

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

**PSEUDOGAP E CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO
DE HUBBARD REPULSIVO**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Ana Claudia Lausmann

Santa Maria, RS, Brasil

2014

PSEUDOGAP E CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO DE HUBBARD REPULSIVO

Ana Claudia Lausmann

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

Orientador: Prof. Eleonir João Calegari

Santa Maria, RS, Brasil

2014

Ficha catalográfica elaborada através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Central da UFSM, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Lausmann, Ana Claudia
Pseudogap e calor específico de um modelo de Hubbard repulsivo / Ana Claudia Lausmann.-2014.
73 f. ; 30cm

Orientador: Eleonir João Calegari
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, RS, 2014

1. Pseudogap 2. Flutuações antiferromagnéticas 3. Calor específico 4. Energia de condensação 5. Modelo de Hubbard I. Calegari, Eleonir João II. Título.

©2014

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

**Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Ciências Naturais e Exatas
Programa de Pós-Graduação em Física**

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,
aprova a Dissertação de Mestrado

**PSEUDOGAP E CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO DE HUBBARD
REPULSIVO**

elaborada por
Ana Claudia Lausmann

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

Eleonir João Calegari, Dr.
(Presidente/orientador)

Amos Troper, Dr. (CBPF)

Carlos Mauricio Giesbrecht Ferreira Chaves, Dr. (CBPF)

Santa Maria, 15 de agosto de 2014.

Aos meus pais, Ana e Claudio, e ao meu irmão Eduardo.

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 e pela sua dedicação;

- 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 Claudio e Ana, ao meu irmão Eduardo e demais familiares pelo apoio durante todos dias da minha vida;

- aos meus amigos pela ajuda e incentivo.

RESUMO

Dissertação de Mestrado
Programa de Pós-Graduação em Física
Universidade Federal de Santa Maria

PSEUDOGAP E CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO DE HUBBARD REPULSIVO

AUTORA: ANA CLAUDIA LAUSMANN

ORIENTADOR: ELEONIR JOÃO CALEGARI

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 15 de agosto de 2014.

No presente trabalho estuda-se o calor específico de um modelo de Hubbard considerado adequado para discutir supercondutores de altas temperaturas. Resultados para o modelo de Hubbard mostram que o calor específico em função da temperatura apresenta uma estrutura de dois picos (DUFFY; MOREO, 1997). O pico de baixa temperatura está associado às flutuações de spin, enquanto que o pico em alta temperatura está relacionado às flutuações de carga. Por outro lado, resultados experimentais do calor específico de supercondutores de altas temperaturas (LORAM et al., 2001), como por exemplo o *YBCO* e o *LSCO*, indicam uma forte relação entre o calor específico e o *pseudogap*. Portanto, neste trabalho investiga-se a relação entre o *pseudogap* e o calor específico de um modelo de Hubbard usando a técnica das funções de Green em conjunto com a aproximação de n -pólos proposta por L. Roth (ROTH, 1969). O calor específico é calculado na região do *pseudogap* e da supercondutividade. Considera-se supercondutividade com simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ e o parâmetro de ordem supercondutor é obtido seguindo-se o procedimento de fatorização proposto por Beenen e Edwards (BEENEN; EDWARDS, 1995). A expressão analítica do calor específico é obtida seguindo o formalismo proposto na referência (KISHORE; JOSHI, 1971). No cenário adotado, o *pseudogap* emerge quando flutuações antiferromagnéticas, as quais estão relacionadas a correlações antiferromagnéticas (presentes no deslocamento de banda da Roth), tornam-se fortes o suficiente para puxar as bandas renormalizadas para energias abaixo do potencial químico no ponto (π, π) . Observou-se que acima de uma certa ocupação, o salto no calor específico decresce sinalizando a abertura do *pseudogap*. Os efeitos das flutuações antiferromagnéticas sobre a energia de condensação e sobre a supercondutividade também são investigados.

Palavras-chave: Modelo de Hubbard. Pseudogap. Funções de Green. Calor específico. Flutuações antiferromagnéticas.

ABSTRACT

Master Thesis
Programa de Pós-Graduação em Física
Universidade Federal de Santa Maria

PSEUDOGAP AND THE SPECIFIC HEAT REPULSIVE HUBBARD MODEL

AUTHOR: ANA CLAUDIA LAUSMANN

ADVISOR: ELEONIR JOÃO CALEGARI

Local and date: Santa Maria, August 15, 2014.

The specific heat and the condensation energy of a two-dimensional Hubbard model, suitable to discuss high T_c superconductors (HTSTC), is studied taking into account hopping to first (t) and second (t_2) nearest neighbors. Results for the Hubbard model show that the specific heat as a function of the temperature $C(T)$ presents a two peaks structure (DUFFY; MOREO, 1997). The low temperature peak has been associated with spin fluctuation while the high temperature peak is related to charge fluctuation. Experimental results for the specific heat of HTSC's (LORAM et al., 2001), for instance, the YBCO and LSCO, indicate a close relation between the *pseudogap* and the specific heat. In the present work, we investigate the specific heat by the Green's function method within the n -pole approximation proposed by L. Roth (ROTH, 1969). The specific heat is calculated on the *pseudogap* and on the superconducting regions. Superconductivity with $d_{x^2-y^2}$ -wave pairing is considered following the procedure proposed by Beenen and Edwards (BEENEN; EDWARDS, 1995). The analytical expressions for the specific heat and for the condensation energy have been obtained following the formalism presented in reference (KISHORE; JOSHI, 1971). In the present scenario, the *pseudogap* emerges when the antiferromagnetic (AF) fluctuations (present in the Roth's band shift) become strongly sufficient to push down the region of the nodal point (π, π) on the renormalized quasi-particle bands. We observed that above a given total occupation n_T , the specific heat decreases signaling the *pseudogap* presence. The effects of the antiferromagnetic fluctuations on the condensation energy and on superconductivity are also investigated.

Keywords: Hubbard model. Pseudogap. Green's functions. Specific heat. Antiferromagnetic fluctuations.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Resistência elétrica (em ohms) do mercúrio em função da temperatura. Fonte: (OSTERMANN; PUREUR, 2005).	13
Figura 1.2 – Representação ilustrativa do efeito Meissner em uma esfera supercondutora. Fonte: lffs.paginas.ufsc.br/files/2011/07/CAP6.19.07.2011.pdf em 20/07/2014.	14
Figura 1.3 – Magnetização em módulo em função do campo magnético aplicado a um material supercondutor tipo I (a esquerda) e a um material supercondutor tipo II (a direita). Fonte: lffs.paginas.ufsc.br/files/2011/07/CAP6.19.07.2011.pdf em 17/07/2014.	15
Figura 1.4 – Planos de CuO_2 separados por reservatórios de carga. Fonte: (CALEGARI, 2006).	17
Figura 1.5 – Estrutura cristalina do composto $La_{2-x}Sr_xCuO_2$. Fonte: (DAGOTTO, 1994)	18
Figura 1.6 – Diagrama de fase genérico da temperatura pela dopagem de cupratos supercondutores dopados por buracos. Fonte: (PIUMBINI, 2013).	18
Figura 1.7 – <i>Gap</i> supercondutor do composto $Bi2212$, medido usando a técnica de ARPES. Fonte:(NORMAN, 1998).	19
Figura 1.8 – Espectros de energia mostrando o <i>gap</i> supercondutor e o <i>pseudogap</i> para o composto $Bi2212$ no regime de baixas dopagens. Fonte:(NORMAN, 1998).	19
Figura 1.9 – Esquema ilustrativo da evolução da superfície de Fermi em função da temperatura. Fonte:(NORMAN, 1998).	20
Figura 2.1 – A figura acima mostra os pólos no eixo imaginário e os contornos de integração por $t - t' > 0$ e $t - t' < 0$. Fonte: (ZUBAREV, 1960).	26
Figura 2.2 – Ilustração esquemática de um sistema descrito pelo modelo de Hubbard. Fonte: Site www.ann-phys.org em 15/07/2014.	28
Figura 2.3 – À esquerda, esquema dos níveis de energia e à direita, densidade eletrônica n em função do potencial químico μ , de um sistema descrito pelo modelo de Hubbard para $t=0$ e U finito. Fonte: (FAZEKAS, 1999)	30
Figura 4.1 – Banda renormalizada para diferentes ocupações n_T	58
Figura 4.2 – Banda renormalizada para diferentes ocupações n_T	58
Figura 4.3 – Banda renormalizada para diferentes intensidades de amplitude do salto para segundos vizinhos t_2	59
Figura 4.4 – Banda renormalizada para diferentes ocupações n_T	60
Figura 4.5 – Função correlação spin-spin em função de $t_2/ t $	60
Figura 4.6 – Densidades de estados para $U = 8, 0 t $, $t = -1, 0eV$, $n_T = 0, 88$ e $k_B T = 0, 03 t $ e diversos valores de t_2	61
Figura 4.7 – Bandas renormalizadas para $k_B T = 0$	62
Figura 4.8 – Calor específico em função de $k_B T$ e diferentes ocupações.	62
Figura 4.9 – O painel de cima mostra o salto da calor específico em função da ocupação. O painel de baixo mostra o comportamento de $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em função da ocupação.	63
Figura 4.10 – Salto do coeficiente do calor específico $\Delta(C/T) = \Delta\gamma$ em função da dopagem p . Fonte:(LORAM et al., 2001)	63
Figura 4.11 – Energia de condensação $U(0)$ em função da ocupação n_T	64
Figura 4.12 – Energia de condensação $U(0)$ em função da dopagem p . Fonte:(LORAM et al., 2001)	64
Figura 4.13 – Energia de condensação em função de t_2 , para várias ocupações.	65
Figura 4.14 – Energia de condensação e e função de correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em função	

da interação Coulombiana.	65
Figura 4.15 – Banda renormalizada para $n_T = 0,85 t $, $t = -1,0eV$, $t_2 = 0$ e $k_B T = 0,03 t $, e diferentes valores de interação Coulombiana.	66

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1 – Exemplos de cupratos supercondutores e suas respectivas temperaturas críticas. Fonte:(OSTERMANN; PUREUR, 2005).....	17
--	----

SUMÁRIO

RESUMO.....	5
ABSTRACT.....	6
INTRODUÇÃO.....	11
1 SUPERCONDUTIVIDADE.....	13
1.1 Supercondutividade: evolução histórica.....	13
1.2 Materiais cupratos e o <i>pseudogap</i>	16
2 MÉTODO.....	21
2.1 Técnica das Funções de Green.....	21
2.1.1 Funções de Green avançada e retardada.....	21
2.1.2 Equações de Movimento.....	23
2.1.3 Funções de correlação.....	24
2.1.4 Representação Espectral.....	25
2.2 Modelo de Hubbard.....	27
2.2.1 Descrição do modelo.....	27
2.2.2 Casos limites.....	29
2.3 Aproximação de <i>n</i> -pólos.....	30
3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA.....	34
3.1 Estado Normal.....	34
3.1.1 Bandas Renormalizadas.....	38
3.1.2 Potencial químico.....	39
3.1.3 Deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$	40
3.2 Estado Supercondutor.....	42
3.2.1 Potencial químico no estado supercondutor.....	45
3.2.2 Função <i>gap</i> $\gamma_{\vec{k}}$	48
3.3 Energia interna por partícula.....	50
3.4 Calor específico.....	52
3.5 Energia de condensação $U(0)$	55
4 RESULTADOS.....	57
4.1 Estado Normal.....	57
4.2 Estado Supercondutor.....	61
5 CONCLUSÃO.....	67
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	69

INTRODUÇÃO

O fenômeno da supercondutividade, foi alvo de grande interesse durante o século XX e ainda hoje é um dos principais temas de pesquisa na área da física da matéria condensada. Esse fenômeno, caracterizado pela perda total da resistência de certos materiais, foi descoberto em 1911, por Kemerling Onnes, enquanto este pesquisava o comportamento da resistência elétrica do mercúrio em temperaturas muito baixas, próximas do zero absoluto (OSTERMANN; PUREUR, 2005). Desde então, busca-se por um material que apresente supercondutividade a temperatura ambiente. Além da importância científica, este feito poderia conduzir a uma nova revolução industrial (LUIZ, 2012). A descoberta deste incrível fenômeno rendeu a Onnes o prêmio Nobel de Física de 1913.

Em 1957, John Bardeen, Leon Cooper e John Robert Schrieffer (BARDEEN; COOPER; SCHIEFFER, 1957) formularam uma teoria que foi capaz de explicar o essencial sobre o fenômeno da supercondutividade (BEENEN; EDWARDS, 1995). Essa teoria ficou conhecida como teoria BCS e levou seus criadores ao prêmio Nobel de Física de 1972. No entanto em 1987, com a descoberta da supercondutividade de alta temperatura em óxidos de cobre (cupratos), novas questões surgiram e cogitou-se a possibilidade de um novo mecanismo atuar nesses sistemas (DOMAŃSKI; WYSOKIŃSKI, 1999), um que não poderia ser explicado pela teoria BCS.

Mais tarde, os cupratos, e demais supercondutores de altas temperaturas, foram incluídos na vasta categoria dos sistemas de elétrons fortemente correlacionados. Um sistema é considerado um sistema de elétrons fortemente correlacionado quando a interação Coulombiana entre uma partícula localizada em um orbital e uma itinerante, é maior que a energia cinética da partícula itinerante (IMADA; FUJIMORI; TOKURA, 1998).

Entre os modelos usados para o estudo dos sistemas de elétrons fortemente correlacionados está o modelo de Hubbard (HUBBARD, 1963) de uma banda, com interação repulsiva local. Anderson (ANDERSON, 1987) foi o primeiro a propor que esse modelo poderia conter o essencial sobre os supercondutores de altas temperaturas. Ele argumentou também que a fase supercondutora, a fase isolante de Mott e o *pseudogap* teriam origem nas fortes correlações e que os três fenômenos poderiam ser descritos pelo modelo de Hubbard (GULL; PARCOLLET; J., 2013). Nos anos que se seguiram após a publicação do artigo de Anderson o modelo tem sido amplamente investigado em diferentes níveis de aproximações, mesmo assim, a existência da supercondutividade e do *pseudogap* no modelo de Hubbard ainda são questões em aberto para a física da matéria condensada (CALEGARI et al., 2013).

O *pseudogap* é uma das características mais interessantes e complexas nos supercondutores de altas temperaturas. Ele é um *gap* parcial que aparece no estado normal em uma região chamada de *underdoped*. Foi observado pela primeira vez em experimen-

tos de ressonância magnética nuclear (NMR) (SILVA, 2009) e acredita-se que o entendimento de sua natureza pode ser a chave para a compreensão dos supercondutores de altas temperaturas (CALEGARI et al., 2013).

Através do estudo do calor específico de um supercondutor pode-se obter algumas informações tanto sobre a supercondutividade, como sobre o *pseudogap*. Existem resultados experimentais (LORAM et al., 2001), para o YBCO e LSCO por exemplo, que indicam uma relação entre o *pseudogap* e o calor específico. O calor específico de um supercondutor apresenta uma descontinuidade na temperatura crítica, evidenciando a ocorrência de um fenômeno de transição de fase (OSTERMANN; PUREUR, 2005). Além disso, essa propriedade termodinâmica pode fornecer informações sobre a simetria do estado supercondutor nesses materiais (PÉREZ et al., 2007). Resultados para a energia de condensação em função da dopagem também evidenciam a abertura do *pseudogap* (LORAM et al., 2001).

Nesse trabalho é investigado o calor específico e a energia de condensação de um modelo de Hubbard de uma banda, bidimensional, com interação repulsiva local U que considera os primeiros (t) e segundos (t_2) vizinhos. Adota-se um cenário no qual o *pseudogap* emerge devido a presença de flutuações antiferromagnéticas. Essas flutuações antiferromagnéticas estão associadas a correlações antiferromagnéticas. O objetivo do estudo é investigar se as flutuações antiferromagnéticas podem ser responsáveis pelo *pseudogap*.

Este trabalho está organizado conforme descrito a seguir: no capítulo 1 discute-se um pouco da evolução histórica da supercondutividade e, em especial, sobre os cupratos supercondutores de altas temperaturas.

No capítulo 2 descreve-se os métodos e o modelo utilizado nesse trabalho.

O capítulo 3 apresenta a formulação do problema e os resultados analíticos.

Os resultados numéricos são apresentados e discutidos no capítulo 4.

Por fim, o capítulo 5 apresenta as conclusões do trabalho.

1 SUPERCONDUTIVIDADE

1.1 Supercondutividade: evolução histórica

Em 8 de Abril de 1911, no Laboratório da Universidade de Leiden, na Holanda, Heike Kamerling Onnes descobriu o fenômeno da supercondutividade, enquanto estudava o comportamento da resistividade elétrica do mercúrio (Hg) em temperaturas muito baixas. Três anos antes, nesse mesmo Laboratório, ele havia obtido a liquefação do hélio, o que lhe permitiu realizar diversas pesquisas na área conhecida atualmente como Física das Baixas Temperaturas (OSTERMANN; PUREUR, 2005). Suas descobertas lhe renderam o prêmio Nobel de Física em 1913.

A figura 1.1 mostra o resultado obtido por Onnes em 1911. Esse resultado foi confirmado várias vezes para garantir que não se tratava de um erro experimental.

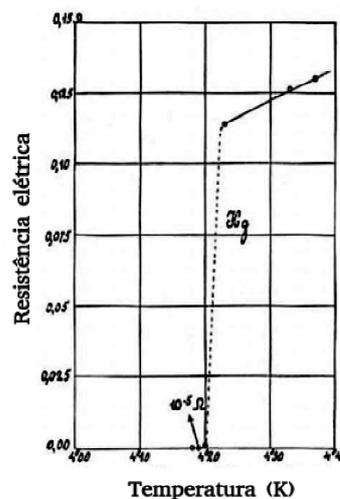


Figura 1.1: Resistência elétrica (em ohms) do mercúrio em função da temperatura. Fonte: (OSTERMANN; PUREUR, 2005).

Mais tarde, em 1914, Onnes também verificou que a supercondutividade pode ser destruída por um campo magnético crítico H_C , o que o levou a notar que existe uma certa densidade de corrente crítica J_C , acima da qual o material deixa de ser supercondutor. Dessa forma, a supercondutividade pode ser destruída por três parâmetros críticos: temperatura, campo magnético e densidade de corrente (LUIZ, 2012).

Em 1933 Walther Meissner e seu assistente Robert Ochsenfeld descobriram que além da perda da resistividade elétrica, um material supercondutor, quando resfriado abaixo de T_C em um campo magnético externo, apresenta a propriedade de expelir o

fluxo magnético de seu interior. Este fenômeno ficou conhecido como efeito Meissner-Ochsenfeld (PEREIRA; FÉLIX, 2013). Por causa do efeito Meissner-Ochsenfeld os supercondutores são considerados materiais diamagnéticos perfeitos (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

Na figura 1.2 observa-se uma representação ilustrativa do efeito Meissner, na qual, primeiro, uma esfera supercondutora é submetida a um campo magnético externo \vec{B} , a uma temperatura T maior que T_C . Nesse caso, a esfera está no estado normal e o fluxo magnético penetra em seu interior. Depois, a temperatura T é menor que T_C e a esfera sofre uma transição de fase, passa do estado normal para o estado supercondutor, levando à expulsão do fluxo magnético de seu interior.

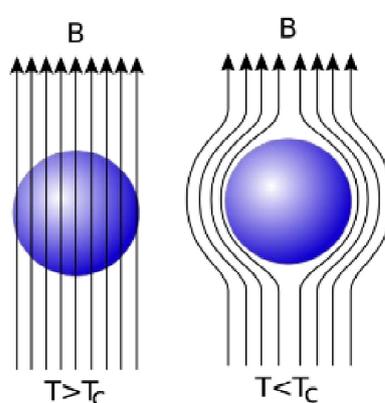


Figura 1.2: Representação ilustrativa do efeito Meissner em uma esfera supercondutora. Fonte: [lffs.paginas.ufsc.br/files/2011/07/CAP6.19.07.2011.pdf](http://ffs.paginas.ufsc.br/files/2011/07/CAP6.19.07.2011.pdf) em 20/07/2014.

O efeito Meissner ocorre em todos os supercondutores se o campo aplicado for suficientemente fraco. No entanto, nem todos os supercondutores respondem da mesma maneira à presença do campo externo, o que levou a classificação dos materiais supercondutores em dois tipos: supercondutores tipo I e tipo II. Os supercondutores do tipo I apresentam apenas os estados de Meissner (no qual, se o campo aplicado for menor que o valor do campo crítico \vec{B}_C , não ocorre penetração de fluxo magnético) e o normal. Já os supercondutores tipo II, apresentam dois campos críticos. Abaixo do campo crítico inferior \vec{B}_{C1} tem-se o estado de Meissner, sem nenhuma penetração do fluxo magnético. Se o campo aplicado for maior que o valor do campo crítico inferior, o fluxo magnético penetra parcialmente no material, porém a supercondutividade se mantém, desde que esse campo seja inferior ao campo crítico superior \vec{B}_{C2} . O campo crítico superior pode ser muitas vezes maior que o campo crítico inferior ((OSTERMANN; PUREUR, 2005) e (ASHCROFT; MERMIN, 2011)).

