

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

SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA DE UM
MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO COM
INTERAÇÃO ATRATIVA

TESE DE DOUTORADO

Cesar de Oliveira Lobo

Santa Maria, RS, Brasil

2012

**SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA DE UM MODELO DE
HUBBARD ESTENDIDO COM INTERAÇÃO ATRATIVA**

por

Cesar de Oliveira Lobo

Tese de doutorado apresentada ao Curso de Doutorado do 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 a obtenção do grau de

Doutor em Física.

Orientador: Eleonir João Calegari

Santa Maria, RS, Brasil

2012

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

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,
aprova a tese de doutorado

**SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA DE UM MODELO DE
HUBBARD ESTENDIDO COM INTERAÇÃO ATRATIVA**

elaborada por
Cesar de Oliveira Lobo

como requisito parcial para obtenção do grau de
Doutor em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

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

Amos Troper, Dr. (CBPF)

Carlos Mauricio Giesbrecht Ferreira Chaves, Dr. (CBPF)

Matheus Jatkoske Lazo, Dr. (FURG)

Lucio Strazzabosco Dorneles, Dr. (UFSM)

Santa Maria, 17 de janeiro de 2012.

Agradecimentos

Agradeço a todas as pessoas que, de uma forma ou de outra, colaboraram para a realização deste trabalho e, em particular:

- ao professor Eleonir João Calegari pela orientação segura e pela sua dedicação;
- ao professor Sergio Garcia Magalhães pelo incentivo;
- ao professor Amos Troper por ter proposto o tema deste trabalho;
- ao coordenador da Pós-Graduação em Física Rogério J. Baierle a secretaria Saionara M. Dutra pelo apoio durante a etapa final deste trabalho;
- aos meus colegas professores do Departamento de Física da UFSM: Fábio Zimmer, Celso A. M. da Silva, Marcos A. Carara, Paulo R. Magnago, Claudio Graça e Orimar Battistel;
- aos meus colegas do Laboratório de Física da Matéria Condensada: Ana Lausmann, Carlos A. V. Moraes Junior e Diego Carrilho;
- aos meus filhos: Bianca, Thales, Athos e Ísis, a minha irmã Vera a Betina e ao João pelo incentivo e carinho.

Dedico de forma especial este trabalho a Tina e em memória do meu pai José Lobo Ribeiro a quem tudo devo.

Resumo

Tese de doutorado
Programa de Pós-Graduação em Física
Universidade Federal de Santa Maria

SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA DE UM MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO COM INTERAÇÃO ATRATIVA

AUTOR: CESAR DE OLIVEIRA LOBO

ORIENTADOR: ELEONIR JOÃO CALEGARI

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 17 de janeiro de 2012.

Neste trabalho, investigamos certas propriedades anômalas do estado normal de sistemas de elétrons fortemente correlacionados, descrito por um modelo de Hubbard estendido, com interação atrativa. As equações de movimento das funções de Green são calculadas na aproximação de dois polos que gera às bandas de quasipartículas renormalizadas. A aproximação de dois polos dá origem a um conjunto de funções correlação. Em particular, a função correlação $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$, associadas às correlações antiferromagnética, desempenha um papel importante como fonte de anomalias no estado normal do modelo. A susceptibilidade magnética é calculada como função da ocupação n_T e da temperatura. Em baixas temperaturas, a susceptibilidade apresenta um pico para $n_T \cong 0,80$ e é nessa ocupação que as correlações antiferromagnéticas assumem um papel importante responsável pelo surgimento de pseudogaps na superfície de Fermi. O cálculo do calor específico em função da temperatura mostra uma estrutura de dois picos, um associado às flutuações de spin e localizado em baixas temperaturas e outro associado à flutuações de cargas localizado em temperaturas mais altas. Verificamos uma relação direta entre o pico, devido às flutuações de spins e às correlações spin-spin do tipo antiferromagnéticas. A superfície de Fermi definida pela função espectral ($A_{\vec{k},\sigma}(\omega)$) em $\omega = 0$ é calculada para diferentes ocupações. Foi observado que a partir de $n_T \cong 0,80$ a superfície de Fermi desenvolve “pockets” centrados no ponto nodal $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ como também pseudogaps nas proximidades dos pontos antinodais $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$.

Palavras-chave: sistemas de elétrons fortemente correlacionados; modelo de Hubbard; funções de Green; superfície de Fermi.

Abstract

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

Magnetic Susceptibility of an extended Hubbard model with attractive interaction

AUTHOR: CESAR DE OLIVEIRA LOBO

ADVISER: ELEONIR JOÃO CALEGARI

Local and Date: Santa Maria, January 17, 2011.

Anomalous properties of the normal state of a strongly correlated electron system described by an attractive extended Hubbard model are investigated. The equations of motion of the Green's functions are calculated with the two-pole approximation which gives rise to quasiparticle renormalized bands. The two-pole approximation leads to a set of correlation functions. In particular, the antiferromagnetic correlation function $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ plays an important role as a source of anomalies in the normal state of the model. The uniform static magnetic susceptibility as a function of occupation n_T and temperature is calculated. At low temperatures, the susceptibility presents a peak for $n_T \simeq 0.80$. The results suggest that it is the onset of short range antiferromagnetic correlations, which could be a mechanism for the pseudogap. The Fermi surface, defined by the spectral function $A(\omega = 0, \vec{k})$, is presented for different dopings. It has been observed that above $n_T \simeq 0.80$ the ordinary Fermi surface evolves to a hole-pocket with pseudogaps near the antinodal points $(0, \pi)$ and $(\pi, 0)$.

Keywords: strong correlations; Hubbard model; Green's functions; Fermi surfaces.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	8
2	SUPERCONDUTORES DE ALTAS TEMPERATURAS	10
2.1	A supercondutividade	10
2.2	Os supercondutores de altas temperaturas	11
2.3	Superfície de Fermi, gap supercondutor e a região pseudogap	15
2.4	Modelo de Hubbard	20
2.5	Modelo de Hubbard estendido com interação atrativa	22
2.6	Pseudogap e a susceptibilidade magnética	22
3	MÉTODO	25
3.1	A técnica das funções de Green	25
3.2	Funções de Green na formulação de Zubarev	26
3.3	Representação espectral para as funções correlação	29
3.4	Representação espectral para as funções de Green	30
3.5	Intensidade espectral $J(\omega)$ em termos de $G(E)$	32
3.6	Intensidade espectral $J(\omega)$ para $t = 0$ e $T = 0$	33
3.7	Aproximação de dois polos	34
3.8	Modelo de Hubbard de uma banda tratado na aproximação de dois polos . . .	36
3.9	Funções correlação no deslocamento de banda	39
3.10	Valor médio da energia de um sistema	43
3.11	Cálculo do calor específico eletrônico	46
4	FORMULAÇÃO GERAL DO PROBLEMA	48
4.1	O modelo	48

4.2	Cálculo da função espectral	53
4.3	Cálculos em primeira ordem do campo magnético	54
4.4	Cálculo analítico de α_σ , β_σ , φ_σ e λ_σ	61
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	66
5.1	Susceptibilidade magnética estática	66
5.2	Correlações spin-spin	68
5.3	Função espectral e a superfície de Fermi	70
5.4	Calor específico eletrônico	73
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	79
A	Apêndice	81
A.1	Segunda Quantização	81

1 INTRODUÇÃO

As ideias que norteiam o estudo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados são importantes porque ajudam a melhor entender as propriedades elétricas e magnéticas dos materiais, permitindo assim classificá-los como metais, isolantes e semicondutores (Dagotto (2005)). Um sistema é considerado fortemente correlacionado quando a interação Coulombiana entre uma partícula localizada em um orbital e uma itinerante é maior do que a energia cinética da partícula itinerante (Imada M.; Fujimori (1998)). O modelo mínimo para descrever esse sistema é bem descrito pelo modelo Hubbard (1963) de uma banda. Na categoria dos sistemas fortemente correlacionados, estão inclusos os cupratos supercondutores de altas temperaturas.

Os materiais supercondutores de altas temperaturas têm recebido muita atenção não só pelo interesse científico mas também devido à possibilidade de aplicação tecnológica (Lee (2006)). A importância não é só de ordem econômica mas também de ordem técnica: a obtenção de temperaturas muito baixas, inferiores à temperatura de transição dos supercondutores de altas temperaturas (temperatura crítica T_c), exige refrigeração com hélio líquido (que apresenta um alto custo de produção) ou hidrogênio líquido (material altamente explosivo). Para os supercondutores de altas temperaturas que apresentam temperaturas críticas superiores a 77 K , esta temperatura pode ser atingida com nitrogênio líquido (mais barato e não reativo). Quanto às possíveis aplicações tecnológicas dos supercondutores, vão desde a eletrônica rápida, micro e nanoeletrônica, usadas em circuitos lógicos e circuitos de memória, à produção de transporte de energia, passando pela revolução dos meios de transportes de alta velocidade (levitação magnética), sem esquecer das várias possibilidades que se acrescentam na medicina (magnetoencefalografia, ressonância nuclear magnética, etc).

A classe de materiais supercondutores de altas temperaturas conhecida como cupratos, descoberta por Bednorz e Muller (1986), se tornou um dos temas de grande interesse na física atual da matéria condensada. Os cupratos são materiais dispostos em camadas, mais precisamente planos de CuO_2 separados por reservatórios de cargas. Em geral, o diagrama de fases de um cuprato supercondutor mostra na fase normal a existência de uma enorme riqueza de fenômenos físicos. Um dos aspectos marcantes dessa fase é a anomalia conhecida como pseudogap. O pseudogap pode ser visto como uma supressão da densidade de estados (DOS) próximo ao nível de Fermi. A região pseudogap situa-se entre as fases antiferromagnética e

supercondutora em um regime de baixas dopagens e temperaturas.

Há um consenso atual na física da matéria condensada de que, para ser construída uma teoria completa para supercondutores de altas temperaturas, é preciso primeiro compreender bem os fenômenos anômalos do estado normal. É certo que a presença do pseudogap produz efeitos espectrais e que pelo menos duas são as possibilidades da origem dessas anomalias. Uma das possibilidades atribui a causa devido a uma pré-formação de pares de Cooper (Timusk e Statt (1999)), a outra é atribuída às correlações antiferromagnéticas (Naqib e Islam (2008)). A física do pseudogap tem sido o tema central dessa questão nas duas últimas décadas (Baba (2008) e Naidyuk (2009)). O comportamento da susceptibilidade estática (χ) e do calor específico como uma função da temperatura e dopagem pode também trazer algumas informações sobre o mecanismo responsável pelo pseudogap (Naqib e Islam (2008)).

Nesta tese, vamos investigar o estado normal de um modelo de Hubbard estendido modificado pela presença de um potencial atrativo $U(U < 0)$ (Calegari et al. (2011)). Entendemos que esse modelo contém os ingredientes mínimos necessários para uma descrição da região pseudogap.

