferentes valores de $k_B T$. Para o caso em que $T=0$ a largura de banda $W=1,20$ eV não é o suficiente para que o sistema evolua para a fase PM. Para $k_B T=0,002$ eV observa-se uma descontinuidade que sugere uma transição de primeira ordem HO-PM. Nos demais casos a transição para a fase PM ocorre de forma contínua, característica de transições de segunda ordem. Nota-se que conforme T aumenta, a largura de banda crítica de transição W_C diminui.



Fonte: Autora.

Na figura 5.17 é mostrado o *gap* da fase HO, $\kappa_{\vec{Q},\sigma}$, como função da temperatura para diferentes larguras de banda W . O *gap* $\kappa_{\vec{Q},\sigma}$ está relacionado ao parâmetro de ordem pela

equação 4.34. Pela análise dessa equação e também pelos resultados apresentados nas figuras 5.16 e 5.17, conclui-se que $\kappa_{\vec{Q},\sigma}$ apresenta o mesmo comportamento observado para $z_{\vec{Q},-\sigma}$, diferindo apenas na ordem de grandeza. Portanto, ambos fornecem as mesmas informações sobre a temperatura crítica e largura de banda crítica. Contudo, o *gap* pode ser observado nas densidades de estado e estrutura de bandas.

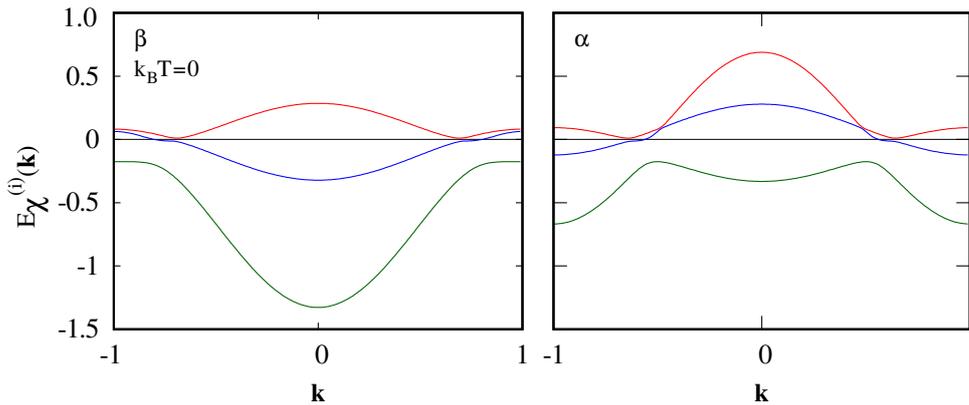
A figura 5.18 apresenta o parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},-\sigma}$ como função da largura de banda W para diferentes valores de $k_B T$. Para $k_B T$ acima de 0,002 eV, o parâmetro de ordem vai continuamente a zero conforme a largura de banda W aumenta. Também nota-se que quanto maior a temperatura, menor é o valor de largura de banda W necessário para destruir a HO. Um comportamento similar é observado nas figuras 5.2 e 5.3, para os parâmetros de ordem de Neel. A curva para $k_B T=0,002$ eV, mostra uma descontinuidade na transição para a fase PM, indicando que a transição HO-PM passa a ser de primeira ordem.

Para $k_B T=0$, a largura de banda $W=1,20$ eV não é o suficiente para destruir a fase HO.

ESTRUTURA DE BANDAS DE ENERGIA

Na figura 5.19, observa-se as bandas de energia para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV. As estruturas de bandas α e β foram obtidas ao longo da diagonal $(-\pi, -\pi, 0) - (0, 0, 0) - (\pi, \pi, 0)$, considerando a primeira zona de Brillouin tridimensional. A linha preta horizontal, em

Figura 5.19 – Bandas de energia para $W=1,00$ eV e $k_B T=0$. No painel à esquerda tem-se as bandas β e no painel à direita as bandas α . A linha preta horizontal em $E_{\chi}^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema.



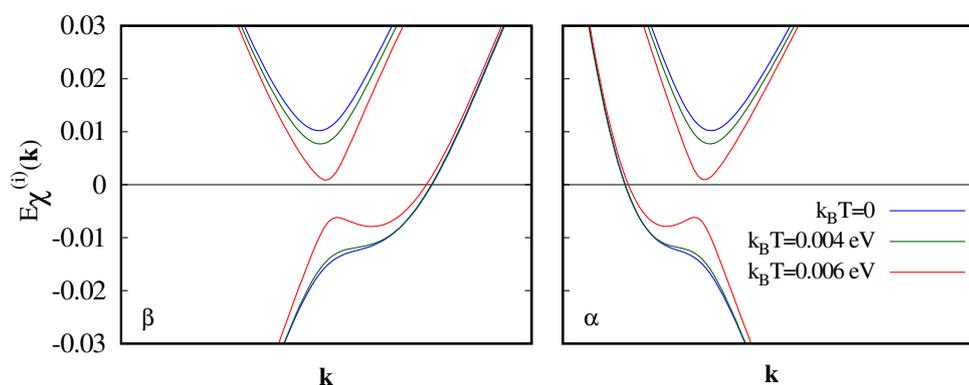
Fonte: Autora.

$E_{\chi}^{(i)}(\mathbf{k})=0$, indica a posição do potencial químico. No painel à esquerda, tem-se as bandas β e à direita, as bandas α .

A evolução das bandas de energia sob a influência da temperatura pode ser vista na figura 5.20. Em geral, as bandas apresentam a mesma estrutura mostrada na figura 5.19. Dessa forma, na figura 5.20, o foco é mostrar a região do *gap* da fase HO, próximo a linha

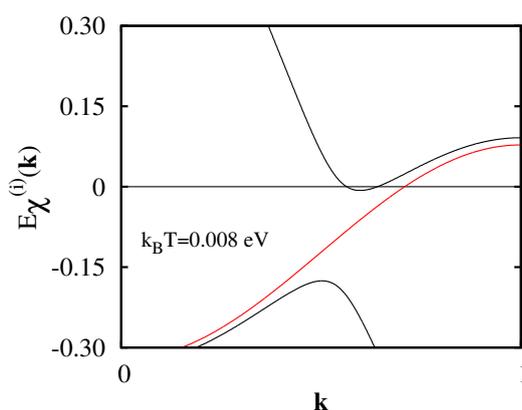
que marca o potencial químico. Cada cor indica uma temperatura diferente. A cor azul está relacionada a $k_B T=0$. Logo, esse resultado é o mesmo observado em 5.19. Para as cores verde e vermelha tem-se respectivamente, $k_B T=0,004$ eV e $k_B T=0,006$ eV. Pode-se observar que com o aumento da temperatura a amplitude do *gap* diminui. O mesmo comportamento é observado na figura 5.17 para $W=1,00$ eV.

