

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

**CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO TEÓRICO PARA
O COMPOSTO URu_2Si_2**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Bruna Garcia Pedrolo

Santa Maria, RS, Brasil

2016

**CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO TEÓRICO PARA O
COMPOSTO URu_2Si_2**

Bruna Garcia Pedrolo

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

2016

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

Pedrolo, Bruna Garcia
Calor Específico de um modelo teórico para o composto
URu₂Si₂ / Bruna Garcia Pedrolo.-2016.
70 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, 2016

1. Férmion pesado 2. Ordem Oculta 3. Calor específico
4. Transição de fase I. Calegari, Eleonir João II. Título.

©2016

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

End. Eletr.: brunapedrolo@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

**CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO TEÓRICO PARA O
COMPOSTO URu_2Si_2**

elaborada por
Bruna Garcia Pedrolo

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

Eleonir João Calegari, Dr.
(Presidente/orientador)

Sergio Garcia Magalhães, Dr. (UFRGS)

Lucio Strazzabosco Dorneles, Dr. (UFSM)

Santa Maria, 29 de janeiro de 2016.

Aos meus pais, Vando e Bina.

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 oportunidade, orientação, dedicação e paciência;

- aos meus colegas e amigos do Laboratório de Teoria em Física da Matéria Condensada do Departamento de Física da UFSM, em especial à Ana Claudia Lausmann, pelo apoio, ajuda e ensinamentos;

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

- aos meus pais Vando e Bina, e a minha irmã Adriane pelo apoio e incentivo durante essa longa jornada.

RESUMO

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

CALOR ESPECÍFICO DE UM MODELO TEÓRICO PARA O COMPOSTO URu_2Si_2

AUTORA: BRUNA GARCIA PEDROLO

ORIENTADOR: ELEONIR JOÃO CALEGARI

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 29 de janeiro de 2016.

O composto férmion pesado URu_2Si_2 tem atraído muito interesse nas últimas décadas devido ao seu comportamento incomum, sendo ainda um problema não resolvido em Física da Matéria Condensada. Medidas de calor específico em compostos URu_2Si_2 mostram que, quando a temperatura é diminuída, o sistema sofre uma transição de fase a 17,5K e outra transição de fase a 1,5K. A transição de fase a 1,5 K leva o sistema para um estado supercondutor. Por outro lado, a transição de fase a 17,5 K leva o sistema para um estado conhecido como Ordem Oculta. Nas últimas três décadas, o sistema URu_2Si_2 tem sido intensamente investigado tanto experimental, como teoricamente, no entanto, a natureza da Ordem Oculta ainda não é clara. Na presença de um campo magnético externo H_z , o sistema URu_2Si_2 apresenta um comportamento interessante. Em particular, existem resultados experimentais para o calor específico, mostrando que, acima de 25T, o pico do calor específico torna-se muito intenso e estreito, perdendo o seu carácter de segunda ordem. Recentemente foi proposta uma teoria baseada no Modelo de Anderson “Underscreened”. Tal teoria foi também utilizada para estudar um modelo mínimo proposto para descrever a Ordem Oculta no sistema URu_2Si_2 . No presente trabalho, os efeitos de um campo magnético externo, H_z , no calor específico de um modelo mínimo, são investigados. O calor específico foi calculado a partir da derivada segunda da energia livre de Helmholtz em relação à temperatura. Para campos magnéticos abaixo de aproximadamente 28T, os presentes resultados mostram uma característica de segunda ordem para o calor específico. No entanto, para campos magnéticos acima de 28T, o pico do calor específico torna-se muito intenso e estreito, o que indica que o sistema atingiu uma região de transição de primeira ordem. É importante ressaltar que estes resultados estão, pelo menos, qualitativamente de acordo com os resultados experimentais.

Palavras-chave: Férmion pesado. Ordem Oculta. Calor específico. Transição de fase.

ABSTRACT

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

SPECIFIC HEAT OF A THEORETICAL MODEL FOR COMPOUND

URu_2Si_2

AUTHOR: BRUNA GARCIA PEDROLO

ADVISOR: ELEONIR JOÃO CALEGARI

Local and date: Santa Maria, January 29, 2016.

The Heavy fermion URu_2Si_2 compound have attracted much interest in the last decades due to its unusual behaviors and still an unsolved problem in Condensed Matter Physics. Specific heat measurements in URu_2Si_2 compounds show that when the temperature is decreased the system undergoes a phase transition at 17,5K and another phase transition at 1,5K. The phase transition at 1,5K leads the system to a superconducting state. On the other hand, the phase transition at 17,5K leads the system to a unclear order known as Hidden Order. In the last three decades, URu_2Si_2 the system has been intensively experimental and theoretical investigated, nevertheless, the nature of the hidden order is still unclear. In presence of an external magnetic field H_z , the URu_2Si_2 system presents a interesting behavior. In particular, there are experimental results for the specific heat showing that above 25T, the specific heat anomaly becomes very sharp and narrow and loses its second-order character. Recently proposed a theory based in the underscreened Anderson Lattice Model. Such theory has been also used to study a minimal model proposed to describe the hidden order in the URu_2Si_2 system. In the present work, the effects of an external magnetic field H_z on the specific heat of a minimal model are investigated. The specific heat has been calculated from the second-derivative of the Helmholtz Free-energy with respect to the temperature. For magnetic fields below approximately 28T, the present results show a second order character for the specific heat. However, for magnetic fields above 28T, the specific heat becomes very sharp and narrow indicating that the system reached a region of first-order transition. It is also important to note that these results are, at least, in qualitatively agreement with experimental results.

Keywords: Heavy fermion. Hidden Order. Specific heat. Phase transition.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Resultado experimental da resistividade <i>versus</i> temperatura (lado esquerdo) e do calor específico <i>versus</i> temperatura (lado direito). Fonte: Adaptada de (SCHLABITZ W., 1986).	11
Figura 2.1 – Diagrama de fases experimental $T \times P$. Fonte: (VILLAUME A., 2008).	14
Figura 2.2 – Esquerda: Estrutura cristalina tetragonal do URu_2Si_2 . Direita: Alinhamento antiferromagnético dos spins do Urânio U no eixo c . Fonte: (MYDOSH; OPPENEER, 2011).	15
Figura 2.3 – Calor específico $\frac{C}{T}$ como função da temperatura para o URu_2Si_2 . Painel superior: $C/T \times T^2$. Painel inferior: $C/T \times T$. Fonte: (PALSTRA T.T.M., 1985).	16
Figura 2.4 – Resultado experimental do calor específico $\frac{C}{T}$ do URu_2Si_2 como função da temperatura para diferentes campos magnéticos, obtido por Jaime e seus colaboradores. Fonte: (JAIME M., 2002).	17
Figura 2.5 – Diagrama de fases $T \text{ versus } B$ obtido por Correa <i>et al.</i> Fonte: (CORREA V.F., 2012).	18
Figura 2.6 – Susceptibilidade magnética χ como função da temperatura para o URu_2Si_2 , com campo magnético de 2T aplicado ao longo dos eixos a e c . Fonte: (PALSTRA T.T.M., 1985).	19
Figura 3.1 – Espalhamento por dois centros espalhadores separados por uma distância $ \vec{l} $. Fonte: (PUREUR, 2001).	26
Figura 3.2 – Ilustração da aproximação de Campo Médio. Fonte: (BRUUS; FLENSBERG, 2002).	28
Figura 3.3 – Comportamento típico da transição de fase de primeira ordem para a energia livre de Gibbs, para o volume e para a entropia. Fonte: (REICHL, 1998).	32
Figura 3.4 – Comportamento típico da transição de fase de segunda ordem para a energia livre de Gibbs, para a entropia e para a capacidade calorífica a pressão constante. Fonte: (REICHL, 1998).	33
Figura 5.1 – <i>gap</i> como função da temperatura para diferentes valores de campo magnético.	53
Figura 5.2 – <i>gap</i> como função do campo magnético para diferentes valores de temperatura.	54
Figura 5.3 – Diagrama de fases $T \times H$. A linha vermelha contínua indica uma transição de segunda ordem e a linha vermelha pontilhada indica uma transição de primeira ordem.	55
Figura 5.4 – Entropia como função da temperatura para diferentes valores de campo magnético.	56
Figura 5.5 – Calor específico como função da temperatura para diferentes valores de campo magnético.	57
Figura 5.6 – Calor Específico como função do campo magnético para 3 valores de temperatura.	58
Figura 5.7 – <i>gap</i> como função do campo magnético para 3 valores de temperatura.	59
Figura 5.8 – Susceptibilidade magnética como função da temperatura para campos paralelo H_z e perpendicular H_x	60
Figura 5.9 – Susceptibilidade intrabanda $\chi^{\alpha\alpha} + \chi^{\beta\beta}$ e interbanda $\chi^{\alpha\beta}$ como função do	

potencial químico.	61
Figura 5.10 – Susceptibilidade intrabanda $\chi^{\alpha\alpha} + \chi^{\beta\beta}$ e interbanda $\chi^{\alpha\beta}$ como função do potencial químico para o "Modelo completo" com hibridização e banda de condução. Fonte: (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012) ..	62

SUMÁRIO

RESUMO.....	6
ABSTRACT.....	7
1 INTRODUÇÃO.....	11
1.1 Objetivos.....	12
2 COMPOSTO FÉRMION PESADO URu_2Si_2	13
2.1 A fase Ordem Oculta.....	13
2.2 Estrutura Cristalina.....	14
2.3 Propriedades Termodinâmicas.....	15
2.4 Teorias propostas: Modelo itinerante versus Modelo localizado.....	19
3 MODELO E MÉTODOS.....	20
3.1 Modelo Completo para a Ordem Oculta no URu_2Si_2	20
3.2 Modelo Mínimo para a Ordem Oculta no URu_2Si_2	21
3.2.1 Descrição do modelo.....	21
3.3 Aproximação de Campo Médio.....	28
3.4 Calor Específico.....	29
3.5 Susceptibilidade Magnética.....	30
3.6 Transição de Fase.....	31
3.6.1 Classificação das Transições de Fase.....	31
4 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA.....	34
4.1 As relações de dispersão das quasi-partículas.....	37
4.2 Energia Livre de Helmholtz.....	48
4.3 Nematicidade Magnética.....	49
4.3.1 Campo Paralelo ao eixo de quantização.....	49
4.3.2 Campo Perpendicular ao eixo de quantização.....	50
5 RESULTADOS.....	52
5.1 Parâmetro de Ordem.....	52
5.2 Diagrama de Fases.....	54
5.3 Entropia.....	56
5.4 Calor Específico.....	57
5.5 Susceptibilidade Magnética.....	59
5.6 Instabilidade do estado paramagnético em relação ao estado Ordem Oculta.....	60
6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS.....	63
Apêndice A - Regras de Hund.....	65
Apêndice B - Energia Livre de Helmholtz.....	65
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	68

1 INTRODUÇÃO

Em 1984, descobriu-se a chamada Ordem Oculta no URu_2Si_2 (SCHLABITZ W., 1986; MAPLE M.B., 1986; PALSTRA T.T.M., 1985). Este é um composto férmion pesado moderado com uma estrutura tetragonal e caracterizado por duas transições de fase. Este composto tem atraído muito interesse, nas últimas décadas, devido ao seu comportamento incomum e por ainda ser um problema não resolvido na Física da Matéria Condensada (MYDOSH; OPPENEER, 2011).

Ao estudar a supercondutividade no composto URu_2Si_2 , o grupo de Schlabitiz (SCHLABITZ W., 1986), acabou por descobrir uma nova fase, a qual acreditava-se ser uma fase antiferromagnética. No lado esquerdo da figura 1.1, tem-se o resultado experimental da resistividade *versus* a temperatura. Observa-se que para baixas temperaturas, inferiores à 1,5K a resistividade vai abruptamente a zero, o que caracteriza uma transição para uma fase supercondutora. Aumentando a temperatura, em torno de 17,5K, observa-se uma anomalia na resistividade, o que indica uma transição de fase. Essas transições de fases também podem ser evidenciadas no resultado experimental do calor específico *versus* a temperatura, mostrado no lado direito da figura 1.1. Um pico no calor específico indica uma transição de fase. Para baixas temperaturas, inferiores a 1,5K, observa-se um pico no calor específico, indicando uma transição para uma fase supercondutora. Aumentando a temperatura, em torno de 17,5K, observa-se um segundo pico no calor específico, indicando uma segunda transição de fase. Hoje, é sabido, que essa região não é uma fase antiferromagnética, como acreditava-se inicialmente, e, sim uma fase não conhecida. A fase associada a essa transição é conhecida como Ordem Oculta ("Hidden Order") do URu_2Si_2 e tem sido muito investigada desde a sua descoberta, há 30 anos (MYDOSH; OPPENEER, 2011).

Mesmo sendo desconhecida, é sabido que a Ordem Oculta resulta de comportamentos complexos coletivos em sistemas de elétrons f (caso do Urânio) (MYDOSH; OPPENEER, 2011), com banda fortemente interagente e estreita. Com isso, o entendimento desse problema pode revelar mecanismos totalmente diferentes do magnetismo convencional (exemplo: ferromagnetismo e antiferromagnetismo).

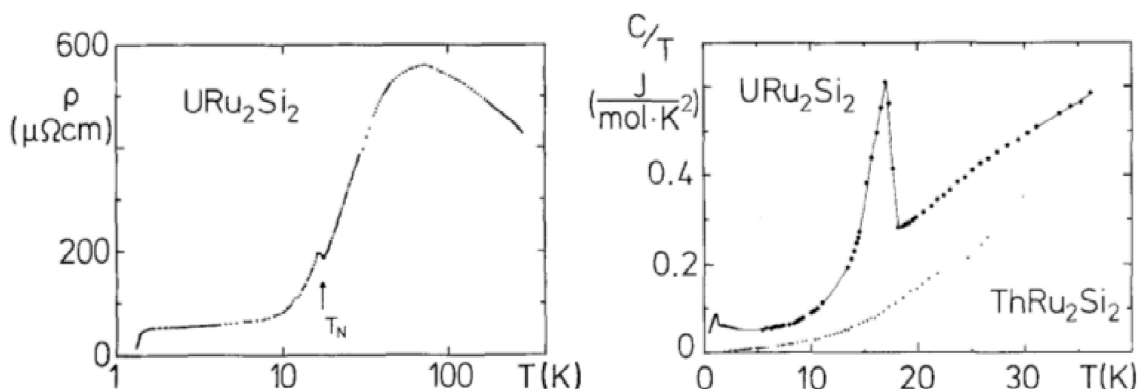


Figura 1.1: Resultado experimental da resistividade *versus* temperatura (lado esquerdo) e do calor específico *versus* temperatura (lado direito). Fonte: Adaptada de (SCHLABITZ W., 1986).

Além de indicar transições de fases, o calor específico do URu_2Si_2 pode ajudar a obter informações tanto da fase supercondutora, quanto da fase Ordem Oculta. Como exemplo, podemos citar o comportamento do calor específico quando o sistema está na

presença de um campo magnético externo. Existem resultados experimentais mostrando que o calor específico altera seu comportamento para campos magnéticos acima de um certo valor (CORREA V.F., 2012; JAIME M., 2002). Outra quantidade que apresenta comportamento interessante é a susceptibilidade magnética. Para um campo aplicado paralelamente ao eixo a , a susceptibilidade é muito pouco dependente da temperatura. Por outro lado, para um campo aplicado paralelamente ao eixo c , a susceptibilidade é fortemente dependente da temperatura (PALSTRA T.T.M., 1985; OKASAKI R., 2011; OKASAKI, 2013).

1.1 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é fazer uma investigação teórica do comportamento do calor específico e da susceptibilidade magnética de um modelo proposto por Riseborough, Magalhães e Calegari (RISEBOROUGH; MAGALHAES; CALEGARI, 2014). Esse modelo foi proposto como modelo mínimo para descrever o composto URu_2Si_2 . Em particular, serão investigados os efeitos do campo magnético no calor específico e na susceptibilidade magnética do modelo mínimo para o URu_2Si_2 .

Este trabalho está organizado conforme descrito a seguir: no capítulo 2, discute-se um pouco da natureza da fase Ordem Oculta e, em especial, sobre o composto férmion pesado URu_2Si_2 . No capítulo 3, descreve-se o modelo e os métodos utilizados nesse trabalho. O capítulo 4 apresenta a formulação do problema e os resultados analíticos. Os resultados numéricos são apresentados e discutidos no capítulo 5. Por fim, o capítulo 6 apresenta as conclusões do trabalho.

2 COMPOSTO FÉRMION PESADO URu_2Si_2

2.1 A fase Ordem Oculta

Em 1984, descobriu-se a chamada Ordem Oculta no URu_2Si_2 , ao se investigar a supercondutividade em um composto férmion pesado à base de Urânio (MYDOSH; OPPENEER, 2014). Esta descoberta, feita por Schlabitz e seus colaboradores, foi apresentada em uma conferência, na forma de pôster (não publicado), onde foi mostrado o aparecimento de duas transições: uma supercondutora e a outra magnética (MYDOSH; OPPENEER, 2011). As primeiras publicações sobre a Ordem Oculta foram feitas em 1985 (PALSTRA T.T.M., 1985) e 1986 (MAPLE M.B., 1986); nesse mesmo ano, Schlabitz e seus colaboradores também publicaram seu primeiro artigo a respeito da Ordem Oculta (SCHLABITZ W., 1986). Os três grupos de autores, citados acima, concordavam com o surgimento de uma região supercondutora abaixo de 1,0K, mas houve diferentes interpretações para a transição magnética em 17,5K. O grupo de Palstra designou um tipo fraco de antiferromagnetismo itinerante; o grupo de Maple, uma transição estática do tipo "charge – density – wave" (CDW) ou "spin – density – wave" (SDW) e o grupo de Schlabitz atribuiu a transição ao momento antiferromagnético local do Urânio. Após 30 anos, sabe-se que as três interpretações são errôneas, devido à transição em 17,5K não estar associada a uma fase magnética convencional, ou seja, não está associada a uma magnetização efetiva (BROHOLM C.; MYDOSH, 2007; MATSUDA K.; AMITSUKA, 2007) e também não há modulação de rede indicando uma formação CDW ou SDW (MYDOSH; OPPENEER, 2011). Sabe-se que a origem da transição é desconhecida sem um parâmetro de ordem definido, pois o parâmetro de ordem está associado a uma certa simetria do sistema. Por isso, o termo Ordem Oculta ("Hidden Order") foi designado para essa nova fase desconhecida que surge abaixo de 17,5K (MYDOSH; OPPENEER, 2011).

Sob pressão, tanto a fase supercondutora, quanto a fase da Ordem Oculta são destruídas. Na figura 2.1, temos um digrama de fases experimental para o composto URu_2Si_2 . O diagrama mostra T versus P , ou seja, temperatura por pressão. Ao analisarmos o eixo da temperatura, na ausência de pressão, observa-se que, para valores abaixo de 1,0K, há uma região supercondutora e, para valores abaixo de aproximadamente 17,5K, há a região conhecida por Ordem Oculta; acima desse valor, 17,5K, há uma região paramagnética. Analisando o eixo da pressão, podemos ver que, com o aumento da pressão, o sistema evolui para um estado antiferromagnético. Em temperaturas mais altas, a Ordem Oculta sobrevive até pressões maiores.