2 SUPERCONDUTORES DE ALTAS TEMPERATURAS

2.1 A supercondutividade

Um fio de material supercondutor resfriado abaixo de uma certa temperatura crítica (T_c) apresenta uma resistência praticamente nula. Uma corrente que o percorra persiste por um tempo infinitamente grande. O fenômeno da supercondutividade, isto é, o desaparecimento da resistividade elétrica em sólidos numa temperatura bem definida, foi descoberto experimentalmente, em 1911, por Heike Kamerlingh Onnes e sua equipe ao estudar a variação da resistência elétrica de uma amostra de mercúrio em função da temperatura. O súbito desaparecimento da resistência elétrica do mercúrio nas proximidades de uma temperatura T_c de $4,2\text{ K}$ ($-268,8\text{ }^\circ\text{C}$) foi interpretado por Onnes, supondo que o mercúrio passa por uma transição de fases de um estado resistivo normal para um novo estado, o estado supercondutor. Nos anos seguintes, o estado supercondutor foi verificado em vários metais e ligas.

Em 1933, Walther Meissner e seu assistente Robert Ochsenfeld descobriram uma outra característica importante do estado supercondutor: o diamagnetismo perfeito. Diz respeito ao comportamento que uma amostra supercondutora apresenta de expulsar o campo magnético, adquirido em uma temperatura superior a T_c , após ser resfriada a uma temperatura abaixo de T_c . Esse comportamento pode desaparecer quando o campo aplicado na amostra for superior a um dado valor crítico que depende da temperatura.

As primeiras teorias para diferenciar o estado normal do estado supercondutor mostravam que o supercondutor apresentava uma energia menor que o estado normal. Em 1956, Leon Cooper mostrou que, através de uma interação fraca, tipo elétron-fônon, os elétrons são capazes de formar pares: os pares de Cooper. Em 1957, surge a primeira teoria microscópica capaz de descrever satisfatoriamente o fenômeno da supercondutividade (Bardeen, Cooper e Schieffer (1957)), a teoria BCS (Bardeen;Cooper;Schieffer), Prêmio Nobel de Física ano 1972. Essa teoria fundamenta-se na interação fraca tipo elétron-fônon, que é responsável pela formação dos pares de Cooper. As temperaturas críticas atingidas nos anos 70 eram inferiores a 30 K .

A descoberta dos supercondutores de cupratos, por Bednorz e Muller (1986), Prêmio Nobel de Física ano 1987, trouxe um notável crescimento na temperatura ($T_c = 164\text{ K}$), mas

Figura 2.1: Evolução da temperatura crítica (T_c) dos supercondutores. Fonte: OSTERMAN, F.; PUREUR, P., 2005.

Figura 2.2: Planos de CuO_2 separados por reservatórios de cargas. Fonte: CALEGARI, 2006.

ainda persiste a esperança de encontrar supercondutividade à temperatura bem mais próxima da temperatura ambiente, ver figura 2.1.

2.2 Os supercondutores de altas temperaturas

Os cupratos são materiais compostos de cobre e pertencentes à família dos supercondutores de altas temperaturas que contêm planos de CuO_2 como base da sua estrutura molecular. Conforme pode ser visto na figura 2.2, esses planos são separados por blocos que funcionam como reservatórios de cargas (Calegari (2006)). Esses materiais apresentam um comportamento anômalo na fase normal (estado não-supercondutor) e mostram uma forte dependência em relação à dopagem (δ), a qual determina o número de ocupação ($n_T = n_\sigma + n_{-\sigma}$), presente nos planos de CuO_2 ,

$$\delta = 1 - n_T.$$

Um sistema de partículas interagentes, mesmo na sua fase desordenada, apresenta alguma ordem de curto alcance e está sujeito a transições de fases. Durante uma transição de fases, por exemplo, na passagem do estado condutor normal (metal) para o estado supercondutor, ocorrem grandes mudanças nas propriedades físicas do sistema. Por causa disso, imensas são as dificuldades matemáticas envolvidas na análise desse fenômeno, mas o interesse em um bom entendimento da fase normal pode nos auxiliar muito na compreensão dos mecanismos que levam o sistema ao estado supercondutor. Conforme a teoria BCS, pode-se considerar que o pareamento entre elétrons via fônons desestabiliza a fase normal de um sistema e o conduz a uma fase supercondutora. Por outro lado, a retirada de poucos elétrons dos planos de CuO_2 , pode levar um sistema do estado antiferromagnético para a região pseudogap (ver figura 2.5).

A teoria de líquido de Fermi de Landau (Abrikosov, Gorkov e Dzyaloshinski (1980)) descreve um sistema metal normal com interação entre partículas comparadas com um gás

Figura 2.3: Estrutura cristalina do composto $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$. As camadas atômicas denominadas de reservatórios de cargas são constituídas por Nd, Ce e O. Fonte: DAGOTTO, 1994.

Figura 2.4: Estrutura cristalina do composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. As camadas atômicas denominadas de reservatórios de cargas são constituídas por La, Sr e O. Fonte: DAGOTTO, 1994.

de elétrons livres de baixas energias, a essas partículas dá-se o nome de quasipartículas. No estado metálico (normal) dos cupratos, existem regiões que possuem várias propriedades não usuais como, por exemplo, cupratos em baixa dopagem apresentam uma dependência quase linear da resistividade ρ com uma ampla faixa de temperatura T , violando a teoria de um líquido de Fermi de Landau, em que essa dependência não é linear.

A dopagem e a temperatura são dois parâmetros importantes para classificar um sistema supercondutor de alta temperatura num diagrama de fases. Na condição de $\delta = 0$, o supercondutor possui um elétron em cada sítio da rede cristalina. Na teoria de bandas essa banda semipreenchida caracteriza uma fase metálica. Mas o comportamento desse sistema, nessa dopagem nula é, na verdade, de um isolante de Mott (apresenta um gap relativamente grande). Variando a dopagem e também a temperatura, vamos encontrar o sistema em outras fases, como: fase supercondutora (baixas temperaturas), fase metal normal (altas dopagens e, ou, altas temperaturas) e fase metal na região do pseudogap (baixas dopagens e temperaturas intermediárias entre as fases supercondutora e metal normal). A fase metálica (altas temperaturas) na região de altas dopagens é descrita como um líquido de Fermi tradicional. A região de baixas dopagens (e baixas temperaturas) não obedece à teoria do líquido de Fermi, uma vez que várias de suas propriedades físicas não seguem o comportamento típico de um líquido de Fermi.

Como exemplos de supercondutores de altas temperaturas, apresentamos o composto $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$, na figura 2.3, dopado por elétrons e o composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, na figura 2.4, dopado por buracos. Em $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ as camadas atômicas contendo Nd, Ce e O atuam como reservatório de cargas já em $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ o reservatório de cargas é formado por La, Sr e O.

Figura 2.5: Diagrama de fases comparando um sistema cuprato dopado por elétrons (esquerda) com um dopado por buracos (direita). Fonte: DAMASCELLI;HUSSAIN;SHEN, 2003.

Acredita-se que a supercondutividade desses compostos esteja confinada nos planos de CuO_2 e que as camadas dos outros átomos servem para suprir de portadores de cargas (elétrons ou buracos) os planos de CuO_2 . Portanto, é possível que a supercondutividade nos cupratos seja um fenômeno bidimensional. Tal suposição baseia-se no fato de que a distância entre dois planos de CuO_2 é maior que o espaçamento entre átomos de cobre e oxigênio nesses planos. O processo de transferência de cargas dos reservatórios para os planos de CuO_2 se faz por mecanismo de dopagem. Na dopagem, os átomos dos reservatórios são substituídos por outros átomos em um estado diferente de ionização, dessa forma, elétrons são retirados ou doados aos planos de CuO_2 . A quantidade de átomos trocados entre os planos de CuO_2 e o reservatório de carga é indicada por x .

A figura 2.5 (Damascelli, Hussain e Shen (2003)) mostra um diagrama de fases da temperatura versus a dopagem x . O composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ está no lado direito da figura e a dopagem é por buracos. Para $x = 0$, o sistema é um isolante de Mott (Mott (1961)), apresentando ordem antiferromagnética (AF) de longo alcance com temperatura de Néel (T_N) de aproximadamente de 300 K. Para uma dopagem da ordem de 0,02, a ordem antiferromagnética desaparece. Em $x \cong 0,05$, o sistema evolui para o estado supercondutor (SC) e, com dopagem $x \cong 0,15$, o estado supercondutor está com temperatura de transição T_c máxima. No composto $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$, que está no lado esquerdo da figura 2.5, a dopagem é por elétrons. Para $x = 0$, o sistema é um isolante de Mott apresentando ordem antiferromagnética (AF) de longo alcance. Para $x = 0,12$ até $x \cong 0,20$, o sistema apresenta uma fase supercondutora com uma temperatura crítica máxima T_c de 24 K. Dizemos que temos uma dopagem ótima para a dopagem em que se verifica a temperatura máxima de transição. Para os compostos apresentados na figura 2.5 a dopagem ótima acontece em $x = 0,15$ nos dois casos.

2.3 Superfície de Fermi, gap supercondutor e a região pseudogap

Muitos experimentos são realizados com dados cada vez mais precisos sobre os cupratos supercondutores de altas temperaturas. Uma dessas técnicas é a “Angle Resolved Photoemission Spectroscopy” (ARPES) que pode ser utilizada para observar a superfície de Fermi e o gap supercondutor. A espectroscopia de fotoemissão de elétrons, como, por exemplo, a técnica ARPES, é uma versão moderna do efeito fotoelétrico e serve de base para um conjunto de técnicas experimentais que têm por objetivo estudar a estrutura eletrônica de um sólido,

ver figura 2.6.

Figura 2.6: Geometria de um experimento de ARPES. A direção de emissão dos elétrons é bem definida pelos ângulos θ e φ . Fonte: SHEN;DESSAU, 1995.

O processo de fotoemissão de elétrons é realizado em câmaras de vácuo (10^{-9} Torr) e pode ser esquematizado em 3 passos independentes:

- 1- excitação dos elétrons no interior da amostra;
- 2- transporte dos elétrons excitados até a superfície da amostra;
- 3- escape dos elétrons excitados através da superfície da amostra.

Na sequência, o elétron emitido do material será detectado por um analisador. Nos experimentos de fotoemissão, a amostra e o analisador de energia são calibrados de tal forma que a energia cinética dos elétrons emitidos seja medida em relação ao potencial químico ($\omega = 0$) (ou à energia de Fermi) da amostra, ver figura 2.7 . Dessa forma, a energia cinética dos elétrons dentro da amostra pode ser diretamente mapeada pela distribuição da energia cinética dos elétrons emitidos pelos fótons incidentes.

A figura 2.8 (Norman (1998)) mostra resultados experimentais obtidos através da técnica ARPES para o composto $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Bi2212). A curva mais escura mostra os espectros de energia do composto Bi2212, obtido no regime de baixa dopagem e para uma temperatura de 14 K. A temperatura de transição é de $T_c = 85$ K. A linha mais clara é do espectro de referência (platina) usado para determinar o potencial químico. As flechas indicam o gap supercondutor definido nos chamados pontos médios, que é o ponto em que o espectro de referência passa pela linha do potencial químico ($\omega = 0$). Dessa forma, o gap supercondutor corresponde a um deslocamento médio do espectro do composto Bi2212 e que é ainda bem caracterizado por uma ausência de estados ocupados à direita da linha potencial químico ($\omega = 0$).