Figura 5.20 – Bandas de energia para $W=1,00$ eV e diversos valores de $k_B T$. No painel à esquerda tem-se as bandas β e no painel à direita as bandas α . A linha preta horizontal em $E_{\chi}^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Observa-se a região do *gap* da fase HO. Conforme a temperatura aumenta o *gap* diminui.



Fonte: Autora.

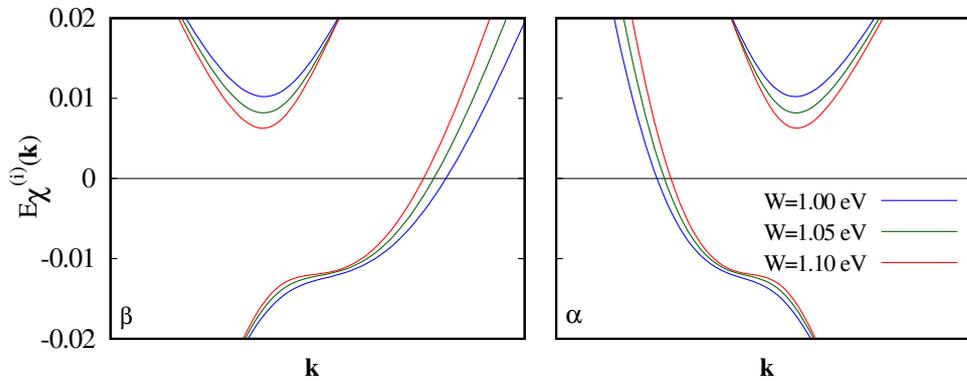
Figura 5.21 – Bandas de energia para $W=1,00$ eV e $k_B T=0,008$ eV. As linhas pretas representam as bandas α e a linha vermelha a banda β . A linha preta horizontal em $E_{\chi}^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Observa-se apenas o *gap* da hibridização $\alpha-d$. O sistema se encontra na fase PM.



Fonte: Autora.

Na figura 5.21, com $k_B T=0,008$ eV, o sistema se encontra no estado normal (PM). Agora tem-se duas bandas α , representadas pela cor preta, e uma β , representada pela cor vermelha. Nesse caso, o único *gap* observado é o da hibridização entre a banda α e a banda de condução.

Figura 5.22 – Bandas de energia para $k_B T=0$ e diversos valores de W . No painel à esquerda tem-se as bandas β e no painel à direita as bandas α . A linha preta horizontal em $E_X^{(i)}(\mathbf{k})=0$ indica o valor do potencial químico do sistema. Observa-se a região do *gap* da fase HO. Conforme a largura de banda W aumenta o *gap* diminui. Cada banda intercepta a linha do potencial químico apenas em um único ponto.



Fonte: Autora.

A evolução das bandas de energia considerando a variação de W também foi investigada e pode ser verificada na figura 5.22. Percebe-se, que conforme a largura de banda aumenta, o *gap*, $\kappa_{\vec{Q},\sigma}$, diminui. Esse resultado está de acordo com o comportamento apresentado pelo parâmetro de ordem na figura 5.18. Vale lembrar que o *gap* e o parâmetro de ordem da fase HO diferem na ordem de grandeza, contudo apresentam o mesmo comportamento.

O comportamento das estruturas de bandas sugere que não há reconstrução de Fermi na fase HO.

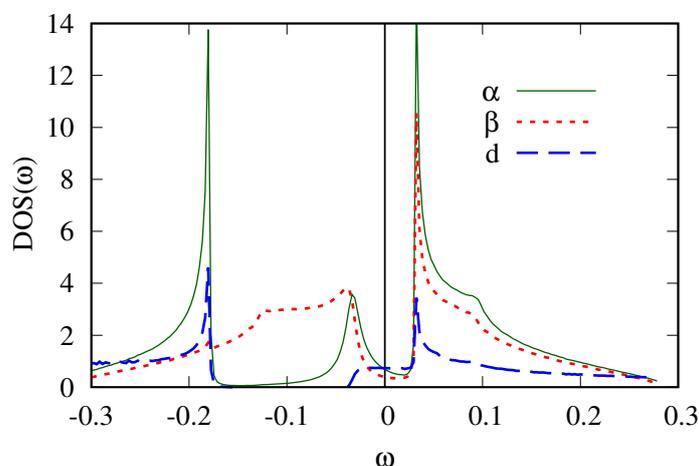
DENSIDADE DE ESTADOS

As densidades de estados (DOS) α (linha verde), β (linha vermelha tracejada) e d (linha azul tracejada), são mostradas na figura 5.23. Esses resultados foram obtidos para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV. Nessa situação o sistema se encontra na fase HO. A linha preta em $\omega=0$ eV marca o valor de potencial químico do sistema.

Pode-se observar o *gap* da fase HO nas densidades α e β entre -0,05 e 0,05 eV. O *gap* da hibridização $\alpha - d$ aparece mais à esquerda, entre -0,20 e -0,05 eV. A linha que marca a região do potencial químico se encontra dentro dos *gap* da fase HO. Porém, uma vez que o *gap* não está totalmente aberto, deve-se observar superfícies de Fermi α e β .