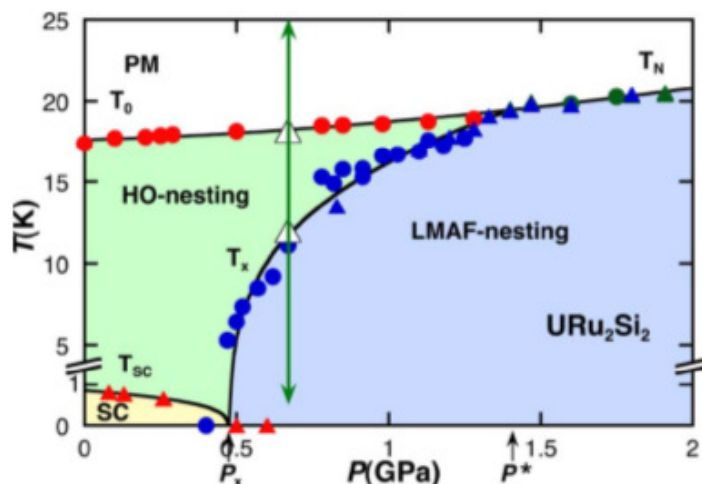


Figura 2.1: Diagrama de fases experimental $T \times P$. Fonte: (VILLAUME A., 2008).

2.2 Estrutura Cristalina

O URu_2Si_2 possui estrutura cristalina tetragonal que corresponde à do cristal $ThCr_2Si_2$ conforme observado por Palstra *et al.* ao preparar e estudar amostras do policristal URu_2Si_2 (PALSTRA T.T.M., 1985). O lado esquerdo da figura 2.2 mostra a estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado do URu_2Si_2 , com grupo espacial $I4/mmm$ e constantes de rede $a = 4,279(1)\text{\AA}$ e $c = 9,5918(7)\text{\AA}$ a 294K. Não há distorções ou alterações na simetria entre 300K e 4,2K (PALSTRA T.T.M., 1985).

O lado direito da figura 2.2 mostra o alinhamento antiferromagnético dos spins do Urânio. Medidas experimentais confirmam a existência de momentos magnéticos muito pequenos ($\sim 0,03\mu_B/U$) (MYDOSH; OPPENEER, 2011). Esses momentos magnéticos não são capazes de assegurar a estabilização de uma verdadeira ordem magnética. Esses pequenos momentos também não explicam a diminuição da entropia nesta transição de fase (OKASAKI, 2013). Por outro lado, em $T \simeq 5K$, medidas de pressão mostram a permanência da Ordem Oculta até a pressão $P = P^* \simeq 0,5GPa$ (ver figura 2.1), mas, para pressões $P > P^* \simeq 0,5GPa$, ocorre uma transição para uma fase antiferromagnética com momentos magnéticos bem desenvolvidos ($\sim 0,4\mu_B/U$) (MYDOSH; OPPENEER, 2011; NIKLOWITZ P.G., 2010).

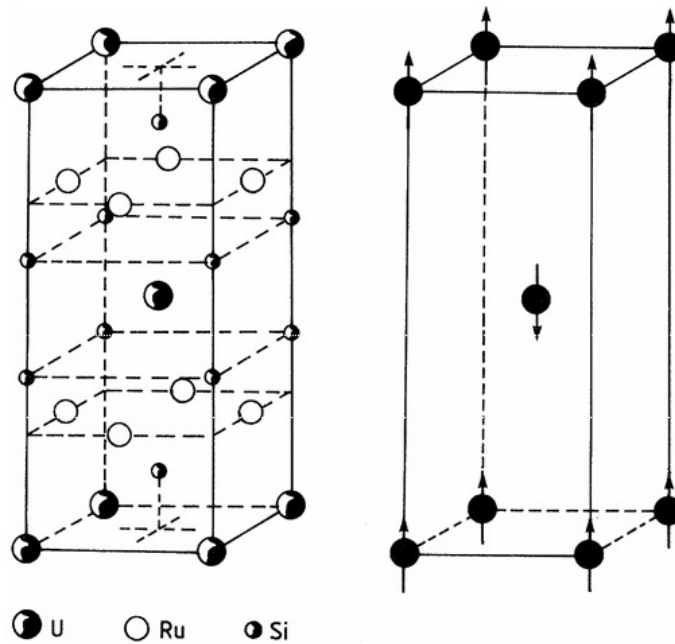


Figura 2.2: Esquerda: Estrutura cristalina tetragonal do URu_2Si_2 . Direita: Alinhamento antiferromagnético dos spins do Urânio U no eixo c . Fonte: (MYDOSHI; OPPENEER, 2011).

2.3 Propriedades Termodinâmicas

A figura 2.3 mostra o calor específico dividido pela temperatura $\frac{C}{T}$ para o URu_2Si_2 . O painel superior mostra $\frac{C}{T}$ versus a temperatura ao quadrado, enquanto o painel inferior mostra $\frac{C}{T}$ versus a temperatura.

Os dados experimentais para o calor específico são bem descritos pela expressão:

$$C(T) = \gamma T + \beta T^3 + a e^{-\left(\frac{\Delta}{T}\right)}, \quad (2.1)$$

onde a é uma constante e Δ é o *gap* de energia do estado da Ordem Oculta (OKASAKI, 2013). Quando $\Delta = 0$, ou seja, acima de $T^* \simeq 17,5K$, $C(T)$ é bem representado pela expressão:

$$C(T) = \gamma T + \beta T^3, \quad (2.2)$$

logo,

$$\frac{C}{T} = \gamma + \beta T^2, \quad (2.3)$$

e, $\frac{C}{T} \times T^2$ tem um comportamento linear conforme se pode observar na linha sólida no

painel superior da figura 2.3.

No painel inferior, observa-se um pico no calor específico em torno de $T_C = 1,5K$. Esse pico indica a transição de fase supercondutora. Para $T < T_C \simeq 1,5K$, o sistema encontra-se em uma fase supercondutora. Quando a temperatura aumenta, em $17,5K$ aparece um segundo pico no calor específico. Esse segundo pico indica uma transição de fase para uma fase não magnética. A fase na região de $T_C < T < T^* \simeq 17,5K$ é a fase conhecida como fase da Ordem Oculta do URu_2Si_2 . A linha sólida mostra o comportamento quadrático de $\frac{C}{T}$ acima de T^* .

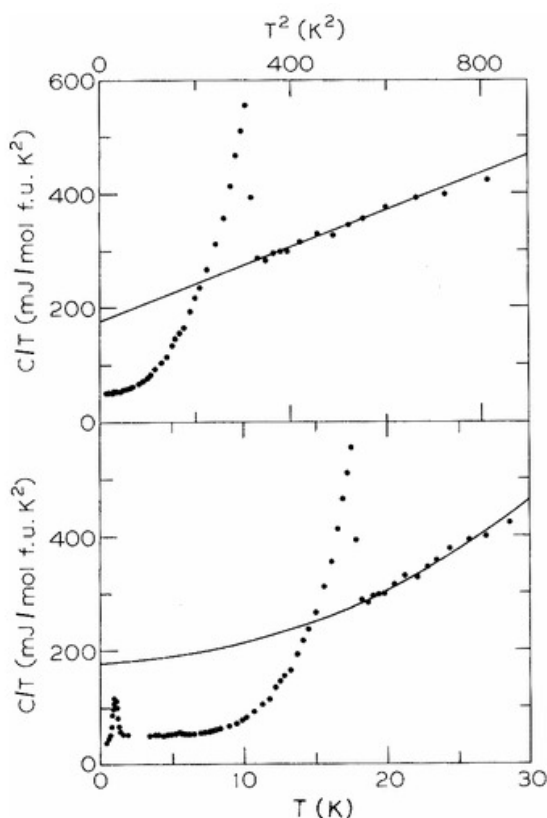


Figura 2.3: Calor específico $\frac{C}{T}$ como função da temperatura para o URu_2Si_2 . Painel superior: $C/T \times T^2$. Painel inferior: $C/T \times T$. Fonte: (PALSTRA T.T.M., 1985).

Um comportamento interessante do calor específico é observado quando o sistema está na presença de um campo magnético externo. A anomalia do calor específico, associada à fase Ordem Oculta no URu_2Si_2 , é deslocada para baixas temperaturas pelo campo magnético externo, tornando-se mais nítida e mais simétrica em campos mais altos (JAIME M., 2002). Na figura 2.4, temos o resultado experimental de $\frac{C}{T}$ versus a temperatura para vários campos magnéticos. Esse resultado foi obtido por Jaime e seus colaboradores (JAIME M., 2002). No painel superior, observa-se que, para campo magnético $H = 0$, quando a temperatura é aumentada, $\frac{C}{T}$ cresce lentamente e tem seu pico mais aberto, o que é característico de uma transição de segunda ordem. Com $H = 0$, observa-

se que a transição associada à fase Ordem Oculta do URu_2Si_2 ocorre na temperatura de aproximadamente 17,5K. Aumentando o campo magnético para $H = 11,5T$, observa-se que $\frac{C}{T}$ mantém seu crescimento lento e pico mais aberto, pois a transição continua sendo contínua, no entanto a temperatura, na qual a transição ocorre, diminui. Aumentando ainda mais o campo magnético, como no casos de $H = 20T$, $H = 22T$, $H = 26T$ e $H = 27T$, o comportamento de $\frac{C}{T}$ é o mesmo verificado para os campos de 0 e 11,5T. No entanto, para $H = 28,8T$, observa-se que, próximo da temperatura de transição, $\frac{C}{T}$ apresenta um comportamento diferente daquele apresentado para campos menores, pois o pico em $\frac{C}{T}$ fica mais estreito e simétrico, indicando uma transição de primeira ordem. Essa transição ocorre em torno de 9,8K. O comportamento típico de transição de primeira ordem apresentado por $\frac{C}{T}$ é mais evidente para $H = 32T$ e $H = 33,5T$.

No painel inferior da figura 2.4, observa-se que, para campo magnético $H = 36T$, quando a temperatura é aumentada, há uma supressão completa do pico em $\frac{C}{T}$, ou seja, não há anomalia associada à fase Ordem Oculta. No entanto, para $H = 38T$, observa-se um comportamento diferente, pois há novamente o surgimento de uma anomalia no pico do $\frac{C}{T}$. Esta anomalia é suprimida com um campo magnético de 40T e sua origem também é desconhecida. Nota-se que essa região (em $H \simeq 40T$) apresenta características de uma transição de primeira ordem.

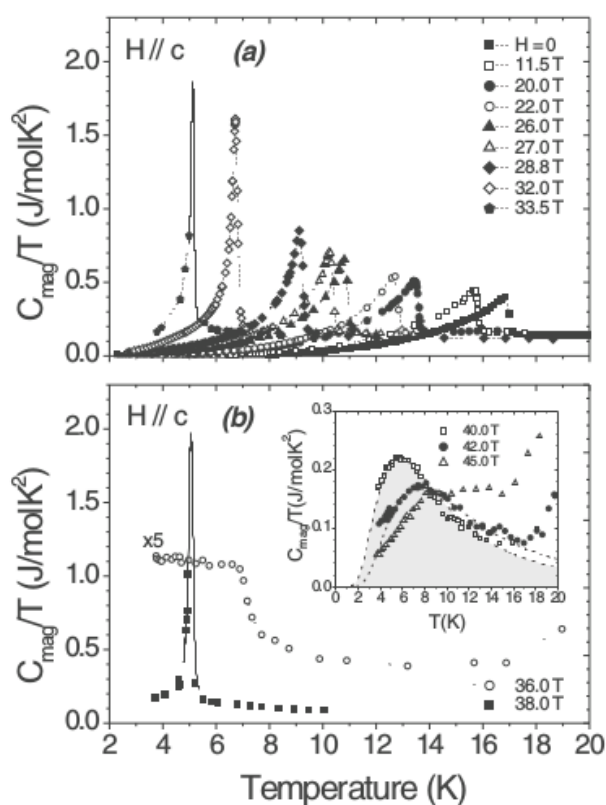


Figura 2.4: Resultado experimental do calor específico $\frac{C}{T}$ do URu_2Si_2 como função da temperatura para diferentes campos magnéticos, obtido por Jaime e seus colaboradores. Fonte: (JAIME M., 2002).

Na figura 2.5, é mostrado o resultado experimental obtido por Correa *et al.* (CORREA V.F., 2012) para um diagrama de fases $T \times B$, ou seja, temperatura versus campo magnético. O diagrama de fases mostra a região da fase Ordem Oculta ("Hidden Order") para campos na faixa de 20 a 45T. Observa-se que, conforme o campo magnético aumenta, a temperatura de transição diminui até chegar a zero em $B \sim 35T$. Para campos mais altos, entre 36 e 38T, aparece uma região que corresponde a uma fase que também ainda não foi identificada. As linhas sólidas na região de baixas temperaturas e altos campos indicam a transição de primeira ordem. O resultado apresentado no diagrama de fases, obtido por Correa *et al.*, está de pleno acordo com o resultado experimental para o calor específico obtido por Jaime e seus colabores (JAIME M., 2002).

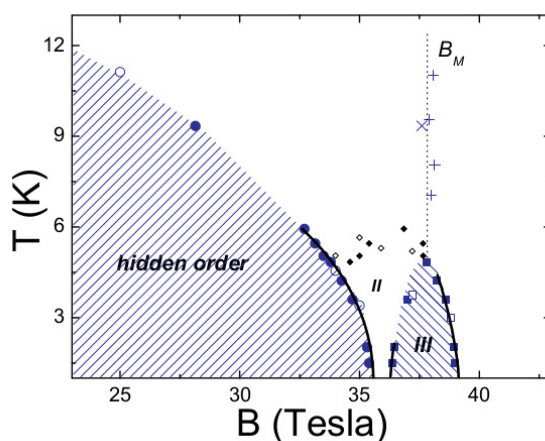


Figura 2.5: Diagrama de fases T versus B obtido por Correa *et al.* Fonte: (CORREA V.F., 2012).

A figura 2.6 mostra a dependência da susceptibilidade magnética em relação à temperatura, para campo magnético de 2T aplicado ao longo dos eixos a e c . A susceptibilidade magnética mostra um comportamento anisotrópico. Em contraste com a susceptibilidade magnética independente da temperatura para o eixo a , a susceptibilidade magnética para o eixo c exibe um máximo a cerca de 50K. Observa-se que o eixo c é fortemente magnético em comparação com o eixo a .

Nota-se o surgimento de uma anisotropia da susceptibilidade magnética abaixo de $T^* = 17,5K$, sendo quebrada a simetria rotacional da estrutura cristalina do URu_2Si_2 . Okasaki e seus colaboradores sugerem que a fase Ordem Oculta é uma fase magnética com quebra de simetria rotacional (OKASAKI R., 2011).

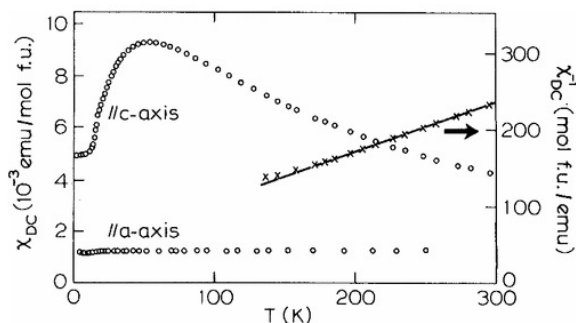


Figura 2.6: Susceptibilidade magnética χ como função da temperatura para o URu_2Si_2 , com campo magnético de 2T aplicado ao longo dos eixos a e c . Fonte: (PALSTRA T.T.M., 1985).

2.4 Teorias propostas: Modelo itinerante versus Modelo localizado

Várias propostas teóricas têm sido feitas para explicar a natureza da Ordem Oculta no URu_2Si_2 , desde a sua descoberta. Essas teorias podem ser classificadas em dois grandes grupos de acordo com o tipo de modelo utilizado: itinerante ou localizado. Devido ao composto URu_2Si_2 ser um sistema férmion pesado, os elétrons $5f$ apresentam uma natureza dupla, ora são localizados, ora itinerantes.

Podem-se citar duas teorias apresentadas recentemente. A primeira se enquadra na categoria dos modelos localizados. Nesse caso, a Ordem Oculta seria gerada por modulações em três dimensões de um estado líquido de spin (PÉPIN C.; FERRAZ, 2011). A origem desse líquido de spin poderia ser explicada como produto de efeitos de frustração geométrica originados da interação entre os momentos magnéticos localizados bem desenvolvidos em pressão finita.

A outra teoria, que foi apresentada em uma publicação recente, considera um modelo com elétrons itinerantes para explicar a Ordem Oculta no URu_2Si_2 (RISEBOROUGH; COQBILIN; MAGALHÃES, 2012). Nesse caso, o modelo utilizado é a rede de Anderson "Underscreened" com duas bandas itinerantes f hibridizadas com uma banda de condução d . Uma versão desse modelo também foi utilizada recentemente para descrever a competição entre ferromagnetismo e efeito Kondo, observada em compostos de Urânio e Netúnio (PERKINS N.B.; IGLESIAS, 2007; C.THOMAS A.S. DA ROSA SIMÕES; COQBILIN, 2011). Entretanto, diferentemente dos casos estudados pelo grupo de Perkins e pelo grupo de Thomas, a transição encontrada em $T^* = 17,5K$ no URu_2Si_2 não envolve efeito Kondo. Isso permite que Riseborough e seus colaboradores possam tratar o problema numa aproximação Hartree-Fock (RISEBOROUGH; COQBILIN; MAGALHÃES, 2012).

3 MODELO E MÉTODOS

3.1 Modelo Completo para a Ordem Oculta no URu_2Si_2

Em 2012, Riseborough, Coqblin e Magalhães propuseram uma teoria baseada no Modelo de Anderson “underscreened”, para investigar a ordem oculta no URu_2Si_2 (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012). Recentemente essa teoria foi utilizada por Riseborough, Magalhães e Calegari (RISEBOROUGH; MAGALHÃES; CALEGARI, 2014) para estudar um modelo mínimo proposto para descrever a ordem oculta no URu_2Si_2 . A originalidade na abordagem proposta na referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012) é a identificação do parâmetro de ordem para caracterizar o estado que aparece em $T < T^*$ no URu_2Si_2 .

O modelo proposto em 2012 para estudar a Ordem Oculta no URu_2Si_2 é dado por (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012):

$$\hat{H} = \hat{H}_f + \hat{H}_d + \hat{H}_{fd}, \quad (3.1)$$

que consiste da soma do Hamiltoniano que descreve os elétrons localizados f , \hat{H}_f , do Hamiltoniano que descreve a banda de condução d , \hat{H}_d , e do Hamiltoniano que descreve a hibridização entre os elétrons localizados e os de condução $f - d$, \hat{H}_{fd} .

O Hamiltoniano que descreve os elétrons localizados f é dado por:

$$\begin{aligned} \hat{H}_f = \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} E_f^\chi(\vec{k}) n_{f, \vec{k}, \sigma}^\chi + \left(\frac{U}{2N} \right) \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma', \chi, \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}, \sigma'}^\chi f_{\vec{k}', \sigma}^\chi \\ + \left(\frac{J}{2N} \right) \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma', \chi, \chi'} f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \chi} f_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^{\dagger, \chi'} f_{\vec{k}', \sigma'}^\chi f_{\vec{k}, \sigma}^\chi, \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $\chi = \alpha, \beta$ e $E_f^\chi(\vec{k})$ representa as bandas $5f$ do composto URu_2Si_2 . A interação coulombiana entre os elétrons $5f$ está descrita no segundo termo de \hat{H}_f . O terceiro termo é o termo de troca interorbital.

O Hamiltoniano que descreve a banda de condução d é dado por:

$$\hat{H}_d = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^\dagger d_{\vec{k}, \sigma}, \quad (3.3)$$

onde $\epsilon(\vec{k})$ descreve a relação de dispersão dos elétrons de condução.