Na figura 2.9, (a),(b) e (c) mostram espectros de energia obtidos por ARPES em três direções diferentes no plano k_x k_y , para o composto Bi2212 em função da temperatura. A temperatura T_c para os resultados apresentados é 85 K. Se analisarmos a direção (a) no plano k_x k_y , veremos que um “gap” entre os pontos médios do espectro do Bi2212 e do espectro referencial permanece mesmo no estado normal acima de 85 K até aproximadamente 150 K. Esse “gap” que aparece no estado normal é chamado de pseudogap. Na direção (b) no plano k_x k_y , o pseudogap aparece entre de 85 K e 120 K. Na direção (c) não há pseudogap. Os resultados sugerem que a simetria do pseudogap é a mesma do gap supercondutor. O

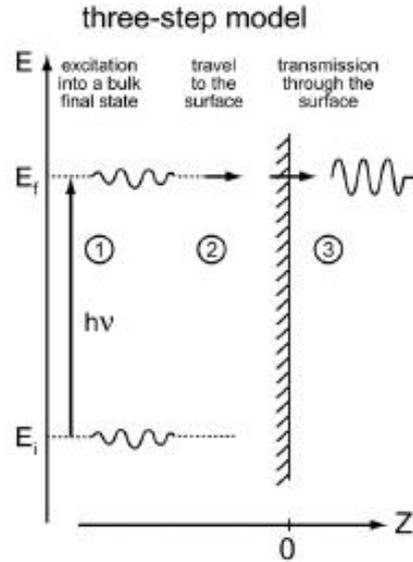


Figura 2.7: Os três passos para descrever o modelo de fotoemissão dos elétrons. Fonte: DAMAS-CELLI, 2004.

Figura 2.8: Gap supercondutor medido através do deslocamento do ponto médio do espectro do Bi2212 e do espectro de referência. O espectro do composto Bi2212 foi obtido no regime de baixas dopagens e para uma temperatura de 14 K. Fonte: NORMAN et al., 1998.

pseudogap define uma região dentro da fase normal, a região pseudogap.

A figura 2.10 mostra a superfície de Fermi ($T > T^*$), o gap supercondutor ($T < T_c$) e o pseudogap ($T_c < T < T^*$) construídas a partir de medidas feitas com a técnica de ARPES.

Na figura 2.11 (Marshall (1996)), a linha cheia mostra a superfície de Fermi esperada no caso do estado normal (dopagem levemente maior que a condição de ótima dopagem e temperatura T maior que a máxima temperatura do estado supercondutor T_c). Note que a linha de Fermi toca as fronteiras da zona de Brillouin na direção $(\pi, 0)$ - (π, π) e $(0, \pi)$ - (π, π) . Baixando a dopagem (para valores menores que a condição de ótima dopagem), mas em temperatura T ($T^* > T > T_c$), seria normal esperar que a linha de Fermi diminuisse e mantivesse ainda a sua forma original, como pode ser vista pela linha hachurada.

No entanto, não é isso que observamos com a técnica experimental de ARPES. O que vemos é uma redução da região delimitada pela linha de Fermi mais um completo desaparecimento da linha de Fermi abaixo da linha pontilhada. Essa redução da superfície de Fermi dá origem ao aparecimento de densidade de estados nula somente para certas direções da primeira zona de Brillouin. Esse comportamento é totalmente diferente de uma transição metal-isolante na qual há um completo desaparecimento da densidade de estados em todas as direções do

Figura 2.9: As figuras (a) e (b) são espectros de energia mostrando o gap supercondutor e o pseudogap para o composto Bi2212 no regime de baixas dopagens correspondendo a um $T_c = 85K$. Em (c) o espectro de energia não apresenta pseudogap. A figura (d) mostra as três direções diferentes no plano $k_x k_y$ num dos quadrantes da primeira zona de Brillouin. Fonte: NORMAN et al., 1998.

Figura 2.10: Superfície de Fermi construídas a partir de medidas de ARPES. Mostrando o gap supercondutor ($T < T_c$) e o pseudogap ($T_c < T < T^*$). Fonte: NORMAN et al., 1998.

espaço dos momentos. Dessa forma, passamos a chamar a região que apresenta a superfície de Fermi truncada de região de pseudogap. A região pseudogap apresenta-se como um metal anômalo, uma vez que não obedece à teoria do Líquido de Fermi de Landau (que descreve um metal normal). Os experimentos na região pseudogap medem propriedades físicas totalmente diferentes das do metal normal. Em dopagem zero, há um ordenamento de longo alcance dos spins localizados nos átomos de cobre, um arranjo antiferromagnético que é bem descrito pelo modelo fortemente correlacionado de Heisenberg.

Acredita-se que o comportamento anômalo dos cupratos deve estar relacionado com o pseudogap e que este pode ter origem nas correlações magnéticas de curto alcance, que atuam no sentido de suprimir a supercondutividade na região de baixas temperaturas.

O espectro de ARPES gera informações sobre os estados ocupados do sistema. Para um sistema bidimensional, a intensidade do espectro $I(\vec{k}, \omega)$ é proporcional ao produto da função de Fermi $f(\omega)$ pela função espectral de um elétron $A_{\vec{k}\sigma}(\omega)$. Portanto, podemos escrever:

$$I(\vec{k}, \omega) = I_0(\vec{k})f(\omega)A_{\vec{k}\sigma}(\omega) \quad (2.1)$$

em que \vec{k} está associado ao momento paralelo à superfície da amostra, ω é a energia em relação ao nível de Fermi. A quantidade $I_0(\vec{k})$ é a amplitude de $I(\vec{k}, \omega)$ e a função espectral $A_{\vec{k}\sigma}(\omega)$ é obtida através das auto-energias do elétron (Randeria (1996)).

A técnica de ARPES permite associar os resultados de um modelo teórico com seus resultados experimentais. A função espectral $A_{\vec{k}\sigma}(\omega)$ está diretamente relacionada com a parte imaginária da funções de Green ($G_{\vec{k}\sigma}(\omega)$), que podem ser obtidas como resultados de

Figura 2.11: Superfície de Fermi obtida a partir de medidas de ARPES. Fonte: MARSHALL et al., 1996.

um modelo teórico,

$$A_{\vec{k}\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\vec{k}\sigma}(\omega). \quad (2.2)$$

O modelo de Hubbard, ou uma variação desse modelo (Calegari, Magalhaes e Gomes (2004) e Calegari, Magalhaes e Gomes (2005)), pode ser usado para obter as funções de Green necessárias na investigação das propriedades dos supercondutores de altas temperatura.

2.4 Modelo de Hubbard

Um dos modelos mais utilizados para descrever sistemas de elétrons fortemente correlacionados (SFC) é o modelo de Hubbard (1963) de uma banda. Esse modelo descreve a competição entre um potencial Coulombiano U ($U > 0$) e a energia cinética (“hopping”) t existente entre elétrons de sítios vizinhos. Em termos dos operadores de criação ($c_{i,\sigma}^\dagger$) e destruição ($c_{i,\sigma}$) de elétrons (ou buracos) com spin σ num sítio i da rede. O modelo é descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} \quad (2.3)$$

em que o número de ocupação $n_{i,\sigma}$ ($n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$) conta o número de partículas com spin σ ($\sigma = \uparrow$ ou \downarrow) em um dado sítio i da rede.

Os elétrons obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, assim seus operadores (fermiônicos) apresentam as seguintes relações canônicas de anticomutação (ver apêndice A.1):

$$c_{i,\sigma} c_{j,\sigma'}^\dagger + c_{j,\sigma'}^\dagger c_{i,\sigma} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (2.4)$$

$$c_{i,\sigma} c_{j,\sigma'} + c_{j,\sigma'} c_{i,\sigma} = 0 \quad (2.5)$$

e

$$c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger + c_{j,\sigma'}^\dagger c_{i,\sigma}^\dagger = 0. \quad (2.6)$$

Para estudar o modelo de Hubbard, podemos utilizar a técnica das funções de Green no formalismo de Zubarev (Zubarev (1960)). Essa técnica permite obter propriedades físicas além de incluir explicitamente a dependência dessas propriedades em relação à temperatura.

O operador $c_{i,\sigma}$, que descreve o modelo de Hubbard, satisfaz a seguinte equação de

movimento:

$$i\frac{d}{dt}c_{i,\sigma} = [c_{i,\sigma}, \mathcal{H}]_- = U \sum_j n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} + \sum_j t_{ij} c_{j,\sigma}, \quad (2.7)$$

nessa equação (2.7) observamos a presença de um novo operador $\eta_{i,\sigma}$, definido por um produto de dois operadores,

$$\eta_{i,\sigma} = n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}. \quad (2.8)$$

A equação de movimento desse novo operador $\eta_{i,\sigma}$,

$$[\eta_{i,\sigma}, \mathcal{H}]_- = U \sum_j n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} + \sum_j t_{ij} (n_{i,-\sigma} c_{j,\sigma} + c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{i,\sigma} - c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}), \quad (2.9)$$

envolve termos que resultam do produto de três operadores. Se continuarmos derivando as equações de movimento obtidas elas irão gerar novos operadores definidos com um número sempre maior de operadores envolvidos. Se o processo for repetido por infinitas vezes, um conjunto infinito de equações de movimento será gerada. Portanto, faz-se necessário algum tipo de aproximação para tratar o conjunto dessas equações de movimento acopladas. Uma maneira de truncar o conjunto de equações de movimento consiste em substituir as quantidades definidas com $-\sigma$ pelos seus valores médios,

$$c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{i,\sigma} \approx \langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} \rangle c_{i,\sigma} \quad (2.10)$$

e

$$c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} \approx \langle c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} \rangle c_{i,\sigma}. \quad (2.11)$$

Como as funções correlação $\langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} \rangle$ e $\langle c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} \rangle$ são equivalentes, os dois últimos termos da equação (2.9) se cancelam, resultando

$$[\eta_{i,\sigma}, \mathcal{H}]_- \approx U \sum_j n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} + \sum_j t_{ij} n_{i,-\sigma} c_{j,\sigma}. \quad (2.12)$$

Essa aproximação foi utilizada por Hubbard (1963) para tratar as equações de movimento das funções de Green gerando, para essas funções, uma estrutura de dois polos. No entanto, essa aproximação, que ficou conhecida como Hubbard I, possui algumas deficiências como, por exemplo, a incapacidade de gerar uma resposta magnética. No capítulo 3, vamos apresentar uma outra aproximação de dois polos, a aproximação de Laura Roth (1969), com a finalidade de melhorar a aproximação Hubbard I.

2.5 Modelo de Hubbard estendido com interação atrativa

Para investigar a física do pseudogap utilizaremos o modelo de Hubbard estendido, em duas dimensões, com um potencial atrativo ($U < 0$) e não local. Esse modelo já foi utilizado para descrever o regime supercondutor fortemente correlacionado, na aproximação Hubbard-I (Caixeiro e Troper (2009a)) (Caixeiro e Troper (2009b)), na aproximação de dois polos (Calegari et al. (2011)) e ainda para observar efeitos de hibridização (Caixeiro e Troper (2010)).