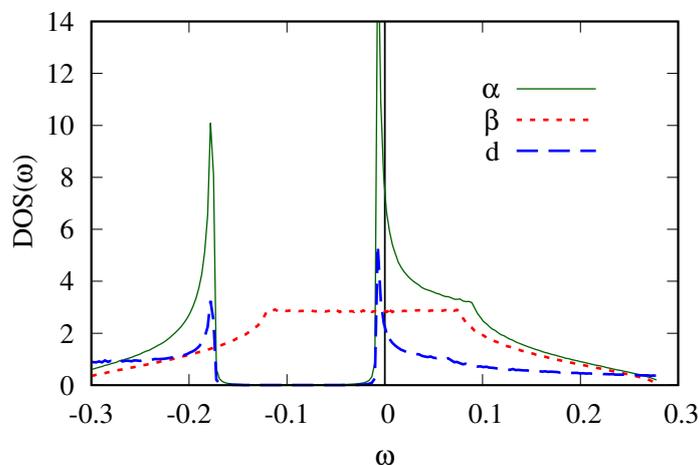
Na figura 5.24, tem-se as densidades de estados para $k_B T=0,008$ eV e $W=1,10$ eV. Para esse conjunto de parâmetros o sistema deve-se encontrar no estado paramagnético. Essa informação é confirmada pelas densidades, uma vez que o *gap* da fase HO não é mais observado. Todavia, o *gap* da hibridização permanece aberto.

Figura 5.23 – DOS para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV. Observa-se os *gaps* de Neel e o *gap* da hibridização. A linha preta vertical em $\omega=0$ eV marca o valor de potencial químico do sistema.



Fonte: Autora.

Figura 5.24 – DOS para $k_B T=0,008$ eV e $W=1,00$ eV. Observa-se apenas o *gap* devido a hibridização entre as bandas α e d . A linha preta vertical em $\omega=0$ eV marca o valor de potencial químico do sistema.

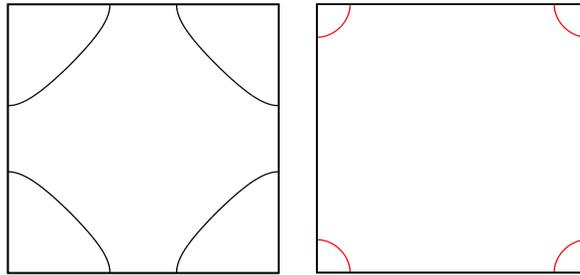


Fonte: Autora.

SUPERFÍCIES DE FERMI

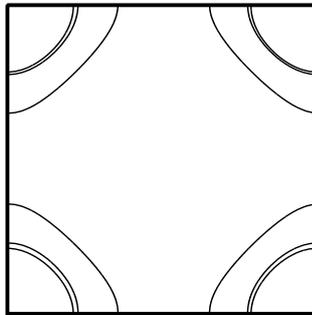
As superfícies de Fermi para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV, são mostradas na figura 5.25. Observa-se uma superfície de Fermi para o caso α (linhas pretas) e outra para o caso β (linhas vermelhas), portanto o sistema encontra-se na fase HO e há um *gap* que destrói cerca de 60% da superfície de Fermi. A única superfície de Fermi observada tanto para o caso α como para o caso β , está associada à banda de caráter d , a qual intercepta o nível de Fermi, como pode ser visto na figura 5.20.

Figura 5.25 – Superfícies de Fermi α (linha preta) e β (linha vermelha) relacionadas à banda de caráter d , para $k_B T=0$ e $W=1,00$ eV.



Fonte: Autora.

Figura 5.26 – Superfície de Fermi para $k_B T=0,008$ eV e $W=1,00$ eV. Observa-se a reconstrução total da superfície de Fermi.



Fonte: Autora.

A figura 5.26 mostra o resultado para $k_B T=0,008$ eV e $W=1,00$ eV. Nesse caso, o sistema encontra-se no estado PM, portanto, há a reconstrução total da superfície de Fermi. Ou seja, existem 3 superfícies de Fermi, uma para cada banda α, β e d .

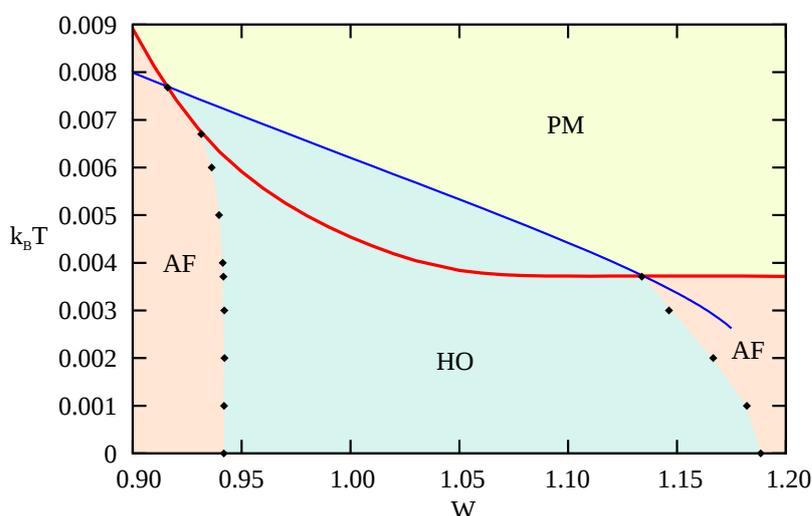
A banda α e a banda de caráter d interceptam a linha do potencial químico em pontos muito próximos. Logo, as suas superfícies de Fermi ficam praticamente sobrepostas. Esse resultado está em acordo com os demais resultados para as bandas de energia e densidades de estados apresentados nas figuras 5.20, 5.21, 5.23 e 5.24.