Na figura 1.3 observa-se uma ilustração da magnetização em módulo em função do campo magnético aplicado a um material supercondutor tipo I e a um material supercondutor tipo II.

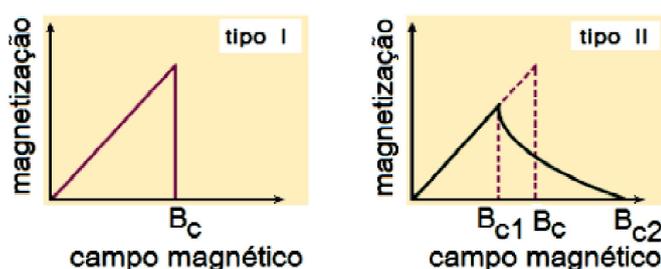


Figura 1.3: Magnetização em módulo em função do campo magnético aplicado a um material supercondutor tipo I (a esquerda) e a um material supercondutor tipo II (a direita). Fonte: ffs.paginas.ufsc.br/files/2011/07/CAP6.19.07.2011.pdf em 17/07/2014.

No ano de 1935, os irmãos F. London e H. London formularam um modelo para o efeito Meissner baseado no chamado modelo de dois fluidos, o qual considera que apenas uma fração dos elétrons de condução se encontra no estado supercondutor.

O modelo formulado pelos irmãos London conseguiu explicar certas características dos supercondutores, contudo, as propriedades desses materiais permaneceram por mais duas décadas sem uma explicação microscópica aceitável (OLIVEIRA; JESUS, 2011). Foi apenas em 1957 que emergiu uma teoria completa e satisfatória para os supercondutores (TINKHAM, 1996). Essa teoria ficou conhecida como teoria BCS da supercondutividade e rendeu a seus criadores - John Bardeen, Leon Cooper e John Robert Schrieffer (BARDEEN; COOPER; SCHIEFFER, 1957)- o Prêmio Nobel de Física de 1972.

A teoria BCS diz que devido à interação elétron-fônon, elétrons, com vetores de onda e spins opostos, podem se emparelhar formando os chamados pares de Cooper compostos por dois elétrons e um fônon, capazes de se deslocar na rede cristalina sem dispersão (CHAPARRO, 1991). O fônon está associado a uma deformação na rede cristalina provocada pela interação entre os elétrons e os íons da rede. Como a velocidade do elétron é muito maior do que a do fônon, ocorre um retardamento na propagação da deformação em relação ao elétron, fazendo com que os elétrons que compõe o par de Cooper permaneçam correlacionados por longas distâncias. No estado fundamental de um supercondutor, todos esses pares de Cooper ocupam o mesmo estado quântico formando um condensado de Bose-Einstein. O resultado mais importante desta teoria é a previsão de que entre o estado supercondutor e o estado normal existe um *gap* de energia, o qual é responsável pelas características incomuns dos supercondutores, como por exemplo o efeito Meissner (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

Até meados de 1980, a temperatura crítica mais elevada observada era de $23K$, no composto intermetálico Nb_3Ge (OSTERMANN; PUREUR, 2005). Em 1986, Georg Bednorz e Karl Alex Müller (BEDNORZ; MULLER, 1986), encontraram um material com T_C próximo de $30 K$ indicando a existência de uma nova classe de supercondutores.

Essa descoberta foi de grande impacto na história dos supercondutores e levou os dois pesquisadores ao Prêmio Nobel da Física em 1987. Ainda nesse ano, foi descoberto o cuprato $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ com T_C próximo de 92 K . Várias características desses novos supercondutores, denominados supercondutores de altas temperaturas, estão de acordo com a teoria BCS, no entanto, ela é incapaz de explicar as altas temperaturas críticas apresentadas por esses novos sistemas (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

Atualmente, sabe-se que a supercondutividade é um fenômeno comum a quase todos os elementos metálicos. Inclusive, o fenômeno já foi observado em sistemas puramente orgânicos e compostos com base em $FeAS$ (genericamente denominados pnictídeos) (OSTERMANN; PUREUR, 2005). A esperança dos pesquisadores é encontrar um material que apresente supercondutividade a temperatura ambiente.

As inúmeras aplicações tecnológicas da supercondutividade, como por exemplo, geração, transmissão e armazenamento de energia elétrica sem perdas de energia pelo efeito joule; construção de trens de levitação magnética; ou ainda aplicações medicinais, como ressonância nuclear magnética e a construção de dispositivos eletrônicos conhecidos como SQUID (Dispositivo Supercondutor de Interferência Quântica), usados para medir campos magnéticos extremamente baixos, como os produzidos pelo coração e cérebro, entre outras (LUIZ, 2012), justificam o esforço que vem sendo feito a mais de um século para compreender as propriedades dos supercondutores.

1.2 Materiais cupratos e o *pseudogap*

A descoberta da supercondutividade num composto complexo contendo lantânio, bário, cobre e oxigênio, no ano de 1986 a uma temperatura crítica de aproximadamente 30 K , causou grande impacto na pesquisa dos sólidos. Esse composto, cuja fórmula química é $La_{2-x}BaCuO_4$, faz parte da família dos cupratos (LUIZ, 2012).

Os cupratos são supercondutores de altas temperaturas com uma característica estrutural essencial: uma sequência de planos atômicos paralelos, com composição CuO_2 , que são responsáveis pelas propriedades eletrônicas do estado normal e pela supercondutividade (OSTERMANN; PUREUR, 2005). Na figura 1.4 é esquematizada a estrutura cristalina do composto, a qual é responsável pela sua anisotropia planar.

No mesmo ano, observou-se que substituindo o bário por estrôncio a temperatura T_C se aproximava de 40 K . Na figura 1.5 observa-se a estrutura cristalina do composto com estrôncio, o $La_{2-x}Sr_xCuO_2$.

Entre os planos de cobre e oxigênio estão as camadas atômicas contendo lantânio e bário (ou estrôncio) e oxigênio, as quais atuam como reservatório de cargas. O processo de transferência de cargas dos reservatórios para os planos de cobre e oxigê-

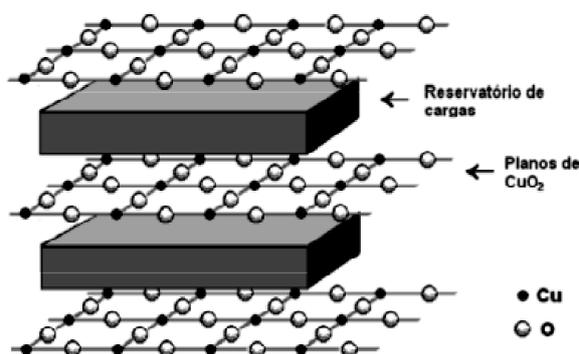


Figura 1.4: Planos de CuO_2 separados por reservatórios de carga. Fonte: (CALEGARI, 2006).

MATERIAL	T_C (K)
$La_{2-x}Sr_xCuO_4$	40
$YBa_2Cu_3O_{7-x}$	92
$BiSr_2CaCu_2O_{8-x}$	89
$BiSr_2Ca_2Cu_2O_{10-x}$	110
$Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10-x}$	125
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_x$	133

Tabela 1.1: Exemplos de cupratos supercondutores e suas respectivas temperaturas críticas. Fonte:(OSTERMANN; PUREUR, 2005).

nio ocorre por meio de um mecanismo de dopagem, em que os átomos dos reservatórios são substituídos por outros átomos em um estado diferente de ionização e assim, elétrons são retirados ou doados aos planos de cobre e oxigênio (LOBO, 2012). A quantidade de átomos trocada entre esses planos e o reservatório de carga é indicada por x .

Em poucos anos foram descobertos vários outros cupratos supercondutores, com temperaturas críticas ainda mais elevadas. Na tabela 1.1 são apresentados alguns desses cupratos e suas respectivas temperaturas críticas.

Além do T_C alto, os supercondutores cupratos apresentam características bastante diferente dos supercondutores convencionais (SILVA, 2009). Dentre as propriedades mais interessantes e complexas dos cupratos dopados com buracos (elétrons removidos dos planos de CuO_2), está o *pseudogap*. O *pseudogap* é um *gap* que aparece no estado normal. A região que contém o *pseudogap* é indicada no diagrama de fases da temperatura versus a densidade de buracos nos planos CuO_2 , mostrado na figura 1.6. Pode-se distinguir duas regiões de dopagem no diagrama. Na região classificada como superdopada, ocorre uma fase metálica normal. Na região denominada subdopada, observa-se a fase anômala, na qual aparece o *pseudogap*.

Vários experimentos evidenciam a existência do *pseudogap*, como por exemplo,

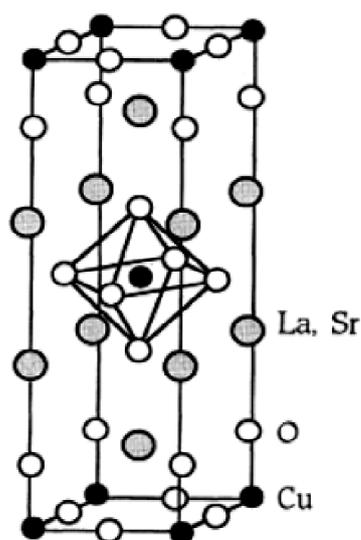


Figura 1.5: Estrutura cristalina do composto $La_{2-x}Sr_xCuO_2$. Fonte: (DAGOTTO, 1994)

os de ressonância magnética nuclear (NRM), espalhamento de nêutrons e NQR (Nuclear Quadrupole Resonance) (RENNER et al., 1998). A técnica de ARPES (Angle-resolved Photoemission Spectroscopy), também tem sido uma fonte significativa de resultados experimentais envolvendo a estrutura eletrônica nos planos de cobre e oxigênio dos cupratos (DAMASCELLI; HUSSAIN; SHEN, 2003). Essa técnica permite observar o *gap* supercondutor, por meio de fotoemissão, através do espectro de energia obtido, conforme observa-se na figura 1.7.

A curva mais escura mostra o espectro de energia para o cuprato $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$, conhecido como *Bi2212*, na região de baixa dopagem obtido no estado supercondutor a

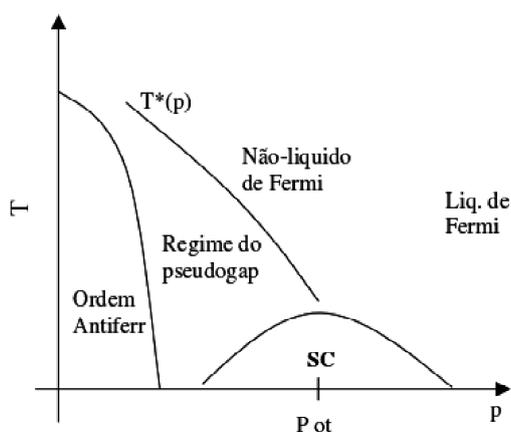


Figura 1.6: Diagrama de fase genérico da temperatura pela dopagem de cupratos supercondutores dopados por buracos. Fonte: (PIUMBINI, 2013).

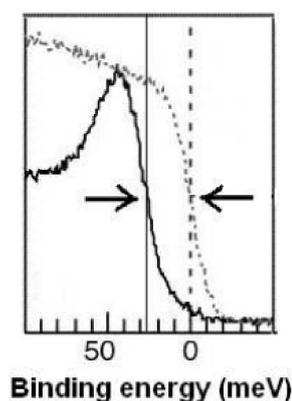


Figura 1.7: *Gap* supercondutor do composto *Bi2212*, medido usando a técnica de ARPES. Fonte:(NORMAN, 1998).

uma temperatura de 14 K . A linha pontilhada é o espectro de energia de um material de referência usado para determinar o potencial químico. O *gap* supercondutor está indicado pelas setas e é definido no ponto onde o espectro de referência passa pela energia de Fermi, ou seja, no potencial químico(CALEGARI, 2006). Na figura 1.8 pode-se observar a evolução do espectro de energia do composto *Bi2212* em função da temperatura. Os painéis (a),(b) e (c) correspondem respectivamente às direções a,b e c indicadas na su-

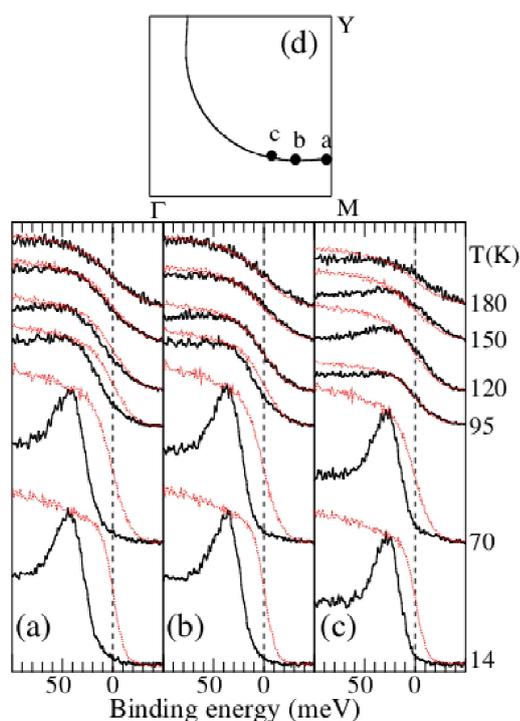


Figura 1.8: Espectros de energia mostrando o *gap* supercondutor e o *pseudogap* para o composto *Bi2212* no regime de baixas dopagens. Fonte:(NORMAN, 1998).

perfície de Fermi no painel (d). A temperatura crítica para os resultados apresentado é $T_C=85$ K. Nota-se a presença de um *gap* parcial mesmo acima de T_C , ou seja, um *gap* no estado normal (*pseudogap*).

Na figura 1.9, observa-se que abaixo de T_C (painel a esquerda), não há superfície de Fermi, apenas um ponto indicando o estado supercondutor. Acima de T_C , no painel do meio, o ponto se expande criando um fragmento da superfície de Fermi em forma de arco. Entretanto, o que se esperava, é que acima de T_C (estado normal) fosse observada uma superfície de Fermi fechada devido ao desaparecimento do *gap* supercondutor. Porém, a mesma só é observada quando o *pseudogap* fecha, o que ocorre em $T > T^*$ (painel da direita) (NORMAN, 1998). Existem diferentes teorias propostas para explicar a

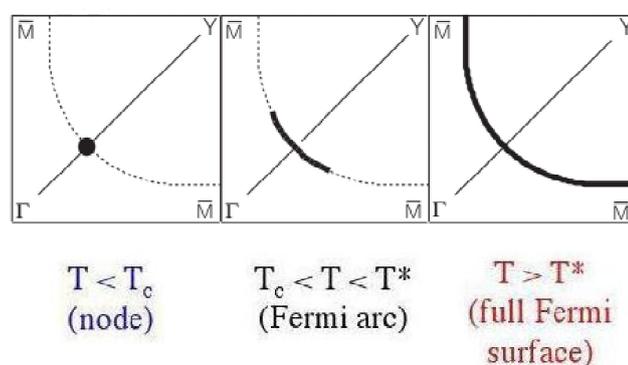


Figura 1.9: Esquema ilustrativo da evolução da superfície de Fermi em função da temperatura. Fonte:(NORMAN, 1998).

origem do *pseudogap*. Pode-se citar como exemplo a teoria que sugere que o *pseudogap* origina-se de uma pré-formação de pares ((EMERY; KIVELSON, 1995) e (KANIGEL et al., 2008)) no estado normal. Outra teoria propõe que o *pseudogap* se origina de um quebra de simetria ((CHAKRAVARTY et al., 2001) e (VARMA, 2006)). Existe também vários trabalhos ((HARRISON; MCDONALD; SINGLETON, 2007),(KAMPFAND; SCHRIEFFER, 1990) e (MORINARI, 2009)) sugerindo que correlações antiferromagnéticas de curto alcance pode ser o mecanismo responsável pelo *pseudogap*. Nesse trabalho, será adotado este último cenário onde as as correlações antiferromagnéticas de curto alcance produzem flutuações antiferromagnéticas que dão origem ao *pseudogap*.

2 MÉTODO

As funções de Green representam um método muito útil e adequado no estudo de sistemas de partículas interagentes. Constituem-se, portanto, em uma ferramenta de grande valia para a física da matéria condensada. Nesse capítulo a técnica será apresentada no formalismo de Zubarev (ZUBAREV, 1960) e aplicada no modelo de Hubbard (HUBBARD, 1963) em conjunto com a aproximação de n -pólos proposta por Laura Roth (ROTH, 1969).

2.1 Técnica das Funções de Green

Nesse trabalho as funções de Green são calculadas tomando-se a média sobre o ensemble grande canônico, dessa forma elas não dependem apenas do tempo, mas também da temperatura. É conveniente a escolha do ensemble grande canônico, pois permite variar o número de partículas do sistema. Nessa seção serão discutidas as funções de Green avançada e retardada.

2.1.1 Funções de Green avançada e retardada

As funções de Green retarda $G_r(t, t')$ e avançada $G_a(t, t')$ são definidas como

$$G_r(t, t') = \ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_r = -i\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle \quad (2.1)$$

e

$$G_a(t, t') = \ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg_a = i\theta(t' - t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle, \quad (2.2)$$

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

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t > 0 \\ 0 & \text{se } t < 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

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 $\hbar = 1$):

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t} \quad (2.4)$$

e

$$\hat{B}(t') = e^{i\hat{H}t'} \hat{A} e^{-i\hat{H}t'}. \quad (2.5)$$

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

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad (2.6)$$

onde μ é o potencial químico, \hat{N} é o operador número de partículas e \hat{H} é um operador hamiltoniano independente do tempo. Por fim, $[\hat{A}, \hat{B}]$ indica um comutador ou anticomutador:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \eta\hat{B}\hat{A} \quad (2.7)$$

com $\eta = \pm 1$. O sinal de η depende se \hat{A} e \hat{B} são operadores que obedecem a estatística de Fermi-Dirac ($\eta = -1$) ou de Bose-Einstein ($\eta = +1$). Ao reescrever as equações 2.1 e 2.2 em conjunto com a equação 2.7 obtém-se as funções de Green na seguinte forma:

$$G_r(t, t') = -i\theta(t - t') \{ \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle \} \quad (2.8)$$

e

$$G_a(t, t') = i\theta(t' - t) \{ \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle \}. \quad (2.9)$$

As equações 2.8 e 2.9 não são definidas se $t = t'$, devido a uma descontinuidade na função degrau (equação 2.3) que não é definida para $t = t'$. Por outro lado, quando $t \neq t'$ tem-se dois casos:

$$G_r(t, t') = 0 \quad \text{se } t < t' \quad (2.10)$$

$$G_a(t, t') = 0 \quad \text{se } t > t'. \quad (2.11)$$

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:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr}\{\hat{O}e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\}}{Z} \quad (2.12)$$

sendo $Z = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\}$ a função de partição para o ensemble grande canônico e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, sendo T a temperatura e k_B a constante de Boltzmann. Da mesma forma, $\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle$ é definida como:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t'} \hat{B} e^{-i\hat{H}t'}\} \quad (2.13)$$

na qual pode-se trocar ciclicamente os operadores dentro da operação traço:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} e^{i\hat{H}(t-t')} \hat{A} e^{-i\hat{H}(t-t')} \hat{B}\} \quad (2.14)$$

e obtém-se:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-\beta t} \hat{A}(t-t') \hat{B}\} \quad (2.15)$$

o que permite escrever as funções Green como

$$\ll \hat{A}(t)\hat{B}(t') \gg = \ll \hat{A}(t-t'); \hat{B}(0) \gg \quad (2.16)$$

ou ainda

$$G_r(t, t') = G_r(t-t') \quad (2.17)$$

$$G_a(t, t') = G_a(t-t') \quad (2.18)$$

mostrando que as funções de Green dependem de t e t' apenas através da diferença $(t-t')$. O resultado 2.16 nos permite fazer a transformada de Fourier em $G(t-t')$ e obter $G(\omega)$.

2.1.2 Equações de Movimento

Definidas as funções retarda e avançada, o próximo passo é o calculo de suas respectivas equações de movimento.

Os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t)$ satisfazem a equação de movimento:

$$i \frac{d}{dt} \hat{A} = \hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A} \quad (2.19)$$

na representação de Heisenberg, com $\hbar = 1$. Derivando em relação ao tempo t as funções de Green, definidas nas equações 2.1 e 2.2, obtém-se a equação de movimento:

$$i \frac{d}{dt} G_{r,a} = i \frac{d}{dt} \ll \hat{A}(t), \hat{B}(t') \gg = \frac{d}{dt} \theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll i \frac{d}{dt} \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg \quad (2.20)$$

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

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(\tau) d\tau \quad (2.21)$$

em que $\tau = t - t'$ e

$$\delta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ix\tau} dx \quad (2.22)$$

pode-se reescrever a equação 2.20 como:

$$i \frac{d}{dt} G_{r,a} = \delta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll i \frac{d}{dt} \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg . \quad (2.23)$$

Considerando a equação de movimento dada pela equação 2.19 é possível reescrever a

equação 2.23 na seguinte forma:

$$i \frac{d}{dt} G_{r,a} = \delta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle + \ll \{ \hat{A}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t) \}; \hat{B}(t') \gg . \quad (2.24)$$

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 quatro operadores, ou seja, de uma função de Green de ordem superior. Se a nova função de Green for diferenciada para obter sua respectiva equação de movimento, surgirá uma nova função de Green, de ordem maior ainda. Se esse processo for repetido infinitas vezes, será gerado um conjunto infinito equações acopladas. Portanto, é necessário tratar essas equações de movimento para reduzir um conjunto infinito de equações de movimento para um número finito de equações. Embora existam diversos métodos que podem ser usados para tratar esse conjunto de equações, como por exemplo Hartree-Fock e Hubbard I (HUBBARD, 1963), todos envolvem algum tipo de aproximação. Nesse trabalho, a aproximação de n -pólos, proposta por Laura Roth (ROTH, 1969), será utilizada para obter as equações de movimento para as funções de Green. Esse método será discutido na seção 2.3.