O modelo de Hubbard estendido com interação atrativa é uma variante do modelo de Hubbard e é representado pelo hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,\sigma} (h\sigma - \mu) n_{i,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} n_{i,\sigma} n_{j,-\sigma} \quad (2.13)$$

em que as notações $\langle \dots \rangle$ e $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ indicam respectivamente a soma sobre os primeiros e segundos vizinhos mais próximos do sítio i , e μ é o potencial químico.

Para os operadores fermiônicos $c_{i,\sigma}$ e $c_{i,\sigma}^\dagger$, podemos escrever os operadores de Bloch, no espaços dos vetores de onda (\vec{k}), $c_{\vec{k},\sigma}$ e $c_{\vec{k},\sigma}^\dagger$, através das seguintes relações:

$$c_{\vec{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{i,\sigma}, \quad (2.14)$$

$$c_{\vec{k},\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{i,\sigma}^\dagger, \quad (2.15)$$

em que L é o número total de sítios da rede. E ainda, a banda de energia $\varepsilon_{\vec{k}}$

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} t_{i0}. \quad (2.16)$$

2.6 Pseudogap e a susceptibilidade magnética

A creditata-se que a compreensão do mecanismo responsável pela existência do pseudogap é um elemento chave para esclarecer a física presente nos materiais supercondutores de altas temperaturas. Um aspecto marcante desse assunto é que o pseudogap aparece na região de baixas dopagens num diagrama de fases temperatura versus dopagem, precisamente entre as fases antiferromagnética (AF) e supercondutora (Tallon e Loram (2001), Lee (2008)). Nessa

região, dependendo da direção tomada na zona Brillouin, haverá excitações com a presença de gap e sem gap (Lee (2008)).

Do ponto de vista experimental, existe uma grande quantidade de informações da presença de pseudogap em cupratos. Entretanto, diferentes técnicas parecem apresentar resultados conflitantes. Um exemplo importante é a superfície de Fermi na região de baixa dopagem a qual é crucial para esclarecer a natureza do pseudogap. Por exemplo, as medidas de fotoemissões “Angle Resolved Photoemissions” (ARPES) indicam para as excitações sem gap a forma de um arco (Norman (1997)), enquanto as medidas feitas por “quantum oscillations” indicam a existência de curvas fechadas “pockets” (Doiron-Leyraud (2007)). Existem na literatura tentativas de conciliar este aparente conflito (Jianqiao Meng (2009), Harrison, McDonald e Singleton (2007)). Na referência (Harrison, McDonald e Singleton (2007)), os autores consideram o efeito do comprimento da correlação antiferromagnética (ξ) na topologia da superfície de Fermi. Quando o comprimento da correlação diminui, a forma da superfície de Fermi evolui desde os “pockets” até os arcos. Portanto, um ponto importante é que esse resultado sugere que os arcos encontrados na superfície de Fermi, nas medidas feitas por ARPES, podem ser entendidos em termos da intensidade das correlações AF.

Do ponto de vista teórico, o papel das correlações AF tem sido investigado por diferentes modelos, entre eles o modelo de Hubbard estendido com potencial atrativo, em duas dimensões, (Calegari et al. (2011)). No trabalho de Beenen e Edwards (1995) a aproximação de dois polos (Roth (1969)) foi utilizada para lidar com as fortes correlações eletrônicas.

Por outro lado, conforme apontado recentemente pela referência (Naqib e Islam (2008)), o comportamento da susceptibilidade estática (χ) como uma função da temperatura e dopagem pode também trazer algumas informações sobre o mecanismo responsável pelo pseudogap. Por exemplo, no composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, a susceptibilidade em função da temperatura apresenta um máximo para dopagens menores que 0,21. Este máximo na susceptibilidade diminui a medida que a dopagem também diminui (Torrance (1989), Johnston (1989)). Este tipo de comportamento é também observado no composto $YBa_2Cu_3O_7$ (Walstedt (1990), Walstedt (1992)). Além disso, quando a temperatura é mantida constante, a susceptibilidade como função da dopagem também apresenta um ponto de máximo. Os autores Naqib e Islam (2008) defendem que o máximo na susceptibilidade estática uniforme em função da temperatura para dopagens menores que 0,21 pode ser usado como um argumento para relacionar o pseudogap com as correlações AF. Na referência Trapper, Ihle e Fehske (1996), também tem sido sugerido que o máximo da susceptibilidade versus dopagem está relacionado à correlações

AF. O debate acima sugere que tanto a susceptibilidade como a topologia da superfície de Fermi - que estão conectadas ao pseudogap - estão relacionados às correlações AF.

3 MÉTODO

O capítulo 3 será organizado como segue: Na seção 3.1, começaremos apresentando um breve resumo da técnica das funções de Green; Na seção 3.2 até a seção 3.6, apresentaremos as definições das funções de Green e as representações espectrais na formulação de Zubarev (1960); Na seção 3.7, apresentaremos a aproximação de dois polos para as funções de Green, conforme o tratamento de Roth (1969). Na seção 3.8 revisaremos o método de tratamento proposto por Roth (1969) para o modelo de Hubbard de uma banda. Na seção 3.9 apresentaremos a construção das funções correlação presentes no deslocamento de banda. Na seção 3.10 revisaremos os cálculos para obter o valor médio da energia de um sistema. Na seção 3.11 calcularemos o calor específico para o modelo de Hubbard atrativo.

3.1 A técnica das funções de Green

A técnica das funções de Green, que teve origem em teoria de campo, mostra-se também adequada para tratar problemas em física da matéria condensada. Em mecânica estatística, trabalha-se com funções de Green obtidas da média termodinâmica sobre um ensemble estatístico. Tais funções de Green dependem do tempo e da temperatura. Para estudar o modelo de Hubbard, descrito em termos da segunda quantização, utilizaremos a técnica das funções de Green no formalismo de Zubarev (1960). Essa técnica permite calcular quantidades físicas importantes de um sistema, além de incluir explicitamente a dependência dessas quantidades em relação à temperatura.

A função de Green ($G_{ij,\sigma}^{A,B}(t) = \ll A(t); B \gg$), envolvendo operadores A e B está definida na equação (3.8) se for uma função de Green retardada ou na equação (3.9) se for uma função de Green avançada. A transformada de Fourier dessa função de Green no tempo ($G_{ij,\sigma}^{A,B}(E) = \ll A; B \gg_E$) é uma função de E (ou de $\omega = E/\hbar$) e satisfaz a seguinte equação de movimento

$$EG_{ij,\sigma}^{A,B}(E) = E \ll A; B \gg_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{-\eta} \rangle + \ll [A, \mathcal{H}]_- ; B \gg_E . \quad (3.1)$$

As equações de movimento para as funções de Green geram um conjunto infinito de equações, em que cada uma delas depende de uma outra função de Green sempre de ordem superior. Tratando adequadamente (por métodos aproximativos) um conjunto de equações de movi-

mento, poderemos obter as funções de Green $G_{ij,\sigma}^{A,B}(E)$. Conhecendo a função de Green, definimos a função correlação para esta função como:

$$\langle BA \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint dE f(E) G_{\vec{k},\sigma}^{AB}(E), \quad (3.2)$$

sendo $f(E)$ a função

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} - \eta} \quad (3.3)$$

em que $\beta = 1/k_B T$, μ o potencial químico e $\eta = \pm 1$. Se A e B são operadores fermiônicos ($\eta = -1$), escrevemos a função correlação na forma:

$$\langle BA(t) \rangle = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{\vec{k},\sigma}^{A,B}(E + i\varepsilon) - G_{\vec{k},\sigma}^{A,B}(E - i\varepsilon)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE. \quad (3.4)$$

A técnica das funções de Green é uma ferramenta muito útil para tratar de sistemas de partículas interagentes. Nos estudos de processos irreversíveis quando se considera um pequeno desvio no estado de equilíbrio estatístico, de modo que se possa usar a Teoria da Resposta Linear as funções de Green são importantes por definir apropriadamente o conceito das funções de correlação que estão intimamente relacionadas com as quantidades observáveis.

3.2 Funções de Green na formulação de Zubarev

Antes de definir as funções de Green, considere um operador A , que descreve um observável qualquer de um sistema físico descrito por um hamiltoniano \mathcal{H} . O símbolo $\langle \dots \rangle$ indica tomar a média termodinâmica do operador A sobre um ensemble,

$$\langle A \rangle = Z^{-1} Tr(Ae^{-\beta\mathcal{H}}), \quad (3.5)$$

sendo Z ($Z = Tr(e^{-\beta\mathcal{H}})$) a função de partição e β ($\beta = \frac{1}{k_B T}$), em que k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura.

Adotando a representação de Heisenberg, a dependência temporal do operador A é explicitada

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}, \quad (3.6)$$

(ou $A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t}$) em unidades nas quais $\hbar = 1$.

A evolução temporal do operador $A(t)$ é

$$i \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), \mathcal{H}]_- = A(t)\mathcal{H} - \mathcal{H}A(t). \quad (3.7)$$

A seguir, serão apresentadas as definições das funções de Green Retardadas e Avançadas, as equações de movimento e as funções correlação, baseando-se sempre no formalismo de Zubarev (1960). As funções de Green Retardadas (r), duplo tempo-temperatura, são definidas por

$$G_r(t, t') = \ll A(t); B(t') \gg^{(r)} = -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_\eta \rangle, \quad (3.8)$$

e as funções de Green Avançadas (a), duplo tempo-temperatura, são definidas por

$$G_a(t, t') = \ll A(t); B(t') \gg^{(a)} = i\theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')]_\eta \rangle, \quad (3.9)$$

com $[A, B]_\eta = AB - \eta BA$, em que $|\eta| = 1$. O sinal de η será positivo se A e B forem operadores que obedecem à estatística de Bose-Einstein e será negativo se obedecerem à estatística de Fermi-Dirac. A presença do fator descontínuo $\theta\{\pm(t - t')\}$, com $t \neq t'$, produz os seguintes cortes nas funções de Green

$$\begin{aligned} \ll A(t); B(t') \gg^{(r)} &= 0 \quad \text{se } t < t' \\ \ll A(t); B(t') \gg^{(a)} &= 0 \quad \text{se } t > t' \end{aligned} \quad (3.10)$$

e, para o caso $t = t'$, as funções de Green Retardadas e Avançadas não são definidas.