DIAGRAMA DE FASES

Em geral, da análise de um diagrama de fases obtém-se várias informações sobre o sistema, como por exemplo, qual conjunto de parâmetros favorece qual fase, que tipo de transição ocorre, se há ou não coexistência de fases, etc. Dessa forma, o diagrama de fases apresentado na figura 5.27 é um resultado muito importante. Nesse diagrama foram reunidas diversas informações, não só sobre a fase HO, mas também sobre a fase AF. Vale lembrar que a variação da largura de banda W simula os efeitos da pressão sobre o sistema, logo esse diagrama pode ser comparado, qualitativamente, com o diagrama ex-

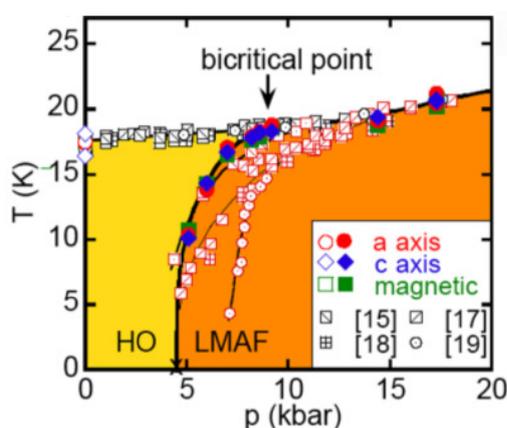
perimental da figura 2.5. A linha vermelha do diagrama representa transições de segunda

Figura 5.27 – Diagrama de fases $T \times W$. A linha vermelha marca transições de segunda ordem AF-PM. A linha azul, por outro lado, marca transições de segunda ordem HO-PM. Os símbolos pretos sinalizam transições de primeira ordem AF-HO e HO-AF, as quais terminam em pontos bi-críticos.



Fonte: Autora.

Figura 5.28 – Diagrama de fases experimental da temperatura pela pressão do URu_2Si_2 . As fases HO e LMAF estão separadas por uma linha de primeira ordem terminada em um ponto bi-crítico.

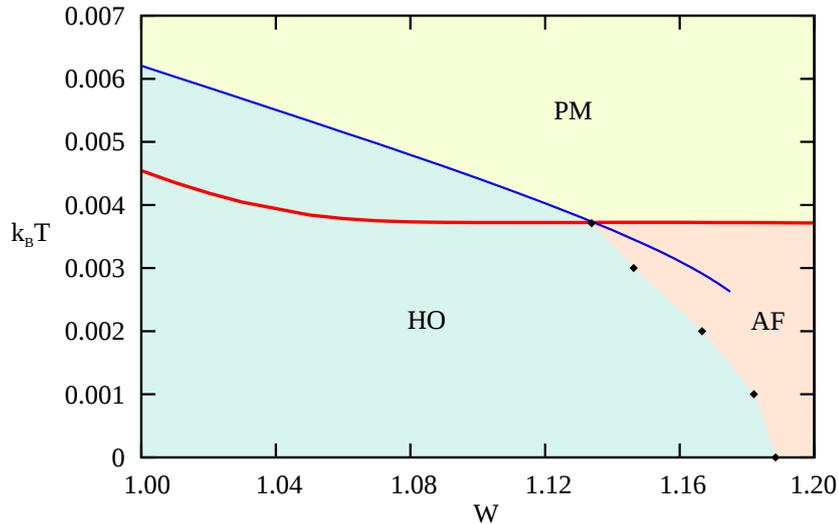


Fonte: (NIKLOWITZ et al., 2010).

ordem PM-AF. Essa linha foi obtida através da equação 4.122. A linha azul, por outro lado, representa transições de segunda ordem HO-PM e foi obtida pela equação 4.155. A linha que apresenta temperaturas críticas de transição mais alta, para o mesmo conjunto de parâmetros, pertence a fase mais estável. Pela análise do diagrama percebe-se que para um intervalo de largura de banda W de 0,90 eV até em torno de 0,92 eV, a T_N é maior que T_{HO} , indicando que a fase de Neel é mais estável. Depois, até aproximadamente 1,14 eV,

a T_{HO} é mais alta que T_N , logo a fase mais estável nessa região é a HO. Para valores de W maiores que 1,14 eV, novamente a temperatura de Neel passa a ser mais alta que a T_{HO} , portanto tem-se novamente a fase de Neel.

Figura 5.29 – Diagrama de fases $T \times W$ mostrando apenas a região de 1,00 eV a 1,20 eV, com os mesmos parâmetros da figura 5.27.



Fonte: Autora.

Para identificar em quais larguras de banda W , para um certo conjunto de parâmetros, ocorrem tais transições é necessário calcular a energia livre de Helmholtz para cada fase e compará-las. A que tiver menor energia é a fase mais estável. Para calcular a energia livre para a fase AF utilizou-se a equação 4.123 e para a fase HO a equação 4.156. A energia livre de cada fase foi calculada para o intervalo de largura de banda de 0,90 eV a 1,20 eV, para diversos valores de $k_B T$. A transição de uma fase para outra ocorre no ponto em que ambas as energias tem o mesmo valor. Os símbolos pretos indicam as transições de primeira ordem AF-HO e HO-AF. Essas transições terminam em pontos bi-críticos.

Considerando que a largura de banda $W=1,00$ eV corresponde a pressão zero, pode-se concluir que esse diagrama está, qualitativamente, de acordo com o diagrama experimental apresentado na figura 2.5, no qual, para pressões mais baixas o sistema encontra-se em uma fase HO. Acima de certo valor de pressão, em baixas temperaturas, o sistema evolui para uma fase AF. Para um certo valor de pressão a fase HO não é mais observada, mesmo para temperaturas mais altas. O diagrama experimental mostrado na figura 5.28 também apresenta esse comportamento. Com intuito de facilitar a essa visualização pode-se observar a figura 5.29 que é apenas um corte da figura 5.27.

O ponto bi-crítico localizado na figura 5.29 vai ao encontro do resultado experimental apresentado na figura 5.28. Nessa figura, o diagrama de fases experimental $T(K) \times p(GPa)$ do URu_2Si_2 apresenta uma linha de transições de primeira ordem terminada em um ponto bi-crítico.