E, por fim, o Hamiltoniano que descreve a hibridização entre os elétrons localizados e os de condução $f - d$ é dado por:

$$\hat{H}_{fd} = \sum_{\vec{k}, \sigma, \chi} \left(V_{\chi}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \chi} d_{\vec{k}, \sigma} + V_{\chi}^*(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} f_{\vec{k}, \sigma}^{\chi} \right). \quad (3.4)$$

A teoria proposta por Riseborough, Coqblin e Magalhães (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012) introduz um parâmetro de ordem para caracterizar o estado da Ordem Oculta. Esse parâmetro de ordem é definido como:

$$z_{\vec{Q}, \sigma}^* = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k} + \vec{Q}}^{\beta} \rangle, \quad (3.5)$$

e indica que o novo estado é dado pelo "nesting" da superfície de Fermi entre as bandas $5f$, e, quando comparado com as soluções paramagnética e antiferromagnética, esse novo estado é estável.

3.2 Modelo Mínimo para a Ordem Oculta no URu_2Si_2

3.2.1 Descrição do modelo

O modelo mínimo é um modelo mais simples do que o modelo completo estudado na referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012), discutido na seção 3.1, basicamente porque não considera a banda d dos elétrons de condução, e, portanto não há hibridização entre elétrons d e f . O hamiltoniano do modelo mínimo é dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{HR}, \quad (3.6)$$

que consiste da soma do Hamiltoniano não interagente \hat{H}_0 e do Hamiltoniano de interação \hat{H}_{HR} .

O Hamiltoniano não interagente \hat{H}_0 é dado por:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\beta} \right). \quad (3.7)$$

Esse modelo considera duas bandas f estreitas. Uma das bandas será denominada de banda α e a outra de banda β .

Com base nas regras de Hund (ver Apêndice A), o Hamiltoniano de interação \hat{H}_{HR} é dado por:

$$\hat{H}_{HR} = -J \sum_i \vec{S}_{\alpha, i} \cdot \vec{S}_{\beta, i}, \quad (3.8)$$

onde J é a interação de troca, sendo $J > 0$, e $\vec{S}_{\alpha, i}$ o vetor spin dos elétrons no sítio i

contidos no orbital α , e analogamente $\vec{S}_{\beta,i}$ é o vetor spin dos elétrons no sítio i contidos no orbital β .

Assumindo que o sistema escolhe espontaneamente uma direção para o eixo de quantização, definido pelo eixo z , podemos escrever o produto escalar $\vec{S}_{\alpha,i} \cdot \vec{S}_{\beta,i}$ em termos dos operadores S^+ , S^- e S^z ,

$$\vec{S}_{\alpha,i} \cdot \vec{S}_{\beta,i} = \frac{1}{2} S_{\alpha,i}^+ S_{\beta,i}^- - \frac{1}{2} S_{\alpha,i}^- S_{\beta,i}^+ + S_{\alpha,i}^z S_{\beta,i}^z. \quad (3.9)$$

Com o resultado (3.4) no Hamiltoniano 3.3, tem-se:

$$\hat{H}_{HR} = -J \sum_i \left(S_{\alpha,i}^z S_{\beta,i}^z + \frac{1}{2} (S_{\alpha,i}^+ S_{\beta,i}^- + S_{\alpha,i}^- S_{\beta,i}^+) \right). \quad (3.10)$$

Os operadores S^+ , S^- e S^z podem ser escritos em termos dos operadores de criação e destruição, ou seja:

$$S_{\chi,i}^+ = f_{i,\uparrow}^{\dagger,\chi} f_{i,\downarrow}^{\chi}, \quad (3.11)$$

$$S_{\chi,i}^- = f_{i,\downarrow}^{\dagger,\chi} f_{i,\uparrow}^{\chi}, \quad (3.12)$$

e,

$$S_{\chi,i}^z = \frac{1}{2} (n_{i,\uparrow}^{\chi} - n_{i,\downarrow}^{\chi}) = \frac{1}{2} (f_{i,\uparrow}^{\dagger,\chi} f_{i,\uparrow}^{\chi} - f_{i,\downarrow}^{\dagger,\chi} f_{i,\downarrow}^{\chi}). \quad (3.13)$$

Onde $n_{i,\sigma}^{\chi} = f_{i,\sigma}^{\dagger,\chi} f_{i,\sigma}^{\chi}$ é denominado operador número de partículas e sua função é contar o número de partículas com spin $\sigma = \uparrow\downarrow$ no orbital χ do sítio i .

É preciso também lembrar que $f_{i,\sigma}^{\dagger,\chi}$ e $f_{i,\sigma}^{\chi}$ são os operadores de criação e destruição, respectivamente. O operador de criação $f_{i,\sigma}^{\dagger,\chi}$ cria um elétron no orbital χ do sítio i com spin σ , enquanto o operador $f_{i,\sigma}^{\chi}$ destrói um elétron no orbital χ do sítio i com spin σ .

Aplicando-se as definições acima (equações 3.11 a 3.13) na equação (3.10), obtém-se o hamiltoniano de interação em termos dos operadores de criação e destruição,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{HR} = -J \sum_i & \left(\frac{1}{2} (f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^{\alpha} - f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\downarrow}^{\alpha}) \frac{1}{2} (f_{i,\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\uparrow}^{\beta} - f_{i,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\downarrow}^{\beta}) \right) \\ & - J \sum_i \left(\frac{1}{2} (f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\downarrow}^{\alpha} f_{i,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\uparrow}^{\beta} + f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^{\alpha} f_{i,\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\downarrow}^{\beta}) \right), \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde os dois últimos termos constituem o Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{x-y} = -J \sum_i \left(f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\downarrow}^{\alpha} f_{i,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\uparrow}^{\beta} + f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^{\alpha} f_{i,\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\downarrow}^{\beta} \right). \quad (3.15)$$

Por serem operadores fermiônicos, f^{χ} obedecem à estatística de Fermi-Dirac e,

portanto satisfazem as seguintes relações de anticomutação:

$$\{f_{i,\sigma}^\alpha, f_{j,\sigma'}^{\dagger,\beta}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\alpha\beta} \quad (3.16)$$

e

$$\{f_{i,\sigma}^\alpha, f_{j,\sigma'}^\beta\} = 0. \quad (3.17)$$

Utilizando as relações de anticomutação acima (equações 3.16 e 3.17), pode-se reescrever a equação (3.15) como,

$$\hat{H}_{x-y} = -J \sum_i \left(f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} (\delta_{ii}\delta_{\downarrow\downarrow}\delta_{\alpha\beta} - f_{i,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\downarrow}^\alpha) f_{i,\uparrow}^\beta + f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} (\delta_{ii}\delta_{\uparrow\uparrow}\delta_{\alpha\beta} - f_{i,\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\uparrow}^\alpha) f_{i,\downarrow}^\beta \right) \quad (3.18)$$

ou

$$\hat{H}_{x-y} = -J \sum_i \left(f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\uparrow}^\beta f_{i,\downarrow}^\alpha + f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\downarrow}^\beta f_{i,\uparrow}^\alpha \right), \quad (3.19)$$

ou ainda

$$\hat{H}_{x-y} = -J \sum_i \left(f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} (\delta_{ii}\delta_{\downarrow\uparrow}\delta_{\beta\beta} - f_{i,\uparrow}^\beta f_{i,\downarrow}^{\dagger,\beta}) f_{i,\downarrow}^\alpha + f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} (\delta_{ii}\delta_{\uparrow\downarrow}\delta_{\beta\beta} - f_{i,\downarrow}^\beta f_{i,\uparrow}^{\dagger,\beta}) f_{i,\uparrow}^\alpha \right). \quad (3.20)$$

Após aplicadas as relações de anticomutação necessárias, o modelo \hat{H}_{x-y} torna-se:

$$\hat{H}_{x-y} = J \sum_i \left(f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^\beta f_{i,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\downarrow}^\alpha + f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\downarrow}^\beta f_{i,\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{i,\uparrow}^\alpha \right). \quad (3.21)$$

O Hamiltoniano de interação \hat{H}_{x-y} relaciona o salto de elétrons entre os orbitais α e β , ou seja, um elétron do orbital α com spin $-\sigma$ salta para o orbital β e um elétron do orbital β com spin σ salta para o orbital α no mesmo sítio i da rede.

O Hamiltoniano \hat{H}_{x-y} está representado no espaço real, portanto o próximo passo consiste em reescrever o Hamiltoniano H_{x-y} no espaço recíproco.

Os operadores de Wannier de criação e destruição dos elétrons f , no sítio i , podem ser expressados em termos dos operadores de Bloch dos elétrons f via:

$$f_{i,\sigma}^\chi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{(i\vec{k}\cdot\vec{R}_i)} f_{\vec{k},\sigma}^\chi, \quad (3.22)$$

onde N é o número de sítios da rede.

A interação de troca, J , ocorre entre partículas em posições diferentes. Para expressar essa dependência de uma forma mais clara, vamos reescrever o Hamiltoniano

\hat{H}_{x-y} em termos das funções $\psi_\chi(r)$.

De um modo geral, dado um hamiltoniano H , pode-se realizar uma operação de segunda quantização (OLIVEIRA; JESUS, 2011):

$$\psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) = \sum_i \phi_{i,\alpha}^*(\vec{r}) f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha}, \quad (3.23)$$

$$\psi_\beta(\vec{r}) = \sum_i \phi_{i,\beta}(\vec{r}) f_{i,\uparrow}^\beta, \quad (3.24)$$

$$\psi_\beta^\dagger(\vec{r}') = \sum_{i'} \phi_{i',\beta}^*(\vec{r}') f_{i',\downarrow}^{\dagger,\beta}, \quad (3.25)$$

$$\psi_\alpha(\vec{r}') = \sum_{i'} \phi_{i',\alpha}(\vec{r}') f_{i',\downarrow}^\alpha, \quad (3.26)$$

onde $\phi_{i\chi}$ são autofunções de \hat{H}'_{x-y} , sendo \hat{H}'_{x-y} o hamiltoniano de interação em primeira quantização.

Em termos de ψ_χ , \hat{H}'_{x-y} é dado por:

$$\hat{H}'_{x-y} = \int d^3r \int d^3r' \psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) \psi_\beta(\vec{r}) J(\vec{r} - \vec{r}') \psi_\beta^\dagger(\vec{r}') \psi_\alpha(\vec{r}'). \quad (3.27)$$

Substituindo ψ_χ (equações 3.23 à 3.26) no Hamiltoniano acima, temos:

$$\hat{H}'_{x-y} = \int d^3r \int d^3r' \sum_i \sum_{i'} f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^\beta f_{i',\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i',\downarrow}^\alpha \phi_{i,\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{i,\beta}(\vec{r}) J(\vec{r} - \vec{r}') \phi_{i',\beta}^*(\vec{r}') \phi_{i',\alpha}(\vec{r}') \quad (3.28)$$

ou

$$\hat{H}'_{x-y} = \sum_i \sum_{i'} f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^\beta f_{i',\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i',\downarrow}^\alpha \int d^3r \int d^3r' \phi_{i,\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{i,\beta}(\vec{r}) J(\vec{r} - \vec{r}') \phi_{i',\beta}^*(\vec{r}') \phi_{i',\alpha}(\vec{r}'). \quad (3.29)$$

Definindo

$$\int d^3r \int d^3r' \phi_{i,\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{i,\beta}(\vec{r}) J(\vec{r} - \vec{r}') \phi_{i',\beta}^*(\vec{r}') \phi_{i',\alpha}(\vec{r}') = J_{i,i'}^{\alpha,\beta}, \quad (3.30)$$

e, usando ambos os termos de \hat{H}'_{x-y} :

$$\hat{H}_{x-y} = \sum_i \sum_{i'} J_{i,i'}^{\alpha,\beta} \left(f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\uparrow}^\beta f_{i',\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{i',\downarrow}^\alpha + f_{i,\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{i,\downarrow}^\beta f_{i',\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{i',\uparrow}^\alpha \right). \quad (3.31)$$

Uma consequência importante da periodicidade cristalina é a possibilidade de que qualquer função que obedeça à simetria de rede seja expandida em uma série de Fourier cujos termos contêm apenas vetores do espaço recíproco (PUREUR, 2001). Assim:

$$J(\vec{r}^n) = \sum_{\vec{q}} J_{\vec{q}} e^{(i\vec{q} \cdot \vec{r}^n)}, \quad (3.32)$$

onde os coeficientes de Fourier são definidos no volume da cela unitária, ou seja,

$$J_{\vec{q}} = \frac{1}{V_{cela}} \int_{cela} J(\vec{r}^n) e^{(i\vec{q} \cdot \vec{r}^n)} d\vec{r}^n. \quad (3.33)$$

A relação 3.32 ilustra o interesse do conceito de rede recíproca, pois em uma expansão de Fourier de uma dada propriedade física de um cristal, somente são relevantes os termos correspondentes a vetores da rede recíproca (PUREUR, 2001).

Identidade de Laue

A Formulação de Laue descreve o problema de difração por um cristal. Na difração de cristais, os centros espalhadores encontram-se em pontos de uma rede de Bravais, reemitindo a radiação recebida em todas as direções. Os feixes difratados serão observados somente nas direções em que a radiação reemitida de todos os pontos da rede interfere construtivamente (PUREUR, 2001).

Na figura 3.1, observam-se dois centros espalhadores, separados por um vetor de rede de Bravais \vec{l} , onde é percebido que o vetor \vec{k} está associado à radiação incidida e o vetor \vec{k}' à radiação refletida. A condição de difração ocorre quando a variação do vetor de onda da radiação incidente for igual a um vetor da rede recíproca, ou seja,

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}, \quad (3.34)$$

onde \vec{G} é o vetor da rede recíproca.

É importante ressaltar que os vetores \vec{q} formam uma rede recíproca se, e somente se, os vetores \vec{l} descreverem uma rede de Bravais. A simetria translacional impõe que uma função que descreve uma determinada propriedade física de um cristal seja periódica na rede, ou seja (PUREUR, 2001):

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{l}), \quad (3.35)$$

onde \vec{l} é um vetor da rede cristalina.

Usando a periodicidade da rede cristalina, pode-se escrever:

$$J_{i,i'}^{\alpha\beta}(\vec{r}^n) = \sum_{\vec{q}} J_q \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}^n), \quad (3.36)$$

onde $\vec{r}^n = \vec{r} - \vec{r}'$ e \vec{q} é um vetor da rede recíproca.

Em termos dos operadores de Bloch:

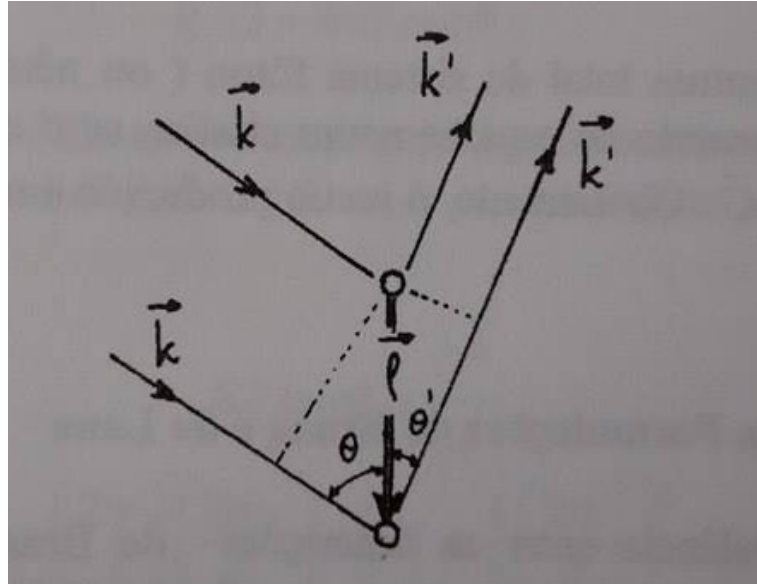


Figura 3.1: Espalhamento por dois centros espalhadores separados por uma distância $|\vec{l}|$. Fonte: (PUREUR, 2001).

$$f_{i,\uparrow}^{\dagger,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1} e^{-(i\vec{k}_1 \cdot \vec{r})} f_{\vec{k}_1,\uparrow}^{\dagger,\alpha}, \quad (3.37)$$

$$f_{i,\uparrow}^{\beta} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_2} e^{(i\vec{k}_2 \cdot \vec{r})} f_{\vec{k}_2,\uparrow}^{\beta}, \quad (3.38)$$

$$f_{i',\downarrow}^{\dagger,\beta} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_3} e^{-(i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}') } f_{\vec{k}_3,\downarrow}^{\dagger,\beta}, \quad (3.39)$$

$$f_{i',\downarrow}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_4} e^{(i\vec{k}_4 \cdot \vec{r}') } f_{\vec{k}_4,\downarrow}^{\alpha}. \quad (3.40)$$

Combinando os operadores de Bloch acima e as equações (3.31) e (3.36), temos:

$$\begin{aligned} \hat{H}'_{x-y} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} J_q e^{(i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}'))} e^{-(i\vec{k}_1 \cdot \vec{r})} f_{\vec{k}_1,\uparrow}^{\dagger,\alpha} e^{(i\vec{k}_2 \cdot \vec{r})} f_{\vec{k}_2,\uparrow}^{\beta} \\ \times \sum_{\vec{k}_3, \vec{k}_4} e^{-(i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}') } f_{\vec{k}_3,\downarrow}^{\dagger,\beta} e^{(i\vec{k}_4 \cdot \vec{r}') } f_{\vec{k}_4,\downarrow}^{\alpha} \end{aligned} \quad (3.41)$$

ou

$$\hat{H}'_{x-y} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}, \vec{k}_1, \vec{k}_2} J_q \sum_{\vec{r}} e^{(i(\vec{q} - \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \cdot \vec{r})} f_{\vec{k}_1,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}_2,\uparrow}^{\beta} \sum_{\vec{k}_3, \vec{k}_4} \sum_{\vec{r}'} e^{(i(-\vec{k}_3 + \vec{k}_4 - \vec{q}) \cdot \vec{r}') } f_{\vec{k}_3,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}_4,\downarrow}^{\alpha}. \quad (3.42)$$

Considerando que:

$$\sum_{\vec{r}'} e^{(i\vec{k}\cdot\vec{r}')} = N\delta_{\vec{k},0}, \quad (3.43)$$

tem-se:

$$\hat{H}'_{x-y} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}, \vec{k}_1, \vec{k}_2} J_q N \delta_{\vec{q}-\vec{k}_1+\vec{k}_2,0} f_{\vec{k}_1,\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}_2,\uparrow}^{\beta} \sum_{\vec{k}_3, \vec{k}_4} N \delta_{-\vec{k}_3+\vec{k}_4-\vec{q},0} f_{\vec{k}_3,\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}_4,\downarrow}^{\alpha}. \quad (3.44)$$

Executando a soma sobre \vec{k}_1 , temos:

$$\delta_{\vec{q}-\vec{k}_1+\vec{k}_2,0} = 1, \quad (3.45)$$

somente se

$$\vec{q} - \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = 0, \quad (3.46)$$

ou seja, $\vec{k}_1 = \vec{k}_2 + \vec{q}$.

Executando a soma sobre \vec{k}_3 , temos:

$$\delta_{-\vec{k}_3+\vec{k}_4-\vec{q},0} = 1, \quad (3.47)$$

somente se

$$-\vec{k}_3 + \vec{k}_4 - \vec{q} = 0, \quad (3.48)$$

ou seja, $\vec{k}_3 = \vec{k}_4 - \vec{q}$.

Assim, \hat{H}'_{x-y} torna-se:

$$\hat{H}'_{x-y} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}, \vec{k}_2} J_q f_{\vec{k}_2+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}_2,\uparrow}^{\beta} N \sum_{\vec{k}_4} f_{\vec{k}_4-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}_4,\downarrow}^{\alpha} N, \quad (3.49)$$

ou seja,

$$\hat{H}'_{x-y} = \sum_{\vec{q}, \vec{k}_2, \vec{k}_4} J_q \left(f_{\vec{k}_2+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}_2,\uparrow}^{\beta} f_{\vec{k}_4-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}_4,\downarrow}^{\alpha} \right). \quad (3.50)$$

Renomeando $\vec{k}_2 = \vec{k}$ e $\vec{k}_4 = \vec{k}'$ e acrescentando a outra parte do hamiltoniano:

$$\hat{H}_{x-y} = \sum_{\vec{q}, \vec{k}, \vec{k}'} J_q \left(f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} + f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \right). \quad (3.51)$$

No presente trabalho, o termo de interação \hat{H}_{x-y} será tratado através de uma aproximação de campo médio.