As funções de Green $G_r(t, t')$ e $G_a(t, t')$ satisfazem a equação de movimento

$$i \frac{d}{dt} \ll A(t); B(t') \gg = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_\eta \rangle + \ll [A(t), \mathcal{H}]_- ; B(t') \gg, \quad (3.11)$$

tomando $\tau = (t - t')$, a relação entre a função descontínua $\theta(\tau)$ e a função delta de Dirac $\delta(\tau)$ é

$$\theta(\tau) = \int_{-\infty}^t dt' \delta(t'). \quad (3.12)$$

As funções de Green são funções de t na representação de Heisenberg. Podemos definir sua transformada de Fourier como:

$$\ll A; B \gg_E = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ll A(\tau), B \gg e^{iE\tau} d\tau. \quad (3.13)$$

Com a transformação de Fourier, equação (3.13), escrevemos a equação de movimento, equação (3.11), na forma

$$E \ll A; B \gg_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{-\eta} \rangle + \ll [A, \mathcal{H}]_- ; B \gg_E . \quad (3.14)$$

Na construção da equação de movimento de dois operadores, surge uma nova função de Green $\ll [A, \mathcal{H}]_- ; B \gg_E$ de ordem superior à função de Green anterior, da qual esta teve origem. Ao repetirmos esse processo de construção da equação de movimento para $\ll [A, \mathcal{H}]_- ; B \gg_E$, esta dependerá de uma nova função de Green de ordem ainda maior. Portanto, se repetirmos esse processo por várias vezes, passamos a gerar uma cadeia infinita de equações acopladas. Existem muitos métodos que possibilitam tratar essa cadeia de equações, porém todos eles estão baseados em algum tipo de aproximação. Os primeiros resultados são geralmente obtidos por uma aproximação de campo médio, mas é possível trabalhar com técnicas de aproximações mais elaboradas. Nesta tese, será utilizado um método de tratamento das equações de movimento conforme proposto por Roth (1969).

A partir daqui, será considerado que os operadores escolhidos A e B são operadores fermiônicos ($\eta = -1$) e ainda que $\omega = E$ ($E = \hbar\omega$), em unidades em que $\hbar = 1$, então será apresentada a notação para a função de Green,

$$G_{ij,\sigma}^{A,B}(\omega) = \ll A; B \gg_\omega . \quad (3.15)$$

A transformada de Fourier no espaço para a equação (3.15),

$$G_{\vec{k},\sigma}^{A,B}(\omega) = L^{-1} \sum_{i,j} G_{ij,\sigma}^{A,B}(\omega) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \quad (3.16)$$

em que L representa o número de sítios do sistema. E, a equação de movimento para a equação (3.16),

$$\omega G_{ij,\sigma}^{A,B}(\omega) = \omega \ll A; B \gg_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_+ \rangle + \ll [A, \mathcal{H}]_- ; B \gg_\omega . \quad (3.17)$$

O próximo passo será construir a definição da função correlação e sua representação espectral.

3.3 Representação espectral para as funções correlação

A função correlação vem por definição da média de um produto de operadores, no ensemble (grande-canônico), na representação de Heisemberg.

$$\mathcal{F}_{BA}(t, t') = \mathcal{F}_{BA}(t - t') = \langle B(t')A(t) \rangle \quad (3.18)$$

e

$$\mathcal{F}_{AB}(t, t') = \mathcal{F}_{AB}(t - t') = \langle A(t)B(t') \rangle, \quad (3.19)$$

as funções correlações apresentam dependência em t . As funções correlação são também definidas em $t = t'$, nesse caso, a média sobre o produto de operadores,

$$\mathcal{F}_{BA}(0) = \langle B(t)A(t) \rangle = \langle B(0)A(0) \rangle \quad (3.20)$$

e

$$\mathcal{F}_{AB}(0) = \langle A(t)B(t) \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle. \quad (3.21)$$

É através dessas médias que poderemos obter quantidades como número médio de ocupação $\langle n \rangle$, susceptibilidade magnética χ e outras para um sistema.

A representação espectral é uma ferramenta que permite analisar várias propriedades analíticas das funções correlação. Para construir a representação espectral, considere as autofunções Ψ_ν e os autovalores E_ν do hamiltoniano \mathcal{H} de um sistema de N partículas interagentes

$$\mathcal{H}\Psi_\nu = E_\nu\Psi_\nu, \quad (3.22)$$

usando a relação de completeza ($\sum_\mu |\Psi_\mu\rangle\langle\Psi_\mu| = 1$) e tomando a média termodinâmica do produto de operadores A e B , conforme (3.5),

$$\mathcal{F}_{BA}(t - t') = \langle B(t')A(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \Psi_\nu | B(t') | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | A(t) | \Psi_\nu \rangle e^{-\beta E_\nu}, \quad (3.23)$$

tomando a representação de Heisemberg (3.6) para os operadores A e B ,

$$\mathcal{F}_{BA}(t - t') = Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \Psi_\nu | e^{i\mathcal{H}t'} B(0) e^{-i\mathcal{H}t'} | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t} | \Psi_\nu \rangle e^{-\beta E_\nu}, \quad (3.24)$$

considerando que $e^{-i\mathcal{H}t} | \Psi_\nu \rangle = e^{-iE_\nu t} | \Psi_\nu \rangle$, escrevemos a média do produto dos operadores,

equação (3.24), como:

$$\mathcal{F}_{BA}(t-t') = Z^{-1} \sum_{\mu,\nu} \langle \Psi_\nu | B(0) | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | A(0) | \Psi_\nu \rangle e^{i(E_\nu - E_\mu)(t-t')} e^{-\beta E_\nu}. \quad (3.25)$$

Introduzindo a intensidade espectral $J(\omega)$ através da transformada de Fourier de $\mathcal{F}_{BA}(t-t')$

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \mathcal{F}_{BA}(\tau) e^{i\omega\tau}, \quad (3.26)$$

com $\tau = (t-t')$ e fazendo uso de (3.25), escrevemos:

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} Z^{-1} \sum_{\mu,\nu} \langle \Psi_\nu | B(0) | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | A(0) | \Psi_\nu \rangle e^{-\beta E_\nu} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i[\omega - (E_\mu - E_\nu)]\tau}, \quad (3.27)$$

lembrando da forma integral da função $\delta(x)$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{ix\tau}, \quad (3.28)$$

a intensidade espectral toma a seguinte forma:

$$J(\omega) = Z^{-1} \sum_{\mu,\nu} \langle \Psi_\nu | B(0) | \Psi_\mu \rangle \langle \Psi_\mu | A(0) | \Psi_\nu \rangle e^{-\beta E_\nu} \delta[\omega - (E_\mu - E_\nu)], \quad (3.29)$$

$J(\omega)$ está definida em $(E_\mu - E_\nu) = \omega$, ou seja, nas energias de excitações do sistema.

Finalmente, escrevemos uma representação espectral para as funções correlação, equações (3.18) e (3.19):

$$\mathcal{F}_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (3.30)$$

e

$$\mathcal{F}_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) e^{\omega\beta} e^{-i\omega(t-t')} \quad (3.31)$$

em que $J(\omega)$ é a intensidade espectral para as funções correlação $\mathcal{F}_{BA}(t, t')$ e $\mathcal{F}_{AB}(t, t')$.

3.4 Representação espectral para as funções de Green

Com a representação espectral das funções de correlação, podemos construir uma representação espectral para as funções de Green. Para começar, toma-se a transformada de

Fourier de $G_r(\tau)$

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau G_r(\tau) e^{iE\tau}, \quad (3.32)$$

com a $G_r(t - t')$, na forma da equação (3.8)

$$G_r(t - t') = \ll A(t); B(t') \gg^{(r)} = -i\theta(t - t') [\langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle] \quad (3.33)$$

e, sendo substituída na equação (3.32), escrevemos

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') e^{iE(t-t')} \theta(t - t') [\mathcal{F}_{AB}(t - t') - \eta \mathcal{F}_{BA}(t - t')]. \quad (3.34)$$

Agora, as funções correlação devem ser substituídas por suas representações espectrais

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') e^{iE(t-t')} \theta(t - t') \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} [e^{\beta\omega} - \eta] \quad (3.35)$$

ou ainda,

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau). \quad (3.36)$$

A integral I , ($I = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau)$), é uma integral em t , usando a definição da função descontínua $\theta(\tau)$ na forma integral,

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ix\tau}}{x + i\delta}, \quad (3.37)$$

com a equação (3.28), escrevemos a seguinte integral I ,

$$I = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\delta(E - \omega - x)}{x + i\delta}, \quad (3.38)$$

e, resolvendo a integração em x ,

$$I = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - \omega + i\delta}. \quad (3.39)$$

Com a equação (3.39), chegamos na representação espectral para $G_r(E)$, como:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{E - \omega + i\delta}. \quad (3.40)$$

Seguindo os mesmos passos anteriores, escrevemos também a representação espectral para $G_a(E)$, como:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{E - \omega - i\delta}. \quad (3.41)$$

Considerando E como uma variável complexa, podemos generalizar os resultados obtidos, equações (3.40) e (3.41), fazendo:

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{E - \omega}. \quad (3.42)$$

A função $G(E)$ é uma função analítica no plano complexo com uma singularidade no eixo real. Se considerarmos que foi feito um corte ao longo do eixo real, então $G(E)$ será uma função analítica constituída de dois ramos, um definido no semiplano superior e outro no semiplano inferior dos valores complexos de E , tal que:

$$G(E) = \begin{cases} G_r(E) & \text{se } \text{Im}E > 0 \\ G_a(E) & \text{se } \text{Im}E < 0 \end{cases}. \quad (3.43)$$

3.5 Intensidade espectral $J(\omega)$ em termos de $G(E)$

Reescrevendo as equações (3.40) e (3.41) assumindo que $E = \omega \pm i\delta$

$$G(\omega \pm i\delta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE J(E)(e^{\beta E} - \eta) \frac{1}{\omega \pm i\delta - E} \quad (3.44)$$

a intensidade espectral $J(\omega)$ vem através da relação:

$$G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE J(E)(e^{\beta E} - \eta) \left[\frac{1}{\omega + i\delta - E} - \frac{1}{\omega - i\delta - E} \right]. \quad (3.45)$$

Usando a representação para a função delta

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - i\delta} - \frac{1}{x + i\delta} \right] \quad (3.46)$$

e tomando $x = \omega - E$, escrevemos:

$$G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE J(E)(e^{\beta E} - \eta) [-2\pi i \delta(\omega - E)], \quad (3.47)$$

resolvendo a integração em E , temos que

$$G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta) = -iJ(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta), \quad (3.48)$$

em que ω é um número real. Finalmente, isolando $J(\omega)$ na equação (3.48), escrevemos que

$$J(\omega) = if(\omega)[G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta)] \quad (3.49)$$

na equação (3.49), $f(\omega)$ é uma função distribuição:

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - \eta} \begin{cases} \eta = 1 & \text{para a Estatística de Bose-Einstein} \\ \eta = -1 & \text{para a Estatística de Fermi-Dirac} \end{cases}. \quad (3.50)$$

Assim, com a função de Green $G(E)$ poderemos obter $J(\omega)$ e, conseqüentemente, obter as funções correlação $\mathcal{F}_{BA}(t - t')$ e $\mathcal{F}_{AB}(t - t')$.