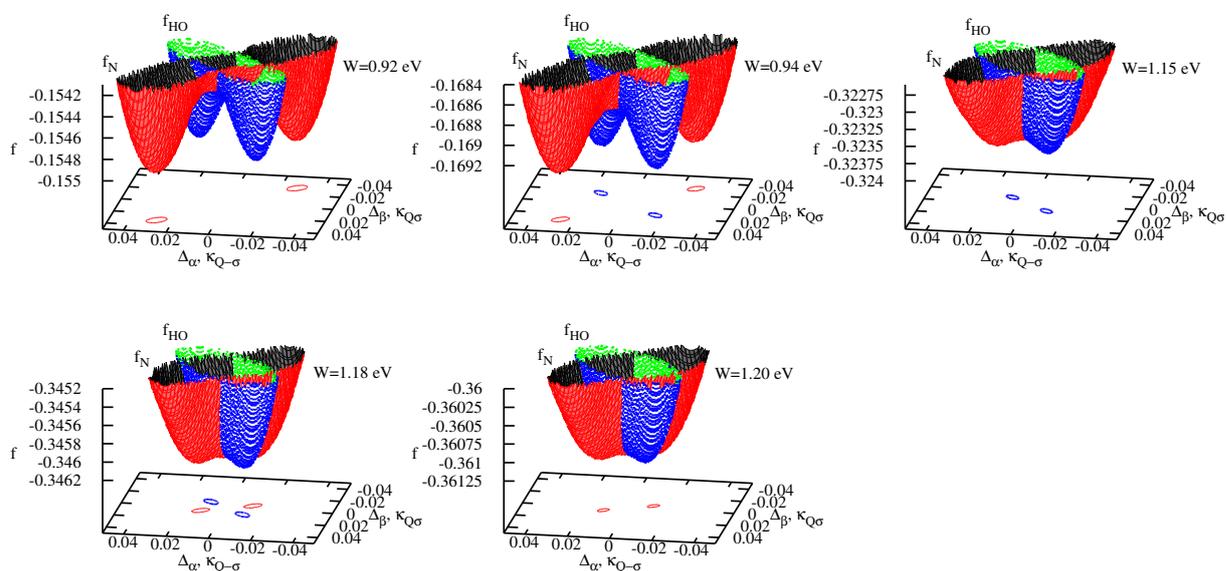
ENERGIA LIVRE DE HELMHOLTZ

Na figura 5.30, tem-se a energia livre de Helmholtz por número de sítios para a fase HO ($f_{HO} = \frac{F_{HO}}{N}$) e para a fase AF ($f_N = \frac{F_N}{N}$) como função dos respectivos *gaps*, em $k_B T=0$.

Os círculos no plano xy indicam qual dos *gaps* está associado ao mínimo global da energia livre.

Pode-se observar que os resultados da figura 5.30 estão de acordo com o diagrama de fases da figura 5.27. Em $W=0,92$ eV os *gaps* da fase AF estão associados ao mínimo global. Depois, em $W=0,94$ eV, os *gaps* das duas fases apresentam aproximadamente o mesmo nível de energia, ou seja, o sistema está próximo da transição AF-HO. Para $W=1,15$ eV, tem-se a fase HO. Em $W=1,18$ eV, ocorre a transição HO-AF, como o esperado. Para $W=1,20$ eV, a fase AF emerge novamente.

Figura 5.30 – Energia livre de Helmholtz por número de sítios, para as fases HO e AF, como função dos *gaps*, em $k_B T=0$, para diversos valores de largura de banda W . Os círculos no plano xy mostram as soluções com energia mais baixa. A cor vermelha representa a fase AF e a cor azul a fase HO. Observa-se que conforme W cresce o sistema evolui da fase AF para a fase HO e novamente para a fase AF.

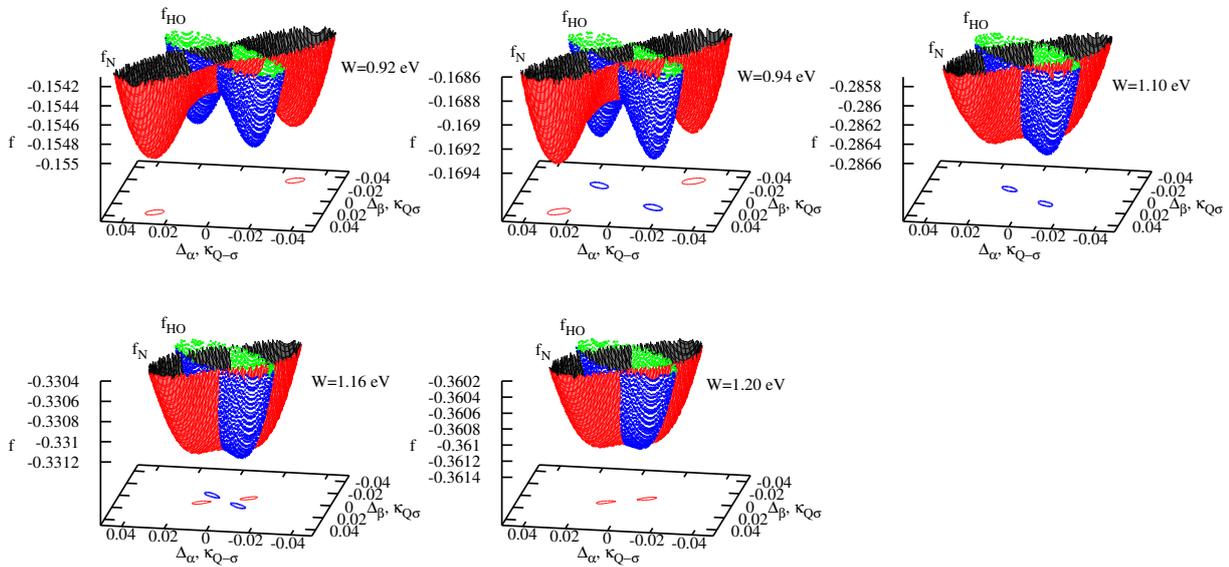


Fonte: Autora.

A figura 5.31 mostra o comportamento da energia livre de Helmholtz por número de sítios como função dos *gaps* em $k_B T=0,002$ eV, também para diversos valores de largura de banda W .

Nota-se nos resultados da figura 5.31 que o aumento da temperatura não tem muita influência na transição AF-HO, contudo a transição HO-AF ocorre mais para a esquerda,

Figura 5.31 – Energia livre de Helmholtz por número de sítios, para as fases HO e AF, como função dos *gaps*, em $k_B T = 0,002$ eV, para diversos valores de largura de banda W . Os círculos no plano xy mostram as soluções com energia mais baixa.



Fonte: Autora.

em W próximo de 1,16 eV. Novamente, o comportamento das energias livres corroboram com o diagrama de fases da figura 5.27.