2.1.3 Funções de correlação

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

$$F_{BA}(t, t') = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle \quad (2.25)$$

ou

$$F_{AB}(t, t') = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle \quad (2.26)$$

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:

$$F_{BA}(t - t') = F_{BA}(0) = \langle \hat{B}(t) \hat{A}(t) \rangle = \langle \hat{B}(0) \hat{A}(0) \rangle \quad (2.27)$$

e

$$F_{AB}(t - t') = F_{AB}(0) = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t) \rangle = \langle \hat{A}(0) \hat{B}(0) \rangle. \quad (2.28)$$

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.

2.1.4 Representação Espectral

A representação espectral para as funções de correlação é dada por

$$F_{BA}(\tau) = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(\tau)} d\omega \quad (2.29)$$

e

$$F_{AB}(\tau) = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\omega\beta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (2.30)$$

onde

$$J(\omega) = Z^{-1} \int_{\nu,\mu} (C_{\nu}^* \hat{A}(0) C_{\mu}) (C_{\mu}^* \hat{B}(0) C_{\nu}) e^{-E_{\mu}\beta} \delta(E_{\mu} - E_{\nu} - \omega) \quad (2.31)$$

é a intensidade espectral. C_{ν} e E_{ν} são, respectivamente, as autofunções e autovalores do hamiltoniano \hat{H} . A representação espectral é uma ferramenta matemática importante para a análise de propriedades analíticas das funções de correlação. Pode-se obter a representação espectral para as funções de Green através das funções de correlação.

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

$$G_r(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E) e^{-iE\tau} dE \quad (2.32)$$

e

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau) e^{-iE\tau} d\tau. \quad (2.33)$$

Substituindo-se a equação 2.33 na equação 2.8 chega-se a

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE(\tau)} \theta(\tau) \{ \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle - \eta \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle \}. \quad (2.34)$$

Pode-se reescrever a equação 2.34 usando a representação espectral das funções de correlação $F_{BA}(\tau)$ e $F_{AB}(\tau)$:

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\omega\beta} - \eta) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau) \quad (2.35)$$

onde a função degrau $\theta(\tau)$ pode ser escrita como

$$\theta(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\varepsilon\tau} \delta(\tau) d\tau \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (\varepsilon > 0) \quad (2.36)$$

ou ainda, usando a forma integral para a função delta (equação 2.22), obtém-se

$$\theta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\varepsilon} dx. \quad (2.37)$$

Deve-se considerar que x é uma variável complexa e que a integral definida na equação 2.37 é executada sobre o contorno mostrado na figura 2.1. O integrando tem um pólo no semi-plano inferior onde $x = -i\varepsilon$. Quando $\tau > 0$ o contorno deve ser fechado pelo semi-

plano inferior, encerrando a singularidade em $-i\varepsilon$, nesse caso a integral da equação 2.37 é igual a um. Já quando $\tau < 0$, o contorno deve ser fechado pelo semi-plano superior, resultando em $\theta(\tau) = 0$.

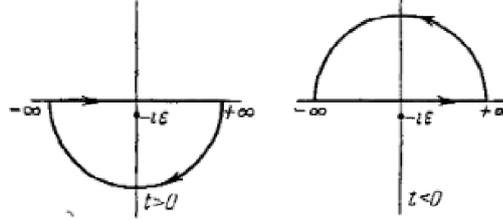


FIG. 1

Figura 2.1: A figura acima mostra os pólos no eixo imaginário e os contornos de integração por $t - t' > 0$ e $t - t' < 0$. Fonte: (ZUBAREV, 1960).

Usando as equações 2.22 e 2.37 chega-se a:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon} \quad (2.38)$$

e então, as componentes de Fourier das funções de Green retardada e avançada são, respectivamente,

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\varepsilon} \quad (2.39)$$

e

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon}. \quad (2.40)$$

As equações 2.39 e 2.40 podem ser reescritas na seguinte forma:

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\varepsilon} \quad (2.41)$$

onde o índice r corresponde ao sinal $+$ e o índice a ao sinal $-$. Agora, assumindo E como uma variável complexa obtém-se:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} = \begin{cases} G_r(E) & \text{Im} E > 0 \\ G_a(E) & \text{Im} E < 0. \end{cases} \quad (2.42)$$

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 . A descontinuidade da função de variável complexa E , $G(E)$, fornece a intensidade espectral $J(\omega)$ através da relação

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = -i(e^{\omega\beta} - \eta)J(\omega), \quad (2.43)$$

sendo ω uma variável real. Voltando a equação 2.42 pode-se reescrever 2.43 na seguinte forma:

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E\beta} - \eta) J(E) \left\{ \frac{1}{\omega - E + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - E - i\varepsilon} \right\} dE. \quad (2.44)$$

Usando a representação

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right\} \quad (2.45)$$

para função δ , chega-se a expressão 2.43. Finalmente, as funções de correlação podem ser escritas em termos das componentes de Fourier das funções de Green como:

$$F_{BA}(\tau) = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\omega\beta} - \eta} e^{-i\omega\tau} d\omega. \quad (2.46)$$

Agora, usando a seguinte identidade

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{E - \omega} \mp i\pi\delta(E - \omega), \quad (2.47)$$

onde $\varepsilon \rightarrow 0$, $\varepsilon > 0$, e P denota o valor principal da integral e considerando-se que $E - \omega$ é uma quantidade real, as funções de Green podem ser expressas na forma

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} - \frac{i}{2} (e^{E\beta} - \eta) J(E) \quad (2.48)$$

e

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega\beta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} + \frac{i}{2} (e^{E\beta} - \eta) J(E), \quad (2.49)$$

da qual segue uma conexão entre as partes real e imaginária das funções de Green:

$$ReG_r(E) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ImG_r(\omega)}{\omega - E} d\omega \quad (2.50)$$

e

$$ReG_a(E) = -\frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ImG_a(\omega)}{\omega - E} d\omega \quad (2.51)$$

onde $J(\omega)$ é uma quantidade real.

2.2 Modelo de Hubbard

2.2.1 Descrição do modelo

O modelo de Hubbard de uma banda é um dos modelos mais simples e adequados para descrever sistemas de elétrons fortemente correlacionados. Esse modelo foi introduzido simultaneamente por Hubbard (HUBBARD, 1963), Gutzwiller e Kanamori em 1963

(ROTH, 1969), na tentativa de compreender o magnetismo de metais de transições. O hamiltoniano do modelo de Hubbard de uma banda é dado por:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i, \sigma}^{\dagger} c_{j, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i, \sigma} n_{i, \sigma} n_{i, -\sigma}. \quad (2.52)$$

Esse modelo expressa dois comportamentos contrários: o primeiro termo representa os elétrons itinerantes e é responsável pelo comportamento metálico; o segundo termo está relacionado com a interação Coulombiana local e sua predominância leva ao comportamento isolante (isolante de Mott) (FAZEKAS, 1999).

O símbolo $\langle \dots \rangle$ representa uma soma sobre os primeiros vizinhos do sítio i . A quantidade t_{ij} está relacionada a energia cinética dos elétrons, e U é potencial repulsivo Coulombiano. O operador de criação $\hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger}$ cria um elétron no sítio i com spin σ , enquanto o operador $\hat{c}_{j, \sigma}$ destrói um elétron no sítio j com spin σ . $\hat{n}_{i, \sigma} = \hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i, \sigma}$ é denominado operador número de partículas e sua função é contar o número de partículas com spin $\sigma = \uparrow \downarrow$ em um dado sítio i . Por serem operadores fermiônicos (que obedecem a estatística de Fermi-Dirac) satisfazem as seguintes relações de anticomutação:

$$\{\hat{c}_{i, \sigma}, \hat{c}_{j, \sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma \sigma'} \quad (2.53)$$

$$\{\hat{c}_{i, \sigma}, \hat{c}_{j, \sigma'}\} = 0. \quad (2.54)$$

Um sítio particular da rede pode encontrar-se vazio, individualmente ocupado ou duplamente ocupado. Devido a forte repulsão Coulombiana U , a dupla ocupação é energeticamente desfavorável, portanto pode ser suprimida (VOLLHARDT, 2012). A figura 2.2 mostra uma ilustração esquemática de um sistema descrito pelo modelo de Hubbard.

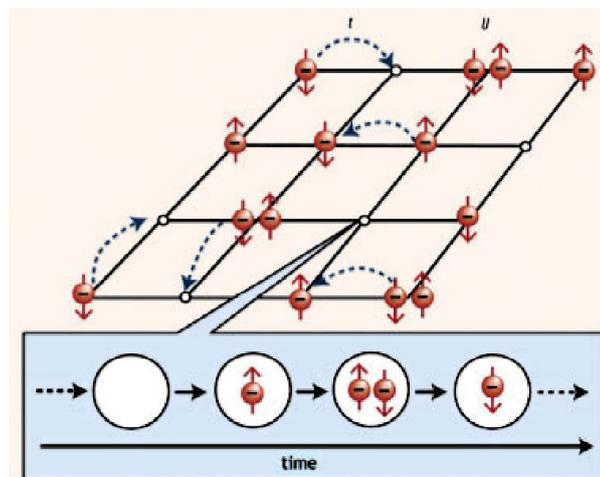


Figura 2.2: Ilustração esquemática de um sistema descrito pelo modelo de Hubbard. Fonte: Site www.ann-phys.org em 15/07/2014.

Para o caso de uma rede quadrada, a relação de dispersão é:

$$\epsilon_{\vec{k}} = 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (2.55)$$

onde t é a amplitude do salto para primeiros vizinhos.

2.2.2 Casos limites

No estudo do modelo de Hubbard de uma banda, a competição entre a itinerância t e a repulsão coulombiana U são tópicos fundamentais. A discussão sobre esses dois comportamentos opostos pode ser levada ao limite de banda e ao limite atômico do modelo.

Limite de banda $U=0$

Para o caso em que $U = 0$ e $t \neq 0$, não há interação entre os elétrons da banda. Serão consideradas duas situações.

Situação 1: o sistema possui uma densidade eletrônica média de dois elétrons por sítio ($n = 2$), que é a ocupação máxima permitida pelo princípio de exclusão de Pauli, nesse caso a banda estará totalmente preenchida e não existem estados acessíveis acima do nível de Fermi. O sistema será um isolante.

Situação 2: o sistema possui uma densidade eletrônica média por sítio $0 < n < 2$. Nessa situação, a banda estará parcialmente preenchida e haverá estados acessíveis acima do nível de Fermi. O sistema será um metal.

Dentro desse limite, é possível calcular, analiticamente, a energia dos elétrons em função do vetor de onda \vec{k} . Considerando o caso de um rede quadrada, a energia $\epsilon_{\vec{k}}$ será dada pela equação 2.55 em que \vec{k} é um vetor na primeira zona de Brillouin e a é um parâmetro de rede (VALENTIM, 2010).

Limite atômico $t=0$

Para o caso em que $t = 0$ e $U \neq 0$, o sistema se reduz a um conjunto de sítios independentes que pode ser descrito pelo hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{at} = \sum_j \hat{H}_j$. O espectro de energia de um único sítio do sistema é descrito pelo hamiltoniano de Hubbard:

$$\hat{H}_j = \epsilon_{at} \sum_{\sigma} \hat{n}_{j,\sigma} + U \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow}. \quad (2.56)$$

O primeiro elétron que entra no sítio j tem um energia ϵ_{at} . Se um segundo elétron é adicionado, o sítio passa a ter uma energia total de $2\epsilon_{at} + U$, o que significa que o segundo elétron foi colocado no nível de energia $\epsilon_{at} + U$. Esse esquema, representado na figura 2.3

(a esquerda), é fundamentalmente diferente do espectro de energia do elétron livre. Para o caso do elétron livre, o primeiro elétron pode ser posto em qualquer nível de energia desejado. Para o caso considerado, como pode ser observado na figura 2.3 (a direita), o elétron só pode ocupar o nível de energia $\epsilon_{at} + U$ se o nível ϵ_{at} já estiver preenchido.

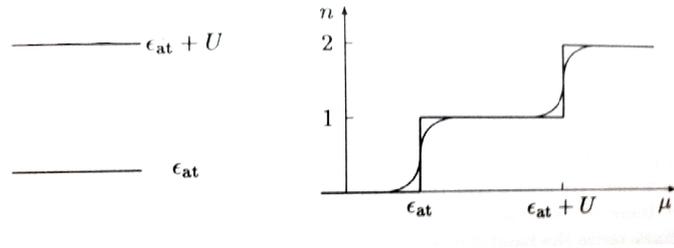


Figura 2.3: À esquerda, esquema dos níveis de energia e à direita, densidade eletrônica n em função do potencial químico μ , de um sistema descrito pelo modelo de Hubbard para $t=0$ e U finito. Fonte: (FAZEKAS, 1999)

Nesse limite, quando a densidade eletrônica média por sítio é $n = 1$, o sistema é um isolante de Mott (FAZEKAS, 1999). Nesse trabalho, será estudado o caso em que $t \neq 0$ e $U \neq 0$, portanto pode haver uma competição entre o termo cinético e o termo de interação.

2.3 Aproximação de n -pólos

Nessa seção será discutida a aproximação de n -pólos, proposta por Laura Roth, com o fim de aperfeiçoar o procedimento de desacoplamento Hubbard-I. A aproximação de n -pólos é adequada para tratar sistemas de elétrons fortemente correlacionados (ROTH, 1969). O problema das fortes correlações entre elétrons em bandas estreitas é considerado através do modelo de Hubbard de uma banda descrito anteriormente, na representação da segunda quantização, pelo seguinte hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i, \sigma} \hat{n}_{i, -\sigma}. \quad (2.57)$$

A equação de movimento do operador $\hat{c}_{i, \sigma}$, presente no hamiltoniano de Hubbard, é:

$$i \frac{d}{dt} \hat{c}_{i, \sigma} = [\hat{c}_{i, \sigma}, \hat{H}]_{(-)} = U \hat{n}_{i, -\sigma} \hat{c}_{i, \sigma} + \sum_j t_{ij} \hat{c}_{j, \sigma}. \quad (2.58)$$

Nessa equação notamos a presença de um novo operador, $\hat{n}_{i, -\sigma} \hat{c}_{i, \sigma}$ que é dado pelo

produto de dois operadores, cuja equação de movimento é:

$$i \frac{d}{dt} \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} = [\hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{H}]_{(-)} = U \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \sum_j t_{ij} (\hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} - \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}). \quad (2.59)$$

Novamente, observa-se a presença de um novo operador, sendo esse um produto de três operadores. Se a equação de movimento para esse novo operador fosse calculada, surgiria outro novo operador, de ordem maior que os anteriores. Seguindo esse processo infinitas vezes, teria-se um conjunto infinito de equação acopladas. Dessa forma, faz-se necessário usar algum método para tratar essas equações de movimento. Em seu tratamento, Hubbard aproxima o último termo da equação 2.59, considerando que $\hat{n}_{i,-\sigma}$ pode ser substituído por seu valor médio $\langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle$ e que dos três termos entre parênteses, os dois últimos se cancelam, o que resulta em

$$[\hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{H}] \cong U \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \sum_j t_{ij} \hat{c}_{j,\sigma} \quad (2.60)$$

que permite resolver o sistema de equações formado pelas funções de Green acopladas. Hubbard assume também invariância translacional $\langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle = \hat{n}_\sigma$, ou seja, a ocupação média independe do sítio.

No procedimento proposto por Roth, usa-se um conjunto finito de operadores $\{\hat{A}_n\}$, que deve representar as excitações mais importantes do sistema, para linearizar a equação de movimento

$$[\hat{A}_n, \hat{H}] = \sum_m \mathbf{K}_{nm} \hat{A}_m. \quad (2.61)$$

A matriz \mathbf{K} pode ser obtida anticomutando os dois lados da equação 2.61 com \hat{A}_p^\dagger , sendo \hat{A}_p um elemento de $\{\hat{A}_n\}$. Então, toma-se a média termodinâmica, em ambos os lados da equação, o que leva a

$$\langle \langle [\hat{A}_n, \hat{H}], \hat{A}_p^\dagger \rangle \rangle_+ = \sum_m \mathbf{K}_{nm} \langle \langle \hat{A}_m, \hat{A}_p^\dagger \rangle \rangle_+ \quad (2.62)$$

ou, se as matrizes energia e normalização forem definidas como

$$E_{nm} = \langle \langle [\hat{A}_n, \hat{H}], \hat{A}_m^\dagger \rangle \rangle \quad (2.63)$$

e

$$N_{nm} = \langle \langle \hat{A}_n, \hat{A}_m^\dagger \rangle \rangle_+ \quad (2.64)$$

tem-se, em notação matricial

$$\mathbf{E} = \mathbf{K}\mathbf{N}, \quad (2.65)$$

ou ainda

$$\mathbf{K} = \mathbf{E}\mathbf{N}^{-1}. \quad (2.66)$$

Uma vez que é possível calcular E_{nm} e N_{nm} e que N_{nm} é uma matriz não singular, isto é, que tem inversa, pode-se determinar K_{nm} . No entanto, é preciso lembrar que os autovalores de \mathbf{K} correspondem as singularidades das funções de Green, logo é essencial que eles sejam reais, ou seja, \mathbf{K} deve ser uma matriz hermitiana. A ordem de \mathbf{K} , assim como de \mathbf{E} e \mathbf{N} , é igual ao número de elementos do conjunto de operadores $\{\hat{A}_n\}$.

Para calcular as funções de Green, usa-se a equação de movimento das funções de Green, escrita na seguinte forma:

$$\omega \ll \hat{A}(t); \hat{B}(t') \gg = \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_+ \rangle + \ll [\hat{A}(t), \hat{H}]; \hat{B}(t') \gg. \quad (2.67)$$

Substituindo a equação 2.62 na equação 2.67 obtém-se

$$\omega \ll \hat{A}_n; \hat{B} \gg = \langle [\hat{A}_n, \hat{B}]_+ \rangle + \sum_m \mathbf{K}_{nm} \ll \hat{A}_m; \hat{B} \gg \quad (2.68)$$

ou ainda, usando as equações 2.62, 2.63 e 2.64

$$\ll \hat{A}_n; \hat{B} \gg = \sum_m g_{nm} \langle [\hat{A}_n, \hat{B}]_+ \rangle, \quad (2.69)$$

com

$$\mathbf{g} = \mathbf{N}(\omega \mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1}. \quad (2.70)$$

Considerando o caso em que $\hat{B} = \hat{A}_m^\dagger$, sendo \hat{A}_m um membro do conjunto $\{\hat{A}_n\}$, pode-se definir uma matriz de funções de Green \mathbf{G} tal que

$$\ll \hat{A}_n; \hat{A}_m^\dagger \gg = G_{nm}, \quad (2.71)$$

o que nos leva a

$$\mathbf{G} = \mathbf{N}(\omega \mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1} \mathbf{N}. \quad (2.72)$$

Assim os elementos da matriz de funções de Green \mathbf{G} dependem apenas da matriz energia \mathbf{E} e da matriz normalização \mathbf{N} .

No espaço recíproco os elementos da matriz das funções de Green podem ser escritas na seguinte forma:

$$G_{\vec{k},\sigma}(\omega) = \sum_{i=1}^2 \frac{Z_{i,\vec{k},\sigma}}{\omega - \omega_{i,\vec{k},\sigma}} \quad (2.73)$$

onde $Z_{i,\vec{k},\sigma}$ são os pesos espectrais e $\omega_{i,\vec{k},\sigma}$ são as relações de dispersão das quasipartículas que correspondem aos pólos das funções de Green. No caso geral, para o estado normal do modelo de Hubbard, tratando as equações de movimento com a aproximação de n -pólos, $G_{\vec{k},\sigma}$ possui dois pólos dados por:

$$\omega_{1,\sigma,\vec{k}} = \frac{U + \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma}}{2} - \frac{X_{\vec{k},\sigma}}{2}, \quad (2.74)$$

e

$$\omega_{2,\sigma,\vec{k}} = \frac{U + \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma}}{2} + \frac{X_{\vec{k},\sigma}}{2}, \quad (2.75)$$

expressas em termos da quantidade $X_{\vec{k},\sigma} = \sqrt{(U - \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma})^2 + 4\langle n_{-\sigma} \rangle (\varepsilon_{\vec{k}} - W_{\vec{k},-\sigma})}$, da interação Coulombiana U , da banda não interagente $\varepsilon_{\vec{k}}$ e de uma quantidade denominada deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$. O deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$ desempenha um papel importante, pois além de deslocar a banda não-interagente para energias diferentes, pode também estreitá-las ou alargá-las.