3.3 Aproximação de Campo Médio

A teoria de campo médio busca uma solução simplificada para o sistema, permitindo, assim, ter uma primeira ideia das propriedades do sistema, através de uma aproximação mais simples.

A ideia básica da aproximação de campo médio é de que as quantidades físicas apresentam apenas pequenas flutuações sobre o seu valor médio. Na figura 3.2, tem-se a ilustração dessa aproximação, onde, tendo um sistema físico real com N partículas (pretas) interagindo uma com a outra, o potencial de interação sentido pela partícula preta é substituído por uma interação média devido à densidade média das partículas brancas.

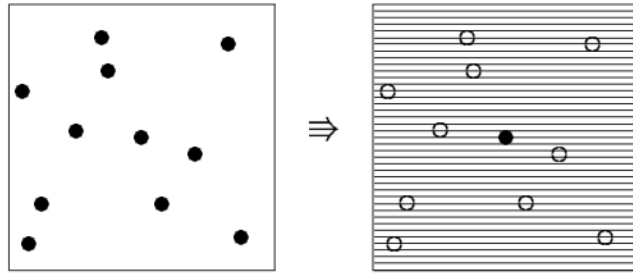


Figura 3.2: Ilustração da aproximação de Campo Médio. Fonte: (BRUUS; FLENSBERG, 2002).

A seguir, a aproximação de campo médio será discutida com base no termo de interação do modelo de Hubbard.

$$H_U = U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}. \quad (3.52)$$

Inicialmente reescreve-se o termo de interação na seguinte forma (FAZEKAS, 1999):

$$n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} = (n_{j\uparrow} - \langle n_{j\uparrow} \rangle + \langle n_{j\uparrow} \rangle)(n_{j\downarrow} - \langle n_{j\downarrow} \rangle + \langle n_{j\downarrow} \rangle) \quad (3.53)$$

ou

$$\begin{aligned} &= (n_{j\uparrow} - \langle n_{j\uparrow} \rangle) \langle n_{j\downarrow} \rangle + (n_{j\downarrow} - \langle n_{j\downarrow} \rangle) \langle n_{j\uparrow} \rangle \\ &\quad + \langle n_{j\uparrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle + (n_{j\uparrow} - \langle n_{j\uparrow} \rangle)(n_{j\downarrow} - \langle n_{j\downarrow} \rangle). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Considerando que $n_{j\uparrow} - \langle n_{j\uparrow} \rangle$ e $n_{j\downarrow} - \langle n_{j\downarrow} \rangle$ são quantidades inerentemente

pequenas, podemos desprezar o último termo da equação (3.54), pois, sendo o produto de duas quantidades pequenas, ele é muito menor do que os outros termos, restando apenas:

$$n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} = (n_{j\uparrow} - \langle n_{j\uparrow} \rangle) \langle n_{j\downarrow} \rangle + (n_{j\downarrow} - \langle n_{j\downarrow} \rangle) \langle n_{j\uparrow} \rangle + \langle n_{j\uparrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle \quad (3.55)$$

ou

$$\begin{aligned} n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} = n_{j\uparrow} \langle n_{j\downarrow} \rangle - \langle n_{j\uparrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle + n_{j\downarrow} \langle n_{j\uparrow} \rangle \\ - \langle n_{j\downarrow} \rangle \langle n_{j\uparrow} \rangle + \langle n_{j\uparrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle, \end{aligned} \quad (3.56)$$

ou ainda

$$n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} = n_{j\uparrow} \langle n_{j\downarrow} \rangle + n_{j\downarrow} \langle n_{j\uparrow} \rangle - \langle n_{j\downarrow} \rangle \langle n_{j\uparrow} \rangle, \quad (3.57)$$

que nada mais é do que o resultado da aproximação de campo médio aplicada no sistema.

Dessa forma, o problema, que inicialmente era uma interação entre duas partículas, agora, resume-se ao problema de uma partícula sob a ação de um “campo externo”.

3.4 Calor Específico

O calor específico pode ser definido a partir da entropia, onde temos que a entropia é dada através da derivada primeira da energia livre de Helmholtz em função da temperatura. Supondo que T , X e N_j são independentes (REICHL, 1998), temos

$$S = S(T, X, N_j). \quad (3.58)$$

A diferencial total da entropia pode ser escrita como:

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{X, \{N_j\}} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial X} \right)_{T, \{N_j\}} dX + \sum_j \left(\frac{\partial S}{\partial N_j} \right)_{T, X, \{N_{i \neq j}\}} dN_j. \quad (3.59)$$

Sabendo que X e N_j são tidos constantes, os dois últimos termos da equação acima se anulam. Com isso,

$$(dQ)_{X, \{N_j\}} = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{X, \{N_j\}} dT, \quad (3.60)$$

e, portanto:

$$C_X = \left(\frac{dQ}{dT} \right) = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{X, \{N_j\}} . \quad (3.61)$$

Lembrando que a entropia S é dada por:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{X, \{N_j\}} . \quad (3.62)$$

Substituindo a equação acima na equação (3.61), temos:

$$C_X = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_{X, \{N_j\}} , \quad (3.63)$$

que é o calor específico C_X , ou seja, a derivada segunda da energia livre de Helmholtz em relação à temperatura. Para processos realizados a (X) constante, temperatura (T) e número de ocupação (N_j) constantes, a energia livre de Helmholtz é o potencial termodinâmico que descreve o sistema. Essa energia, quando em volume constante, é útil para sistemas termicamente acoplados e fechados, sendo mecanicamente isolados.

3.5 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética χ_m é definida como a derivada segunda da energia livre de Helmholtz em relação ao campo magnético externo. Partindo da definição de magnetização, onde se sabe que há uma relação aproximadamente linear entre a Magnetização M e o Campo Magnético Externo H (REITZ; MILFORD; CHRISTY, 1982),

$$M = \chi_m H, \quad (3.64)$$

onde, de forma mais geral, a susceptibilidade magnética pode ser dada por (SCHEERER, 2013):

$$\chi_m = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right) . \quad (3.65)$$

Embora χ_m seja uma função da temperatura, e, algumas vezes, varie muito drasticamente com esta, a uma temperatura finita e, em um dado campo magnético externo, a relação entre a magnetização e a energia livre de Helmholtz é dada por:

$$M = \frac{-1}{V} \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right) , \quad (3.66)$$

onde V é o volume do sistema.

Combinando as equações 3.65 e 3.66, a susceptibilidade magnética torna-se:

$$\chi_m = \frac{-1}{V} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right), \quad (3.67)$$

onde a susceptibilidade magnética χ_m é definida como a derivada segunda da energia livre de Helmholtz em relação ao campo magnético externo.

3.6 Transição de Fase

3.6.1 Classificação das Transições de Fase

Tendo um sistema PVT simples, as variáveis independentes desse sistema podem variar até atingirem um valor crítico, para as quais pode ocorrer uma mudança (transição) de fase. A energia livre de Gibbs nesse caso é dada pela seguinte equação (REICHL, 1998):

$$G = \sum_{j=1}^l n_j \mu_j, \quad (3.68)$$

onde n_j é o número de moles e μ_j é o potencial químico.

A equação acima também pode ser escrita na forma,

$$(dG)_{Y,T} = \sum_{j=1}^l \mu_j dn_j. \quad (3.69)$$

Assim, na linha de transição de fase, a derivada $\mu_j = \left(\frac{\partial G}{\partial n_j} \right)_{Y,T,n_{j \neq i}}$, nas duas fases, deve ser igual, e a energia livre de Gibbs deve ter o mesmo valor nas duas fases. No entanto, para as derivadas $X = - \left(\frac{\partial G}{\partial Y} \right)_{T,n_j}$ e $S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{Y,n_j}$, nenhuma restrição é colocada.

O comportamento dessas derivadas é usado para classificar a transição de fase. Se as derivadas acima são descontínuas, a transição é dita de primeira ordem, o que pode ser observado na figura 3.3, tendo essas derivadas valores diferentes, ou seja, ocorrem distintamente. Já, se as derivadas são contínuas, a transição de fase é dita de segunda ordem, o que pode ser observado na figura 3.4.

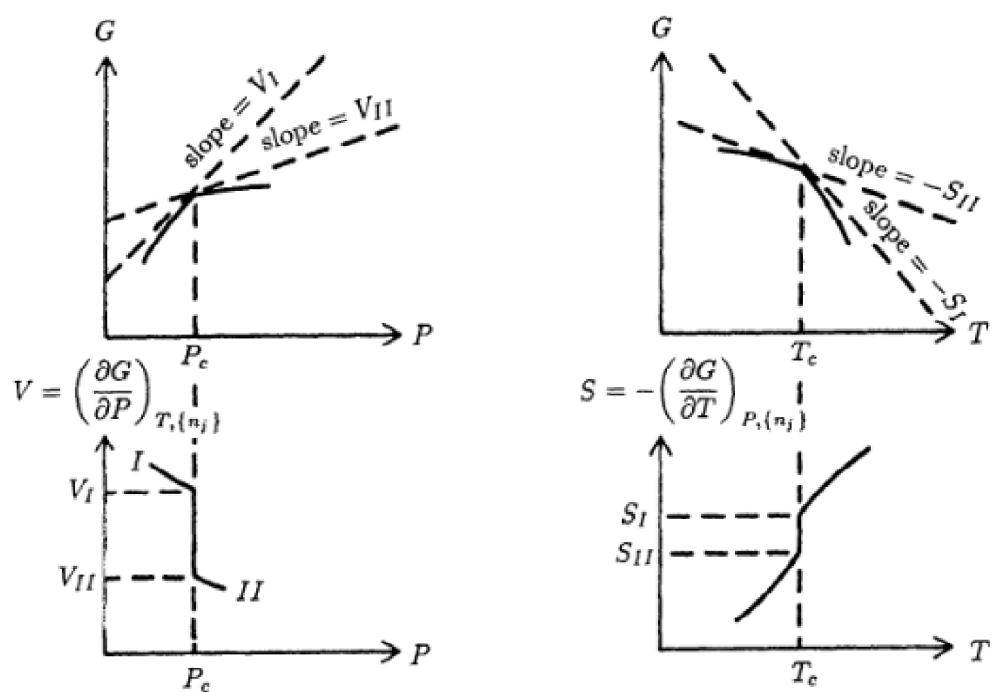


Figura 3.3: Comportamento típico da transição de fase de primeira ordem para a energia livre de Gibbs, para o volume e para a entropia. Fonte: (REICHL, 1998).

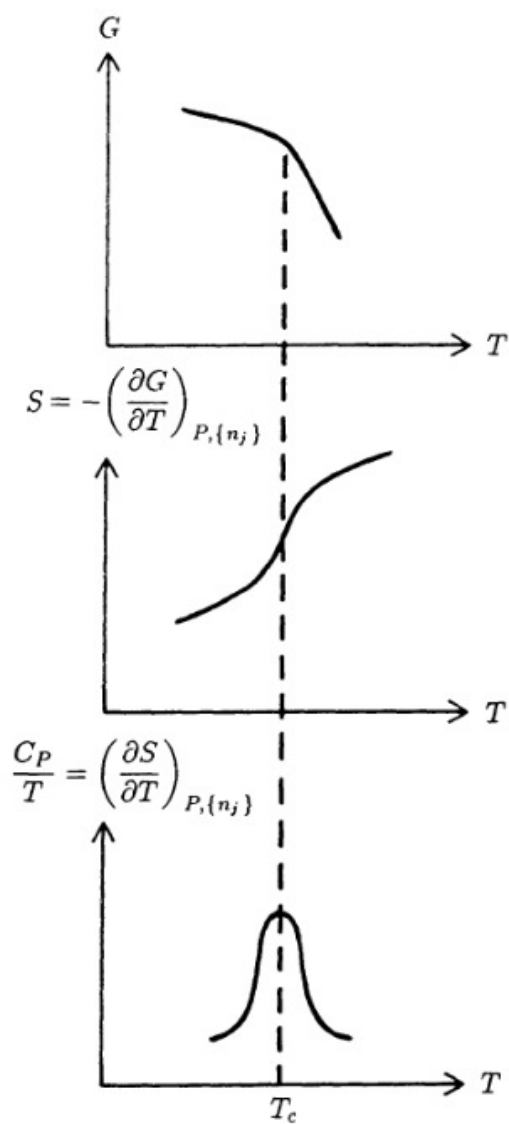


Figura 3.4: Comportamento típico da transição de fase de segunda ordem para a energia livre de Gibbs, para a entropia e para a capacidade calorífica a pressão constante. Fonte: (REICHL, 1998).

4 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Os principais objetivos deste trabalho são: calcular o calor específico e a susceptibilidade magnética, bem como obter um diagrama de fases T versus H_z .

Para se alcançar esse objetivo, será necessário obter a energia livre de Helmholtz, partindo do Hamiltoniano do modelo mínimo discutido no capítulo 3. No entanto, antes de se obter a energia livre, é necessário tratar o Hamiltoniano dentro da aproximação de campo médio. A aproximação de campo médio justifica-se neste problema pelo fato de que a relação $\frac{J}{W^f} < 1$, onde W^f é a largura das bandas f e J é a interação de troca.

Inicialmente, faz-se uso da equação (3.53) no primeiro termo do somatório da equação (3.51), dessa forma:

$$f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} = \left(f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} - \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \right) \times \left(f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} - \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle \right), \quad (4.1)$$

onde temos os termos de flutuações dados por:

$$\Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\alpha,\beta} = f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} - \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \quad (4.2)$$

e

$$\Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\beta,\alpha} = f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} - \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle. \quad (4.3)$$

Substituindo os termos de flutuações (equações 4.2 e 4.3) na equação 4.1, temos:

$$f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} = \left(\Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\alpha,\beta} + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \right) \left(\Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\beta,\alpha} + \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle \right), \quad (4.4)$$

$$f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} = \Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\alpha,\beta} \Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\beta,\alpha} + \Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\alpha,\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\beta,\alpha} + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle. \quad (4.5)$$

Como o produto das flutuações é muito menor que os outros termos, este pode ser desconsiderado, assim:

$$f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} = \Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\alpha,\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\beta,\alpha} + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle. \quad (4.6)$$

Agora, aplica-se a aproximação de campo médio no segundo termo da equação (3.51), como feito na equação (4.1), e assim:

$$f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} = \Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\alpha,\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle \Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\beta,\alpha} + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle. \quad (4.7)$$

Dessa maneira, nas equações (4.6) e (4.7), obteve-se a aproximação de campo médio para o Hamiltoniano de interação \hat{H}_{x-y} . Logo, para se obter o Hamiltoniano de interação de campo médio \hat{H}_{x-y}^{CM} , substituem-se as equações (4.6) e (4.7) na equação (3.51) e, dessa forma:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{x-y}^{CM} = & \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \left(\Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\alpha,\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\beta,\alpha} + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle \right) \quad (4.8) \\ & + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \left(\Delta z_{\vec{q},\downarrow}^{\alpha,\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle \Delta z_{\vec{q},\uparrow}^{\beta,\alpha} + \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle \right). \end{aligned}$$

Substituindo os termos de flutuações (equações 4.2 e 4.3) na equação acima, temos:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{x-y}^{CM} = & \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \left(f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle - \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle \right) \quad (4.9) \\ & + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \left(\langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} - \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle \right) \\ & + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\downarrow}^{\alpha} \rangle \\ & + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \left(f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle - \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle \right) \\ & + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \left(\langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} - \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle \right) \\ & + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \langle f_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\downarrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q},\uparrow}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\uparrow}^{\alpha} \rangle. \end{aligned}$$

Extraindo os termos que se cancelam, tem-se o Hamiltoniano de interação de campo médio \hat{H}_{x-y}^{CM} :

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{x-y}^{CM} = & \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left(f_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \uparrow}^{\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \uparrow}^{\beta} \rangle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \downarrow}^{\alpha} \right) \\
& + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left(f_{\vec{k}+\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \downarrow}^{\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \uparrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \downarrow}^{\beta} \rangle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \uparrow}^{\alpha} \right) \\
& - \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left(\langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \downarrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \uparrow}^{\alpha} \rangle \right). \tag{4.10}
\end{aligned}$$

Conforme mostrado no capítulo 3, na equação (3.6), o Hamiltoniano do modelo mínimo é a soma das equações (3.7) e (4.10), dessa forma:

$$\begin{aligned}
H^{CM} = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\beta} \right) \\
& \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left(f_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \uparrow}^{\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \uparrow}^{\beta} \rangle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \downarrow}^{\alpha} \right) \\
& + \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left(f_{\vec{k}+\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \downarrow}^{\beta} \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \uparrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \downarrow}^{\beta} \rangle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \uparrow}^{\alpha} \right) \\
& - \frac{J}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left(\langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \uparrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \downarrow}^{\alpha} \rangle + \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \downarrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \downarrow}^{\beta} \rangle \langle f_{\vec{k}'-\vec{q}, \uparrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}', \uparrow}^{\alpha} \rangle \right). \tag{4.11}
\end{aligned}$$

A quantidade $z_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha, \beta}$ introduzida na equação (4.2) é definida por:

$$z_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha, \beta} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle f_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\beta} \rangle, \tag{4.12}$$

onde $z_{\vec{q}, \sigma}^{\alpha, \beta}$ é o parâmetro de ordem do sistema, que caracteriza a chamada Ordem Oculta.

Assume-se que $z \neq 0$ somente se $q = Q$, onde Q é um vetor de onda comensurável aos vetores de onda da rede recíproca.

Substituindo a equação (4.12), que nos fornece o parâmetro de ordem, na equação (4.11), teremos o Hamiltoniano do modelo mínimo na forma:

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{CM} = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\beta} \right) \\
& + J \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(f_{\vec{k}+\vec{Q}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\beta} z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\beta, \alpha} + z_{\vec{Q}, -\sigma}^{\alpha, \beta} f_{\vec{k}-\vec{Q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} \right) \\
& - JN \left(z_{\vec{Q}, \sigma}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\beta, \alpha} + z_{\vec{Q}, -\sigma}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \sigma}^{\beta, \alpha} \right). \tag{4.13}
\end{aligned}$$

A seguir será feito um cálculo para obter as relações de dispersão das bandas de quasi-partículas para o modelo da equação (4.13).

4.1 As relações de dispersão das quasi-partículas

Os termos do Hamiltoniano \hat{H}^{CM} , que são quadráticos em relação aos operadores fermiônicos, ou seja, termos do tipo $f^\dagger f$, podem ser diagonalizados. Porém, antes de iniciar a diagonalização, as quantidades associadas ao orbital β terão a origem do vetor de onda \vec{k} deslocada pelo vetor \vec{Q} . Logo, o Hamiltoniano \hat{H}^{CM} torna-se:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k},\sigma} \left(E_\sigma^\alpha(\vec{k}) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q}) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \right) \\ & + J \sum_{\vec{k},\sigma} \left(f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \right) \\ & - JN \left(z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta} z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} + z_{\vec{Q},-\sigma}^{\alpha,\beta} z_{-\vec{Q},\sigma}^{\beta,\alpha} \right). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Em seguida, aplica-se uma transformação canônica no Hamiltoniano de quasi-partículas:

$$\hat{H}_{QP}^{CM} = \hat{U}^\dagger \hat{H}_{QP}^{CM} \hat{U}, \quad (4.15)$$

a qual não altera os autovalores do Hamiltoniano, nem as relações de comutação dos operadores fermiônicos.