6 CONCLUSÃO

No presente trabalho, investigou-se a teoria proposta por Riseborough, Coqblin e Magalhaes para descrever a ordem oculta (HO) no URu_2Si_2 , incluindo a fase antiferromagnética (AF) que surge quando aplica-se pressão no sistema. A teoria é baseada no modelo de rede sub-blindada de Anderson (UAL), o qual já foi usado para descrever a competição entre ferromagnetismo e efeito Kondo (COQBLIN et al., 2009). A grande inovação dessa teoria é a proposta de um parâmetro de ordem para descrever a HO. O candidato a parâmetro de ordem é dado pelo valor médio do operador $\hat{z}_{\vec{Q},\sigma}$. Esse operador fornece uma medida do acoplamento entre os dois tipos de banda f (relativas aos orbitais α e β) e em baixas temperaturas leva o sistema para uma fase que pode ser descrita como um tipo de *spin-density-wave* inter-orbital, na qual ocorre quebra de simetria sem a formação de momentos magnéticos (CALEGARI; MAGALHAES; RISEBOROUGH, 2017).

Um dos principais objetivos deste trabalho consistiu em verificar se o modelo UAL, no âmbito da teoria proposta por Riseborough, Coqblin e Magalhaes, consegue descrever a competição entre as fases HO e AF que aparece em diagramas de fases de temperatura (T) e pressão (P) experimentais ((VILLAUME et al., 2008),(NIKLOWITZ et al., 2010),(HASSINGER et al., 2008)). Sendo assim, investigou-se os parâmetros de ordem, os *gaps* de energia, a energia livre de Helmholtz, as bandas de energia, as densidades de estado, as superfícies de Fermi e as susceptibilidades generalizadas de ambas as fases. Resumindo todas essas informações foi possível construir um diagrama de fases $T \times P$, que pode ser comparado com os resultados experimentais.

Com a finalidade de analisar a instabilidade da fase paramagnética (PM) em relação à fase AF, utilizou-se o comportamento das susceptibilidades intra-banda e o critério de Stoner. Na figura 5.1, observa-se o comportamento da susceptibilidade intra-banda $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ em função do potencial químico μ . Segundo o critério de Stoner, quando a susceptibilidade diverge a fase PM se torna instável em relação a fase AF. Os resultados apresentados nessa figura, foram obtidos para $k_B T=0$ e diversos valores de largura de banda W . Pode-se verificar duas divergências em $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$ no intervalo de μ entre 0,29 e 0,34 eV, significando que existem duas regiões de instabilidade da fase PM. Conclui-se então, que para determinados valores de μ a fase AF é mais estável que a fase PM. Verifica-se que esses valores permanecem os mesmos independente da largura de banda W .

Os parâmetros de ordem da fase AF, referentes as bandas α e β , são mostrados nas figuras 5.2 e 5.3. Observa-se que o aumento da temperatura causa uma diminuição na largura de banda crítica W_c , assim como o aumento da largura de banda W causa uma diminuição na temperatura crítica de Neel, T_N . Para certos valores de temperatura e largura de banda W , nota-se uma descontinuidade nos parâmetros de ordem.

O comportamento da energia livre de Helmholtz, na figura 5.7, confirma que essa des-

continuidade marca uma transição de primeira ordem entre duas fase AF denominadas de AF_1 e AF_2 . Ambas as fases de Neel apresentam parâmetros de ordem finitos simultaneamente e diferem uma da outra pela amplitude dos *gaps* de energia, Δ_α e Δ_β , como mostrado na figura 5.5. Também verificou-se que a transição de fase AF_1 - AF_2 desaparece acima de certo valor de temperatura. A região marcada por essas transições de primeira ordem entre as fases de Neel termina em um ponto crítico. Também foi observado que para temperaturas acima de $k_B T_{tric}=0,0011$ eV e larguras de banda abaixo de $W_{tric}=1,6410$ eV, a transição de fase AF-PM ocorre de forma contínua, enquanto que para valores abaixo de T_{tric} e acima de W_{tric} , a transição é marcada por descontinuidades nos parâmetros de ordem AF. Esse comportamento é sugestivo da presença de um ponto tri-crítico, o qual foi confirmado pela expansão da energia livre de Helmholtz.

As bandas de energia e densidades de estados para a fase AF também foram estudadas. Verificou-se que a transição de primeira ordem AF_1 - AF_2 pode ser percebida pelo comportamento dos *gaps* nas bandas de energia: quando a transição ocorre, os *gaps* sofrem uma considerável redução em sua amplitude, que em alguns casos chega a mais de 50%. Fora da região de transições de primeira ordem os *gaps* vão fechando continuamente conforme a temperatura ou a largura de banda aumenta. O que era esperado devido ao comportamento dos parâmetros de ordem. Os *gaps* de Neel e o *gap* da hibridização são observados nas bandas de energia e nas densidades de estados.

As superfícies de Fermi também foram analisadas. Observou-se a reconstrução das superfícies de Fermi α e β . A reconstrução da superfície de Fermi β coincide com a transição de fase AF_1 - AF_2 , contudo, continua ocorrendo mesmo acima do ponto crítico. Esse comportamento sugere que pode existir uma transição de Lifshitz associada a reconstrução da superfície de Fermi. No entanto, é necessário um estudo mais aprofundado para confirmar essa transição. No caso α foi observada uma mudança na topologia da superfície que passa do tipo elétron centrada em $(0,0,0)$ para o tipo buraco centrada em $(\pi,\pi,0)$.

Os resultados para as fases de Neel foram resumidos no diagrama de fases $T \times P$ apresentado na figura 5.14. Esse diagrama de fases é bastante similar a resultados apresentados em outros trabalhos teóricos e ao diagrama experimental $T \times P$ do ferromagneto itinerante UGe_2 .

Na sequência, foram apresentados os resultados para a fase HO. Na figura 5.15, as susceptibilidades intra-banda e inter-banda mostram que o modelo é capaz de assegurar a estabilidade tanto da fase AF, quanto da fase HO. Nota-se que em torno de $\mu=0,32$ eV, abre uma "janela" de potencial químico em $\chi_{f,\sigma}^{\alpha\alpha} + \chi_{f,\sigma}^{\beta\beta}$, permitindo que a fase HO torne-se mais estável que a fase AF em um dado intervalo de potencial químico.