Conforme o procedimento original de Roth (ROTH, 1969) introduz-se o deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$ como:

$$\begin{aligned} \langle n_{\sigma} \rangle (1 - \langle n_{\sigma} \rangle) W_{\vec{k},\sigma} = & - \sum_{j \neq i} t_{ij} (n_{j,\sigma} - 2m_{j,\sigma}) - \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} t_{ij} \left\{ \frac{\alpha_{j,\sigma} n_{j,\sigma} + \beta_{j,\sigma} m_{j,\sigma}}{1 - \beta_{\sigma} \beta_{-\sigma}} + \right. \\ & \left. \frac{\alpha_{j,\sigma} n_{j,-\sigma} + \beta_{j,\sigma} m_{j,-\sigma}}{1 + \beta_{\sigma}} + \frac{\alpha_{j,\sigma} n_{j,-\sigma} + \beta_{j,\sigma} (n_{j,-\sigma} - m_{j,-\sigma})}{1 - \beta_{\sigma}} \right\} \end{aligned} \quad (2.76)$$

em que

$$\alpha_{j,\sigma} = \frac{n_{j,\sigma} - m_{j,\sigma}}{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle} \quad (2.77)$$

e

$$\beta_{j,\sigma} = \frac{m_{j,\sigma} / n_{-\sigma} - n_{j,\sigma}}{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}, \quad (2.78)$$

com

$$n_{j,\sigma} = \langle \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi L} \sum_{\vec{k}} \oint f(\omega) G_{\vec{k}\sigma}^{11} d\omega \quad (2.79)$$

e

$$m_{j,\sigma} = \langle \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{n}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi L} \sum_{\vec{k}} \oint f(\omega) G_{\vec{k}\sigma}^{12} d\omega \quad (2.80)$$

em que foi usada a notação (BEENEN; EDWARDS, 1995)

$$\langle \hat{A}\hat{B} \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint f(\omega) \ll \hat{B}; \hat{A} \gg \quad (2.81)$$

para relacionar a função de correlação com a função de Green, onde

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (2.82)$$

é a função de Fermi. $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ e $G_{\vec{k},\sigma}^{12}$ são elementos da matriz das funções de Green G .

O cálculo da matriz das funções de Green G será abordado novamente no capítulo 3, tanto para o estado normal como para o estado supercondutor.

3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

As funções de Green representam uma técnica muito adequada na análise de sistemas fortemente correlacionados. Através da técnica das funções de Green pode-se analisar propriedades termodinâmicas, como energia por partícula do sistema (KISHORE; JOSHI, 1971), calor específico e potencial químico, ou ainda, analisar a evolução de importantes quantidades físicas, como por exemplo, densidades de estados e estruturas de bandas renormalizadas (NAZARENO, 1986). Nesse capítulo, são calculadas as funções de Green para o estado normal e supercondutor de um sistema de elétrons fortemente correlacionados, descrito pelo modelo de Hubbard de uma banda discutido no capítulo 2. As funções de Green são apresentadas através de valores médios termodinâmicos no ensemble grande canônico. Na sessão 3.1 são calculadas as funções de Green para o estado normal do modelo de Hubbard de uma banda e na sessão 3.2, calcula-se as funções de Green para o estado supercondutor.

3.1 Estado Normal

O modelo de Hubbard de uma banda estudado nesse trabalho, como já foi discutido na seção 2.2 do capítulo 2, é descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i, \sigma} \hat{n}_{i, -\sigma} - \mu \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i, \sigma}. \quad (3.1)$$

Nota-se que há um terceiro termo nesse hamiltoniano, relacionado ao potencial químico μ , o qual não está presente na versão do modelo introduzido na equação 2.52. Os dois primeiros termos do modelo já foram descritos na seção 2.2 do capítulo 2. A adição desse terceiro termo deve-se ao fato de que as funções Green são calculadas considerando o ensemble grande canônico.

Para descrever o estado normal do sistema (estado no qual o parâmetro de ordem supercondutor é nulo) foi escolhido o conjunto de operadores $\{\hat{A}_n\} = \{\hat{c}_{i, \sigma}, \hat{c}_{i, \sigma} \hat{n}_{i, -\sigma}\}$. Esse conjunto de operadores deve representar as excitações mais importantes do sistema.

Depois da escolha de $\{\hat{A}_n\}$, o próximo passo para se obter a matriz das funções de Green, é calcular as equações de movimento do conjunto operadores $\{\hat{A}_n\}$. Tem-se então:

$$[\hat{c}_{i, \sigma}, \hat{\mathcal{H}}] = \sum_j t_{ij} \hat{c}_{j, \sigma} + U \hat{c}_{i, \sigma} \hat{n}_{i, -\sigma} - \mu \hat{c}_{i, \sigma} \quad (3.2)$$

$$[\hat{c}_{i,\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma}, \hat{\mathcal{H}}] = \sum_j t_{ij}\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,-\sigma} - \sum_j t_{ij}\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,-\sigma} + \sum_j t_{ij}\hat{c}_{j,\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma} + (U - \mu)\hat{c}_{i,\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma}. \quad (3.3)$$

Com as equações de movimento acima, pode-se obter os elementos da matriz energia \mathbf{E} definida na equação 2.63:

$$E_{11} = t_{ij} + U\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle\delta_{ij} - \mu\delta_{ij} \quad (3.4)$$

$$E_{12} = t_{ij}\langle\hat{n}_{j,-\sigma}\rangle + U\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle\delta_{ij} - \mu\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle\delta_{ij} \quad (3.5)$$

$$E_{21} = t_{ij}\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle + U\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle\delta_{ij} - \mu\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle\delta_{ij} \quad (3.6)$$

e

$$E_{22} = (U - \mu)\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle\delta_{ij} + t_{ij}\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle^2 + \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle(1 - \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle)W_{ij,-\sigma} \quad (3.7)$$

com

$$\begin{aligned} \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle(1 - \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle)W_{ij,-\sigma} = & -t_{ij}\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle^2 + t_{ij}\sum_l \langle\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{l,-\sigma}\hat{n}_{i,\sigma}\rangle\delta_{ij} + t_{ij}\sum_l \langle\hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,-\sigma}\hat{n}_{j,\sigma}\rangle\delta_{ij} + (3.8) \\ & + t_{ij}\sum_l \langle\hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,-\sigma}\rangle\delta_{ij} + t_{ij}\langle\hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,-\sigma}\rangle - t_{ij}\langle\hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}\rangle + t_{ij}\langle\hat{n}_{j,-\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle. \end{aligned}$$

Na condição de invariância translacional de um sistema paramagnético, considera-se que:

$$\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle = \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle. \quad (3.9)$$

A transformada de Fourier dos elementos $E_{nm}^{(ij)}$ é dada por

$$E_{nm}^{(\vec{k})} = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} E_{nm}^{(ij)}, \quad (3.10)$$

em que L representa o número de sítios do sistema. Até aqui havia sido omitida a dependência dos elementos da matriz energia \mathbf{E} em i e j , apenas para simplificar a notação.

A matriz energia \mathbf{E} , no espaço recíproco, para o estado normal é dada por:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{\vec{k}} + U\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle - \mu & (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle \\ (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle & (U - \mu)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle + \varepsilon_{\vec{k}}\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle^2 + \bar{n}_{-\sigma}W_{\vec{k},-\sigma} \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

com

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij}, \quad (3.12)$$

$$\bar{n}_{-\sigma} = \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle(1 - \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle) \quad (3.13)$$

e

$$\bar{n}_{-\sigma} W_{\vec{k}, -\sigma} = - \sum_{j \neq i} t_{ij} \langle \hat{c}_{i, -\sigma}^\dagger \hat{c}_{j, -\sigma} (1 - \hat{n}_{i, \sigma} - \hat{n}_{j, \sigma}) \rangle + \frac{1}{L} \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} t_{ij} \quad (3.14)$$

$$(\langle \hat{n}_{j, -\sigma} \hat{n}_{i, -\sigma} \rangle - \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2 + \langle \hat{c}_{j, -\sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{i, \sigma} \rangle - \langle \hat{c}_{j, -\sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} \hat{c}_{i, \sigma} \hat{c}_{i, -\sigma} \rangle).$$

Para uma rede quadrada, a relação de dispersão $\varepsilon_{\vec{k}}$ pode também ser escrita na forma:

$$\varepsilon_{\vec{k}} = 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a) \quad (3.15)$$

em que a é o parâmetro da rede.

Para se obter explicitamente a matriz de funções de Green é necessário ainda, calcular a matriz normalização \mathbf{N} , definida na equação 2.64. Considerando o modelo introduzido na equação 3.1 e o conjunto de operadores $\{\hat{A}_n\}$ obtém-se:

$$N_{11} = \delta_{ij} \quad (3.16)$$

e

$$N_{12} = N_{21} = N_{22} = \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \delta_{ij}. \quad (3.17)$$

Seguindo o mesmo procedimento usado para obter a matriz energia \mathbf{E} , faz-se a transformada de Fourier dos elementos N_{nm} e chega-se a seguinte matriz normalização \mathbf{N} :

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \\ \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

Calculadas as matrizes energia \mathbf{E} e normalização \mathbf{N} , é possível obter a matriz de funções de Green dada pela equação 2.72.

Considerando que

$$\mathbf{D} = \omega \mathbf{N} - \mathbf{E}, \quad (3.19)$$

a relação 2.72 pode ser reescrita como

$$\mathbf{G} = \mathbf{N} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{N}. \quad (3.20)$$

Calcula-se então a matriz \mathbf{D} :

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

com

$$D_{11} = \omega - \varepsilon_{\vec{k}} - U \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + \mu \quad (3.22)$$

$$D_{12} = \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \quad (3.23)$$

$$D_{21} = \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \quad (3.24)$$

e

$$D_{22} = \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - (U - \mu) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - \varepsilon_{\vec{k}} \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2 - \bar{n}_{-\sigma} W_{\vec{k}, -\sigma}. \quad (3.25)$$

Na equação 3.20 nota-se que é necessário calcular a inversa da matriz \mathbf{D} para obter a matriz \mathbf{G} .

Sabendo que:

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{\text{Cof}(\mathbf{A})^T}{|\mathbf{A}|}, \quad (3.26)$$

em que \mathbf{A}^{-1} é a matriz inversa de uma matriz \mathbf{A} qualquer, $\text{Cof}(A)^T$ é a matriz transposta da matriz dos cofatores de \mathbf{A} e $|\mathbf{A}|$ é o determinante de \mathbf{A} . Dessa forma, obtém-se

$$\mathbf{D}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{D}|} \begin{bmatrix} D_{22} & -D_{12} \\ -D_{21} & D_{11} \end{bmatrix}, \quad (3.27)$$

onde

$$|\mathbf{D}| = D_{11}D_{22} - D_{12}D_{21}. \quad (3.28)$$

Finalmente, a matriz de funções de Green do estado normal pode ser escrita como:

$$\mathbf{G} = \frac{1}{|\mathbf{D}|} \begin{bmatrix} 1 & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \\ \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{22} & -D_{12} \\ -D_{21} & D_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \\ \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

ou ainda, deixando explícita a dependência em relação ao vetor de onda \vec{k} e ao spin σ , tem-se:

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} G_{\vec{k}, \sigma}^{11} & G_{\vec{k}, \sigma}^{12} \\ G_{\vec{k}, \sigma}^{21} & G_{\vec{k}, \sigma}^{22} \end{bmatrix}, \quad (3.30)$$

em que

$$G_{\vec{k}, \sigma}^{11} = \frac{D_{22} - (D_{21} + D_{12}) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + D_{11} \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2}{|\mathbf{D}|}, \quad (3.31)$$

$$G_{\vec{k}, \sigma}^{12} = \frac{(D_{22} - D_{12}) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + (D_{11} - D_{21}) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2}{|\mathbf{D}|}, \quad (3.32)$$

$$G_{\vec{k}, \sigma}^{21} = \frac{(D_{22} - D_{21}) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + (D_{11} - D_{12}) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2}{|\mathbf{D}|} \quad (3.33)$$

e

$$G_{\vec{k},\sigma}^{22} = \frac{(D_{22} - D_{21} + D_{11} - D_{12})\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle^2}{|\mathbf{D}|}. \quad (3.34)$$

Mais adiante, a função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ será usada para obter o potencial químico e a função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{12}$ será usada no cálculo do deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$.

3.1.1 Bandas Renormalizadas

Os elementos da matriz de funções de Green possuem o denominador em comum, dado pela equação 3.28. Combinando as equações 3.22-3.25, $|\mathbf{D}|$ pode ser reescrito como:

$$|\mathbf{D}| = a\omega^2 + b\omega + c \quad (3.35)$$

com

$$a = \bar{n}_{-\sigma}, \quad (3.36)$$

$$b = (\mu - U)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle - \varepsilon_{\vec{k}}\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle^2 - \bar{n}_{-\sigma}W_{\vec{k},-\sigma} - (\varepsilon_{\vec{k}} + U\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle - \mu)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle - 2(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle^2 \quad (3.37)$$

e

$$c = (\varepsilon_{\vec{k}} + U\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle - \mu)((U - \mu)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle + \varepsilon_{\vec{k}}\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle^2 + \bar{n}_{-\sigma}, W_{\vec{k},-\sigma}) - 2(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U)\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle. \quad (3.38)$$

Como esse polinômio é de 2º grau, pode também ser expresso na seguinte forma:

$$|\mathbf{D}| = (\omega - \omega_{1,\vec{k},\sigma})(\omega - \omega_{2,\vec{k},\sigma}) \quad (3.39)$$

onde $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ e $\omega_{2,\vec{k},\sigma}$ são os pólos das funções de Green e satisfazem a condição $|\mathbf{D}| = 0$, ou seja, são as raízes do polinômio de 2º grau dado na equação 3.101. Portanto, calculando essas raízes obtém-se as bandas renormalizadas.

Usando a fórmula de Báscara,

$$\omega_{1,2,\vec{k},\sigma} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (3.40)$$

obtém-se as raízes:

$$\omega_{1,\vec{k},\sigma} = \frac{U + \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma} - 2\mu}{2} - \frac{X_{\vec{k},\sigma}}{2} \quad (3.41)$$

e

$$\omega_{2,\vec{k},\sigma} = \frac{U + \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma} - 2\mu}{2} + \frac{X_{\vec{k},\sigma}}{2}, \quad (3.42)$$

com $X_{\vec{k},\sigma} = \sqrt{(U - \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma})^2 + 4\langle n_{-\sigma} \rangle U(\varepsilon_{\vec{k}} - W_{\vec{k},-\sigma})}$.

Nesse ponto já é possível obter resultados numéricos para as bandas renormalizadas no meio preenchimento ($\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = 1$). Para obter resultados numéricos fora do meio preenchimento, é necessário ainda obter a expressão analítica que relaciona a ocupação $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle$ ao potencial químico.

3.1.2 Potencial químico

A função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ é um dos elementos mais importantes da matriz de funções de Green G porque está relacionada à função de correlação número de ocupação $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle$, e portanto, pode ser usada para calcular o potencial químico μ para uma determinada ocupação.

Partindo da equação 3.31 e substituindo os elementos da matriz D em $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ obtém-se:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{g_a \omega + g_b}{(\omega - \omega_{1,\vec{k},\sigma})(\omega - \omega_{2,\vec{k},\sigma})} \quad (3.43)$$

onde

$$g_a = \bar{n}_{-\sigma} \quad (3.44)$$

e

$$g_b = -\varepsilon_{\vec{k}} \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2 - (U - \mu) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - \bar{n}_{-\sigma} W_{\vec{k},-\sigma} + 2(\varepsilon_{\vec{k}} + U - \mu) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2 - (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle) \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2. \quad (3.45)$$

Com o intuito de usar a identidade introduzida pela equação 2.47 no capítulo 2, decompõe-se a função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ em frações parciais. Assim, obtém-se

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{Z_{1,\vec{k},\sigma}}{\omega - \omega_{1,\vec{k},\sigma}} + \frac{Z_{2,\vec{k},\sigma}}{\omega - \omega_{2,\vec{k},\sigma}}, \quad (3.46)$$

em que os pesos espectrais são dados por

$$Z_{1,\vec{k},\sigma} = \frac{1}{2} + \frac{U(1 - 2\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle) - \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma}}{2X_{\vec{k}}} \quad (3.47)$$

e

$$Z_{2,\vec{k},\sigma} = 1 - Z_{1,\vec{k},\sigma}. \quad (3.48)$$

O número de ocupação é calculado usando a relação 2.81:

$$\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi i L} \sum_{\vec{k}} \oint f(\omega) G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) d\omega. \quad (3.49)$$

A equação acima depende do potencial químico μ através das bandas renormalizadas

$\omega_{i,\vec{k},\sigma}$.

3.1.3 Deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$

Uma das propriedades mais interessantes e complexas dos supercondutores de altas temperaturas dopados com buracos, é a presença de um *gap* no estado normal, denominado *pseudogap* e que ocorre na região chamada de *underdoped*.

O *pseudogap* foi observado pela primeira vez em experimentos de ressonância magnética nuclear (NMR) (SILVA, 2009). Outros experimentos também confirmaram a presença de um *gap* no estado normal, como por exemplo, experimentos utilizando ARPES (Angle Resolved Photon Emission), espalhamento de nêutrons e NQR (Nuclear Quadrupole Resonance), (RENNER et al., 1998).

A existência do *pseudogap* ainda não foi satisfatoriamente explicada pela física da matéria condensada. Do ponto de vista teórico existe a proposição de que a presença de correlações antiferromagnéticas de curto alcance pode ser o mecanismo responsável pela presença do *pseudogap* (CALEGARI; MAGALHAES, 2011).

Sabe-se que a função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$, presente no deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$, pode estar associada a correlações antiferromagnéticas (BEENEN; EDWARDS, 1995). O procedimento de Roth para o cálculo do deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$ descarta a dependência da função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ no vetor de onda \vec{k} , o que faz com que a função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ seja constante na primeira zona de Brillouin. Contudo, a estrutura de $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ no espaço dos \vec{k} 's é fundamental para o surgimento do *pseudogap*, como mostram alguns estudos (CALEGARI; MAGALHAES, 2011).

Como nesse trabalho tem-se o interesse de investigar o *pseudogap*, o procedimento de Roth foi aprimorado, de forma a incluir adequadamente a dependência em \vec{k} no cálculo do deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$ e conseqüentemente na função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$.

O deslocamento de banda introduzido pela equação 3.14 pode ser reescrito na seguinte forma (BEENEN; EDWARDS, 1995):

$$\begin{aligned} \bar{n}_\sigma W_{\vec{k},\sigma} = & - \sum_{j \neq i} t_{ij} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} (1 - \hat{n}_{i,-\sigma} - \hat{n}_{j,-\sigma}) \rangle + \frac{1}{4} \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} (\langle \hat{N}_j \hat{N}_i \rangle \\ & - \langle \hat{N}_j \rangle \langle \hat{N}_i \rangle) + \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle - \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde, como pode-se notar, a função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ aparece explicitamente.

Através das seguintes definições

$$\lambda = - \sum_{j \neq i} t_{ij} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} (1 - \hat{n}_{i,-\sigma} - \hat{n}_{j,-\sigma}) \rangle, \quad (3.51)$$

$$\lambda_{ij,\sigma}^{(1)} = \frac{1}{4} \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} (\langle \hat{N}_j \hat{N}_i \rangle - \langle \hat{N}_j \rangle \langle \hat{N}_i \rangle) \quad (3.52)$$

$$\lambda_{ij,\sigma}^{(2)} = \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \langle \hat{S}_j \cdot \hat{S}_i \rangle \quad (3.53)$$

e

$$\lambda_{ij,\sigma}^{(3)} = - \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle \quad (3.54)$$

a equação 3.51 pode ser reescrita como:

$$\bar{n}_\sigma W_{\vec{k},\sigma} = \lambda + \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \{ \lambda_{ij,\sigma}^{(1)} + \lambda_{ij,\sigma}^{(2)} + \lambda_{ij,\sigma}^{(3)} \}. \quad (3.55)$$

Sendo a transformada inversa de Fourier de $\lambda_{ij,\sigma}$ dada por

$$\lambda_{ij,\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \lambda_{\vec{q},\sigma} \quad (3.56)$$

a equação 3.55 pode ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} \bar{n}_\sigma W_{\vec{k},\sigma} &= \lambda + \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \left\{ \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(1)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(2)} + \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(3)} \right\}, \end{aligned} \quad (3.57)$$

ou também como

$$\bar{n}_\sigma W_{\vec{k},\sigma} = \lambda + \sum_{j \neq i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \{ \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(1)} + \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(2)} + \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(3)} \}. \quad (3.58)$$

Pode-se reescrever a equação acima como:

$$\bar{n}_\sigma W_{\vec{k},\sigma} = \lambda + \sum_{\vec{q}} \frac{1}{L} \sum_{j \neq i} e^{i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \{ \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(1)} + \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(2)} + \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(3)} \}. \quad (3.59)$$

Assim é possível identificar a relação de dispersão

$$\varepsilon(\vec{k} - \vec{q}) = \frac{1}{L} \sum_{j \neq i} e^{i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} t_{ij} \quad (3.60)$$

e

$$F_{\vec{q},\sigma} = \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(1)} + \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(2)} + \lambda_{\vec{q},\sigma}^{(3)}. \quad (3.61)$$

Por fim, o deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$ pode ser escrito como:

$$\bar{n}_\sigma W_{\vec{k},\sigma} = \lambda + \sum_{\vec{q}} \varepsilon(\vec{k} - \vec{q}) F_{\vec{q},\sigma} \quad (3.62)$$

em que \vec{q} e \vec{k} são vetores de onda da primeira zona de Brillouin.