A forma unitária do operador \hat{U} é dada por (RISEBOROUGH; MAGALHAES; CALLEGARI, 2014):

$$\hat{U} = e^{\left(\sum_{\vec{k},\sigma} \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta - \theta_{\vec{k}}^* f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \right)}. \quad (4.16)$$

E, analogamente, a forma unitária do operador \hat{U}^\dagger é dada por:

$$\hat{U}^\dagger = e^{-\left(\sum_{\vec{k},\sigma} \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha - \theta_{\vec{k}}^* f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \right)}, \quad (4.17)$$

onde $\theta_{\vec{k}}$ deve ser determinado.

Os operadores fermiônicos são transformados a partir da relação de Baker-Hausdorff (LOUISELL, 1990):

$$e^{-B} A e^B = A + [A, B] + \frac{1}{2!} [[A, B], B] + \frac{1}{3!} [[[A, B], B], B] + \dots, \quad (4.18)$$

onde e^{-B} equivale ao operador \hat{U}^\dagger , e^B ao operador \hat{U} e A equivale aos operadores fermi-

ônicos.

A transformação canônica deve ser feita para todos os operadores fermiônicos do Hamiltoniano de quasi-partículas, dado pela equação (4.14). Para isso, utilizam-se as relações acima, (4.15 a 4.18), lembrando que, por serem operadores fermiônicos, devem-se utilizar as relações de anticomutação dadas pelas equações (3.16) e (3.17).

Primeiro, faz-se a transformação canônica para o operador destruição $f_{\vec{k},\sigma}^\alpha$, onde:

$$\tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^\alpha = \hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{U} \quad (4.19)$$

e

$$\hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{U} = f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + [f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [[f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}], \hat{B}] + \frac{1}{3!} [[[f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}], \hat{B}], \hat{B}] + \dots \quad (4.20)$$

Resolvendo, separadamente, os termos da equação acima (4.20), começando pelo segundo termo, pois o primeiro é um termo isolado, temos:

$$\begin{aligned} [f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}] &= f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{B} - \hat{B} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \quad (4.21) \\ &= f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha \right) \\ &\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha \right) f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \\ &= \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} (f_{\vec{k},\sigma}^\alpha f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta) - \theta_{\vec{k}'}^* (f_{\vec{k},\sigma}^\alpha f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha) \right) \\ &\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha \right) f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \\ &= \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} (\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\alpha,\alpha} - f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha) f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta \right) \\ &\quad - \left(\theta_{\vec{k}'}^* (\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\alpha,\beta} - f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha) f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha \right) \\ &\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha \right) f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \\ &= \sum_{\vec{k}',\sigma'} \theta_{\vec{k}'} (\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\alpha,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta) - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta \\ &\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \theta_{\vec{k}'}^* \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\alpha,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha + \sum_{\vec{k}',\sigma'} \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha \\ &\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^\beta - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^\alpha \right) f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} + \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \\
&\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \theta_{\vec{k}'} \left(f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha},
\end{aligned} \tag{4.22}$$

$$[f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}, \hat{B}] = \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}. \tag{4.23}$$

Agora, resolvendo o terceiro termo da equação (4.16), temos:

$$\begin{aligned}
&[[f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}, \hat{B}], \hat{B}] = \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \hat{B} - \hat{B} \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \tag{4.24} \\
&= \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \\
&\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&= \theta_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} (f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta}) - \theta_{\vec{k}'}^* (f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma}^{\beta} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha}) \right) \\
&\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&= \theta_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} (\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\alpha,\beta} - f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}) f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} \right) \\
&\quad - \left(\theta_{\vec{k}'}^* (\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\beta,\beta} - f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}) f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \\
&\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&= -\theta_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \right) f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'}^* (\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\beta,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha}) \right) \\
&+ \theta_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&= \theta_{\vec{k}} \left(-\theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \right) + \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&\quad - \sum_{\vec{k}',\sigma'} \left(\theta_{\vec{k}'} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\beta} - \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k}'-\vec{Q},\sigma'}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}',\sigma'}^{\alpha} \right) \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta},
\end{aligned}$$

$$[[f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}, \hat{B}], \hat{B}] = -\theta_{\vec{k}} \theta_{\vec{k}'}^* f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}. \tag{4.25}$$

Por último, resolve-se o quarto termo da equação (4.16),

$$\begin{aligned}
[[[f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}], \hat{B}], \hat{B}] &= [-\theta_{\vec{k}}\theta_{\vec{k}}^* f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}] \\
&= -\theta_{\vec{k}}\theta_{\vec{k}}^* [f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}] \\
&= -\theta_{\vec{k}}\theta_{\vec{k}}^*\theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta,
\end{aligned} \tag{4.26}$$

$$[[[f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \hat{B}], \hat{B}], \hat{B}] = -\theta_{\vec{k}}^2\theta_{\vec{k}}^* f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta. \tag{4.27}$$

Depois de terem sido feitas as operações de anticomutação dos operadores fermiônicos, para a transformação canônica dada pela equação (4.15), os resultados encontrados são substituídos na referida equação, onde temos:

$$\begin{aligned}
\hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{U} &= f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + \theta_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta - \frac{1}{2!}\theta_{\vec{k}}\theta_{\vec{k}}^* f_{\vec{k},\sigma}^\alpha - \frac{1}{3!}\theta_{\vec{k}}^2\theta_{\vec{k}}^* f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta + \dots \\
&= \left(1 - \frac{1}{2!}\theta_{\vec{k}}\theta_{\vec{k}}^* + \dots\right) f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + \left(\theta_{\vec{k}} - \frac{1}{3!}\theta_{\vec{k}}^2\theta_{\vec{k}}^* + \dots\right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta,
\end{aligned} \tag{4.28}$$

onde

$$\hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{U} = A_{\vec{k}} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + B_{\vec{k}} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta, \tag{4.29}$$

sendo

$$\cos|\theta_{\vec{k}}| = A_{\vec{k}} = 1 - \frac{1}{2!}\theta_{\vec{k}}^2 + \dots, \tag{4.30}$$

$$\text{sen}|\theta_{\vec{k}}| = B_{\vec{k}} = \theta_{\vec{k}} - \frac{1}{3!}\theta_{\vec{k}}^3 + \dots = \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}|\theta_{\vec{k}}|. \tag{4.31}$$

E, finalmente, encontramos a transformação canônica para o operador destruição $f_{\vec{k},\sigma}^\alpha$:

$$\tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^\alpha = \hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{U} = \cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta. \tag{4.32}$$

E, analogamente, o mesmo procedimento é feito para os demais operadores fermiônicos da equação (4.10).

Assim, temos:

$$\tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta = \hat{U}^\dagger f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \hat{U} = \cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta - \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^\alpha, \tag{4.33}$$

$$\tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger\alpha} = \hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger\alpha} \hat{U} = \cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger\alpha} + \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger\beta}, \tag{4.34}$$

$$\tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger\beta} = \hat{U}^\dagger f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger\beta} \hat{U} = \cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger\beta} - \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger\alpha}. \quad (4.35)$$

A transformação canônica dada pela equação (4.15) pode ser reescrita na forma:

$$\hat{H}_{QP} = \hat{U}^\dagger (\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3) \hat{U}, \quad (4.36)$$

onde

$$\hat{H}_1 = \sum_{\vec{k},\sigma} \left(E_\sigma^\alpha(\vec{k}) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q}) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \right), \quad (4.37)$$

$$\hat{H}_2 = J \sum_{\vec{k},\sigma} \left(f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \right) \quad (4.38)$$

e

$$\hat{H}_3 = -JN \left(z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta} z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} + z_{\vec{Q},-\sigma}^{\alpha,\beta} z_{-\vec{Q},\sigma}^{\beta,\alpha} \right). \quad (4.39)$$

Primeiro, resolve-se a equação canônica para \hat{H}_1 , de forma que:

$$\hat{H}_1 = \sum_{\vec{k},\sigma} \left(E_\sigma^\alpha(\vec{k}) \hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{U} + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q}) \hat{U}^\dagger f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \hat{U} \right). \quad (4.40)$$

Lembrando que:

$$\hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{U} = 1. \quad (4.41)$$

A equação (4.40) pode ser reescrita da forma,

$$\hat{H}_1 = \sum_{\vec{k},\sigma} \left(E_\sigma^\alpha \hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} \hat{U} \hat{U}^\dagger f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \hat{U} + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q}) \hat{U}^\dagger f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} \hat{U} \hat{U}^\dagger f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \hat{U} \right). \quad (4.42)$$

E, substituindo os operadores canônicos, equações (4.32 a 4.35) na equação acima (4.42), tem-se:

$$\hat{H}_1 = \sum_{\vec{k},\sigma} \left(E_\sigma^\alpha \tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} \tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^\alpha + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q}) \tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} \tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \right). \quad (4.43)$$

Resolvendo o primeiro termo da equação acima,

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} \tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^\alpha &= \left(\cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} + \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} \right) \\ &\times \left(\cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^\beta \right), \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} \tilde{f}_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} &= \cos^2|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} + \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \cos|\theta_{\vec{k}}| \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\ &+ \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} + \frac{\theta_{\vec{k}}^* \theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \operatorname{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Agora, resolve-se o segundo termo da equação (4.43):

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} \tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} &= \left(\cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} - \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} \right) \\ &\times \left(\cos|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} - \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \right), \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} \tilde{f}_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} &= \cos^2|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} - \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} \cos|\theta_{\vec{k}}| \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \\ &- \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \cos|\theta_{\vec{k}}| \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} + \frac{\theta_{\vec{k}}^* \theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \operatorname{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Substituindo as equações (4.45) e (4.47) na equação (4.43), temos:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \cos^2|\theta_{\vec{k}}| + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \frac{\theta_{\vec{k}}^* \theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \operatorname{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \\ &+ \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \cos^2|\theta_{\vec{k}}| + E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \frac{\theta_{\vec{k}}^* \theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \operatorname{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\ &+ \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| \right) \left(\frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} + \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \right). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Os procedimentos utilizados, desde a equação (4.40) à equação (4.48), são repetidos para a equação canônica de \hat{H}_2 (4.38), onde:

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 &= -J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \operatorname{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}) \\ &+ J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \cos^2|\theta_{\vec{k}}| - \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}^2}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \operatorname{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\ &+ J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \cos^2|\theta_{\vec{k}}| - \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}^2}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \operatorname{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right)^* f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Agora, substituindo-se as equações (4.48) e (4.49) na equação (4.36), teremos o

Hamiltoniano das quasi-partículas na forma transformada:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \cos^2|\theta_{\vec{k}}| + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \frac{\theta_{\vec{k}}^* \theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \text{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.50) \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \cos^2|\theta_{\vec{k}}| + E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \frac{\theta_{\vec{k}}^* \theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \text{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& - J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}) \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| \right) \left(\frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} + \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \right) \\
& + J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \cos^2|\theta_{\vec{k}}| - \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}^2}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \text{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& + J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \cos^2|\theta_{\vec{k}}| - \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}^2}{|\theta_{\vec{k}}|^2} \text{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right)^* f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}.
\end{aligned}$$

Nas equações acima, os termos fora da diagonal desaparecem se $\theta_{\vec{k}}$ é escolhido para satisfazer a equação:

$$\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) \text{sen}(2|\theta_{\vec{k}}|) = -J \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} \cos^2|\theta_{\vec{k}}| - \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \text{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right), \quad (4.51)$$

que pode ser reduzida a condição (RISEBOROUGH; MAGALHAES; CALEGARI, 2014):

$$z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} = \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \quad (4.52)$$

e

$$\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) \text{sen}(2|\theta_{\vec{k}}|) = -\frac{J}{2} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|). \quad (4.53)$$

Então, a equação 4.50 pode ser reescrita na forma,

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \cos^2|\theta_{\vec{k}}| + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \text{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.54) \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \cos^2|\theta_{\vec{k}}| + E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \text{sen}^2|\theta_{\vec{k}}| \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& - J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}).
\end{aligned}$$

Aplicando-se as relações trigonométricas:

$$\cos^2 x = \frac{1}{2}(1 + \cos(2x)) \quad (4.55)$$

e

$$\text{sen}^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos(2x)), \quad (4.56)$$

nas duas primeiras linhas do Hamiltoniano das quasi-partículas, equação (4.54), tem-se:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \left\{ E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \left(\frac{1}{2}(1 + \cos(2|\theta_{\vec{k}}|)) \right) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \left(\frac{1}{2}(1 - \cos(2|\theta_{\vec{k}}|)) \right) \right\} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.57) \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left\{ E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \left(\frac{1}{2}(1 + \cos(2|\theta_{\vec{k}}|)) \right) + E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \left(\frac{1}{2}(1 - \cos(2|\theta_{\vec{k}}|)) \right) \right\} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& - J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}),
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{1}{2} E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + \frac{1}{2} E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.58) \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{1}{2} E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) - \frac{1}{2} E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{1}{2} E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) + \frac{1}{2} E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{1}{2} E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - \frac{1}{2} E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& - J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}),
\end{aligned}$$

ou ainda:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} &= \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) + \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.59) \\
&+ \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) - \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&- J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \frac{\theta_{\vec{k}}^*}{|\theta_{\vec{k}}|} + \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}).
\end{aligned}$$

Agora, substituindo a equação (4.52), na terceira linha da equação acima, temos:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} &= \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) + \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.60) \\
&+ \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) - \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&- J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(2 \left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \text{sen}|\theta_{\vec{k}}| \cos|\theta_{\vec{k}}| (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}).
\end{aligned}$$

E, aplicando a relação trigonométrica:

$$2 \text{sen}(x) \cos(x) = \text{sen}(2x), \quad (4.61)$$

também na terceira linha da equação (4.60):

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} &= \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) + \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.62) \\
&+ \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) - \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
&- J \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\left(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} \right)^* \frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} \right) \text{sen}(2|\theta_{\vec{k}}|) (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}).
\end{aligned}$$

Aplicando a condição (RISEBOROUGH; MAGALHAES; CALEGARI, 2014):

$$\frac{\theta_{\vec{k}}}{|\theta_{\vec{k}}|} = \frac{z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}}{|z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|}, \quad (4.63)$$

o Hamiltoniano das quasi-partículas pode ser reescrito na forma:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) + \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.64) \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) - \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& - \sum_{\vec{k}\sigma} J |z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}| \text{sen}(2|\theta_{\vec{k}}|) (f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta}),
\end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.65) \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) - J |z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}| \text{sen}(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\
& + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) \cos(2|\theta_{\vec{k}}|) - J |z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}| \text{sen}(2|\theta_{\vec{k}}|) \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\beta}.
\end{aligned}$$

Reescrevendo a segunda linha da equação (4.65) como

$$\sum_{\vec{k}\sigma} (b \cos\Theta + c \text{sen}\Theta) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}, \quad (4.66)$$

onde

$$b = \left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right), \quad (4.67)$$

$$c = -|J z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|, \quad (4.68)$$

$$\Theta = 2|\theta_{\vec{k}}|. \quad (4.69)$$

Utilizando as relações trigonométricas do triângulo retângulo juntamente com o teorema de Pitágoras, tem-se:

$$\cos\Theta = \frac{b}{\sqrt{b^2 + c^2}} \quad (4.70)$$

e

$$\text{sen}\Theta = \frac{c}{\sqrt{b^2 + c^2}}. \quad (4.71)$$

Substituindo as equações (4.70) e (4.71) na equação (4.66), temos:

$$\sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{b^2 + c^2}{\sqrt{b^2 + c^2}} \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}, \quad (4.72)$$

ou

$$\sum_{\vec{k}\sigma} \pm \sqrt{b^2 + c^2} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}. \quad (4.73)$$

E, substituindo as equações (4.67) e (4.68) na equação acima, temos:

$$\sum_{\vec{k}\sigma} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha}. \quad (4.74)$$

O mesmo procedimento é realizado para a quarta linha da equação (4.65), assim,

$$\sum_{\vec{k}\sigma} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\beta}. \quad (4.75)$$

Substituindo as equações (4.74) e (4.75) na segunda e quarta linha, respectivamente da equação (4.65), temos o Hamiltoniano das quasi-partículas em função das bandas das quasi-partículas:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \quad (4.76) \\ & + \sum_{\vec{k}\sigma} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^{\alpha} \\ & + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\beta} \\ & + \sum_{\vec{k}\sigma} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2} f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^{\beta} \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} \hat{H}_{QP}^{CM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{E_\sigma^\alpha(\vec{k}) + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_\sigma^\alpha(\vec{k}) - E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2} \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \\ & + \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\frac{E_\sigma^\alpha(\vec{k}) + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{E_\sigma^\alpha(\vec{k}) - E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2} \right) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\beta. \end{aligned} \quad (4.77)$$

As bandas das quasi-partículas são

$$E_{\vec{k},\sigma}^\pm = \left(\frac{E_\sigma^\alpha(\vec{k}) + E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{E_\sigma^\alpha(\vec{k}) - E_\sigma^\beta(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2}. \quad (4.78)$$

4.2 Energia Livre de Helmholtz

O calor específico, a volume constante C_V , é uma quantidade termodinâmica de grande interesse experimental e teórico. No entanto, na abordagem desse trabalho, para obter uma expressão analítica para o calor específico C_V , primeiro é necessário calcular a energia livre de Helmholtz F do sistema, uma vez que:

$$C_V = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right). \quad (4.79)$$

Lembrando que o sistema é descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{CM} = & \sum_{\vec{k},\sigma} \left(E_\sigma^\alpha(\vec{k}) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha + E_\sigma^\beta(\vec{k}) f_{\vec{k},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\beta \right) \\ & + J \sum_{\vec{k},\sigma} \left(f_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\alpha} f_{\vec{k},\sigma}^\beta z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} + z_{\vec{Q},-\sigma}^{\alpha,\beta} f_{\vec{k}-\vec{Q},\sigma}^{\dagger,\beta} f_{\vec{k},\sigma}^\alpha \right) \\ & - JN \left(z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta} z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha} + z_{\vec{Q},-\sigma}^{\alpha,\beta} z_{-\vec{Q},\sigma}^{\beta,\alpha} \right). \end{aligned} \quad (4.80)$$

A energia livre de Helmholtz, para o modelo da equação acima é dada por:

$$\begin{aligned}
F = \sum_{\pm \vec{k}, \sigma} \left[E_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} - \mu \right] n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} + \mu N_{elec} \quad (4.81) \\
- JN \left(z_{\vec{Q}, \uparrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \downarrow}^{\beta, \alpha} + z_{\vec{Q}, \downarrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \uparrow}^{\beta, \alpha} \right) \\
+ k_B T \sum_{\pm \vec{k}, \sigma} \left[n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} \ln n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} + (1 - n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm}) \ln(1 - n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm}) \right].
\end{aligned}$$

Minimizando a energia livre em relação ao parâmetro $(z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\beta, \alpha})^*$, obtém-se a equação para o *gap*:

$$\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{J^2 z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\alpha, \beta} (n_{\vec{k}, \sigma}^- - n_{\vec{k}, \sigma}^+)}{\sqrt{\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |J z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\beta, \alpha}|^2}} = -J z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\alpha, \beta}. \quad (4.82)$$

Minimizando F em relação a $n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm}$, obtém-se a distribuição de Fermi-Dirac,

$$n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} = \frac{1}{e^{\beta(E_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} - \mu)} + 1}. \quad (4.83)$$

Para o tratamento numérico da energia livre, é mais adequado reescrevê-la em uma forma mais simples (ver Apêndice B):

$$F = - \sum_{\pm \vec{k}, \sigma} k_B T \ln \left(e^{-\left(\frac{E_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} - \mu}{k_B T} \right)} + 1 \right) + \mu N_{elec} - JN \left(z_{\vec{Q}, \uparrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \downarrow}^{\beta, \alpha} + z_{\vec{Q}, \downarrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \uparrow}^{\beta, \alpha} \right). \quad (4.84)$$

4.3 Nematicidade Magnética

4.3.1 Campo Paralelo ao eixo de quantização

Na presença de um campo magnético H^z , paralelo ao eixo z , é necessário adicionar o seguinte termo ao modelo mínimo:

$$\hat{H}_z^{campo} = H_z g \mu_B \sum_i \hat{S}_i^z, \quad (4.85)$$

onde g é o fator giro magnético e μ_B é o magneton de Bohr.