3.6 Intensidade espectral $J(\omega)$ para $t = 0$ e $T = 0$

Para a distribuição de Fermi-Dirac, considerando o potencial químico μ ,

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\omega - \mu}{k_B T}} + 1}. \quad (3.51)$$

No caso particular em que os tempos t e t' são iguais e a temperatura $T = 0$, temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\omega) \rightarrow 1 \quad \text{se } \omega < \mu \\ f(\omega) \rightarrow 0 \quad \text{se } \omega > \mu \end{array} \right\}. \quad (3.52)$$

Nessas condições, $\mathcal{F}_{BA}(0)$, a equação (3.30) será dada por:

$$\mathcal{F}_{BA}(0) = i \int_{-\infty}^{\mu} d\omega [G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta)]. \quad (3.53)$$

As funções de Green $G(\omega + i\delta)$ e $G(\omega - i\delta)$ podem ser determinadas através da seguinte identidade:

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\delta} = P \frac{1}{E - \omega} \mp i\pi\delta(E - \omega), \quad (3.54)$$

em que, $\delta \rightarrow 0$ com $\delta > 0$ e P a parte principal do valor da integral (Abrikosov, Gorkov e

Dzyaloshinski (1980)). Com essa identidade, escrevemos a equação (3.40),

$$G_r(E) = P \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{E - \omega} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) [i\pi\delta(E - \omega)], \quad (3.55)$$

ou, calculando a integral do segundo termo da $G_r(E)$,

$$G_r(E) = P \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{E - \omega} - \frac{i}{2} J(E)(e^{\beta E} - \eta). \quad (3.56)$$

Fazendo o mesmo procedimento para $G_a(E)$, equação (3.41), escrevemos

$$G_a(E) = P \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{E - \omega} + \frac{i}{2} J(E)(e^{\beta E} - \eta). \quad (3.57)$$

Subtraindo (3.57) de (3.56), resulta para a equação (3.48), que

$$G_r(E) - G_a(E) = -iJ(E)(e^{\beta E} - \eta). \quad (3.58)$$

Então, a intensidade espectral $J(E)$ pode ser definida em termos de $G(E)$,

$$J(E) = i \frac{G_r(E) - G_a(E)}{e^{\beta E} - \eta}, \quad (3.59)$$

ou,

$$J(E) = i \frac{G(E + i\delta) - G(E - i\delta)}{e^{\beta E} - \eta}. \quad (3.60)$$

Portanto, sempre que for possível determinar as funções de Green $G(E)$ de um sistema, então poderemos obter a intensidade espectral $J(\omega)$ e conseqüentemente as funções correlação $\mathcal{F}_{BA}(t - t')$ e $\mathcal{F}_{AB}(t - t')$, que são grandezas necessárias para o cálculo de valores médios termodinâmicos de um sistema físico.

3.7 Aproximação de dois polos

Nesta seção, será discutida uma das aproximações para tratar o conjunto das equações de movimento das funções de Green acopladas, equação (3.1). Como ponto de partida, será considerado um hamiltoniano descrito por operadores fermiônicos A e B

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(A, B). \quad (3.61)$$

A aproximação de dois polos consiste em impor que a dinâmica das partículas seja descrita através de um conjunto de operadores $\{A_n\}$ de tal maneira que a evolução (temporal) de cada operador A_n desse conjunto permaneça no subespaço gerado por estes operadores, isto é,

$$i \frac{d}{dt} A_n = [A_n, \mathcal{H}]_- = \sum_m K_{nm} A_m. \quad (3.62)$$

Anticomutando ambos os lados da equação (3.62) com os operadores B_p do conjunto A_n , teremos:

$$[[A_n, \mathcal{H}]_-, B_p]_+ = \sum_m K_{nm} [A_m, B_p]_+. \quad (3.63)$$

Tomando a média termodinâmica em ambos os lados da equação (3.63), definimos como matriz energia

$$\langle [[A_n, \mathcal{H}]_-, B_p]_+ \rangle = E_{n,p} \quad (3.64)$$

e como a matriz normalização

$$\langle [A_n, B_p]_+ \rangle = N_{n,p}. \quad (3.65)$$

Se a matriz normalização não for singular, podemos obter a matriz \mathbf{K} para o conjunto de operadores previamente escolhidos,

$$\mathbf{K} = \mathbf{E} \mathbf{N}^{-1}. \quad (3.66)$$

A ordem da matriz energia \mathbf{E} e da matriz normalização \mathbf{N} será igual ao número de operadores considerados no conjunto $\{A_n\}$. Tomando $E = \omega$ (para $\hbar = 1$), em termos da matriz energia \mathbf{E} e a matriz normalização \mathbf{N} , escrevemos a equação de movimento, como:

$$\omega \mathbf{G}^{A,B}(\omega) = \mathbf{N} + \mathbf{K} \mathbf{G}^{A,B}(\omega) \quad (3.67)$$

e assim escrevemos a matriz das funções de Green geradas pela aproximação de dois polos, na forma

$$\mathbf{G} = \mathbf{N}(\omega \mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1} \mathbf{N} \quad (3.68)$$

ou

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{N} \quad (3.69)$$

em que,

$$\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{N}(\omega \mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1}. \quad (3.70)$$

Com as funções de Green, podemos então calcular as funções correlação, equação (3.4).

3.8 Modelo de Hubbard de uma banda tratado na aproximação de dois polos

A aproximação de dois polos, conforme proposto por Roth (1969), tem a finalidade de melhorar a aproximação de campo médio utilizada por Hubbard (1963), em Hubbard I.

Para investigar a fase normal (paramagnética) de um sistema fortemente correlacionado, na aproximação de dois polos, é necessário a escolha de um conjunto apropriado de operadores $\{A_n\} = \{c_{i,\sigma}, n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}\}$. As equações de movimento para $\{A_n\}$ são:

$$[c_{i,\sigma}, \mathcal{H}]_- = \sum_j t_{ij}c_{j,\sigma} + Un_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}, \quad (3.71)$$

e

$$[n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}, \mathcal{H}]_- = \sum_j t_{ij}\pi_{ij,\sigma} + Un_{i,-\sigma}c_{i,\sigma} \quad (3.72)$$

em que

$$\pi_{ij,\sigma} = n_{i,-\sigma}c_{j,\sigma} + c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}c_{i,\sigma} - c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}. \quad (3.73)$$

Com as equações (3.71) e (3.72), podemos calcular $\langle [[A_n, \mathcal{H}]_-, A_p^\dagger]_+ \rangle$, para obter a matriz energia

$$\mathbf{E}_{ij,\sigma} = \begin{pmatrix} t_{ij} + Un_{-\sigma}\delta_{ij} & t_{ij}n_{-\sigma} + Un_{-\sigma}\delta_{ij} \\ t_{ij}n_{-\sigma} + Un_{-\sigma}\delta_{ij} & \langle [\sum_j t_{lj}\pi_{lj,\sigma}, n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}^\dagger]_+ \rangle + Un_{-\sigma}\delta_{ij} \end{pmatrix}. \quad (3.74)$$

Na condição de invariança translacional de um sistema paramagnético, escrevemos que,

$$n_{-\sigma} = \langle n_{i,-\sigma} \rangle$$

e

$$\begin{aligned} \langle [\sum_j t_{lj}\pi_{lj,\sigma}, n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}^\dagger]_+ \rangle &= t_{ij}\langle n_{i,\sigma} \rangle^2 + \sum_l t_{il} \{ \langle n_{i,\sigma}c_{i,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma} \rangle \\ &+ \langle n_{i,\sigma}c_{l,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} \rangle \\ &+ \langle c_{i,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma} n_{i,-\sigma} \rangle \\ &- \langle c_{l,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} n_{i,-\sigma} \rangle \} \delta_{ij} \\ &- t_{ij} \{ \langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} \rangle \\ &+ \langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma} c_{i,\sigma} \rangle \}. \end{aligned}$$

Introduzimos aqui $W_{ij,-\sigma}$, denominado de deslocamento de banda

$$W_{ij,-\sigma} = \frac{\langle [\sum_j t_{lj} \pi_{lj,\sigma}, n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger]_+ \rangle - t_{ij} \langle n_{i,-\sigma} \rangle^2}{\langle n_{i,\sigma} \rangle (1 - \langle n_{i,\sigma} \rangle)}, \quad (3.75)$$

em que,

$$\langle [\sum_j t_{lj} \pi_{lj,\sigma}, n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger]_+ \rangle = t_{ij} \langle n_{i,\sigma} \rangle^2 + \langle n_{i,\sigma} \rangle (1 - \langle n_{i,\sigma} \rangle) W_{ij,-\sigma}. \quad (3.76)$$

O deslocamento de banda $W_{ij,-\sigma}$ depende de várias funções correlação que envolvem além dos operadores do conjunto A_n outros operadores auxiliares B . Esses novos operadores B são definidos conforme procedimento original de L.Roth (1969) (ver seção 3.9).

No deslocamento de banda, uma das funções correlação presentes é

$$\langle (c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}) (c_{i,-\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \rangle = \langle S_j^+ S_i^- \rangle. \quad (3.77)$$

Essa correlação para o estado paramagnético pode ser escrita na forma

$$\langle S_j^+ S_i^- \rangle = \langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle - \langle S_j^z S_i^z \rangle, \quad (3.78)$$

sendo que o primeiro termo da equação (3.78) é conhecido por função correlação spin-spin.

Para construir as funções de Green para o modelo de Hubbard, na aproximação de dois polos, começaremos pela obtenção da matriz normalização (ver equação (3.65))

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} 1 & n_{-\sigma} \\ n_{-\sigma} & n_{-\sigma} \end{pmatrix}. \quad (3.79)$$

Com a equação (3.64) calculamos a matriz energia. Considerando a transformada de Fourier

$$\mathbf{E}_{\vec{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{i,j} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \mathbf{E}_{ij,\sigma}, \quad (3.80)$$

temos para os elementos de matriz energia:

$$E_{\vec{k},\sigma}^{11} = \varepsilon_{\vec{k}} + U n_{-\sigma}, \quad (3.81)$$

$$E_{\vec{k},\sigma}^{12} = E_{\vec{k},\sigma}^{21} = \varepsilon_{\vec{k}} n_{-\sigma} + U n_{-\sigma} \quad (3.82)$$

e

$$E_{\vec{k},\sigma}^{22} = \varepsilon_{\vec{k}} n_{-\sigma}^2 + U n_{-\sigma} + n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma}) W_{\vec{k},-\sigma} \quad (3.83)$$

em que

$$\begin{aligned} n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma}) W_{\vec{k},-\sigma} = & \\ & - \sum_{j \neq 0} t_{0j} \langle c_{0,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} (1 - n_{0,-\sigma} - n_{j,-\sigma}) \rangle \\ & + \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} (\langle n_{j,\sigma} n_{0,\sigma} \rangle - n_{\sigma}^2) \\ & + \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{0,-\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} \rangle \\ & - \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}^\dagger c_{0,-\sigma} c_{0,\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Com as matrizes \mathbf{N} , \mathbf{E} e a relação (3.70), obtemos a transformada de Fourier de $\tilde{\mathbf{G}}$, como:

$$\tilde{\mathbf{G}}_{\vec{k},\sigma}^{A,B}(\omega) = L^{-1} \sum_{i,j} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \tilde{\mathbf{G}}_{ij,\sigma}^{A,B}(\omega) \quad (3.85)$$

sendo que

$$\tilde{\mathbf{G}} = \gamma_{\vec{k},\sigma} \begin{pmatrix} \omega - U - W_{\vec{k},-\sigma} & U \\ n_{-\sigma}(\varepsilon_{\vec{k}} - W_{\vec{k},-\sigma}) & \omega - \varepsilon_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (3.86)$$

e

$$\gamma_{\vec{k},\sigma} = \frac{1}{(\omega - \varepsilon_{\vec{k}})(\omega - U - W_{\vec{k},-\sigma}) - U n_{-\sigma}(\varepsilon_{\vec{k}} - W_{\vec{k},-\sigma})}. \quad (3.87)$$