Os resultados para as bandas renormalizadas, cujo o deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$ é calculado dessa forma, são apresentados mais adiante, no capítulo 4.

3.2 Estado Supercondutor

O estudo do estado supercondutor exige que o conjunto de operadores $\{\hat{A}_n\}$, introduzido na seção anterior para o estado normal, seja acrescido com mais dois operadores tornando-se:

$$\{A_n\} = \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{i,\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma}, \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger, \hat{n}_{i,\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\} \quad (3.63)$$

em que $\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger$ e $\hat{n}_{i,\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger$ são operadores adicionados ao conjunto $\{\hat{A}_n\}$ com o intuito de gerar funções de correlação anômalas relacionadas com as propriedades supercondutoras do sistema (BEENEN; EDWARDS, 1995).

As equações de movimento para os operadores $\hat{c}_{i,\sigma}$ e $\hat{c}_{i,\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma}$ já foram calculadas na seção anterior. Para os novos operadores as equações de movimento são:

$$[\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger, \hat{H}] = - \sum_j t_{ij} \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger - U \hat{n}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger + \mu \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \quad (3.64)$$

e

$$\begin{aligned} [\hat{n}_{i,\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger, \hat{H}] &= (\mu - U) \hat{n}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger - \sum_j t_{ij} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \\ &\quad - \sum_j t_{ij} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \sum_j t_{ij} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.65)$$

A equação 2.71 é usada novamente, para obter os elementos da matriz energia \mathbf{E}_{SC} :

$$E_{11} = t_{ij} + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{ij} - \mu \delta_{ij}, \quad (3.66)$$

$$E_{12} = t_{ij} \langle \hat{n}_{j,-\sigma} \rangle + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{ij} - \mu \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{ij}, \quad (3.67)$$

$$E_{13} = U \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle \delta_{ij}, \quad (3.68)$$

$$E_{14} = (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle, \quad (3.69)$$

$$E_{21} = t_{ij} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle + U \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{ij} - \mu \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{ij}, \quad (3.70)$$

$$E_{22} = (U - \mu) \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \delta_{ij} + t_{ij} \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle^2 + \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle (1 - \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle) W_{ij,-\sigma} \quad (3.71)$$

$$E_{23} = \sum_l t_{ij} \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} + \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle \delta_{ij} + (U - t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle, \quad (3.72)$$

$$E_{24} = t_{il} \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \hat{c}_{l,-\sigma} + \hat{n}_{l,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma} \rangle + \sum_l t_{il} \langle \hat{n}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} - \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle \delta_{ij}, \quad (3.73)$$

$$E_{31} = -U \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \rangle \delta_{ij}, \quad (3.74)$$

$$E_{32} = (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \rangle, \quad (3.75)$$

$$E_{33} = -E_{11}, \quad (3.76)$$

$$E_{34} = -E_{12}, \quad (3.77)$$

$$E_{41} = - \sum_l t_{ij} \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger + \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \rangle \delta_{ij} + (U \delta_{ij} - t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \rangle, \quad (3.78)$$

$$E_{42} = E_{24}^* \quad (3.79)$$

$$E_{43} = -E_{21} \quad (3.80)$$

e

$$E_{44} = -E_{22}. \quad (3.81)$$

Nesse trabalho será estudada supercondutividade onde o parâmetro de ordem tem simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ (BEENEN; EDWARDS, 1995). Devido à simetria $d_{x^2-y^2}$ o parâmetro de ordem supercondutor se anula sempre $|x| = |y|$. Dessa forma a função de correlação local do tipo $\langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \rangle$ é nula. A soma sobre l das funções de correlação $\langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle$ e $\langle \hat{n}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle$, em que l são os primeiros vizinhos do sítio i , resulta em zero, também devido a simetria do parâmetro de ordem. Levando-se em conta tais considerações os elementos da matriz energia são reescritos e então, após fazer a transformada de Fourier, obtém-se a matriz energia para o estado supercondutor:

$$\mathbf{E}_{SC} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & 0 & 0 \\ E_{21} & E_{22} & 0 & \gamma_{\vec{k}} \\ 0 & 0 & -E_{11} & -E_{12} \\ 0 & \gamma_{\vec{k}}^* & -E_{21} & -E_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.82)$$

em que

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{L} \sum_{il} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_i)} t_{il} \gamma_{il} \quad (3.83)$$

é a função *gap* que determina o estado supercondutor com

$$\gamma_{il} = \{ \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle + \langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma} \rangle \}. \quad (3.84)$$

O próximo passo, para obter a matriz das funções de Green no estado supercondutor, é calcular os elementos da matriz normalização para o novo conjunto de operadores. Usando a equação 2.63 e considerando novamente a invariância translacional, tem-se:

$$N_{11} = \delta_{ij}, \quad (3.85)$$

$$N_{12} = N_{21} = N_{22} = N_{33} = N_{34} = N_{43} = N_{44} = \langle n_{-\sigma} \rangle \delta_{ij}, \quad (3.86)$$

e

$$N_{13} = N_{14} = N_{23} = N_{24} = N_{31} = N_{32} = N_{41} = N_{42} = 0, \quad (3.87)$$

Logo, a matriz normalização, para o estado supercondutor, é dada por:

$$\mathbf{N}_{SC} = \begin{bmatrix} 1 & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle & 0 & 0 \\ \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \\ 0 & 0 & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle & \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle \end{bmatrix}. \quad (3.88)$$

Agora pode-se obter a matriz de funções de Green, a qual é dada pela equação 3.20:

$$\mathbf{G}_{SC}(\omega) = \mathbf{N}_{SC} \mathbf{D}_{SC}^{-1} \mathbf{N}_{SC} \quad (3.89)$$

em que

$$\mathbf{D}_{SC} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{D}_2 \\ \mathbf{D}_3 & \mathbf{D}_4 \end{bmatrix}. \quad (3.90)$$

cuja inversa é:

$$\mathbf{D}_{SC}^{-1} = \frac{1}{\mathbf{D}_1 \mathbf{D}_4 - \mathbf{D}_2 \mathbf{D}_3} \begin{bmatrix} \mathbf{D}_4 & -\mathbf{D}_2 \\ -\mathbf{D}_3 & \mathbf{D}_1 \end{bmatrix} \quad (3.91)$$

onde as matrizes \mathbf{D}_i são:

$$\mathbf{D}_1 = (\mathbf{d}_1 - \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_4^{-1} \mathbf{d}_3)^{-1}, \quad (3.92)$$

$$\mathbf{D}_2 = -\mathbf{d}_1^{-1} \mathbf{d}_2 (\mathbf{d}_4 - \mathbf{d}_3 \mathbf{d}_1^{-1} \mathbf{d}_2)^{-1}, \quad (3.93)$$

$$\mathbf{D}_3 = -\mathbf{d}_4^{-1} \mathbf{d}_3 (\mathbf{d}_1 - \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_4^{-1} \mathbf{d}_3)^{-1} \quad (3.94)$$

e

$$\mathbf{D}_4 = (\mathbf{d}_4 - \mathbf{d}_3 \mathbf{d}_1^{-1} \mathbf{d}_2)^{-1}, \quad (3.95)$$

com

$$\mathbf{d}_1 = \begin{bmatrix} \omega - E_{11} & \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - E_{12} \\ \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - E_{21} & \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle - E_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.96)$$

$$\mathbf{d}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_{\vec{k}} \end{bmatrix}, \quad (3.97)$$

$$\mathbf{d}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_{\vec{k}}^* \end{bmatrix} \quad (3.98)$$

e

$$\mathbf{d}_4 = \begin{bmatrix} \omega + E_{11} & \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + E_{12} \\ \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + E_{21} & \omega \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + E_{22} \end{bmatrix}. \quad (3.99)$$

A matriz de funções de Green pode então ser escrita como:

$$\mathbf{G}_{SC}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{D}_1 \mathbf{D}_4 - \mathbf{D}_2 \mathbf{D}_3} \begin{bmatrix} \mathbf{N} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{D}_4 & -\mathbf{D}_2 \\ -\mathbf{D}_3 & \mathbf{D}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{N} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N} \end{bmatrix} \quad (3.100)$$

onde \mathbf{N} é a matriz normalização do estado normal. Por fim, executando os produtos das matrizes da equação 3.100 obtém-se a seguinte matriz de funções de Green:

$$\mathbf{G}_{SC}(\omega) = \begin{bmatrix} G_{\vec{k},\sigma}^{11} & G_{\vec{k},\sigma}^{12} & G_{\vec{k},\sigma}^{13} & G_{\vec{k},\sigma}^{14} \\ G_{\vec{k},\sigma}^{21} & G_{\vec{k},\sigma}^{22} & G_{\vec{k},\sigma}^{23} & G_{\vec{k},\sigma}^{24} \\ G_{\vec{k},\sigma}^{31} & G_{\vec{k},\sigma}^{32} & G_{\vec{k},\sigma}^{33} & G_{\vec{k},\sigma}^{34} \\ G_{\vec{k},\sigma}^{41} & G_{\vec{k},\sigma}^{42} & G_{\vec{k},\sigma}^{43} & G_{\vec{k},\sigma}^{44} \end{bmatrix}. \quad (3.101)$$

A função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{13}$ é um dos elementos mais importantes da matriz \mathbf{G}_{SC} , uma vez que está relacionada função *gap* $\gamma_{\vec{k}}$. Outro elemento importante da matriz \mathbf{G}_{SC} é função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$, a qual é usada para obter a ocupação média $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle$ do sistema e também será usada para obter a energia por partícula.

3.2.1 Potencial químico no estado supercondutor

A função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ é a transformada de Fourier de $G_{ij,\sigma}^{11}$. Usando a notação da equação 2.81 é fácil ver que a função de Green $G_{ij,\sigma}^{11} = \ll \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \gg$ está diretamente

associada a ocupação média por spin $\langle \hat{n}_{i,\sigma} \rangle = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$, como mencionado na subseção 3.1.2. Portanto a função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ é usada para calcular o potencial químico e é dada por:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{g_{s1} - g_{s2}\gamma_{\vec{k}}^2}{|\mathbf{D}_{SC}|} \quad (3.102)$$

em que

$$g_{s1} = \bar{n}_\sigma^2 (\omega^3 + \omega^2 \alpha_1 + \omega \alpha_2 + \alpha_3) \quad (3.103)$$

e

$$g_{s2} = \omega - E_{11}, \quad (3.104)$$

com

$$\alpha_1 = \omega_{1,\vec{k},\sigma} + \omega_{2,\vec{k},\sigma} - (W_{\vec{k},-\sigma} + U(1 - \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle)), \quad (3.105)$$

$$\alpha_2 = \omega_{1,\vec{k},\sigma} \omega_{2,\vec{k},\sigma} - (\omega_{1,\vec{k},\sigma} + \omega_{2,\vec{k},\sigma})(W_{\vec{k},-\sigma} + U(1 - \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle)) \quad (3.106)$$

e

$$\alpha_3 = -\omega_{1,\vec{k},\sigma} \omega_{2,\vec{k},\sigma} (W_{\vec{k},-\sigma} + U(1 - \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle)). \quad (3.107)$$

sendo $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ e $\omega_{2,\vec{k},\sigma}$ as bandas renormalizadas do estado normal.

O determinante é dado por

$$|\mathbf{D}_{SC}| = A\omega^4 + B\omega^2 + C \quad (3.108)$$

em que

$$A = \bar{n}_\sigma^2, \quad (3.109)$$

$$B = 2\bar{n}_\sigma (E_{22}E_{11} - E_{12}^2) - (-E_{22} - (E_{11} - 2E_{12})\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle)^2 - \gamma_{\vec{k}}^2 \quad (3.110)$$

e

$$C = (E_{22}E_{11} - E_{12}^2)^2 + E_{11}^2 \gamma_{\vec{k}}^2. \quad (3.111)$$

Como se observa, o determinante $|\mathbf{D}_{SC}|$ é um polinômio de 4º grau. Logo, a função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ pode ser expressa como:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{g_{s1} - g_{s2}\gamma_{\vec{k}}^2}{(\omega - E_{1,\vec{k},\sigma})(\omega - E_{2,\vec{k},\sigma})(\omega - E_{3,\vec{k},\sigma})(\omega - E_{4,\vec{k},\sigma})} \quad (3.112)$$

onde E_i são as raízes que satisfazem a condição $|\mathbf{D}_{SC}| = 0$.

Reescrevendo o polinômio dado pela equação 3.108 como:

$$|\mathbf{D}_{SC}| = AX^2 + BX + C \quad (3.113)$$

com

$$X = \omega^2, \quad (3.114)$$

e usando a fórmula de Báscara, encontra-se as raízes $X_{1,2}$ (da equação 3.113). Através

da relação 3.114, obtém-se as raízes do polinômio de grau 4.

Por fim, as bandas renormalizadas são dadas por:

$$E_{1,\vec{k},\sigma} = \sqrt{\omega_{1,\vec{k},\sigma}^2 + \frac{|\gamma_{\vec{k}}|^2}{\bar{n}_{-\sigma}^2} \frac{E_{11}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2}{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2}}, \quad (3.115)$$

$$E_{2,\vec{k},\sigma} = -\sqrt{\omega_{1,\vec{k},\sigma}^2 + \frac{|\gamma_{\vec{k}}|^2}{\bar{n}_{-\sigma}^2} \frac{E_{11}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2}{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2}}, \quad (3.116)$$

$$E_{3,\vec{k},\sigma} = \sqrt{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 + \frac{|\gamma_{\vec{k}}|^2}{\bar{n}_{-\sigma}^2} \frac{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - E_{11}^2}{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2}}, \quad (3.117)$$

e

$$E_{4,\vec{k},\sigma} = -\sqrt{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 + \frac{|\gamma_{\vec{k}}|^2}{\bar{n}_{-\sigma}^2} \frac{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - E_{11}^2}{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2}}. \quad (3.118)$$

Usando frações parciais, $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ pode ser expressa por:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{Z_{1,\vec{k},\sigma}^{11}}{\omega - E_{1,\vec{k},\sigma}} + \frac{Z_{2,\vec{k},\sigma}^{11}}{\omega - E_{2,\vec{k},\sigma}} + \frac{Z_{3,\vec{k},\sigma}^{11}}{\omega - E_{3,\vec{k},\sigma}} + \frac{Z_{4,\vec{k},\sigma}^{11}}{\omega - E_{4,\vec{k},\sigma}} \quad (3.119)$$

em que os pesos espectrais são:

$$Z_{1,\vec{k},\sigma}^{11} = -\frac{c_1 + c_2\gamma_{\vec{k}}^2 - c_3E_{1,\vec{k},\sigma} + c_4\gamma_{\vec{k}}^2E_{1,\vec{k},\sigma} + c_5E_{1,\vec{k},\sigma}^2 - c_6E_{1,\vec{k},\sigma}^3}{E_{1,\vec{k},\sigma}^3 - E_{1,\vec{k},\sigma}E_{3,\vec{k},\sigma}^2}, \quad (3.120)$$

$$Z_{2,\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{c_1 + c_2\gamma_{\vec{k}}^2 - c_3E_{2,\vec{k},\sigma} + c_4\gamma_{\vec{k}}^2E_{2,\vec{k},\sigma} + c_5E_{2,\vec{k},\sigma}^2 - c_6E_{2,\vec{k},\sigma}^3}{E_{1,\vec{k},\sigma}^3 - E_{1,\vec{k},\sigma}E_{3,\vec{k},\sigma}^2}, \quad (3.121)$$

$$Z_{3,\vec{k},\sigma}^{11} = -\frac{c_1 + c_2\gamma_{\vec{k}}^2 - c_3E_{3,\vec{k},\sigma} + c_4\gamma_{\vec{k}}^2E_{3,\vec{k},\sigma} + c_5E_{3,\vec{k},\sigma}^2 - c_6E_{3,\vec{k},\sigma}^3}{E_{3,\vec{k},\sigma}^3 - E_{3,\vec{k},\sigma}E_{1,\vec{k},\sigma}^2}, \quad (3.122)$$

e

$$Z_{4,\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{c_1 + c_2\gamma_{\vec{k}}^2 - c_3E_{4,\vec{k},\sigma} + c_4\gamma_{\vec{k}}^2E_{4,\vec{k},\sigma} + c_5E_{4,\vec{k},\sigma}^2 - c_6E_{4,\vec{k},\sigma}^3}{E_{3,\vec{k},\sigma}^3 - E_{3,\vec{k},\sigma}E_{1,\vec{k},\sigma}^2}, \quad (3.123)$$

onde

$$c_1 = \frac{\omega_{1,\vec{k},\sigma}\omega_{2,\vec{k},\sigma}(\omega_{1,\vec{k},\sigma} + \omega_{2,\vec{k},\sigma} - E_{11})}{2}, \quad (3.124)$$

$$c_2 = \frac{E_{11}}{2\bar{n}_{-\sigma}^2}, \quad (3.125)$$

$$c_3 = \frac{\omega_{1,\vec{k},\sigma}\omega_{2,\vec{k},\sigma} + (\omega_{1,\vec{k},\sigma} + \omega_{2,\vec{k},\sigma})(E_{11} - (\omega_{1,\vec{k},\sigma} + \omega_{2,\vec{k},\sigma}))}{2}, \quad (3.126)$$

$$c_4 = \frac{1}{2\bar{n}_{-\sigma}^2}, \quad (3.127)$$

$$c_5 = -\frac{E_{11}}{2} \quad (3.128)$$

e

$$c_6 = \frac{1}{2}. \quad (3.129)$$

Por fim, o número de ocupação é calculado usando a relação introduzida pela equação 3.49, na qual o potencial químico μ é incluso através das bandas renormalizadas.

3.2.2 Função *gap* $\gamma_{\vec{k}}$

No estado supercondutor, uma das funções de Green mais importantes é $G_{\vec{k},\sigma}^{13}$. A partir dela obtém-se a função *gap* $\gamma_{\vec{k}}$ e o parâmetro de ordem γ . A função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{13}$ é dada por:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{13} = -\frac{\gamma_{\vec{k}}[\bar{n}_{-\sigma}U]^2}{|\mathbf{D}_{SC}|}. \quad (3.130)$$

Nesse trabalho, como já mencionado, considera-se o estado supercondutor com simetria de onda $d_{x^2-y^2}$. Para esse caso, a função de correlação que determina o *gap* não é local e é uma função composta de quatro operadores (equação 3.85), a qual pode ser escrita como:

$$\gamma_{il} = \langle (\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} + \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}) \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle. \quad (3.131)$$

Devido a simetria de onda $d_{x^2-y^2}$ tem-se:

$$\gamma_{il} = \begin{cases} \gamma & \text{para } \vec{R}_i - \vec{R}_l = (\pm a, 0) \\ -\gamma & \text{para } \vec{R}_i - \vec{R}_l = (0, \pm a). \end{cases} \quad (3.132)$$

em que a é o parâmetro da rede cristalina.

A função de correlação dada pela equação 3.131, não pode ser expressa diretamente através das funções de Green da matriz \mathbf{G}_{SC} . Uma maneira de resolver esse problema é usar o procedimento de fatorização proposto por Beenen e Edwards (BEENEN; EDWARDS, 1995). Embora esse procedimento superestime o valor do *gap* e não seja válido no limite em que $U \rightarrow \infty$, para valores intermediários de U ele pode fornecer informações importantes sobre a estrutura do *gap* e sua dependência em relação a dopagem, temperatura e interação Coulombiana. Assim, devido a simplicidade do método, e considerando os valores de U que serão usados nesse trabalho, opta-se por tratar a função de correlação, dada pela equação 3.131, com procedimento de fatorização sugerido por Beenen e Edwards (BEENEN; EDWARDS, 1995).

Dessa forma, pode-se aproximar a função de correlação dada pela equação 3.131 escrevendo:

$$\gamma_{il} = (\langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \rangle) \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle, \quad (3.133)$$

em que a simetria $\gamma_{il} = \gamma_{li}$ é conservada. Assim, as funções de correlação $\langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle$ e $\langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle$ são obtidas diretamente através das funções de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ e $G_{\vec{k},\sigma}^{13}$ da matriz \mathbf{G}_{SC} .