Nesse caso, a energia livre será dada por:

$$\begin{aligned}
F = \sum_{\pm \vec{k}, \sigma} \left[E_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} - \sigma \mu_B H^z - \mu \right] n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} + \mu N_{elec} \\
- JN \left(z_{\vec{Q}, \uparrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \downarrow}^{\beta, \alpha} + z_{\vec{Q}, \downarrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \uparrow}^{\beta, \alpha} \right) \\
+ k_B T \sum_{\pm \vec{k}, \sigma} \left[n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} \ln n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} + (1 - n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm}) \ln(1 - n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm}) \right].
\end{aligned} \tag{4.86}$$

A equação para o *gap* será exatamente igual ao caso sem campo:

$$\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{J^2 z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\alpha, \beta} (n_{\vec{k}, \sigma}^- - n_{\vec{k}, \sigma}^+)}{\sqrt{\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right)^2 + |J z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\beta, \alpha}|^2}} = -J z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\alpha, \beta}. \tag{4.87}$$

O *gap* dependerá do campo somente através da distribuição de Fermi-Dirac.

4.3.2 Campo Perpendicular ao eixo de quantização

No caso em que o campo magnético H^x é aplicado perpendicular ao eixo de quantização, o Hamiltoniano de campo médio pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{CM} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} + E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q}) f_{\vec{k} - \vec{Q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k} - \vec{Q}, \sigma}^{\beta} \right) \\
- \mu_B H^x \sum_{\vec{k}} \left(f_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \downarrow}^{\alpha} + f_{\vec{k}, \downarrow}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k}, \uparrow}^{\alpha} + f_{\vec{k} - \vec{Q}, \uparrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k} - \vec{Q}, \downarrow}^{\beta} + f_{\vec{k} - \vec{Q}, \downarrow}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k} - \vec{Q}, \uparrow}^{\beta} \right) \\
+ J \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger, \alpha} f_{\vec{k} - \vec{Q}, \sigma}^{\beta} z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\beta, \alpha} + z_{-\vec{Q}, -\sigma}^{\beta, \alpha} * f_{\vec{k} - \vec{Q}, \sigma}^{\dagger, \beta} f_{\vec{k}, \sigma}^{\alpha} \right) \\
- JN \left(z_{\vec{Q}, \uparrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \downarrow}^{\beta, \alpha} + z_{\vec{Q}, \downarrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \uparrow}^{\beta, \alpha} \right),
\end{aligned} \tag{4.88}$$

e a energia livre:

$$\begin{aligned}
F = \sum_{\pm \vec{k}, \sigma} \left[E_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} - \mu \right] n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} + \mu N_{elec} \\
- JN \left(z_{\vec{Q}, \uparrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \downarrow}^{\beta, \alpha} + z_{\vec{Q}, \downarrow}^{\alpha, \beta} z_{-\vec{Q}, \uparrow}^{\beta, \alpha} \right) \\
+ k_B T \sum_{\pm \vec{k}, \sigma} \left[n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} \ln n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm} + (1 - n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm}) \ln(1 - n_{\vec{k}, \sigma}^{\pm}) \right],
\end{aligned} \tag{4.89}$$

onde as relações de dispersão são dadas por:

$$E_{\vec{k},\sigma}^{\pm} = \left(\frac{E^{\alpha}(\vec{k}) - E^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{E^{\alpha}(\vec{k}) - E^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} - \sigma\mu_B H^x \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2}. \quad (4.90)$$

Variando a energia livre em relação ao parâmetro de ordem $(z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\alpha,\beta})^*$, temos a equação do *gap*:

$$\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{J^2 z_{-\vec{Q},-\sigma}^{\alpha,\beta} (n_{\vec{k},\sigma}^- - n_{\vec{k},\sigma}^+)}{\sqrt{\left(\frac{E_{\sigma}^{\alpha}(\vec{k}) - E_{\sigma}^{\beta}(\vec{k} - \vec{Q})}{2} - \sigma\mu_B H^x \right)^2 + |Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\beta,\alpha}|^2}} = -Jz_{-\vec{Q},-\sigma}^{\alpha,\beta}, \quad (4.91)$$

onde o *gap* é dependente do campo H^x .

5 RESULTADOS

Nesse capítulo, são apresentados os resultados numéricos obtidos através de um programa computacional desenvolvido em linguagem fortran 77. Para a obtenção dos resultados numéricos, considerou-se $W^f = 0,6$ e $J = 0,0728$. O valor de J foi ajustado para reproduzir a temperatura de transição experimental a campo magnético externo nulo.

No presente trabalho, no capítulo 3, o modelo mínimo, proposto para descrever a Ordem Oculta no composto férmion pesado URu_2Si_2 , é tratado pela aproximação de campo médio. Através do estudo desse modelo, pode-se obter o calor específico, a susceptibilidade magnética e o parâmetro de ordem da ordem oculta. Também foi possível investigar os efeitos do campo magnético nessas quantidades físicas.

5.1 Parâmetro de Ordem

O parâmetro de ordem é de fundamental importância, pois além de indicar a temperatura crítica de transição, o parâmetro de ordem também pode fornecer informações sobre o *gap* $\kappa_{\vec{Q},\sigma}$, devido à relação existente entre ambos, dada por:

$$\kappa_{\vec{Q},\sigma} = Jz_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta}. \quad (5.1)$$

Na equação acima, observa-se que o *gap* (associado à Ordem Oculta) difere do parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta}$ (definido na equação 4.12) apenas pela constante J . Logo, o comportamento do parâmetro de ordem e o comportamento do *gap* são exatamente iguais. Sendo assim, é completamente equivalente analisar o *gap* ou o parâmetro de ordem.

Na figura 5.1, pode-se observar o *gap* como função da temperatura para vários valores de campo magnético. O parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta}$ identifica a Ordem Oculta. Na região de temperatura, onde $z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta} = 0$, portanto $\kappa_{\vec{Q},\sigma} = 0$, o estado do sistema é paramagnético. Para campo magnético, $H_z = 0$, quando a temperatura é aumentada, o *gap* vai continuamente a zero, o que é característico de uma transição de segunda ordem. Com $H_z = 0$, a transição do estado da ordem oculta para o estado paramagnético ocorre na temperatura de aproximadamente 17,5K. Aumentando o campo magnético para $H_z = 10T$, a transição continua sendo contínua, no entanto a temperatura, na qual a transição ocorre, diminui. Aumentando ainda mais o campo magnético, como no casos de $H_z = 20T$ e $H_z = 27T$, o comportamento do *gap* é o mesmo verificado para os campos de 0 e 10T.

Por outro lado, para $H_z = 28T$, observa-se que próximo da temperatura de transi-

ção, o *gap* apresenta uma descontinuidade. Essa descontinuidade é mais evidente para $H_z = 29T$ e $H_z = 30T$. A partir de $28T$, o *gap* cai abruptamente a zero, o que caracteriza uma transição de primeira ordem, ocorrendo essa transição em torno de $9,8K$. Outro ponto interessante observado na figura 5.1 é que, para baixas temperaturas, o *gap* depende pouco do campo magnético.

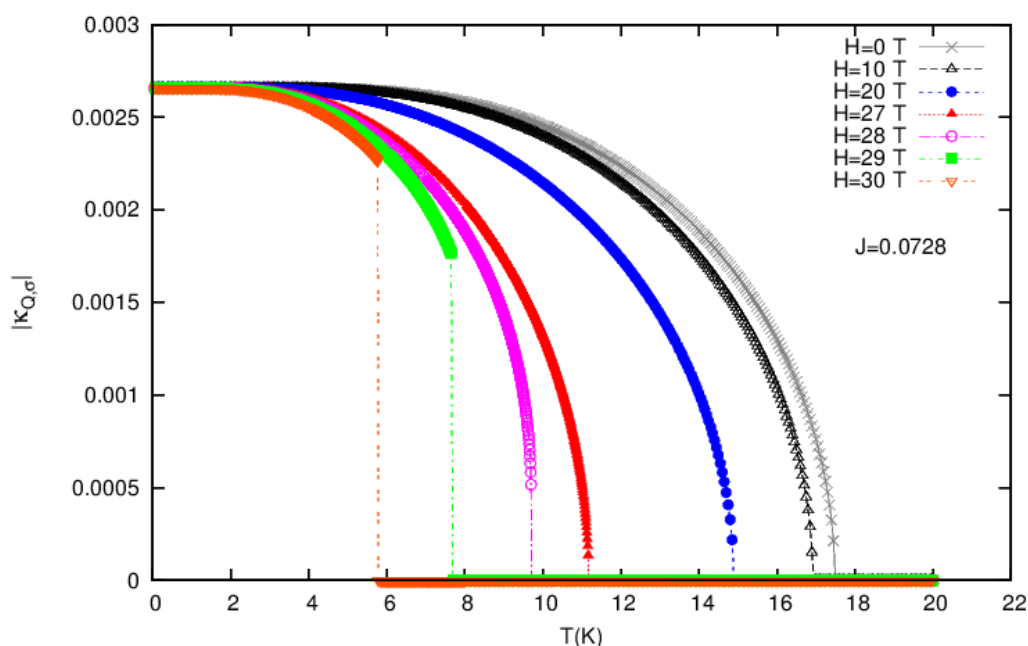


Figura 5.1: *gap* como função da temperatura para diferentes valores de campo magnético.

Na figura 5.2, observa-se o *gap* como função do campo magnético para 3 valores de temperatura. Pode-se observar que o *gap* tem um comportamento interessante quando aplicado um campo magnético externo. Para baixas temperaturas, $T = 7,7K$, há uma queda descontínua do *gap* de um valor de aproximadamente $0,025$ para zero, caracterizando uma transição de primeira ordem em torno de $H_z = 29T$. Conforme discutido no capítulo 3 (para um sistema PVT), figura 3.3, V é a variável extensiva e descontínua, que, nesse caso, é equivalente ao *gap*, e P é a variável intensiva e contínua equivalente ao campo. Uma descontinuidade no *gap* (parâmetro de ordem) indica uma transição de fase de primeira ordem. É importante lembrar que, quando o *gap* vai a zero, o parâmetro de ordem também vai a zero, devido à relação existente entre ambos, citada no início dessa seção, equação (5.1). Para valores mais elevados de temperatura $T = 14,8K$ e $T = 17K$, o *gap* vai continuamente a zero, ocorrendo uma transição de segunda ordem em aproximadamente $H_z = 20T$ e $H_z = 9T$, respectivamente.

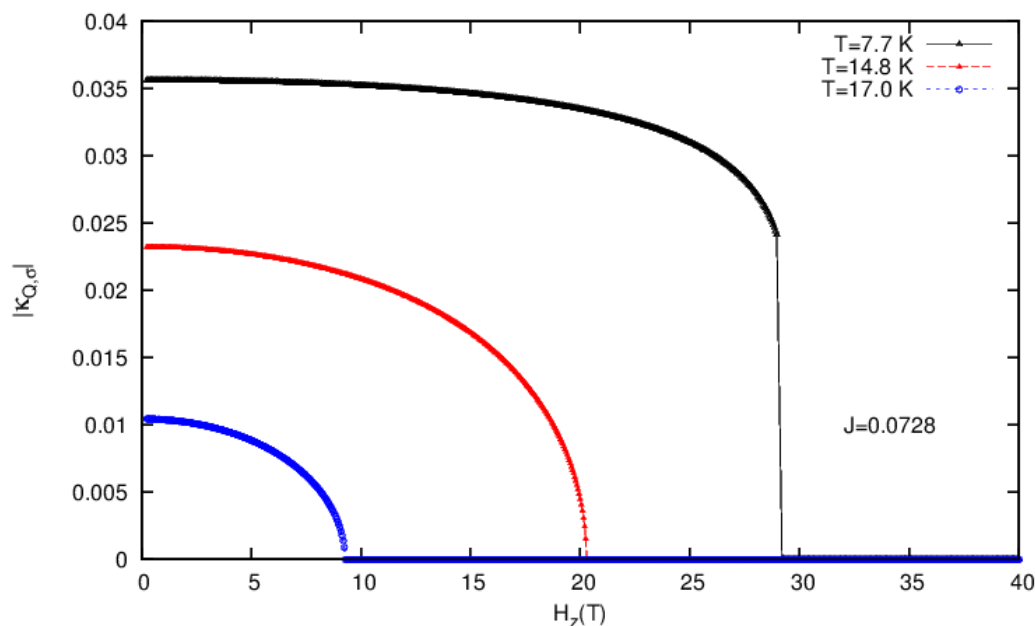


Figura 5.2: gap como função do campo magnético para diferentes valores de temperatura.

As transições de fases, obtidas através do gap , podem ser melhor evidenciadas em um diagrama de fases.

5.2 Diagrama de Fases

O diagrama de fases nos mostra as regiões de transições de fases para o modelo. Como já discutido no capítulo 3, a classificação das transições de fase depende das variáveis extensivas e intensivas do sistema. Na figura 5.3, temos um diagrama de fases T-H, ou seja, temperatura por campo magnético. Para valores de campo magnético até $\sim 23T$, a transição paramagnética-Ordem Oculta é de segunda ordem. Conforme aumenta o valor do campo magnético e diminui o valor da temperatura, a partir de $23T$ e $9,8K$, respectivamente, temos uma região de múltiplas soluções, para o parâmetro de ordem $z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta}$. Esta região está demarcada pelas spinodais. Essas curvas spinodais estão posicionadas entre a fase Ordem Oculta (OO) e a fase paramagnética (PM), indicando uma região de transição de primeira ordem. A solução “verdadeira”, a que interessa ao modelo apresentado, é a solução com o menor valor de energia livre, ou seja, as múltiplas soluções para energia livre são testadas e a de menor valor é a escolhida. Os valores do campo e da temperatura, que correspondem à solução de $z_{\vec{Q},\sigma}^{\alpha,\beta}$ associada à menor energia livre, estão indicados no diagrama de fases como linha de transição de primeira ordem que está localizada entre as duas spinodais.

Outro ponto importante a ser observado é que, conforme a temperatura do sistema diminui, os pontos spinodais se afastam uns dos outros. O contrário também pode

ser observado, ou seja, à medida que a temperatura do sistema aumenta, os pontos spinodais se aproximam uns dos outros, encontrando-se ao atingirem a temperatura da Ordem Oculta T_{OO} , em aproximadamente 9,8K. Quando $T = T_{OO}$, a região de múltiplas soluções desaparece, o que comprova a influência do aumento da temperatura no sistema tratado. Sendo assim, o ponto crítico pode ser classificado como um ponto limite da família dos pontos spinodais (FILHO, 2011); esse ponto crítico, pode ser observado na figura 5.3, em aproximadamente $H_z = 28T$.

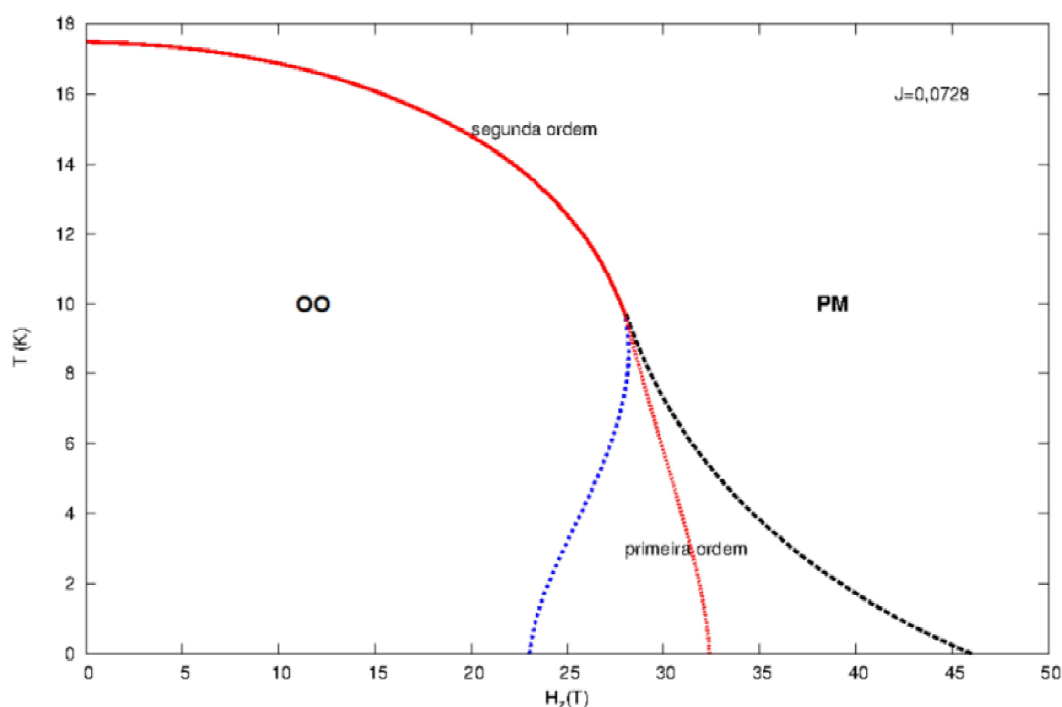


Figura 5.3: Diagrama de fases $T \times H$. A linha vermelha contínua indica uma transição de segunda ordem e a linha vermelha pontilhada indica uma transição de primeira ordem.

O diagrama de fases, obtido para o modelo tratado nesse trabalho, evidencia um comportamento qualitativo que está de acordo com os resultados experimentais obtidos por Correa *et al.* (CORREA V.F., 2012). Do ponto de vista quantitativo, também, há uma boa concordância com os resultados experimentais, uma vez que a razão entre campo magnético e temperatura para os dados experimentais é $\frac{B(T=0)}{T(B=0)} \simeq 2$ e a razão para os resultados teóricos obtidos nesse trabalho é $\frac{H_z(T=0)}{T(H_z=0)} \simeq 1,85$. É importante destacar que a região de primeira ordem, observada no diagrama de fases da figura 5.3, está de acordo com o diagrama de fases experimental da figura 2.5. Na figura 2.5, temos o diagrama de fases experimental, onde a região III não foi objeto de estudo neste trabalho.

Como já discutido anteriormente, através do diagrama de fases, podemos observar a região de transição de fases para o modelo. O mesmo pode ser observado no parâmetro de ordem, pois nos fornece a temperatura crítica de transição.

5.3 Entropia

A entropia S em função da temperatura é mostrada na figura 5.4, para valores diferentes de campo magnético. Observa-se que, para campo magnético $H_z = 0$, quando a temperatura é aumentada, a entropia apresenta um comportamento aproximadamente quadrático até 17,5K. Acima de 17,5K, a entropia apresenta um comportamento linear. Esse comportamento apresentado pela entropia é característico de uma transição de segunda ordem. Com $H_z = 0$, a transição do estado da Ordem Oculta para o estado paramagnético ocorre na temperatura de aproximadamente 17,5K. Aumentando o campo magnético para $H_z = 10T$, observa-se que a entropia mantém seu crescimento aproximadamente quadrático, pois a transição continua sendo contínua, no entanto a temperatura, na qual a transição ocorre, diminui. Aumentando ainda mais o campo magnético, como no casos de $H_z = 20T$ e $H_z = 27T$, o comportamento da entropia é o mesmo verificado para os campos de 0 e 10T.