Finalmente, escrevemos também a transformada de Fourier da matriz função de Green, a equação (3.68), como:

$$\mathbf{G}_{\vec{k},\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) & G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega) \\ G_{\vec{k},\sigma}^{21}(\omega) & G_{\vec{k},\sigma}^{22}(\omega) \end{pmatrix} \quad (3.88)$$

com

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) = \gamma_{\vec{k},\sigma} [\omega - U(1 - n_{-\sigma}) - W_{\vec{k},-\sigma}], \quad (3.89)$$

$$G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega) = G_{\vec{k},\sigma}^{21}(\omega) = \gamma_{\vec{k},\sigma} n_{-\sigma} (\omega - W_{\vec{k},-\sigma}), \quad (3.90)$$

$$G_{\vec{k},\sigma}^{22}(\omega) = \gamma_{\vec{k},\sigma} n_{-\sigma} [\omega - \varepsilon_{\vec{k}}(1 - n_{-\sigma}) - n_{-\sigma} W_{\vec{k},-\sigma}]. \quad (3.91)$$

A aproximação de dois polos, conforme proposto por Roth (1969), gera um deslocamento de banda ($W_{\vec{k}}^-$), que muda a energia dos polos da função espectral $A_{\vec{k}\sigma}^-(\omega)$. O desloca-

mento de banda contém informações que descrevem como as correlações spin-spin afetam a dispersão da banda ($\varepsilon_{\vec{k}}$).

3.9 Funções correlação no deslocamento de banda

A escolha de um operador auxiliar B_s depende da função correlação a ser calculada. As funções correlação presentes em $E_{\vec{k},\sigma}^{22}$, equação (3.83), no termo

$$\begin{aligned} n_\sigma(1-n_\sigma)W_{\vec{k},\sigma} &= - \sum_{j \neq 0} t_{0,j} \langle c_{0,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} (1 - n_{0,-\sigma} - n_{j,-\sigma}) \rangle \\ &+ \sum_{j \neq 0} t_{0,j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} (\langle n_{j,\sigma} n_{0,\sigma} \rangle - n_\sigma^2) \\ &+ \sum_{j \neq 0} t_{0,j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} [\langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} \cdot c_{0,-\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} \rangle - \langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} \cdot c_{0,-\sigma} c_{0,\sigma} \rangle], \end{aligned} \quad (3.92)$$

podem ser calculadas considerando um conjunto extra de operadores $B_{\vec{k},\sigma}^s$, definidos conforme procedimento original de L.Roth (1969):

$$B_s = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} B_{\vec{k},\sigma}^s, \quad (3.93)$$

$$B_{\vec{k},\sigma}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} n_{l+j,\sigma} c_{l,\sigma}^\dagger, \quad (3.94)$$

$$B_{\vec{k},\sigma}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} n_{l+j,-\sigma} c_{l,\sigma}^\dagger, \quad (3.95)$$

$$B_{\vec{k},\sigma}^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} c_{l+j,\sigma}^\dagger c_{l+j,-\sigma} c_{l,-\sigma}^\dagger, \quad (3.96)$$

e

$$B_{\vec{k},\sigma}^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} c_{l+j,\sigma}^\dagger c_{l+j,-\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma}, \quad (3.97)$$

mais as funções correlação

$$\langle c_{0,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle = n_{0j,\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{11} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}, \quad (3.98)$$

$$\langle c_{0,\sigma}^\dagger n_{j,-\sigma} c_{j,\sigma} \rangle = m_{0j,\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{12} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \quad (3.99)$$

em que

$$\mathcal{F}_\omega = \frac{1}{2\pi} \oint f(\omega) d\omega \quad (3.100)$$

e $f(\omega)$ é a função de Fermi. $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ e $G_{\vec{k},\sigma}^{12}$ são elementos da matriz G , equação (3.88).

Introduzindo também

$$a_{j,\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega \tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{11} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}, \quad (3.101)$$

$$b_{j,\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega \tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{12} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}, \quad (3.102)$$

consequentemente, a_σ ($a_\sigma = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega \tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{11}$) e b_σ ($b_\sigma = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega \tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{12}$), ver equações (3.101) e (3.102) para $\vec{R}_j = 0$. $\tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{11}$ e $\tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{12}$ são elementos da matriz \tilde{G} , equação (3.86). Podemos escrever $\tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{11}$ e $\tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{12}$ em termos de $G_{\vec{k},\sigma}^{11}$ e $G_{\vec{k},\sigma}^{12}$, (ver equação (3.69)) como segue:

$$\tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{11} = \frac{G_{\vec{k},\sigma}^{11} - G_{\vec{k},\sigma}^{12}}{1 - n_{-\sigma}} \quad (3.103)$$

e

$$\tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{12} = \frac{\frac{G_{\vec{k},\sigma}^{12}}{n_{-\sigma}} - G_{\vec{k},\sigma}^{11}}{1 - n_{-\sigma}} \quad (3.104)$$

substituindo (3.103 e 3.104) em $a_{j,\sigma}$ e em $b_{j,\sigma}$, podemos escrever que:

$$a_{j,\sigma} = \frac{n_{0j,\sigma} - m_{0j,\sigma}}{1 - n_{-\sigma}} \quad (3.105)$$

e

$$b_{j,\sigma} = \frac{\frac{m_{0j,\sigma}}{n_{-\sigma}} - n_{0j,\sigma}}{1 - n_{-\sigma}}. \quad (3.106)$$

Para qualquer um dos operadores $B_{\vec{k},\sigma}^s$, as funções correlação são determinadas por:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle B^s c_{\vec{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega \tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{11} \langle [c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^s]_+ \rangle + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega \tilde{G}_{\vec{k},\sigma}^{12} \langle [n_{\vec{k}-\sigma} c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^s]_+ \rangle. \quad (3.107)$$

Para $B_{\vec{k},\sigma}^s = B_{\vec{k},\sigma}^{(1)}$, na equação (3.107), vamos obter a função correlação $\langle n_{0j,\sigma} n_{0,\sigma} \rangle$. Para isso, inicialmente calculamos $\langle [c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(1)}]_+ \rangle$ e $\langle [n_{\vec{k}-\sigma} c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(1)}]_+ \rangle$ e usando as equações (3.98 e 3.99) escrevemos

$$\langle [c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(1)}]_+ \rangle = n_\sigma - e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} n_{0j,\sigma} \quad (3.108)$$

e

$$\langle [n_{\vec{k}-\sigma} c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(1)}]_+ \rangle = \langle n_{0,-\sigma} n_{0j,\sigma} \rangle - e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} m_{0j,\sigma} \quad (3.109)$$

na sequência, utilizamos as equações (3.101 e 3.102) para finalmente obter a função correlação $\langle B_{(1)} c_{i\sigma} \rangle$ (ou $\langle n_{0j,\sigma} n_{0,\sigma} \rangle$),

$$\langle n_{0j,\sigma} n_{0,\sigma} \rangle = a_\sigma n_\sigma - a_{j,\sigma} n_{0j,\sigma} + b_\sigma \langle n_{0,-\sigma} n_{0j,\sigma} \rangle - b_{j,\sigma} m_{0j,\sigma}. \quad (3.110)$$

Repetindo os passos seguidos em $B_{\vec{k},\sigma}^s = B_{\vec{k},\sigma}^{(1)}$, calculamos as outras funções correlação presentes em $E_{\vec{k},\sigma}^{22}$.

Para $B_{\vec{k},\sigma}^s = B_{\vec{k},\sigma}^{(2)}$, na equação (3.107), vamos obter a correlação $\langle n_{0j,-\sigma} n_{0,\sigma} \rangle$.

Inicialmente calculamos

$$\langle [c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(2)}]_+ \rangle = n_{-\sigma} \quad (3.111)$$

e

$$\langle [n_{\vec{k}-\sigma} c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(2)}]_+ \rangle = \langle n_{0,-\sigma} n_{0j,-\sigma} \rangle \quad (3.112)$$

para obter a função correlação $\langle B_{(2)} c_{i\sigma} \rangle$ (ou $\langle n_{0j,-\sigma} n_{0,\sigma} \rangle$),

$$\langle n_{0j,-\sigma} n_{0,\sigma} \rangle = a_\sigma n_{-\sigma} + b_\sigma \langle n_{0,-\sigma} n_{0j,-\sigma} \rangle. \quad (3.113)$$

Trocando σ por $-\sigma$ na equação (3.113) e substituindo na equação (3.110), resulta que:

$$\langle n_{0j,\sigma} n_{0,\sigma} \rangle = \frac{a_\sigma n_\sigma - a_{j,\sigma} n_{0j,\sigma} + b_\sigma a_{-\sigma} n_{-\sigma} - b_{j,\sigma} m_{0j,\sigma}}{1 - b_\sigma b_{-\sigma}}, \quad (3.114)$$

como as equações (3.105) e (3.106), podemos escrever

$$\langle n_{0j,\sigma} n_{0,\sigma} \rangle - n_\sigma^2 = -\frac{a_{j,\sigma} n_{0j,\sigma} + b_{j,\sigma} m_{0j,\sigma}}{1 - b_\sigma b_{-\sigma}}. \quad (3.115)$$

A função correlação $\langle B_{(3)} c_{i\sigma} \rangle$ (ou $\langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{0,-\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} \rangle$) será obtida com as equações:

$$\langle [c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(3)}]_+ \rangle = -e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} n_{0,j-\sigma} \quad (3.116)$$

e

$$\langle [n_{\vec{k}-\sigma} c_{\vec{k}\sigma}, B_{\vec{k},\sigma}^{(3)}]_+ \rangle = -e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} m_{0j,-\sigma} - \langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{0,-\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} \rangle \quad (3.117)$$

resultando

$$\langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{0,-\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} \rangle = -\frac{a_{j,\sigma} n_{0j,-\sigma} + b_{j,\sigma} m_{0j,-\sigma}}{1 + b_\sigma}. \quad (3.118)$$