A equação 3.133 pode ser escrita como

$$\gamma_{il} = 2n_1 \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle \quad (3.134)$$

em que

$$n_1 = \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle = \langle \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \rangle. \quad (3.135)$$

A transformada de Fourier da função de correlação n_1 e da função de correlação $\langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle$ são dadas, respectivamente, por:

$$n_1 t = \frac{1}{zL} \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \quad (3.136)$$

com $n_{\vec{k}} = \langle \hat{c}_{\vec{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\sigma} \rangle$, e

$$\langle \hat{c}_{\vec{k},-\sigma} \hat{c}_{\vec{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle \quad (3.137)$$

em que L é o número de sítios da rede e z é o número de vizinhos próximos. Para uma rede quadrada $z = 4$.

A função de correlação $\langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma} \rangle$ está relacionada a função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{13}$ por meio da relação

$$\frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{\vec{k},-\sigma} \hat{c}_{\vec{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi i L} \sum_{\vec{k}} \oint f(\omega) G_{\vec{k},\sigma}^{13}(\omega) d\omega. \quad (3.138)$$

A função *gap* é dada por

$$\gamma_{\vec{k}} = \sum_{il} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_i)} t_{il} \gamma_{il}. \quad (3.139)$$

Reescrevendo a exponencial como

$$e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_i)} = \cos(\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_i)) - i \text{sen}(\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_i)) \quad (3.140)$$

e considerando as condições impostas pela simetria $d_{x^2-y^2}$ (ver equação 3.132) obtém-se

$$\gamma_{\vec{k}} = g(\cos(k_x a) - \cos(k_y a)), \quad (3.141)$$

na qual $g = 2t\gamma$ é a amplitude da função *gap*.

A equação final para o *gap* será

$$1 = -\frac{2n_1 t U^2}{L} \sum_{\vec{k}} (\cos(k_x a) - \cos(k_y a))^2 F(E_{1,\vec{k}\sigma}, E_{3,\vec{k}\sigma}) \quad (3.142)$$

onde

$$F(E_{1,\vec{k}\sigma}, E_{3,\vec{k}\sigma}) = \frac{1}{2(E_{3,\vec{k}\sigma}^2 - E_{1,\vec{k}\sigma}^2)} \left\{ \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta E_{1,\vec{k}\sigma})}{E_{1,\vec{k}\sigma}} - \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta E_{3,\vec{k}\sigma})}{E_{3,\vec{k}\sigma}} \right\}. \quad (3.143)$$

A solução da equação 3.142 determina se o sistema está no estado supercondutor. O sistema estará no estado supercondutor quando $\gamma \neq 0$ (BEENEN; EDWARDS, 1995).

3.3 Energia interna por partícula

O calor específico a volume constante C_V é uma quantidade termodinâmica de grande interesse experimental e teórico. Além de fornecer a temperatura de transição de fase, o C_V também pode fornecer informações sobre a simetria do estado supercondutor (PÉREZ et al., 2007). No entanto, na abordagem desse trabalho, para obter uma expressão analítica para o calor específico C_V , primeiro é necessário calcular a energia por partícula E do sistema, uma vez que

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right). \quad (3.144)$$

O cálculo da energia é feito seguindo o formalismo apresentado por Kishore e Joshi (KISHORE; JOSHI, 1971). Lembrando que o sistema é descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}. \quad (3.145)$$

e que a derivada em relação ao tempo t de um operador na representação de Heisenberg é dada por:

$$i \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}]_-. \quad (3.146)$$

Se

$$\hat{A}(t) = \hat{c}_{i,\sigma}(t) \quad (3.147)$$

então:

$$i \frac{d}{dt} \hat{c}_{i,\sigma}(t) = [\hat{c}_{i,\sigma}(t), \hat{\mathcal{H}}]_- \quad (3.148)$$

onde, seguindo-se as relações de comutação dadas por 2.53 e 2.54, obtém-se:

$$[\hat{c}_{i,\sigma}(t), \hat{\mathcal{H}}]_- = \sum_j (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \hat{c}_{j,\sigma} + U \hat{c}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}. \quad (3.149)$$

Multiplicado ambos os lados da equação acima por $\hat{B}(t' = 0) = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ e somando sobre σ e i , tem-se:

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) = \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}. \quad (3.150)$$

Sendo $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$, pode-se reescrever a equação 3.150 como:

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) = \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}. \quad (3.151)$$

Tomando a média termodinâmica em ambos os lados da igualdade obtém-se:

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) \rangle = \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + U \sum_{i,\sigma} \langle \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle. \quad (3.152)$$

Como o objetivo é calcular a energia média por partícula, a qual é dada por $E = \frac{\langle \hat{H} \rangle}{L}$, toma-se a média termodinâmica sobre \hat{H} :

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} \langle \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle \quad (3.153)$$

Isolando o termo relacionado a U :

$$U \sum_{i,\sigma} \langle \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle = 2 \langle \hat{H} \rangle - 2 \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \quad (3.154)$$

e substituindo 3.154 em 3.152, chega-se a:

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) \rangle = \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + 2 \langle \hat{H} \rangle - 2 \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \quad (3.155)$$

ou ainda

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) \rangle = 2 \langle \hat{H} \rangle - \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} + \mu \delta_{ij}) \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle. \quad (3.156)$$

Como visto no capítulo 2, uma função de correlação pode ser expressa como:

$$\langle \hat{B}(0) \hat{A}(t) \rangle = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_{ij,\sigma}^{nm}(\omega \pm i\varepsilon) e^{-i\omega t}}{e^{\beta\omega} + \eta} d\omega \quad (3.157)$$

em que $\Gamma_{ij,\sigma}^{nm}(\omega \pm i\varepsilon) = G_{ij,\sigma}^{nm}(\omega + i\varepsilon) - G_{ij,\sigma}^{nm}(\omega - i\varepsilon)$. Substituindo os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(0)$ pelos escolhidos na relação 3.157 tem-se:

$$\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) \rangle = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) e^{-i\omega t}}{e^{\beta\omega} + 1} d\omega \quad (3.158)$$

Multiplicando ambos os lados da equação 3.158 por i e derivando em relação a t obtém-se:

$$i \frac{d}{dt} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) \rangle = i^2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) \frac{d}{dt} (e^{-i\omega t}) d\omega. \quad (3.159)$$

Somando em σ e em i a equação torna-se:

$$i \frac{d}{dt} \sum_{i,\sigma} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}(t) \rangle = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) \omega e^{-i\omega t} d\omega. \quad (3.160)$$

Comparando a equação 3.156 e a equação 3.160 nota-se que:

$$i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) \omega e^{-i\omega t} d\omega = 2\langle \hat{H} \rangle - \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} + \mu\delta_{ij}) \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle. \quad (3.161)$$

Usando a relação 3.157, $\langle \hat{H} \rangle$ pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \frac{i}{2} \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} + \mu\delta_{ij}) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega + \\ &\quad \frac{i}{2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \end{aligned} \quad (3.162)$$

Considerando o caso em que $t \rightarrow 0$, tem-se

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{i}{2} \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} + \mu\delta_{ij}) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) d\omega + \frac{i}{2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \Gamma_{ij,\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) d\omega. \quad (3.163)$$

Por fim, faz-se a transformada espacial de Fourier e encontra-se a energia por partícula em termos da função de Green $G_{\vec{k}\sigma}^{11}$:

$$E = \frac{\langle H \rangle}{L} = \frac{i}{2L} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\vec{k},\sigma} (\varepsilon_{\vec{k}} + \mu + \omega) \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) f(\omega) d\omega. \quad (3.164)$$

em que $\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega \pm i\varepsilon) = G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega + i\varepsilon) - G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega - i\varepsilon)$.

Tendo a energia por partícula E , é possível calcular o calor específico.

3.4 Calor específico

O calor específico é definido como:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right) \quad (3.165)$$

em que E é a energia interna por partícula.

Usando a identidade dada pela equação 2.47 pode-se reescrever a equação 3.164 na forma

$$E = \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\vec{k},\sigma} \sum_{i=1}^4 Z_{i,\vec{k},\sigma}^{11} (\varepsilon_{\vec{k}} + \mu + \omega) f(\omega) \delta(\omega - E_{i,\vec{k},\sigma}) d\omega. \quad (3.166)$$

Agora, utilizando a propriedade da função delta

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0) \quad (3.167)$$

executa-se a integral em ω e a equação da energia torna-se:

$$E = \frac{1}{2L} \sum_{\vec{k},\sigma} \sum_{i=1}^4 Z_{i,\vec{k},\sigma}^{11} (\varepsilon_{\vec{k}} + \mu + E_{i,\vec{k},\sigma}) f(E_{i,\vec{k},\sigma}). \quad (3.168)$$

Logo, o calor específico pode ser escrito como:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{2L} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \sum_{\vec{k},\sigma} \sum_{i=1}^4 Z_{i,\vec{k},\sigma}^{11} (\varepsilon_{\vec{k}} + \mu + E_{i,\vec{k},\sigma}) f(E_{i,\vec{k},\sigma}) \right\}. \quad (3.169)$$

Definindo:

$$\bar{Z}_{i,\vec{k},\sigma} = Z_{i,\vec{k},\sigma}^{11} (\varepsilon_{\vec{k}} + \mu + E_{i,\vec{k},\sigma}) \quad (3.170)$$

então, o C_V pode ser reescrito como:

$$C_V = \frac{1}{2L} \sum_{\vec{k},\sigma} \sum_{i=1}^4 \left\{ \frac{\partial \bar{Z}_{i,\vec{k},\sigma}}{\partial T} f(E_{i,\vec{k},\sigma}) + \bar{Z}_{i,\vec{k},\sigma} \frac{\partial f(E_{i,\vec{k},\sigma})}{\partial T} \right\}. \quad (3.171)$$

Derivando a função de Fermi em relação a temperatura T obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial T} f(E_{i,\vec{k},\sigma}) = \frac{e^{\beta E_{i,\vec{k},\sigma}}}{(k_B T)^2 (e^{\beta E_{i,\vec{k},\sigma}} + 1)^2} [k_B E_{i,\vec{k},\sigma} - k_B T \frac{\partial E_{i,\vec{k},\sigma}}{\partial T}]. \quad (3.172)$$

As bandas renormalizadas $E_{i,\vec{k},\sigma}$ dependem do parâmetro de ordem superconductor, logo dependem da temperatura. Dessa forma, é necessário derivar as bandas renormalizadas $E_{i,\vec{k},\sigma}$ em relação a temperatura T , para obter explicitamente a derivada da função de Fermi. Antes de derivar $E_{i,\vec{k},\sigma}$, define-se:

$$e_a = \frac{E_{11}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2}{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2} \frac{1}{\bar{n}_{-\sigma}^2} \quad (3.173)$$

e

$$e_b = \frac{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - E_{11}^2}{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{1,\vec{k},\sigma}^2} \frac{1}{\bar{n}_{-\sigma}^2} \quad (3.174)$$

assim, as bandas podem ser reescritas da seguinte forma:

$$E_{1,\vec{k},\sigma} = \sqrt{\omega_{1,\vec{k},\sigma}^2 + |\gamma_{\vec{k}}|^2 e_a} \quad (3.175)$$

$$E_{2,\vec{k},\sigma} = -E_{1,\vec{k},\sigma} \quad (3.176)$$

$$E_{3,\vec{k},\sigma} = \sqrt{\omega_{2,\vec{k},\sigma}^2 + |\gamma_{\vec{k}}|^2 e_b} \quad (3.177)$$

e

$$E_{4,\vec{k},\sigma} = -E_{3,\vec{k},\sigma} \quad (3.178)$$

em que considera-se que e_a e e_b não dependem da temperatura, uma vez que a variação

do potencial químico com a temperatura é muito pequena. Assim, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial T} E_{1,\vec{k},\sigma} = \frac{e_a}{2E_{1,\vec{k},\sigma}} \frac{\partial |\gamma_{\vec{k}}|^2}{\partial T}, \quad (3.179)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} E_{2,\vec{k},\sigma} = -\frac{\partial}{\partial T} E_{1,\vec{k},\sigma}, \quad (3.180)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} E_{3,\vec{k},\sigma} = \frac{e_b}{2E_{2,\vec{k},\sigma}} \frac{\partial |\gamma_{\vec{k}}|^2}{\partial T} \quad (3.181)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial T} E_{4,\vec{k},\sigma} = -\frac{\partial}{\partial T} E_{3,\vec{k},\sigma}. \quad (3.182)$$

A derivada de $|\gamma_{\vec{k}}|^2$ é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial T} |\gamma_{\vec{k}}|^2 = 8t^2 [\cos(q_x a) - \cos(q_y a)]^2 \gamma \frac{\partial}{\partial T} \gamma. \quad (3.183)$$

Nesse trabalho, a derivada $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$ é calculada numericamente. O próximo passo para obter a expressão analítica de C_V , é calcular $\frac{\partial}{\partial T} \bar{Z}_{i,\vec{k},\sigma}$:

$$\frac{\partial}{\partial T} \bar{Z}_{i,\vec{k},\sigma} = Z_{i,\vec{k},\sigma} \frac{\partial E_{i,\vec{k},\sigma}}{\partial T} + (E_{i,\vec{k},\sigma} + \mu + \varepsilon_{\vec{k}}) \frac{\partial Z_{i,\vec{k},\sigma}}{\partial T}. \quad (3.184)$$

Como $\frac{\partial}{\partial T} E_{i,\vec{k},\sigma}$ já foi calculada, segue a derivada dos pesos espectrais apresentados na subseção 3.2.1:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} Z_{1,\vec{k},\sigma} &= -[c_1 + c_2 \frac{\partial}{\partial T} \gamma_{\vec{k}}^2 - c_3 \frac{\partial}{\partial T} E_{1,\vec{k},\sigma} + c_4 \frac{\partial}{\partial T} (\gamma_{\vec{k}}^2 E_{1,\vec{k},\sigma}) + c_5 \frac{\partial}{\partial T} E_{1,\vec{k},\sigma}^2] \\ &\quad - c_6 \frac{\partial}{\partial T} E_{1,\vec{k},\sigma}^3 \left[\frac{\partial}{\partial T} E_{1,\vec{k},\sigma}^3 - \frac{\partial}{\partial T} (E_{1,\vec{k},\sigma} E_{3,\vec{k},\sigma}^2) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.185)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} Z_{2,\vec{k},\sigma} &= [c_1 + c_2 \frac{\partial}{\partial T} \gamma_{\vec{k}}^2 - c_3 \frac{\partial}{\partial T} E_{2,\vec{k},\sigma} + c_4 \frac{\partial}{\partial T} (\gamma_{\vec{k}}^2 E_{2,\vec{k},\sigma}) + c_5 \frac{\partial}{\partial T} E_{2,\vec{k},\sigma}^2] \\ &\quad - c_6 \frac{\partial}{\partial T} E_{2,\vec{k},\sigma}^3 \left[\frac{\partial}{\partial T} E_{1,\vec{k},\sigma}^3 - \frac{\partial}{\partial T} (E_{1,\vec{k},\sigma} E_{3,\vec{k},\sigma}^2) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.186)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} Z_{3,\vec{k},\sigma} &= -[c_1 + c_2 \frac{\partial}{\partial T} \gamma_{\vec{k}}^2 - c_3 \frac{\partial}{\partial T} E_{3,\vec{k},\sigma} + c_4 \frac{\partial}{\partial T} (\gamma_{\vec{k}}^2 E_{3,\vec{k},\sigma}) + c_5 \frac{\partial}{\partial T} E_{3,\vec{k},\sigma}^2] \\ &\quad - c_6 \frac{\partial}{\partial T} E_{3,\vec{k},\sigma}^3 \left[\frac{\partial}{\partial T} E_{3,\vec{k},\sigma}^3 - \frac{\partial}{\partial T} (E_{3,\vec{k},\sigma} E_{1,\vec{k},\sigma}^2) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.187)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} Z_{4,\vec{k},\sigma} = & [c_1 + c_2 \frac{\partial}{\partial T} \gamma_{\vec{k}}^2 - c_3 \frac{\partial}{\partial T} E_{4,\vec{k},\sigma} + c_4 \frac{\partial}{\partial T} (\gamma_{\vec{k}}^2 E_{4,\vec{k},\sigma}) + c_5 \frac{\partial}{\partial T} E_{4,\vec{k},\sigma}^2 \\ & - c_6 \frac{\partial}{\partial T} E_{4,\vec{k},\sigma}^3] [\frac{\partial}{\partial T} E_{3,\vec{k},\sigma}^3 - \frac{\partial}{\partial T} (E_{3,\vec{k},\sigma} E_{1,\vec{k},\sigma}^2)]^{-1} \end{aligned} \quad (3.188)$$

com:

$$\frac{\partial}{\partial T} (\gamma_{\vec{k}}^2 E_{i,\vec{k},\sigma}) = E_{i,\vec{k},\sigma} \frac{\partial \gamma_{\vec{k}}^2}{\partial T} + \frac{\partial E_{i,\vec{k},\sigma}}{\partial T} \gamma_{\vec{k}}^2, \quad (3.189)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} E_{i,\vec{k},\sigma}^2 = 2E_{i,\vec{k},\sigma} \frac{\partial E_{i,\vec{k},\sigma}}{\partial T} \quad (3.190)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial T} E_{i,\vec{k},\sigma}^3 = 3E_{i,\vec{k},\sigma}^2 \frac{\partial E_{i,\vec{k},\sigma}}{\partial T}. \quad (3.191)$$

Ao substituir todas as derivadas na equação do C_V vê-se que ele terá a forma

$$C_V = C_N + C_{SC} \frac{\partial \gamma}{\partial T} \quad (3.192)$$

em que C_N é o calor específico associado ao estado normal e C_{SC} é a contribuição do estado supercondutor para o C_V .

A partir de C_N e C_V pode-se obter o salto do calor específico (ASHCROFT; MERMIN, 2011), o qual é dado por:

$$\Delta C = \frac{C_V - C_N}{C_N} \quad (3.193)$$

e é calculado em $T = T_C$.

O comportamento ΔC em função da ocupação pode fornecer informações importantes a respeito da presença de um *pseudogap*.

3.5 Energia de condensação $U(0)$

Assim como para o calor específico, também pode-se obter uma expressão para a energia de condensação através da energia interna E , dada pela equação 3.164.

Escreve-se inicialmente a diferença de energia entre o estado normal e supercondutor,

$$U(T) = F_N(T) - F_S(T), \quad (3.194)$$

em que F_N é a energia livre de Helmholtz no estado normal e F_S é a energia livre de Helmholtz no estado supercondutor.

A energia livre de Helmholtz é dada por:

$$F(T) = E - ST. \quad (3.195)$$

No entanto, define-se a energia de condensação na condição de $T = 0$ (TINKHAM, 1996). Dessa forma, tem-se:

$$F(0) = E. \quad (3.196)$$

Logo,

$$U(0) = E_N - E_S, \quad (3.197)$$

sendo E_N a energia interna para o estado normal (obtida pela equação 3.164, forçando $\gamma = 0$) e E_S a energia interna para o estado supercondutor.

4 RESULTADOS

Nesse capítulo, são apresentados os resultados numéricos obtidos através de um programa computacional desenvolvido em linguagem fortran 77. Todas as energias são expressadas em termos de $|t|$, sendo $t = -1 \text{ eV}$.

No presente trabalho o modelo de Hubbard bidimensional de uma banda, com interação repulsiva local, é tratado pela aproximação de n -pólos proposta por Roth (ROTH, 1969). Adota-se um cenário no qual as correlações antiferromagnéticas são responsáveis pela presença de um *pseudogap* no estado normal.

É necessário destacar o alto nível de dificuldade numérica para obter os resultados apresentados nesse capítulo. O procedimento descrito na seção 3.2, para o cálculo do deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$, mostra que para incluir adequadamente a dependência da função correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ na primeira zona de Brillouin ela passa a depender de \vec{q} . Como ela depende também \vec{k} , conseqüentemente, para cada \vec{k} é preciso fazer uma soma em \vec{q} na primeira zona de Brillouin. Assim, para obter por exemplo o calor específico em função da temperatura, para cada valor de temperatura T deve ser feita uma soma sobre \vec{k} , e para cada \vec{k} será feita uma soma sobre \vec{q} . Além disso, a derivada da função de Fermi, presente no cálculo do calor específico, tem uma forma gaussiana em altas temperaturas, mas, aproxima-se de uma função delta de Dirac na região de baixas temperaturas, logo são necessários muitos valores de \vec{k} em baixas temperaturas para obter-se resultados mais precisos. Dessa forma, esse processo requer um grande esforço computacional.