Por outro lado, para H_z a partir de 28T, próximo da temperatura de transição, S apresenta uma descontinuidade, indicando uma transição de primeira ordem. Essa transição ocorre em aproximadamente 8,0K. A descontinuidade apresentada por S é mais evidente para $H_z = 30T$, no entanto, nesse caso, a temperatura, na qual a transição ocorre, diminui. Essa transição ocorre em aproximadamente 7,0K.

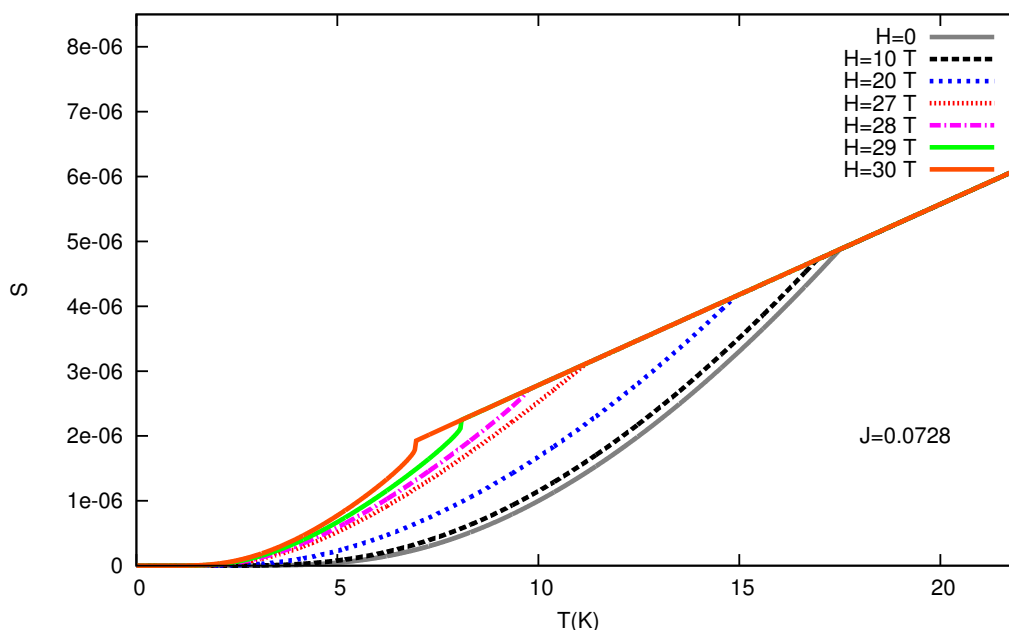


Figura 5.4: Entropia como função da temperatura para diferentes valores de campo magnético.

Uma outra quantidade física importante no estudo da Ordem Oculta no URu_2Si_2 é o calor específico C_V . A transição Paramagnética-Ordem Oculta ($PM - OO$) foi observada, pela primeira vez, em medidas experimentais do calor específico (MYDOSH; OPPENEER, 2014).

5.4 Calor Específico

O calor específico é dado pela derivada segunda da energia livre, conforme já discutido no capítulo 3. O calor específico C_V em função da temperatura é mostrado na figura 5.5, para valores diferentes de campo magnético. Observa-se que, para campo magnético $H_z = 0$, quando a temperatura é aumentada, o C_V cresce lentamente e tem seu pico mais aberto, o que é característico de uma transição de segunda ordem. Com $H_z = 0$, a transição do estado da ordem oculta para o estado paramagnético ocorre na temperatura de aproximadamente 17,5K. Aumentando o campo magnético para $H_z = 10T$, observa-se que o C_V mantém seu crescimento lento e pico mais aberto, pois a transição continua sendo contínua, no entanto a temperatura, na qual a transição ocorre, diminui. Aumentando ainda mais o campo magnético, como no casos de $H_z = 20T$ e $H_z = 27T$, o comportamento do C_V é o mesmo verificado para os campos de 0 e 10T.

Por outro lado, para $H_z = 28T$, observa-se que, próximo da temperatura de transição, o C_V apresenta um comportamento diferente, pois o pico do C_V fica mais estreito, indicando uma transição de primeira ordem. Essa transição ocorre em torno de 9,8K. A descontinuidade apresentada pelo C_V é mais evidente para $H_z = 29T$ e $H_z = 30T$. Essa descontinuidade no C_V está de acordo com a temperatura crítica de transição paramagnética-Ordem Oculta, fornecida pelo parâmetro de ordem, figura 5.1.

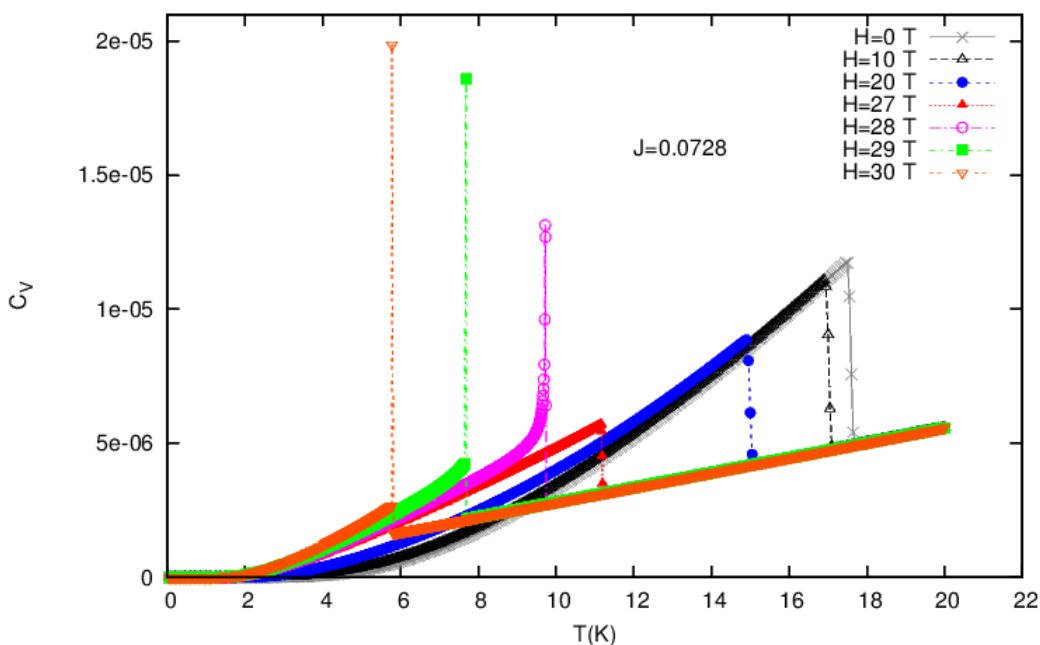


Figura 5.5: Calor específico como função da temperatura para diferentes valores de campo magnético.

Ao compararmos a figura 5.5, que mostra o resultado teórico para o calor específico como função da temperatura para diferentes valores de campo magnético, e a figura 2.4, onde temos o resultado experimental obtido por Jaime e seus colaboradores (JAIME

M., 2002), comprovamos que o resultado teórico obtido, nesse trabalho, evidencia um comportamento qualitativo que está de acordo com o resultado experimental.

Quando o calor específico é variado em função do campo magnético, como mostrado na figura 5.6, para diferentes valores de temperatura, também, observa-se a descontinuidade que indica a transição de fase. Para temperatura $T = 7,7K$, quando o campo magnético é aumentado, o C_V apresenta uma descontinuidade, tendo o pico mais estreito, o que é característico de uma transição de primeira ordem. Aumentando a temperatura, como nos casos de $T = 11K$ e $T = 14,8K$, o comportamento do C_V passa a ser característico de uma transição de segunda ordem, pois possui um pico mais aberto e valores mais baixos de campo magnético.

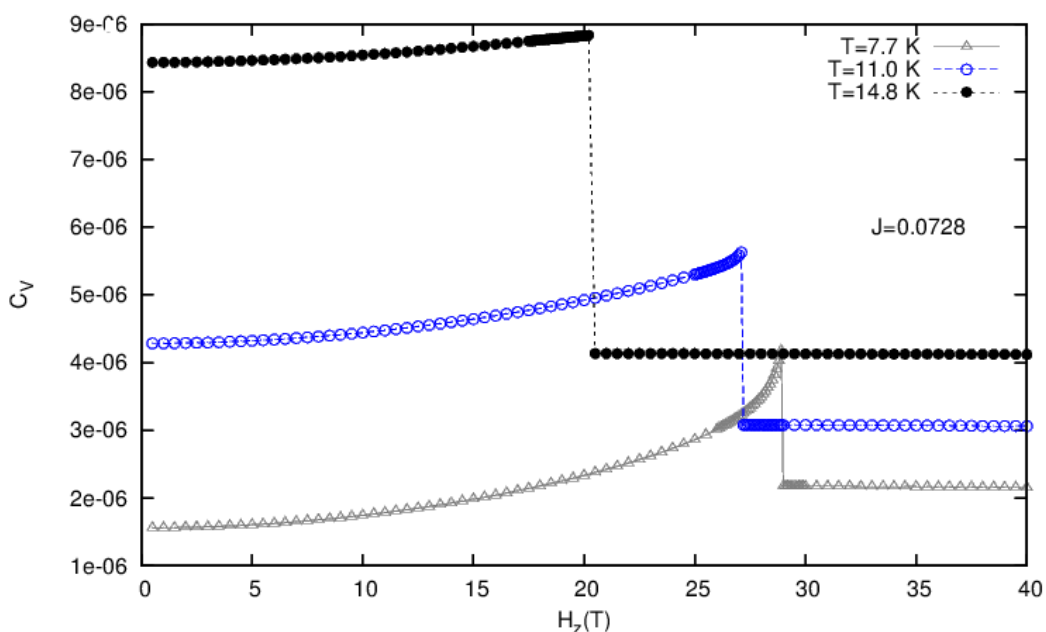


Figura 5.6: Calor Específico como função do campo magnético para 3 valores de temperatura.

A figura 5.7 mostra o *gap* em função do campo magnético para as mesmas temperaturas consideradas na figura 5.6. Para baixas temperaturas $T = 7,7K$, há uma queda descontínua do *gap* de um valor de aproximadamente 0,025 para zero, caracterizando uma transição de primeira ordem em torno de $H_z = 29T$. Para valores mais elevados de temperatura $T = 11K$ e $T = 14,8K$, o *gap* vai continuamente a zero, ocorrendo uma transição de segunda ordem em aproximadamente $H_z = 27T$ e $H_z = 20T$, respectivamente.

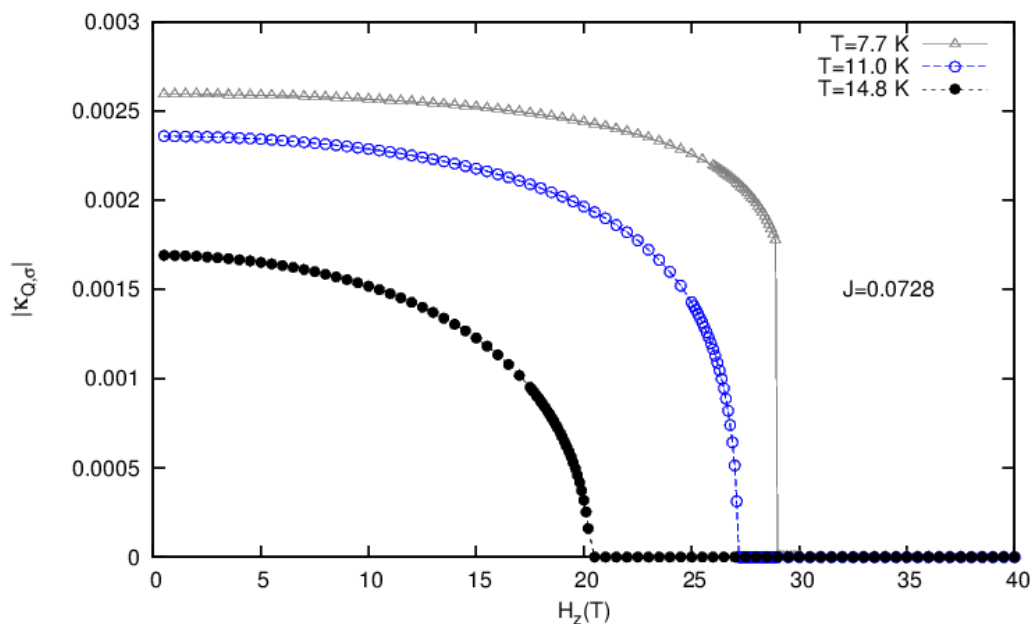


Figura 5.7: *gap* como função do campo magnético para 3 valores de temperatura.

O comportamento apresentado pelo C_V e pelo *gap*, ambos em função do campo magnético, estão de acordo com os resultados apresentados no diagrama de fases da figura 5.3. Isso deixa mais uma vez em evidência que, para baixas temperaturas, o *gap* depende pouco do campo magnético.

Outra quantidade física obtida no estudo do modelo mínimo é a Susceptibilidade Magnética e tem por finalidade investigar a nematicidade magnética.

5.5 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética como função da temperatura foi calculada para casos distintos: no primeiro caso, o campo magnético externo H_z é aplicado paralelo ao eixo de quantização e, no segundo caso, o campo magnético H_x é aplicado perpendicular ao eixo de quantização.

Na figura 5.8, pode-se observar que, quando o campo magnético externo H_z está presente, a susceptibilidade magnética χ_z é fortemente dependente da temperatura, enquanto que, para o campo magnético H_x , a susceptibilidade magnética χ_x não depende da temperatura. A transição paramagnética-Ordem Oculta (PM-OO) corresponde à intersecção entre as susceptibilidades χ_z e χ_x , ocorrendo em torno de 17,5K. Este resultado está de acordo com o resultado experimental obtido por Pfeleiderer e seus colaboradores (PFLEIDERER C.; VOJTA, 2006).

O fato da susceptibilidade χ_z ser fortemente dependente da temperatura, enquanto que a susceptibilidade χ_x independe da temperatura, indica que abaixo de 17,5K, ou seja,

na região da Ordem Oculta, a invariância spin-rotacional do sistema é quebrada.

Ao compararmos o resultado teórico da figura 5.8 e o resultado experimental mostrado na figura 2.6, obtido por Palstra *et al.* (PALSTRA T.T.M., 1985), comprovamos que o resultado teórico obtido nesse trabalho evidencia um comportamento qualitativo que está de acordo com o resultado experimental. Esse resultado também está de acordo com resultados experimentais mais recentes obtidos por Okasaki e seus colaboradores (OKASAKI R., 2011; OKASAKI, 2013).

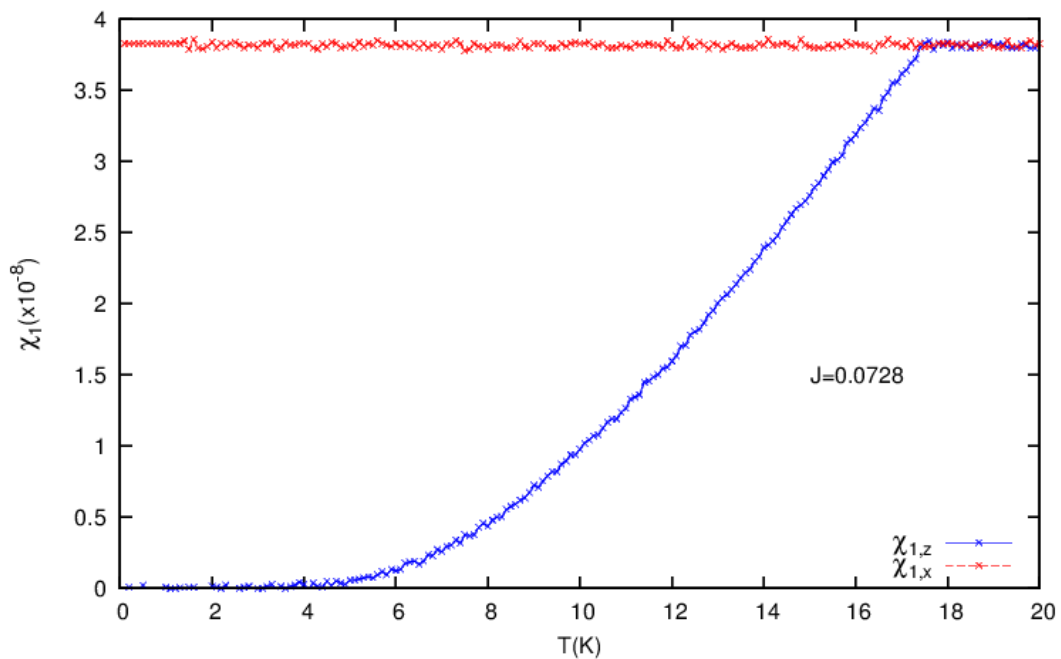


Figura 5.8: Susceptibilidade magnética como função da temperatura para campos paralelo H_z e perpendicular H_x .

5.6 Instabilidade do estado paramagnético em relação ao estado Ordem Oculta

A análise da estabilidade da Ordem Oculta pode ser feita através da investigação da susceptibilidade $\chi^{\alpha\beta}$ conforme é discutido na referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012). No caso do URu_2Si_2 , o estado da Ordem Oculta compete com um estado antiferromagnético. Portanto, é necessário analisar também as susceptibilidades $\chi^{\alpha\alpha}$ e $\chi^{\beta\beta}$ que estão associadas à estabilidade da ordem antiferromagnética.

Na figura 5.9, tem-se a susceptibilidade $\chi^{\alpha\beta}$ e $\chi^{\alpha\alpha} + \chi^{\beta\beta}$ versus o potencial químico para o modelo mínimo. A região com a divergência em $\chi^{\alpha\beta}$ é a região em que o estado paramagnético torna-se instável em relação à Ordem Oculta e, também, em relação ao estado antiferromagnético, exatamente no mesmo valor de potencial químico. Isso significa que não há como saber qual dos estados, Ordem Oculta ou antiferromagnético, é

mais estável nessa região de potencial químico. Uma forma de corrigir esse problema seria introduzir uma banda de condução hibridizada com uma das bandas α ou β . Esse é o caso do "modelo completo" discutido na referência (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012).

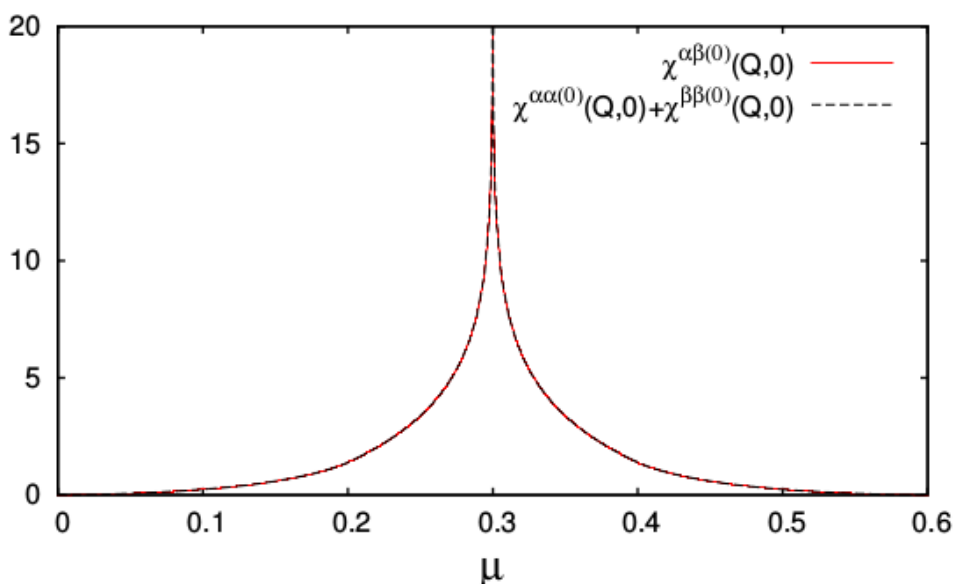


Figura 5.9: Susceptibilidade intrabanda $\chi^{\alpha\alpha} + \chi^{\beta\beta}$ e interbanda $\chi^{\alpha\beta}$ como função do potencial químico.