As figuras 5.16 e 5.18 mostram o comportamento do parâmetro de ordem da fase HO em função de $k_B T$ e em função da largura de banda W , respectivamente. Os resultados revelam que acima da largura de banda 1,18 eV a transição da fase PM para a fase HO passa a ser uma transição descontínua. Entretanto, nessa região o diagrama de fases

apresentado na figura 5.27 indica que a fase AF é mais estável do que a fase HO.

O diagrama de fases $T \times W$, da figura 5.27, foi construído usando as instabilidades de segunda ordem dadas pelas equações 4.122 e 4.155, e a energia livre de Helmholtz da fase AF e da fase HO. O diagrama mostra-se qualitativamente em acordo com o diagrama experimental apresentado na figura 2.5. A análise da energia livre de Helmholtz da fase AF e da fase HO, feita a partir das figuras 5.30 e 5.31, corroboram com as informações fornecidas pelo diagrama de fase $T \times W$ sobre as transições de primeira da ordem AF-HO e HO-AF. Lembrando, que a variação da largura de banda W simula os efeitos da pressão sobre o sistema.

Para finalizar, conclui-se que os resultados obtidos neste trabalho mostram que, mesmo fazendo considerações como por exemplo, o uso de uma relação de dispersão de uma rede cúbica ao invés de uma rede mais realista para o sistema URu_2Si_2 , a teoria proposta por Riseborough et.al. (RISEBOROUGH; COQBILIN; MAGALHAES, 2012) para o modelo de rede sub-blindada de Anderson consegue descrever detalhes importantes do composto URu_2Si_2 , como visto no diagrama de fases que mostra a presença de ambas as fases, HO e AF.

Perspectivas

Como continuação do trabalho, pretende-se tratar o problema completo sem separar as fases HO e AF nas funções de Green. Esses estudo servirá para confirmar, ou não, o comportamento das linhas de transições de primeira ordem AF-HO e HO-AF. Outro ponto a ser abordado é o uso da expansão da energia livre completa (HO+AF) para verificar a existência de um ponto bi-crítico observado experimentalmente (NIKLOWITZ et al., 2010) .

Além disso, para o caso AF puro, será feita uma análise dos efeitos de um campo transversal sobre o ponto tri-crítico verificado no diagrama de fases apresentado neste trabalho. Essa análise tem por objetivo investigar se o ponto tri-crítico evolui para um ponto crítico quântico ou para um *end critical point* quando o sistema encontra-se sob a ação de um campo magnético transversal externo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRIKOSOV, A.; GORKOV, L.; DZIALOSHINSKI, I. **Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics**. [S.l.]: Dover Publications, 1975.

ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metal. **Physical Review**, v. 124, n. 1, p. 41–53, 1961.

BAEK, S.-H. et al. Antiferromagnetic patches and hidden order in URu₂Si₂. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 132404, Apr 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.132404>>.

BAREILLE, C. et al. Momentum-resolved hidden-order gap reveals symmetry breaking and origin of entropy loss in URu₂Si₂. **Nature Communications**, v. 5, n. 4326, 2014.

BROHOLM, C. et al. Magnetic excitations and ordering in the heavy-electron superconductor URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, v. 58, n. 14, p. 1467–1470, 2007.

_____. Magnetic excitations in the heavy-fermion superconductor URu₂Si₂. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 43, p. 12809–12822, Jun 1991. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.12809>>.

BRUUS, H.; FLENSBERG, K. **Introduction to Many-body quantum theory in condensed matter physics**. Copenhagen: [s.n.], 2002.

BUHOT, J. et al. Symmetry of the excitations in the hidden order state of URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 113, p. 266405, Dec 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.266405>>.

BUTCH, N. P. et al. Antiferromagnetic critical pressure in URu₂Si₂ under hydrostatic conditions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 82, p. 060408, Aug 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.060408>>.

CALEGARI, E. J.; MAGALHAES, S. G. Introdução a sistemas fortemente correlacionados. **Revista Ciência e Natura**, Especial, p. 174–187, Agosto 2005.

CALEGARI, E. J.; MAGALHAES, S. G.; RISEBOROUGH, P. S. Unusual magnetic field-dependence of a possible hidden order phase. **NPJ - Quantum Materials**, 2017.

CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics**. [S.l.]: Wiley, 1985. 512 p.

CHANDRA P., C. P. F. R. Hastatic order in the heavy-fermion compound URu₂Si₂. **Nature**, Nature Publishing Group, a division of Macmillan Publishers Limited. All Rights Reserved., v. 493, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature11820>>.

COQBLIN, B. et al. Underscreened kondo lattice model versus underscreened anderson lattice model: Application to uranium compounds. **Physica B: Condensed Matter**, v. 404, n. 19, p. 2961 – 2963, 2009.

CULLITY, B. D. **Introduction to Magnetic Materials**. Estados Unidos: Wesley Publishing Company, 1972.

DAS, T. Imprints of spin-orbit density wave in the hidden-order state of URu₂Si₂. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 89, p. 045135, Jan 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.045135>>.

DUBI, Y.; BALATSKY, A. V. Hybridization wave as the “hidden order” in URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 106, p. 086401, Feb 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.086401>>.

FAZEKAS, P. **Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism**. New York: World Scientific, 1999.

FERREIRA, J. V. B. **Modelo de Anderson de dois canais**. 2000. Tese (Doutorado Ciências: Física Básica) — Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, São Carlos, 2000.

FREIRE, M. D. M. **FUNÇÕES DE GREEN EM MECÂNICA ESTATÍSTICA**. 2014. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2014.

FUJIMOTO, S. Spin nematic state as a candidate of the hidden order phase of URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 106, p. 196407, May 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.196407>>.

HARIMA, H.; MIYAKE, K.; FLOUQUET, J. Why the hidden order in URu₂Si₂ is still hidden—one simple answer. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 79, n. 3, p. 033705, 2010.