4.1 Estado Normal

Estrutura de bandas e densidade de estados

Um dos principais objetivos desse trabalho é investigar se correlações antiferromagnéticas associadas a função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ (BEENEN; EDWARDS, 1995) presente no deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$ (ver equação 3.51), podem ser responsáveis pela presença de um *pseudogap* no estado normal. Dessa forma, a função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ tem um papel fundamental neste trabalho. No entanto, como mencionado na seção 3.1, no procedimento original de Roth (ROTH, 1969), a dependência em \vec{k} dessa função de correlação é desprezada, o que faz com que ela seja constante na primeira zona de Brillouin. Nesse caso, $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ tem o mesmo peso para todos os \vec{k} 's. Como a simetria do *pseudogap* é a mesma do *gap* supercondutor ($d_{x^2-y^2}$) (MISHRA et al., 2014), o *pseudo-*

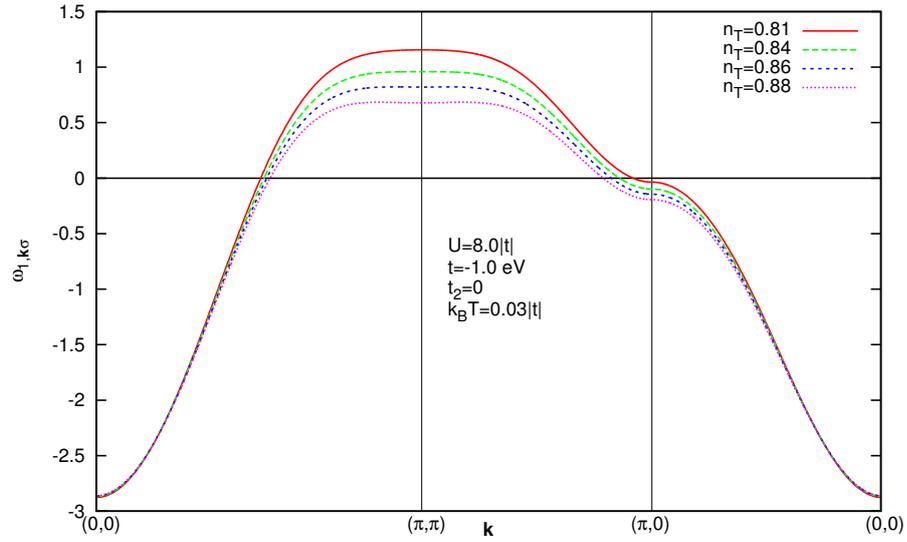


Figura 4.1: Banda renormalizada para diferentes ocupações n_T .

gap não emerge quando a função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ é considerada independente de \vec{k} .

Na figura 4.1 por exemplo, pode-se observar a banda renormalizada inferior de Hubbard $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ ao longo da direção $(0,0) - (\pi,\pi) - (\pi,0)$, na primeira zona de Brillouin, para várias ocupações n_T , em que $n_T = \langle n_\sigma \rangle + \langle n_{-\sigma} \rangle$. A linha em $\gamma = 0$ marca a posição do potencial químico. Nesse trabalho considera-se apenas o caso de sistemas cupratos dopados por buracos. Portanto, somente a banda inferior de Hubbard é interceptada

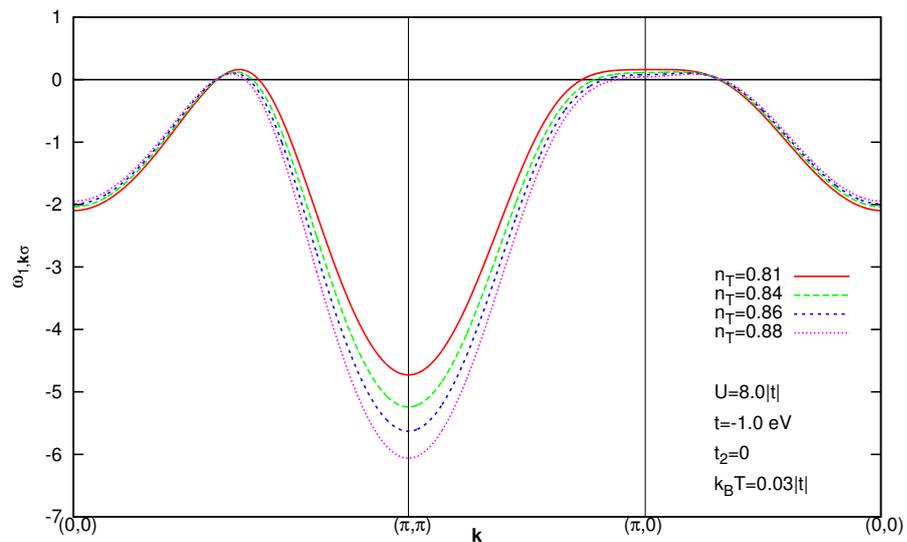


Figura 4.2: Banda renormalizada para diferentes ocupações n_T .

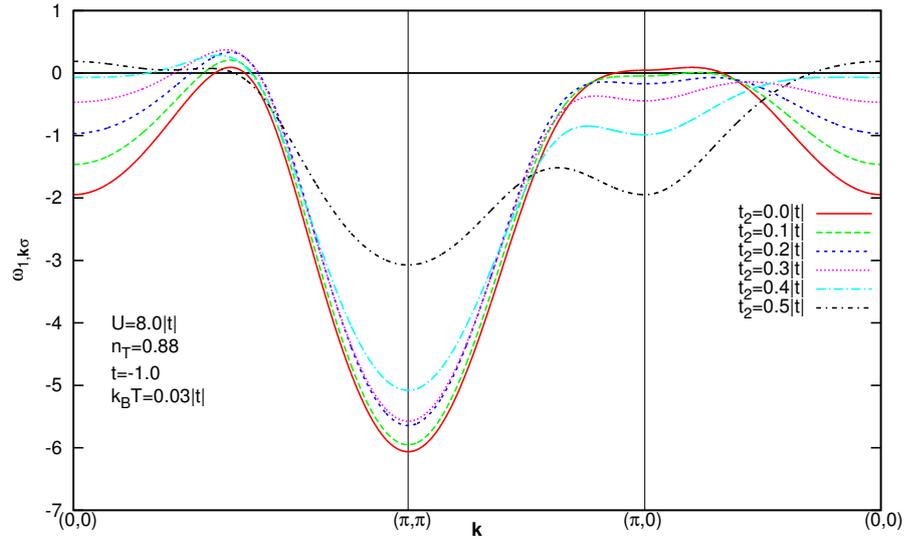


Figura 4.3: Banda renormalizada para diferentes intensidades de amplitude do salto para segundos vizinhos t_2 .

pele potencial químico, logo a banda superior de Hubbard não será mostrada. A banda renormalizada $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ foi obtida para $U = 8,0|t|$, $t_2 = 0$ e $k_B T = 0,03|t|$, seguindo o procedimento original de Roth.

Por outro lado, na figura 4.2, é apresentada a banda renormalizada $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ para os mesmos parâmetros da figura 4.1, contudo, para esses resultados o procedimento de Roth foi modificado, conforme discutido na seção 3.1, de forma a incluir a dependência da função de correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em \vec{k} , para o cálculo do deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}$.

A diferença entre os dois resultados é facilmente notada. Ao incluir a dependência em \vec{k} de $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ a banda $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ é deslocada para energias abaixo do potencial químico no ponto (π, π) . Esse comportamento é fundamental para possibilitar a abertura de um *pseudogap* na região $(\pi, 0)$. Entretanto, constata-se também, que para $t_2 = 0$ não há a presença do *pseudogap* no ponto $(\pi, 0)$. Como será discutido mais adiante, $t_2 \neq 0$ é essencial para obter o *pseudogap*.

Observa-se na figura 4.3, que conforme o valor do parâmetro t_2 aumenta, a região do ponto $(\pi, 0)$ é deslocada para energias mais baixas, até que para $t_2 = 0,2|t|$ nota-se a presença de um *pseudogap* na região $(\pi, 0)$. Contudo, para o valor de $t_2 = 0,5|t|$ o *pseudogap* desaparece novamente devido à distorção da banda (CALEGARI et al., 2013). Na figura 4.4, tem-se $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ para $t_2 = 0,2|t|$ e diversos valores de n_T . Pode-se notar que para uma ocupação próxima de $n_T = 0,83$ abre um *pseudogap* no ponto $(\pi, 0)$. Logo, é necessário também um certo valor de ocupação para abrir um *pseudogap*. A figura menor mostra em detalhe o *pseudogap* para $n_T = 0,88$.

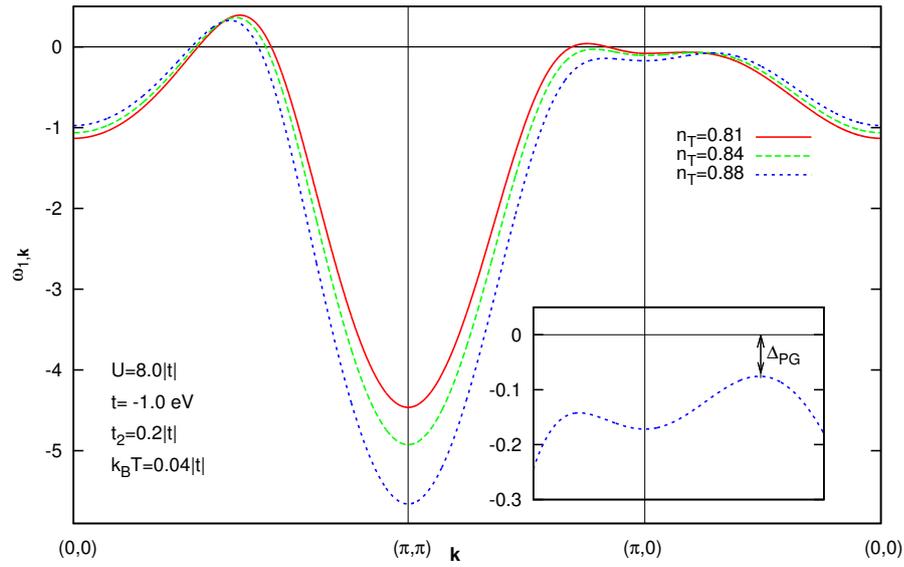


Figura 4.4: Banda renormalizada para diferentes ocupações n_T .

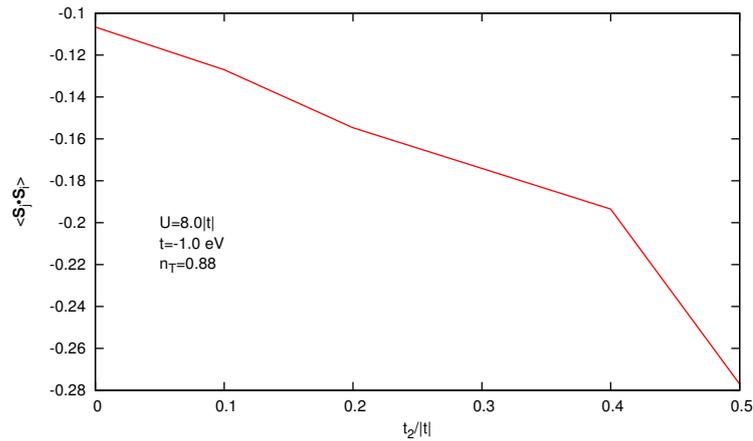


Figura 4.5: Função correlação spin-spin em função de $t_2/|t|$.

A figura 4.5 mostra a função de correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em função de t_2 . Nota-se que $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$ aumenta com o aumento de t_2 , ou seja, t_2 favorece as correlações antiferromagnéticas.

Esses resultados sugerem que a abertura do *pseudogap* está diretamente relacionada a $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$, a qual é favorecida com o aumento t_2 e n_T (como será visto na próxima seção).

A densidade de estados também é afetada pelos efeitos de t_2 em $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$, como pode-se notar pelos resultados apresentados na figura 4.6, a qual mostra as densidades de estados para os mesmos parâmetros da figura 4.3.

Na figura 4.3, observa-se que a banda é distorcida por t_2 , conseqüentemente a densidade de estados é modificada e a singularidade de van Hove é deslocada. Esse compor-

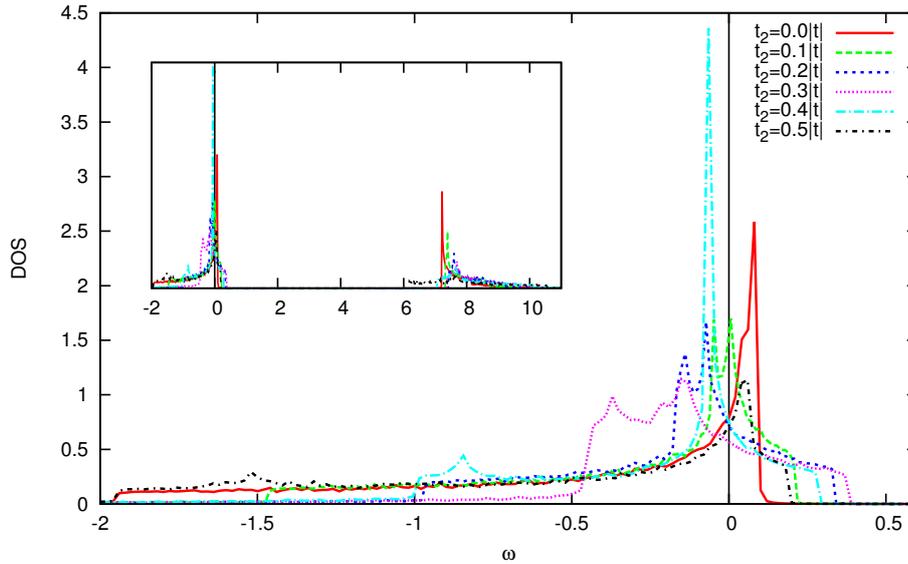


Figura 4.6: Densidades de estados para $U = 8, 0|t|$, $t = -1, 0eV$, $n_T = 0, 88$ e $k_B T = 0, 03|t|$ e diversos valores de t_2 .

tamento é importante porque quando o potencial químico fica próximo a singularidade de van Hove significa que tem-se uma alta concentração de elétrons próximo ao potencial químico, o que deve favorecer a supercondutividade. Por outro lado, pode ocorrer também que o potencial químico fique em uma região de baixa densidade de estados, o que é desfavorável à supercondutividade, uma vez que isso significa haver poucos elétrons disponíveis para a formação de pares responsáveis pela supercondutividade. Dessa forma, pode-se prever que as correlações antiferromagnéticas relacionadas a $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ também devem afetar supercondutividade.

4.2 Estado Supercondutor

Os resultados apresentados a seguir foram obtidos seguindo o procedimento de fatorização usado por Beenen e Edwards (BEENEN; EDWARDS, 1995), para o caso de um *gap* supercondutor com simetria de onda $d_{x^2-y^2}$, ou seja, um *gap* anisotrópico. Esse procedimento é válido na região de U intermediário.

Primeiramente, na figura 4.7, são apresentadas as bandas renormalizadas $E_{1,\vec{k},\sigma}$ e $E_{2,\vec{k},\sigma}$ ao longo da direção $(0, 0) - (\pi, \pi) - (\pi, 0)$, na primeira zona de Brillouin. As bandas foram calculadas para $n_T = 0, 88$, $U = 8, 0|t|$, $t_2 = 0, 2|t|$ e $k_B T = 0, 0$. No painel menor tem-se em detalhe a região do *gap* supercondutor. A localização do *gap*, o qual abre na região em torno do ponto $(\pi, 0)$ e desaparece para $k_x = k_y$, reflete a simetria $d_{x^2-y^2}$ do

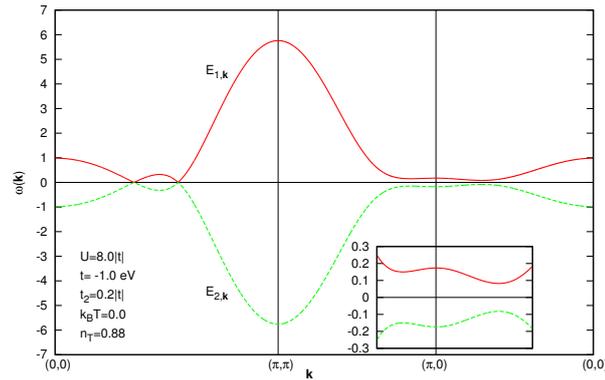


Figura 4.7: Bandas renormalizadas para $k_B T = 0$.

parâmetro de ordem supercondutor.

O parâmetro de ordem supercondutor γ e o calor específico C_V em função da temperatura são mostrados na figura 4.8. Através do parâmetro de ordem (painel de cima) obtêm-se as temperaturas críticas de transição do estado supercondutor para o estado normal para as várias ocupações consideradas. No painel de baixo, observa-se que o C_V apresenta uma descontinuidade na temperatura crítica de transição indicando uma transição de fase do estado supercondutor para o estado normal. As descontinuidades no C_V para cada ocupação estão de acordo com as temperaturas críticas fornecidas pelo parâmetro de ordem γ mostrado no painel superior da figura 4.8. Nota-se também que a posição da descontinuidade em C_V e a altura do salto, dependem de n_T .

Além de indicar a temperatura crítica de transição, o calor específico também pode

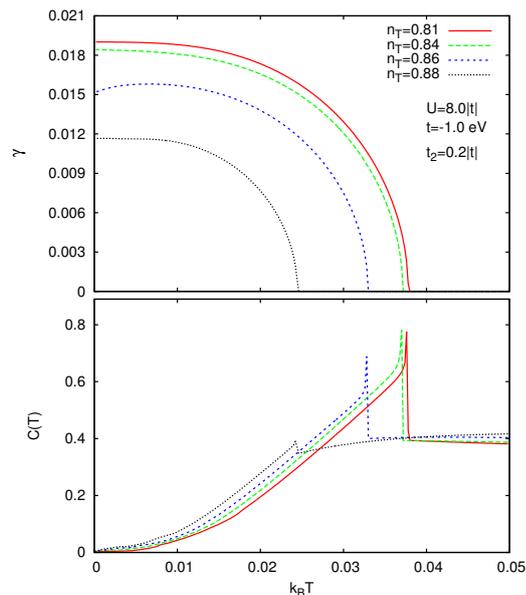


Figura 4.8: Calor específico em função de $k_B T$ e diferentes ocupações.

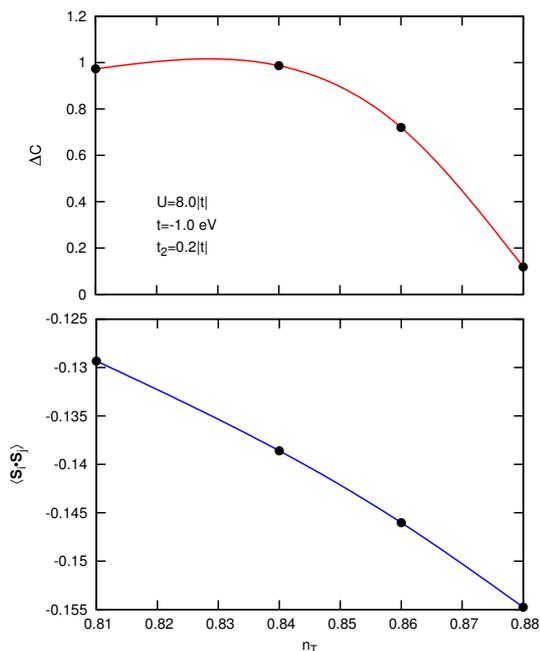


Figura 4.9: O painel de cima mostra o salto da calor específico em função da ocupação. O painel de baixo mostra o comportamento de $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em função da ocupação.

fornecer informações sobre o *pseudogap*. No painel de cima da figura 4.9 tem-se o salto do calor específico ΔC , calculado em T_C , em função da ocupação. Verifica-se que ΔC começa a decrescer para uma ocupação próxima de $n_T = 0,83$. Esse comportamento está relacionado com a abertura do *pseudogap* no ponto $(\pi, 0)$ (ver figura 4.4) e concorda qualitativamente com os resultados experimentais mostrados na figura 4.10. No painel de baixo observa-se o comportamento da função correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ presente no deslocamento de banda, agora em função da ocupação n_T , para os mesmos parâmetros

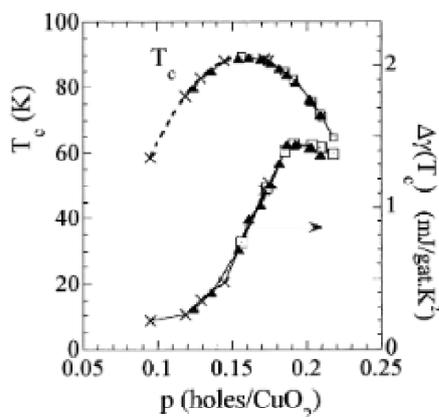


Figura 4.10: Salto do coeficiente do calor específico $\Delta(C/T) = \Delta\gamma$ em função da dopagem p . Fonte:(LORAM et al., 2001)

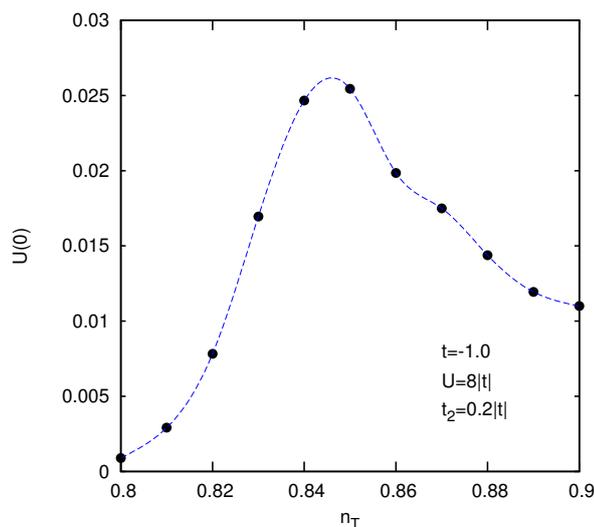


Figura 4.11: Energia de condensação $U(0)$ em função da ocupação n_T .

do painel de cima. Vê-se que $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$, a qual no presente cenário é responsável pela abertura do *pseudogap*, aumenta com n_T .