Na figura 5.10, tem-se a susceptibilidade versus o potencial químico para o modelo completo do URu_2Si_2 (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012). A susceptibilidade intrabanda é determinada pela soma da susceptibilidade da banda α com a susceptibilidade da banda β , ou seja, $\chi^{\alpha\alpha} + \chi^{\beta\beta}$. O primeiro pico é originário da susceptibilidade da banda β e o segundo da susceptibilidade da banda α .

A divergência associada à banda α se desloca em relação à divergência associada à banda β não hibridizada. Com isso, surge uma janela onde se encontra a divergência de $\chi^{\alpha\beta}$. Isso significa que, nessa "janela", a solução da Ordem Oculta é mais estável do que a solução antiferromagnética.

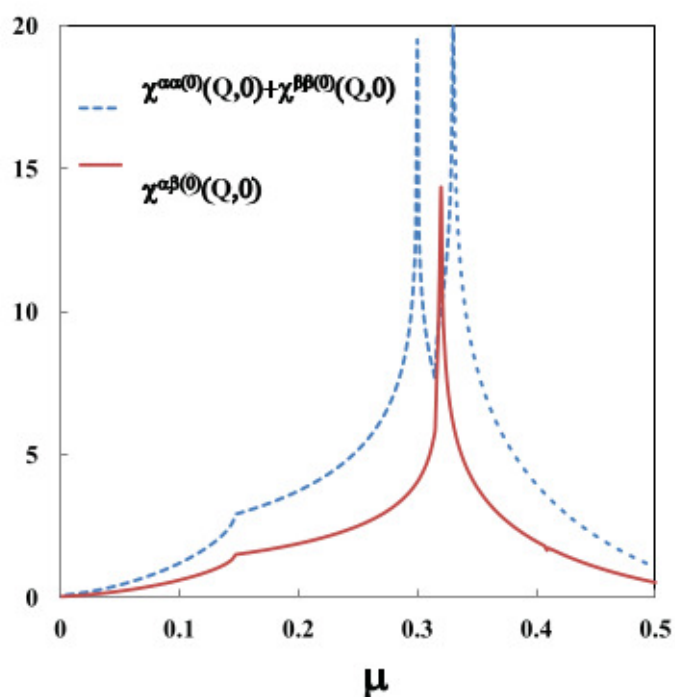


Figura 5.10: Susceptibilidade intrabanda $\chi^{\alpha\alpha} + \chi^{\beta\beta}$ e interbanda $\chi^{\alpha\beta}$ como função do potencial químico para o "Modelo completo" com hibridização e banda de condução. Fonte: (RISEBOROUGH; COQBLIN; MAGALHÃES, 2012)

É importante ressaltar que, mesmo apresentando essa dificuldade para definir qual estado é mais estável, Ordem Oculta ou antiferromagnético, o modelo mínimo é um bom ponto de partida para o estudo da Ordem Oculta no URu_2Si_2 . Uma prova disto é a boa concordância qualitativa entre o diagrama de fases teórico e o experimental.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, foi investigado um modelo mínimo proposto para descrever o composto URu_2Si_2 . Este composto atraiu muito interesse nas últimas décadas devido ao seu comportamento incomum. No URu_2Si_2 , existe uma transição para uma fase de natureza desconhecida que não pode ser classificada como uma fase magnética usual. Essa fase tem sido chamada de Ordem Oculta e ainda é um problema em aberto desde a sua descoberta em 1984. Através do estudo do modelo mínimo, pode-se obter o calor específico, a susceptibilidade magnética e o *gap* da Ordem Oculta. Para isso, o modelo foi tratado pela aproximação de campo médio. Ao se aplicar um campo magnético no sistema, o mesmo exibe um comportamento muito interessante. Os efeitos do campo magnético no *gap* da Ordem Oculta, no calor específico e na susceptibilidade do modelo mínimo, foram investigados.

Os resultados foram então analisados em gráficos que mostram o comportamento do *gap* da Ordem Oculta, da entropia, do calor específico e da susceptibilidade magnética. Além disso, o diagrama de fases da temperatura T em função do campo magnético H também foi analisado e, a partir desse diagrama, pode-se observar uma região de transição de primeira ordem. Esta região apresenta múltiplas soluções para o parâmetro de ordem. A região de múltiplas soluções está indicada no diagrama de fases através de duas spinodais. Na região de múltiplas soluções, temos sempre 3 soluções: 1 solução trivial e 2 soluções não triviais (por isso, é chamada região de múltiplas soluções). Para marcarmos exatamente o valor de campo magnético em que a transição de fase ocorre para uma dada temperatura, foi necessário analisar a energia livre de cada uma das 3 soluções, onde a solução associada à menor energia livre foi escolhida. Esse processo foi repetido para cada valor de temperatura na região de múltiplas soluções.

Na região de campos altos, o *gap* em função da temperatura apresenta uma descontinuidade, indicando uma possível transição de primeira ordem. A análise do calor específico mostra que, para baixos campos, o C_V aumenta lentamente com a temperatura e tem uma anomalia (descontinuidade) na temperatura de transição (Ordem Oculta-Paramagnética). No entanto, o comportamento do calor específico, para campos acima de 28T, mostra que o C_V aumenta abruptamente com a temperatura. O pico mais aberto do calor específico é característico de uma transição de segunda ordem, enquanto que um pico mais pontiagudo e simétrico caracteriza uma região de primeira ordem. Ao analisarmos a susceptibilidade, observamos que, para campos paralelos, a susceptibilidade é altamente dependente da temperatura e apresenta um comportamento anisotrópico. Para campos perpendiculares ao eixo de quantização, a susceptibilidade não depende da temperatura. Quando as susceptibilidades para os dois campos se cruzam, ocorre a transição Ordem Oculta-paramagnética.

Quando um campo magnético é considerado no modelo mínimo, observa-se que o *gap* apresenta uma dependência interessante ao campo magnético, bem como o calor específico. A transição de segunda ordem perde seu caráter para valores de campo acima de $27T$, sendo necessário um campo magnético acima de $32T$ para destruir a Ordem Oculta do sistema. Resultados experimentais mostram que a transição de segunda ordem perde seu caráter para valores de campo em torno de $28,8T$ (JAIME M., 2002), sendo necessário um campo magnético acima de $35T$ para destruir a Ordem Oculta do sistema (CORREA V.F., 2012). Com isso, evidencia-se que o modelo introduzido por Riseborough, Magalhães e Calegari (RISEBOROUGH; MAGALHAES; CALEGARI, 2014) apresenta um comportamento qualitativo que está de acordo com os resultados experimentais obtidos por Jaime e seus colaboradores (JAIME M., 2002) e também por Correa *et al.* (CORREA V.F., 2012).

Uma deficiência, observada nesse modelo, foi a falta de uma banda d dos elétrons de condução hibridizada com uma banda f . Conforme discutido na seção 5.6, o estado da Ordem Oculta compete com uma ordem antiferromagnética. Na presente teoria, a hibridização é fundamental para obter uma região de estabilidade da fase Ordem Oculta. No entanto, embora não consiga levantar a degenerescência entre o estado Ordem Oculta e o estado antiferromagnético, o modelo mínimo considerado neste trabalho é mais simples que o modelo completo, permitindo obter resultados mais rapidamente. Com este modelo mínimo, foi possível adquirir um diagrama de fases, calor específico e susceptibilidade que estão qualitativamente em concordância com os resultados obtidos experimentalmente.

Como perspectivas, pretende-se fazer um estudo detalhado da estrutura de bandas e da superfície de Fermi na presença do campo magnético. Outra possibilidade é fazer um estudo da susceptibilidade não linear, já que existem estudos teóricos e experimentais mostrando uma relação $C_V = \alpha\chi_3$ entre o calor específico e a susceptibilidade não linear (RAMIREZ A.P., 1991; CHANDRA P. COLEMAN; FLINT, 2013).

Apêndice A - Regras de Hund

Em um átomo com muitos elétrons, os momentos angulares orbital e de spin de cada elétron se combinam de modo a formar o momento total do átomo (OLIVEIRA; JESUS, 2011):

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (\text{A.1})$$

onde $\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i$ e $\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i$.

Vale ressaltar que o momento magnético é uma grandeza proporcional ao momento angular, seja ele extrínseco (\vec{L}), ou intrínseco (\vec{S}). O átomo será magnético se possuir momento magnético total diferente de zero e, portanto, momento angular total \vec{J} diferente de zero. Para sabermos o valor de J de um átomo no estado fundamental, aplicamos as regras de Hund (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

Na primeira regra, o spin total do átomo deve ser maximizado e consiste com o princípio de exclusão, ou, distribuindo os elétrons nos estados m_l de modo a maximizar o spin total (ou seja, na medida do possível tentar manter todos os spins apontados na mesma direção).

Já na segunda regra, o momento angular total deve ser maximizado e consistente com a primeira regra, ou, mantendo a primeira regra mandatória, destruir os elétrons nos estados m_l de modo a maximizar o momento angular total (ou seja, manter a soma dos valores de m_l a maior possível).

E, por fim, na terceira regra, se a camada eletrônica estiver mais da metade cheia, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, caso contrário $\vec{J} = |\vec{L} - \vec{S}|$.

Apêndice B - Energia Livre de Helmholtz

Podemos reescrever a energia livre de Helmholtz da equação (4.63) em uma forma mais simples que facilitará o tratamento numérico.

Definindo,

$$A_1 = \mu N_{elec} - JN \left(z_{Q,\uparrow}^{\alpha,\beta} z_{-Q,\downarrow}^{\beta,\alpha} + z_{Q,\downarrow}^{\alpha,\beta} z_{-Q,\uparrow}^{\beta,\alpha} \right), \quad (\text{B.2})$$

$$n_{k,\sigma}^{\pm} = \frac{1}{B}, \quad (\text{B.3})$$

$$B = e^x + 1, \quad (\text{B.4})$$

$$x = \frac{E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu}{k_B T}. \quad (\text{B.5})$$

Então tem-se:

$$F = \sum_{\pm k,\sigma} \left\{ (E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu) \frac{1}{B} + k_B T \left(\ln \left(\frac{1}{B} \right) \frac{1}{B} + \left(1 - \frac{1}{B} \right) \ln \left(1 - \frac{1}{B} \right) \right) \right\} + A_1, \quad (\text{B.6})$$

com $A_2 = \frac{(E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu)}{B}$.

Primeiro, resolve-se $\ln \left(\frac{1}{B} \right)$ e $\ln \left(1 - \frac{1}{B} \right)$,

$$\ln \left(\frac{1}{B} \right) = \ln(1) - \ln(B) = -\ln B \quad (\text{B.7})$$

e

$$\ln \left(1 - \frac{1}{B} \right) = \ln \left(\frac{B-1}{B} \right) = \ln(B-1) - \ln B \quad (\text{B.8})$$

Agora, substituindo as equações (B.7) e (B.8) na equação (B.6), tem-se:

$$F = \sum_{\pm k,\sigma} \left\{ A_2 + \frac{k_B T}{B} (-\ln B) + k_B T (\ln(B-1) - \ln B) - \frac{k_B T}{B} (\ln(B-1) - \ln B) \right\} + A_1, \quad (\text{B.9})$$

$$F = \sum_{\pm k,\sigma} \left\{ A_2 - \frac{k_B T \ln B}{B} + k_B T (\ln(e^x + 1) - 1) - k_B T \ln B \right\} - \left\{ \frac{k_B T \ln(e^x + 1) - 1}{B} + \frac{k_B T \ln B}{B} \right\} + A_1, \quad (\text{B.10})$$

$$F = \sum_{\pm k,\sigma} \left\{ \frac{(E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu)}{B} + k_B T x - k_B T \ln B - \frac{k_B T x}{B} \right\} + A_1, \quad (\text{B.11})$$

$$F = \sum_{\pm k,\sigma} \left\{ \frac{(E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu)}{B} + k_B T \frac{(E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu)}{k_B T} - k_B T \ln B - \frac{k_B T (E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu)}{B} \right\} + A_1, \quad (\text{B.12})$$

$$F = \sum_{\pm k,\sigma} \left\{ \frac{(E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu)}{B} + (E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu) - k_B T \ln B - \frac{(E_{k,\sigma}^{\pm} - \mu)}{B} \right\} + A_1, \quad (\text{B.13})$$

$$F = \sum_{\pm k, \sigma} \{ (E_{k, \sigma}^{\pm} - \mu) - k_B T \ln(1 + e^x) \} + A_1. \quad (\text{B.14})$$

Trabalhando no $\ln(1 + e^x)$:

$$\begin{aligned} \ln(1 + e^x) &= \ln\left(1 + \frac{1}{e^{-x}}\right) \\ &= \ln\left(\frac{e^{-x} + 1}{e^{-x}}\right) \\ &= \ln(e^{-x} + 1) - \ln e^{-x}, \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

$$\ln(1 + e^x) = \ln(e^{-x} + 1) + x. \quad (\text{B.16})$$

Substituindo a equação (B.16), na equação (B.14), tem-se:

$$F = \sum_{\pm k, \sigma} \{ (E_{k, \sigma}^{\pm} - \mu) - k_B T (\ln(e^{-x} + 1) + x) \} + A_1, \quad (\text{B.17})$$

$$F = \sum_{\pm k, \sigma} \left\{ (E_{k, \sigma}^{\pm} - \mu) - k_B T \ln(e^{-x} + 1) - k_B T \frac{(E_{k, \sigma}^{\pm} - \mu)}{k_B T} \right\} + A_1, \quad (\text{B.18})$$

$$F = \sum_{\pm k, \sigma} \{ (E_{k, \sigma}^{\pm} - \mu) - k_B T \ln(e^{-x} + 1) - (E_{k, \sigma}^{\pm} - \mu) \} + A_1. \quad (\text{B.19})$$

Substituindo a equação (B.2), na equação acima, temos a energia livre de Helmholtz para o modelo dado pela equação (4.59):

$$F = - \sum_{\pm k, \sigma} k_B T \ln(e^{-x} + 1) + \mu N_{elec} - JN \left(z_{Q, \uparrow}^{\alpha, \beta} z_{-Q, \downarrow}^{\beta, \alpha} + z_{Q, \downarrow}^{\alpha, \beta} z_{-Q, \uparrow}^{\beta, \alpha} \right). \quad (\text{B.20})$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BROHOLM C., K. J. B. W. M. P. P. T. M. A.; MYDOSH, J. Magnetic excitations and ordering in the heavy-electron superconductor URu_2Si_2 . **Physical Review Letters**, v. 58, p. 1467–1470, 2007.

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

CHANDRA P. COLEMAN, P.; FLINT, R. Origin of the large anisotropy in the x^3 anomaly in URu_2Si_2 . **Journal of Physics:10th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S-X)**, v. 449, p. 012026, 2013.

CORREA V.F., e. a. High-magnetic-field lattice length changes in URu_2Si_2 . **Physical Review Letters**, v. 109, p. 246405, 2012.

C.THOMAS A.S. DA ROSA SIMÕES, I. J. L. C. P. N.; COQBLIN, B. Application of the $s=1$ underscreened anderson lattice model to kondo uranium and neptunium compounds. **Physical Review B**, v. 83, p. 014415, 2011.

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

FILHO, O. L. d. S. **Diagramas de fase para a matéria nuclear e de quarks**. 2011. 116 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal Fluminense - Instituto de Física, Niterói, 2011.

JAIME M., e. a. High magnetic field studies of the hidden order transition in URu_2Si_2 . **Physical Review Letters**, v. 89, n. 28, p. 287201, 2002.

LOUISELL, W. **Quantum statistical properties of radiation**. New York: John Wiley; Sons, 1990.

MAPLE M.B., e. Partially gapped fermi surface in the heavy-electron superconductor URu_2Si_2 . **Physical Review Letters**, v. 56, 1986.

MATSUDA K., K. Y. K. T. K. K.; AMITSUKA, H. Spatially inhomogeneous development of antiferromagnetism in URu_2Si_2 : Evidence from Si^{29} NMR under pressure. **Physical Review Letters**, v. 87, p. 087203, 2007.

MYDOSH, J.; OPPENEER, P. Colloquium: Hidden order, superconductivity, and magnetism: The unsolved case of URu_2Si_2 . **Reviews of Modern Physics**, v. 83, n. 4, p. 1301 – 1322, 2011.

_____. Hidden order behaviour in URu_2Si_2 (a critical review of the status of hidden order in 2014). **Philosophical Magazine**, v. 94, n. 00, p. 3642 – 3662, 2014.

NIKLOWITZ P.G., e. a. Parasitic small-moment antiferromagnetism and nonlinear coupling of hidden order and antiferromagnetism in URu_2Si_2 observed by larmor diffraction. **Physical Review Letters**, v. 104, p. 106406, 2010.

OKASAKI, R. **Hidden Order and Exotic Superconductivity in the Heavy-Fermion Compound URu_2Si_2** . 2013. Tese (Doctoral Thesis), 2013.

OKASAKI R., e. a. Rotational symmetry breaking in the hidden-order phase of URu_2Si_2 . **Science**, v. 331, p. 439 – 442, 2011.

OLIVEIRA, I.; JESUS, V. **Introdução à física do estado sólido**. São Paulo: Livraria da Física, 2011.

PALSTRA T.T.M., e. Superconducting and magnetic transitions in the heavy-fermion system URu_2Si_2 . **Physical Review Letters**, v. 55, n. 24, p. 2727, 1985.

PERKINS N.B., N.-R. M. C. B.; IGLESIAS, J. R. Underscreened kondo lattice model applied to heavy fermion uranium compounds. **Physical Review B**, v. 76, p. 125101, 2007.

PFLEIDERER C., M.-J.; VOJTA, M. Pressure dependence of the magnetization of URu_2Si_2 . **Physical Review B**, v. 74, p. 104412, 2006.

PUREUR, P. **Estado Sólido**. Porto Alegre: Instituto de Física - UFRGS, 2001.

PÉPIN C., N.-M. B. S.; FERRAZ, A. The modulated spin liquid: a new paradigm for URu_2Si_2 . **Physical Review Letters**, v. 106, p. 106601, 2011.

RAMIREZ A.P., e. a. Nonlinear susceptibility as a probe of tensor spin order in URu_2Si_2 . **Physical Review Letters**, v. 68, n. 17, p. 2680 – 2683, 1991.

REICHL, L. **A Modern Course in Statistical Physics**. New York: John Wiley; Sons, 1998.

REITZ, J.; MILFORD, F.; CHRISTY, R. **Fundamentos de teoria eletromagnética**. Rio de Janeiro: Campus, 1982.

RISEBOROUGH, P.; COQBLIN, B.; MAGALHÃES, S. Phase transition arising from the underscreened anderson lattice model: A candidate concept for explaining hidden order in URu_2Si_2 . **Physical Review B**, v. 85, p. 165116, 2012.

RISEBOROUGH, P.; MAGALHAES, S.; CALEGARI, E. A minimal model for "hidden order" in URu_2Si_2 . **Philosophical Magazine**, 2014.

SCHEERER, G. **High-Magnetic-Field Study of the Heavy-Fermion System URu₂Si₂**. URu_2Si_2 . 2013. Tese (Doctoral Thesis), 2013.

SCHLABITZ W., e. a. Superconductivity and magnetic order in a strongly interacting fermi-system: URu_2Si_2 . **Z. Phys. B**, v. 62, p. 171 – 177, 1986.

VILLAUME A., e. a. Signature of hidden order in heavy fermion superconductor URu_2Si_2 : Resonance at the wave vector $q_0 = (1,0,0)$. **Physical Review B**, v. 78, p. 012504, 2008.