HASSINGER, E. et al. Temperature-pressure phase diagram of URu₂Si₂ from resistivity measurements and ac calorimetry: Hidden order and fermi-surface nesting. **Phys. Rev. B**, v. 77, p. 115117, 2008.

HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. **Proc. Roy. Soc.**, p. 238, 1963.

IGA, F.; KASAYA, M.; KASUYA, T. Specific heat measurements of YbB₁₂ and Yb_xLu_{1-x}B₁₂. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 76-77, 1988.

IKEDA, H.; OHASHI, Y. Theory of unconventional spin density wave: A possible mechanism of the micromagnetism in U-based heavy fermion compounds. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 81, p. 3723–3726, Oct 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.3723>>.

KAKEHASHI, Y. **Modern Theory of Magnetism in Metals and Alloys**. [S.l.]: Springer, 2012.

KERNAVANOIS, N. et al. Investigation of the crystal structure of URu₂Si₂ by high-resolution x-ray diffraction. **Physica B**, v. 259-261, p. 648–649, 1999.

KISS, A.; FAZEKAS, P. Group theory and octupolar order in URu₂Si₂. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 71, p. 054415, Feb 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.054415>>.

KUBO, K. Lifshitz transitions in magnetic phases of the periodic anderson model. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 84, n. 9, p. 094702, 2015.

LAUSMANN, A. C. et al. Competing antiferromagnetic phases of the under-screened anderson lattice model. **Progress in Nuclear Science and Technology**, Atomic Energy Society of Japan, v. 5, 2018.

MAPLE, M. et al. Partially gapped fermi surface in the heavy-electron superconductor URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, v. 56, n. 2, p. 185–188, 1986.

MINEEV, V. P.; ZHITOMIRSKY, M. E. Interplay between spin-density wave and induced local moments in URu₂Si₂. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 72, p. 014432, Jul 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.014432>>.

MYDOSH, J. A.; OPPENEER, P. M. Hidden order, superconductivity, and magnetism: the unsolved case of URu₂Si₂. **Rev. Mod. Phys.**, v. 83, n. 4, p. 1301–1322, 2011.

NAZARENO, H. N. **Mecânica estatística e funções de Green**. [S.l.]: Editora Universidade de Brasília, 1986. 78 p.

NIKLOWITZ, P. G. et al. Parasitic small-moment antiferromagnetism and nonlinear coupling of hidden order and antiferromagnetism in URu₂Si₂ observed by larmor diffraction. **Phys. Rev. Lett.**, v. 104, n. 106406, p. 1–4, 2010.

OKAZAKI, R. **Hidden Order and Exotic Superconductivity in the Heavy-Fermion Compound URu₂Si₂**. 2013. 102 f. Tese (Doutorado em Geofísica) — Kyoto University, Japan, 2013.

OKAZAKI, R. et al. Rotational symmetry breaking in the hidden-order phase of URu₂Si₂. **Science**, v. 331, p. 439–442, 2011.

OSTERMANN, F.; PUREUR, P. **Supercondutividade**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005. 78 p.

PALSTRA, T. T. M. et al. Superconducting and magnetic transitions in the heavy-fermion system URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, v. 55, n. 24, p. 2727–2730, 1985.

PÉPIN, C. et al. Modulated spin liquid: A new paradigm for URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 106, p. 106601, Mar 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.106601>>.

PERKINS, N. B. et al. Underscreened kondo lattice model applied to heavy fermion uranium compounds. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 76, p. 125101, Sep 2007. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.125101>>.

PUREUR, P. **Estado sólido**. Porto Alegre: Instituto de Física - UFRGS, 2001.

RAMIREZ, A. P. et al. Nonlinear susceptibility as a probe of tensor spin order in URu₂Si₂. **Phys. Rev. Lett.**, v. 68, n. 17, p. 2680–2683, 1992.

REICHL, L. E. **A Modern Course in Statistical Physics**. [S.l.]: John Wiley and Sons, Inc., 1998. 666 p.

RISEBOROUGH, P. S.; COQBLIN, B.; MAGALHAES, S. G. Phase transition arising from the underscreened anderson lattice model: A candidate concept for explaining hidden order in URu₂Si₂. **Phys. Rev. B**, v. 85, p. 165116, 2012.

_____. The underscreened anderson lattice: A model for uranium compounds. **Journal of the Korean Physical Society**, v. 62, n. 10, p. 1431–1433, 2013.

RISEBOROUGH, P. S.; MAGALHAES, S. G.; CALEGARI, E. J. Signatures of broken spin-rotational invariance in the “hidden ordered” compound URu₂Si₂? **Philosophical Magazine**, v. 94, p. 3820–3837, 2015.

RISEBOROUGH S. G. MAGALHAES, E. J. C. P. S. A minimal model for hidden order in URu_2Si_2 . **Philosophical Magazine**, 2014.

SALINAS, S. R. A. **Introdução a Física Estatística**. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005.

SANTINI, P.; AMORETTI, G. Crystal field model of the magnetic properties of URu_2Si_2 . **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 73, p. 1027–1030, Aug 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.1027>>.

SCHLABITZ, W.; BAUMANN, J.; POLLIT, B. Superconductivity and magnetic order in a strongly interacting fermi-system: URu_2Si_2 . **Z. Phys. B - Condensed Matter**, v. 62, p. 171–177, 1986.

TAUFOUR, V. et al. Tricritical point and wing structure in the itinerant ferromagnet UGe_2 . **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 105, p. 217201, Nov 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.217201>>.

THOMAS, C. et al. Three-dimensional modulated spin liquid model applied to URu_2Si_2 . **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 87, p. 014422, Jan 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.014422>>.

VILLAUME, A. et al. Signature of hidden order in heavy fermion superconductor URu_2Si_2 : Resonance at the wave vector $\mathbf{q}_0 = (1, 0, 0)$. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 78, p. 012504, Jul 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.012504>>.

WALKER, H. C. et al. Resonant x-ray scattering study of the URu_2Si_2 hidden-order phase. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 83, p. 193102, May 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.193102>>.

ZUBAREV, D. N. Double-time green functions in statistical physics. **Soviet Physics Uspekhi**, v. 3, p. 320–342, 1960.