A figura 4.11 mostra a energia de condensação $U(0)$ em função da ocupação n_T . Pode-se observar que $U(0)$ começa a decrescer para uma ocupação próxima de $n_T = 0,83$, como ocorre com ΔC na figura 4.9. O comportamento de $U(0)$ em função de n_T concorda qualitativamente com os resultados experimentais com resultados experimentais mostrados na figura 4.12.

Também foram obtidos resultados para a energia de condensação $U(0)$ em função de t_2 , parâmetro o qual, como visto na figura 4.5, favorece as correlação antiferromagnéticas associadas a $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$. Esses resultados, os quais são apresentados na figura 4.13, mostram que a energia de condensação $U(0)$ apresenta um valor máximo de $U(0)$ para

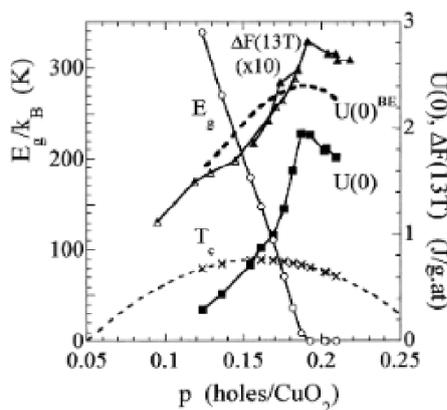


Figura 4.12: Energia de condensação $U(0)$ em função da dopagem p . Fonte:(LORAM et al., 2001)

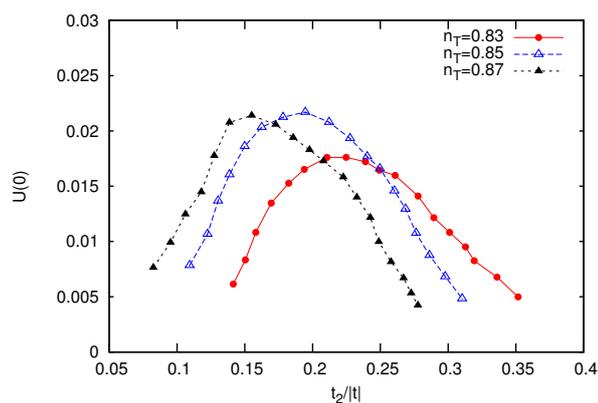


Figura 4.13: Energia de condensação em função de t_2 , para várias ocupações.

cada ocupação. Entretanto, conforme o número de ocupação aumenta, o ponto máximo se move para valores mais baixos de t_2 . A posição do valor máximo de $U(0)$ está relacionada com a abertura do *pseudogap* na densidade de estados. Para ocupações maiores, por exemplo $n_T = 0,87$, o *pseudogap* surge para $t_2/|t| \cong 0,13$, enquanto que para ocu-

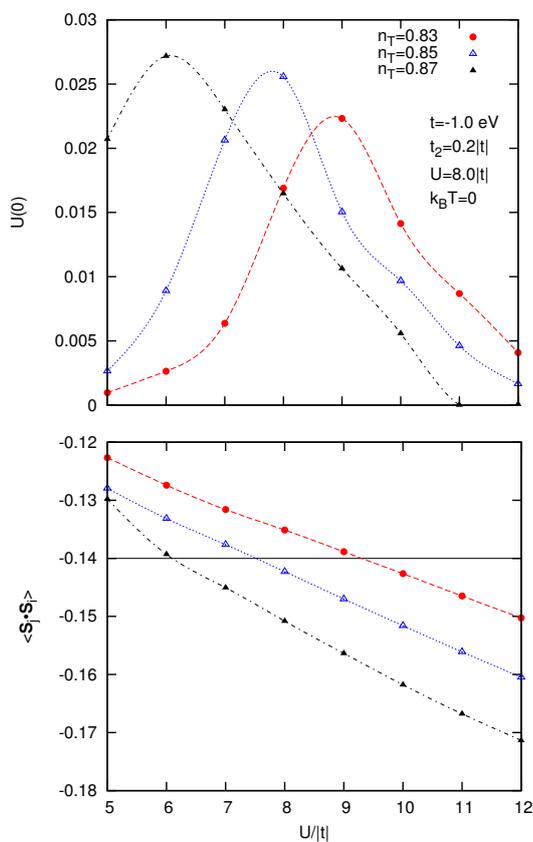


Figura 4.14: Energia de condensação e e função de correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em função da interação Coulombiana.

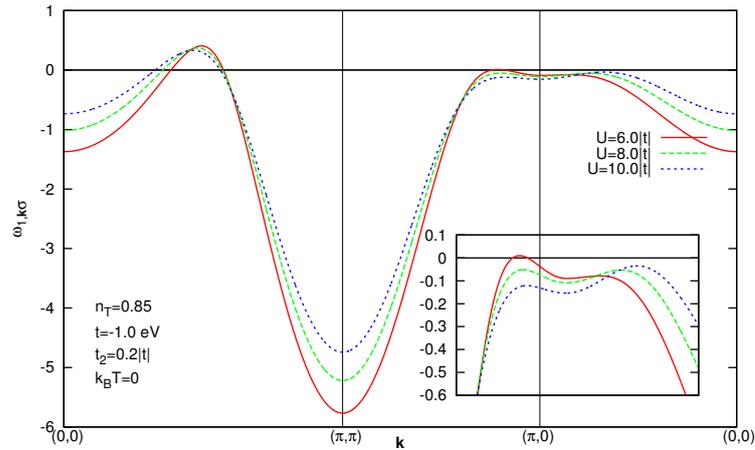


Figura 4.15: Banda renormalizada para $n_T = 0,85|t|$, $t = -1,0eV$, $t_2 = 0$ e $k_B T = 0,03|t|$, e diferentes valores de interação Coulombiana.

pações menores é necessário um valor maior de $t_2/|t|$ para que o *pseudogap* apareça.

Na figura 4.14, é apresentada a energia de condensação $U(0)$ (painel superior) e a função de correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ (painel inferior) em função da interação Coulombiana U , para diferentes ocupações n_T . Observa-se que em geral é necessário um valor mínimo de $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$ para que abra um *pseudogap* na superfície de Fermi. Mais especificamente, pode-se notar que $U(0)$ começa a decrescer, para todos os valores n_T , quando $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$ atinge um valor em torno de 0,14. Entretanto, conforme n_T decresce é necessário um valor maior de U para que um *pseudogap* emerja. No trabalho de Gull e Millis (2012) é discutido que o *pseudogap* seria fruto das correlações fortes que aparecem no regime de n_T e U grandes. De acordo com o trabalho de Gull e Millis (2012) pode-se entender que conforme n_T decresce é necessário um valor maior de U para acessar o regime de fortes correlações e abrir o *pseudogap*. Percebe-se também que $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$ aumenta com U . O comportamento de $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em relação a U e n_T concorda com resultados apresentados no trabalho de Herrmann e Nolting (1997).

Nos resultados mostrados na figura 4.15, nota-se que conforme U aumenta, a região do ponto $(\pi, 0)$ da banda renormalizada $\omega_{1,\vec{k},\sigma}$ é deslocada para energias mais baixas. Para $U = 8,0|t|$ e $U = 10,0|t|$ tem-se a presença de um *pseudogap*. Através da figura 4.14 (painel inferior) observa-se que para $n_T = 0,85$, quando $U = 6,0|t|$ tem-se $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle| < 0,14$ e não há *pseudogap* na região do ponto $(\pi, 0)$, já para $U = 8,0|t|$ e $U = 10,0|t|$ tem-se $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle| > 0,14$. Isso sugere que existe um valor crítico de $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$, acima do qual o sistema acessa o regime de fortes correlações e um *pseudogap* emerge na região do ponto $(\pi, 0)$. Isso explica o comportamento de $U(0)$ em função de U . Sempre que $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$ atinge esse valor crítico, ocorre a abertura do *pseudogap* e a energia de condensação começa a decrescer.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi estudado o calor específico e a energia de condensação do modelo de Hubbard de uma banda com interação Coulombiana local U , considerando o efeito de primeiros e segundos vizinhos do sítio i . Para realizar esse estudo utilizou-se a técnica das funções de Green, em que as equações de movimento das funções Green foram tratadas através da aproximação de n -pólos proposta por Roth (ROTH, 1969). O parâmetro de ordem supercondutor foi obtido através do procedimento de fatorização desenvolvido por Beenen e Edwards (BEENEN; EDWARDS, 1995). Adotou-se um cenário no qual as correlações antiferromagnéticas dão origem ao *pseudogap* e o cálculo do deslocamento de banda foi aprimorado de forma a incluir a dependência em \vec{k} da função correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$, sendo \vec{k} um vetor de onda na primeira zona de Brillouin. Essa função de correlação encontra-se no deslocamento de banda e está associada a correlações antiferromagnéticas (BEENEN; EDWARDS, 1995), o que a torna fundamental para o estudo do *pseudogap* no presente cenário.

As bandas renormalizadas obtidas no estado normal mostram que incluir a dependência em \vec{k} na função correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ é crucial para dar origem ao *pseudogap* na região do ponto $(\pi, 0)$. Isso se dá pelo fato de que, se a dependência em \vec{k} de $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ é desprezada, $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ torna-se constante na primeira zona de Brillouin e portanto, tem o mesmo peso para todos os \vec{k} 's. Como o *pseudogap* em questão tem a mesma simetria do *gap* supercondutor (MISHRA et al., 2014), o fato de $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ ter peso diferente para cada vetor de onda \vec{k} é essencial para gerar um *pseudogap* na região do ponto $(\pi, 0)$. Entretanto, os resultados apresentados também indicam que é necessário um certo valor de t_2 para que as correlações antiferromagnéticas sejam fortes o suficiente para abrir o *pseudogap*. Isso deve-se ao fato de que $|\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle|$, a qual está relacionada com correlações antiferromagnéticas (BEENEN; EDWARDS, 1995), aumenta com t_2 . Também notou-se que acima de um certo valor, t_2 pode causar uma grande distorção nas bandas renormalizadas fazendo com que o *pseudogap* desapareça novamente, que é o que ocorre na figura 4.3 para $t_2 = 0,5|t|$.

Os resultados para o calor específico em função da temperatura mostram a descontinuidade do calor específico na temperatura crítica de transição do estado normal para o estado supercondutor. A dependência do calor específico em relação a ocupação também é bem clara. Na faixa de ocupação n_T considerada neste trabalho, observa-se que a posição da descontinuidade (em relação a temperatura) e a altura do salto no C_V dependem de n_T . Mais precisamente, acima de $n_T \cong 0,83$ o salto no C_V começa a decrescer, o que pode ser observado claramente quando analisa-se ΔC , o qual descreve o salto no C_V através da equação 3.192.

Conforme discutido anteriormente, o decréscimo no ΔC , ocorre devido ao surgimento

de um *pseudogap* na região do ponto $(\pi, 0)$ na primeira zona de Brillouin. Esse *pseudogap* afeta a densidade de estados próximo ao potencial químico e conseqüentemente, afeta também ΔC , cujo comportamento está qualitativamente de acordo com os resultados experimentais obtidos para alguns cupratos (LORAM et al., 2001).

A análise da energia de condensação do estado supercondutor $U(0)$ também fornece informações importantes na região do *pseudogap*. Por exemplo, a análise de $U(0)$ em função da ocupação n_T mostra um decréscimo de $U(0)$ acima de uma certa ocupação. Tal comportamento se constitui em mais uma evidência da presença do *pseudogap* na densidade de estados. Esse resultado também está de acordo com resultados experimentais obtidos para alguns cupratos (LORAM et al., 2000).

Por fim, com base nos resultados aqui apresentados, pode-se afirmar que as correlações antiferromagnéticas associadas a função de correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ desempenham um papel muito importante na região do *pseudogap* e da supercondutividade no modelo de Hubbard.

Uma continuação natural desse trabalho seria estudar o calor específico e a energia de condensação de um modelo de Hubbard estendido, na região do *pseudogap* e da supercondutividade. Esse modelo de Hubbard estendido inclui repulsão Coulombiana local e não-local, salto entre primeiros e segundos vizinhos do sítio i - para elétrons d e p - e um termo um termo de hibridização. O modelo considera também os sítios de oxigênio (elétrons p), os quais não são considerados no modelo de Hubbard de uma banda. Embora o modelo de Hubbard de uma banda forneça várias informações importantes ele não descreve corretamente algumas propriedades dos cupratos, como por exemplo, a assimetria magnética no diagrama de fase de temperatura versus dopagem (CALEGARI; MAGALHAES; GOMES, 2005). Por conseguinte, um modelo que considera os átomos de oxigênio poderia ser mais adequado para o estudo de cupratos supercondutores. Outra proposta para dar continuidade ao trabalho, seria investigar o comportamento do calor específico e da energia de condensação de um modelo de Hubbard atrativo, também na região da supercondutividade e do *pseudogap*. Isso seria feito com o objetivo de verificar qual dos modelos descreve mais adequadamente os sistemas cupratos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, P. W. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. **Science**, v. 235, p. 1196, 1987.

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Física do Estado Sólido**. Guarulhos, SP: Lis Gráfica e Editora LTDA, 2011. 870 p.

BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. **Phys. Rev.**, v. 108, p. 1175, 1957.

BEDNORZ, J. G.; MULLER, K. A. Possible high t_c superconductivity in the balacuo system. **Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter**, v. 64, p. 189, 1986.

BEENEN, J.; EDWARDS, D. M. Superconductivity in the two-dimensional hubbard model. **Phys. Rev. B**, v. 52, n. 18, p. 13636, 1995.

CALEGARI, E. J. **Supercondutividade em um Modelo de Hubbard $d - p$, em Duas Dimensoes**. 2006. 131 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2006.

CALEGARI, E. J.; MAGALHAES, S. G. Spectral function of a $d - p$ hubbard model. **International Journal of Modern Physics B**, v. 25, n. 1, p. 41–53, 2011.

CALEGARI, E. J.; MAGALHAES, S. G.; CHAVES, C. M.; TROPER, A. Pseudogap and specific heat of high T_C superconductors. **Solid State Communications**, v. 158, p. 20–24, 2013.

CALEGARI, E. J.; MAGALHAES, S. G.; GOMES, A. A. Superconductivity in a two dimensional extended hubbard model. **European Physical Journal B**, v. 45, p. 485–496, 2005.

CHAKRAVARTY, S.; LAUGHILN, R. B.; MORR, D. K.; NAYAK, C. Hidden order in the cuprates. **Phys. Rev. B**, v. 63, p. 094503, 2001.

CHAPARRO, G. A. L. **Supercondutividade e antiferromagnetismo em um modelo de Hubbard estendido**. 1991. 62 p. Tese (Doutorado em Física) — Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1991.

DAGOTTO, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. **Rev. Mod. Phys.**, v. 66, n. 3, p. 763, 1994.

DAMASCELLI, A.; HUSSAIN, Z.; SHEN, Z. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. **Reviews of Modern Physics, APS**, v. 75, n. 2, p. 473, 2003.

DOMAŃSKI, T.; WYSOKIŃSKI, K. I. Superconducting phases in the presence of coulomb interaction: From weak to strong correlations. **Phys. Rev. B**, v. 59, n. 1, p. 173–176, 1999.

DUFFY, D.; MOREO, A. Specific heat of the two-dimensional hubbard model. **Phys. Rev. B**, v. 55, p. 12918, 1997.

EMERY, V. J.; KIVELSON, S. A. Importance of phase fluctuations in superconductors with small superfluid density. **Nature**, v. 374, n. 434, 1995.

FAZEKAS, P. **Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism**. New York: World Scientific, 1999. 78 p.

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

GULL, E.; PARCOLLET, O.; J., M. A. Superconductivity and pseudogap in the two-dimensional hubbard model. **Phys. Rev. Lett.**, v. 110, p. 216405, 2013.

HARRISON, N.; MCDONALD, R. D.; SINGLETON, J. Cuprate fermi orbits and fermi arcs: The effect of short-range antiferromagnetic order. **Phys. Rev. Lett.**, v. 99, p. 206406, 2007.

HERRMANN, T.; NOLTING, W. Magnetism in the single-band hubbard model. **J. Magn. Mater.**, v. 170, p. 253, 1997.

HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. **Proc. Roy. Soc.**, p. 238, 1963.

IMADA, M.; FUJIMORI, A.; TOKURA, Y. Metal-insulator transitions. **Reviews of Modern Physics**, 1998.

KAMPFAND, A. P.; SCHRIEFFER. Spectral function and photoemission spectra in antiferromagnetically correlated metals. **Phys. Rev. B**, v. 42, p. 7967, 1990.

KANIGEL, A.; CHATTERJEE, U.; RANDEIRA, M.; NORMAN, M. R.; KOREN, G.; KADOWAKI, K.; CAMPUZANO, J. C. Evidence for pairing above the transition temperature of cuprate superconductors from the electronic dispersion in the pseudogap phase. **Phys. Rev. Lett.**, v. 101, p. 137002, 2008.

KISHORE, R.; JOSHI, S. K. Metal-nonmetal transition in magnetic systems. **J. Phys. C: Solid St. Phys.**, v. 4, p. 2475, 1971.

LOBO, C. O. **Susceptibilidade Magnética de um Modelo de Hubbard Estendido com Interação Atrativa**. 2012. 78 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2012.

LORAM, J. L.; LUO, L.; COOPER, J. R.; LIANG, W. Y.; TALLON, J. L. The condensation energy and pseudogap energy scale of $Bi : 2212$ from the electronic specific heat. **Physica C**, v. 341-348, p. 831 – 834, 2000.

LORAM, J. W.; LUO, J.; COOPER, J. R.; LIANG, W. Y.; TALLON, J. L. Evidence on the pseudogap and condensate from the electronic specific heat. **Physics and Chemistry of Solids**, v. 62, p. 59 – 64, 2001.

LUIZ, A. M. **Aplicação dos Supercondutores na Tecnologia e na Medicina**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2012. 189 p.

MISHRA, V.; CHATTERJEE, U.; C., C. J.; NORMAN, M. R. Effect of the pseudogap on the transition temperature in the cuprates and implications for its origin. **Nature Physics**, p. 357–360, 2014.

MORINARI, T. Pseudogap and short-range antiferromagnetic correlation controlled fermi surface in underdoped cuprates: From fermi arc to electron pocket. **J. Phys. Soc. Jpn.**, v. 78, p. 054708, 2009.

NAZARENO, H. N. **Mecânica estatística e funções de Green**. [S.l.]: Editora Universidade de Brasília, 1986. 78 p.

NORMAN, M. R. e. a. Destruction of the fermi surface in underdoped high-*t_c* superconductors. **Nature**, v. 392, p. 157, 1998.

OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. **Introdução à Física do Estado Sólido**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2011. 507 p.

OSTERMANN, F.; PUREUR, P. **Supercondutividade**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005. 78 p.

PEREIRA, S. H.; FÉLIX, M. G. 100 anos de supercondutividade e a teoria de ginzburg-landau. **Revista Brasileira e Ensino de Física**, v. 35, n. 1, p. 1313, 2013.

PÉREZ, L. A.; MILLÁN, J. S.; DOMÍNGUEZ, B. C.; C., W. Electronic specific heat anisotropic superconductors and its doping dependence. **J. of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 310, p. e129–e131, 2007.

PIUMBINI, C. K. **Relação entre o transporte elétrico e a estrutura de poros no sistema $YBa_2Cu_3O_{7-y}$** . 2013. 132 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2013.

RENNER, C.; REVAZ, B.; GENOUD, J.-Y.; KADOWAKI, K.; FISCHER, O. Pseudogap precursor of the superconducting gap in under- and overdoped $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 1, p. 149–152, 1998.

ROTH, L. M. Electron Correlation in Narrow Energy Bands. I. The Two-Pole Approximation in a Narrow *S* Band. **Phys. Rev.**, v. 184, n. 451, 1969.

SILVA, M. G. da. **Assimetria no *gap* dos supercondutores de altas temperaturas**. 2009. 78 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal do Amazonas, Manaus, 2009.

TINKHAM, M. **INTRODUCTION TO SUPERCONDUCTIVITY**. New York: McGraw-Hill, Inc., 1996. 78 p.

VALENTIM, A. **Modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com padrão tabuleiro de xadrez**. 2010. 77 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Mato Grosso - Instituto de Física, Mato Grosso, 2010.

VARMA, C. M. Theory of the pseudogap state of the cuprates. **Phys. Rev. B**, v. 73, p. 155113, 2006.

VOLLHARDT, D. Dynamical mean-field theory for correlated electrons. **Ann. Phys**, v. 524, n. 1, p. 1–19, 2012.

ZUBAREV, D. N. Double-time green functions in statistical physics. **Soviet Physics Uspekhi**, v. 3, p. 320–342, 1960.