A última função correlação $\langle B_{(4)} c_{i\sigma} \rangle$ (ou $\langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}^\dagger c_{0,-\sigma} c_{0,\sigma} \rangle$) será obtida com as equações:

$$\langle [c_{\vec{k}\sigma}^\dagger, B_{\vec{k},\sigma}^{(4)}]_+ \rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} n_{0j,-\sigma} \quad (3.119)$$

e

$$\langle [n_{\vec{k}-\sigma} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger, B_{\vec{k},\sigma}^{(4)}]_+ \rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \langle n_{0j,-\sigma} n_{0j,-\sigma} \rangle - e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \langle c_{j,\sigma}^\dagger n_{0j,-\sigma} c_{j,\sigma} \rangle + \langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}^\dagger c_{0,-\sigma} c_{0,\sigma} \rangle \quad (3.120)$$

resultando

$$\langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}^\dagger c_{0,-\sigma} c_{0,\sigma} \rangle = \frac{a_{j,\sigma} n_{j,-\sigma} + b_{j,\sigma} (n_{j,-\sigma} - m_{j,\sigma})}{1 - b_\sigma}. \quad (3.121)$$

Retornando à equação (3.83), no termo que envolve o deslocamento de banda, substituindo as funções correlação equações (3.98, 3.99, 3.115, 3.118 e 3.121), temos:

$$\begin{aligned} n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}) W_{\vec{k}-\sigma} = & \\ & - \sum_{j \neq 0} t_{0j} (n_{0j,-\sigma} - 2m_{0j,-\sigma}) \\ & - \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \left(\frac{a_{j,-\sigma} n_{0j,-\sigma} + b_{j,-\sigma} m_{0j,-\sigma}}{1 - b_{-\sigma} b_\sigma} \right) \\ & - \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \left\{ \frac{a_{j,-\sigma} n_{0j,\sigma} + b_{j,-\sigma} m_{0j,\sigma}}{1 + b_{-\sigma}} \right\} \\ & - \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \left\{ \frac{a_{j,-\sigma} n_{0j,\sigma} + b_{j,-\sigma} (n_{0j,\sigma} - m_{0j,\sigma})}{1 - b_{-\sigma}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.122)$$

Assumindo que

$$\begin{aligned} h_{j,-\sigma}^{(1)} &= \frac{a_{j,-\sigma} n_{0j,-\sigma} + b_{j,-\sigma} m_{0j,-\sigma}}{1 - \beta_{-\sigma} \beta_\sigma} \\ h_{j,-\sigma}^{(2)} &= \frac{a_{j,-\sigma} n_{0j,\sigma} + b_{j,-\sigma} m_{0j,\sigma}}{1 + b_{-\sigma}} \\ h_{j,-\sigma}^{(3)} &= \frac{a_{j,-\sigma} n_{0j,\sigma} - b_{j,-\sigma} m_{0j,\sigma} + b_{j,-\sigma} n_{0j,\sigma}}{1 - b_{-\sigma}} \end{aligned} \quad (3.123)$$

finalmente, escrevemos para o termo que envolve o deslocamento de banda como:

$$n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}) W_{\vec{k}-\sigma} = - \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} t_{0j} (n_{0j,-\sigma} - 2m_{0j,-\sigma}) - \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} t_{0j} \{ h_{j,-\sigma}^{(1)} + h_{j,-\sigma}^{(2)} + h_{j,-\sigma}^{(3)} \}. \quad (3.124)$$

O método proposto por Roth para a escolha de um operador auxiliar B_s depende da função correlação a ser calculada, mas essa escolha não é única e escolhas diferentes levam a resultados diferentes. Uma deficiência deste método (Avella (1998)) é a compressibilidade ($\kappa = \frac{\partial n_T}{\partial \mu}$) negativa na região do meio preenchimento. Stanescu e seus colaboradores (Sta-

nescu, Martin e Phillips (2000)) mostraram que ainda que o princípio de Pauli seja aplicado de forma correta a compressibilidade continua negativa próxima a região do meio preenchimento. Mas, mesmo sem impor o princípio de Pauli, bons resultados são obtidos (Beenen e Edwards (1995)) para o estado normal do modelo de Hubbard. A comparação desses resultados com os de Monte Carlo e mesmo com dados experimentais sugere que o método proposto por Roth para a escolha de um operador auxiliar B_s gera bons resultados apesar do seu comportamento não físico na região do meio preenchimento.

3.10 Valor médio da energia de um sistema

Nessa seção, vamos obter a energia por átomo de um sistema com N partículas (férmions) interagentes, como aquele representado pelo hamiltoniano do modelo de Hubbard, equação (2.3). Para esse modelo, temos que

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} \langle n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} \rangle. \quad (3.125)$$

Começaremos com uma breve revisão dos passos necessários para o cálculo de E :

1. A equação de movimento das funções de Green

$$\omega \ll A; B \gg = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_+ \rangle + \ll [A, \mathcal{H}']_- ; B \gg, \quad (3.126)$$

para

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} - \mu N \quad (3.127)$$

com

$$N = \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} = \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}. \quad (3.128)$$

2. A dependência temporal de um operador A

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t}. \quad (3.129)$$

3. A evolução temporal (equação de movimento) do operador A

$$i \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), \mathcal{H}']_- = A(t) \mathcal{H}' - \mathcal{H}' A(t). \quad (3.130)$$

4. A função correlação em termos das funções de Green

$$\langle A(t)B(t') \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{\Gamma^{AB}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + \eta} \quad (3.131)$$

sendo que

$$\Gamma^{AB}(\omega \pm i\delta) = \ll A(t); B(t') \gg_{(\omega+i\delta)} - \ll A(t); B(t') \gg_{(\omega-i\delta)} \quad (3.132)$$

ou

$$\Gamma^{AB}(\omega \pm i\delta) = G_{ii}^{AB}(\omega + i\delta) - G_{ii}^{AB}(\omega - i\delta). \quad (3.133)$$

5. Tomando o somatório em i e σ na equação (3.131)

$$\sum_{i,\sigma} \langle A(t)B(t') \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{\Gamma^{AB}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + \eta}. \quad (3.134)$$

6. A derivada no tempo da função correlação, equação (3.134)

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle A(t)B(t') \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{\Gamma^{AB}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + \eta}. \quad (3.135)$$

Assim, se a função correlação $\langle A(t)B(t') \rangle = \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(t) \rangle$ ($\eta = 1$, para férmions), as equações (3.134) e (3.135) tomam as seguintes formas:

$$\sum_{i,\sigma} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(t) \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{\Gamma^{cc}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (3.136)$$

e

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(t) \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{\Gamma^{cc}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (3.137)$$

Então, com os passos acima (Kishore e Joshi (1971)), passamos a determinar a energia do sistema fermiônico através da função de Green $G_{ii}^{cc}(\omega) = \ll c_{i,\sigma}^\dagger; c_{i,\sigma}(t) \gg$. Começamos com a evolução do operador $c_{i,\sigma}(t)$,

$$i \frac{d}{dt} c_{i,\sigma}(t) = [c_{i,\sigma}(t), \mathcal{H}]_- = \sum_j (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) c_{j,\sigma}(t) + U c_{i,\sigma}(t) n_{i,-\sigma}(t). \quad (3.138)$$

Multiplicamos a equação (3.138), no seu lado esquerdo, por $c_{i,\sigma}^\dagger$ e pelo somatório em i e σ

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(t) = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}(t) + U \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(t) n_{i,-\sigma}(t). \quad (3.139)$$

Na sequência, tomamos a média sobre o ensemble

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(t) \rangle = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} - \mu\delta_{ij}) \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}(t) \rangle + U \sum_{i,\sigma} \langle n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma}(t) \rangle. \quad (3.140)$$

A função correlação que aparece no segundo termo da equação (3.140) pode ser retirada da equação (3.125)

$$U \sum_{i,\sigma} \langle n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma}(t) \rangle = 2\langle \mathcal{H} \rangle - 2 \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle. \quad (3.141)$$

Substituindo a equação (3.141), na equação (3.140), temos:

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(t) \rangle = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} - \mu\delta_{ij}) \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}(t) \rangle + 2\langle \mathcal{H} \rangle - 2 \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle. \quad (3.142)$$

Tomando $t = t'$ e no limite para $t \rightarrow 0$, nas equações (3.142), (3.136) e (3.137), escrevemos:

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \rangle = - \sum_{ij\sigma} (\mu\delta_{ij} + t_{ij}) \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle + 2\langle \mathcal{H} \rangle, \quad (3.143)$$

$$\sum_{i,\sigma} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\Gamma^{cc}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (3.144)$$

e

$$i \sum_{i,\sigma} \frac{d}{dt} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{i,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \frac{\Gamma^{cc}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (3.145)$$

Considerando a relação dos operadores $c_{i,\sigma}^\dagger, c_{i,\sigma}(t)$ com os operadores de Bloch $c_{\vec{k},\sigma}^\dagger, c_{\vec{k},\sigma}(t)$ e ainda a relação entre t_{ij} e $\epsilon_{\vec{k}}$ como segue:

$$c_{\vec{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{i,\sigma}, \quad (3.146)$$

$$c_{\vec{k},\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{i,\sigma}^\dagger, \quad (3.147)$$

e

$$\epsilon_{\vec{k}} = \sum_i e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} t_{ij}. \quad (3.148)$$

Escrevemos a transformada de Fourier das equações (3.143), (3.144) e (3.145), como:

$$i \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{d}{dt} \langle c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \rangle = - \sum_{\vec{k},\sigma} (\mu + \epsilon_{\vec{k}}) \langle c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \rangle + 2\langle \mathcal{H} \rangle, \quad (3.149)$$

$$\sum_{\vec{k},\sigma} \langle c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{\vec{k},\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{cc}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (3.150)$$

e

$$i \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{d}{dt} \langle c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{\vec{k},\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \frac{\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{cc}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (3.151)$$

Substituindo agora as equações (3.150) e (3.151) na equação (3.149), escrevemos:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{i}{2} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{\vec{k},\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\omega + \mu + \epsilon_{\vec{k}}) \frac{\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{cc}(\omega \pm i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (3.152)$$

Então, a energia por átomo E de um sistema com partículas (férmions) interagentes é

$$E = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = \frac{i}{2N} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{\vec{k},\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\omega + \mu + \epsilon_{\vec{k}}) \frac{G_{\vec{k},\sigma}^{cc}(\omega + i\delta) - G_{\vec{k},\sigma}^{cc}(\omega - i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (3.153)$$

Com a equação da energia por átomo de um sistema com N partículas interagentes podemos determinar quantidades como o calor específico eletrônico (c) para o modelo.

3.11 Cálculo do calor específico eletrônico

O comportamento do calor específico eletrônico pode trazer informações importantes a respeito dos efeitos das correlações de um sistema com partículas (férmions) interagentes. A seguir vamos obter uma expressão para o calor específico eletrônico considerando o modelo de Hubbard estendido com interação atrativa. Por definição o calor específico eletrônico (a volume constante) é:

$$c = \frac{\partial E}{\partial T} \quad (3.154)$$

sendo E a energia por átomo de um sistema e T a temperatura. Com a energia dada pela equação (3.153). Precisamos primeiro calcular $\frac{\partial f(\omega)}{\partial T}$ em que $f(\omega)$ é a distribuição de Fermi-Dirac,

$$\frac{\partial f(\omega)}{\partial T} = \frac{\omega e^{\frac{\omega}{k_B T}}}{k_B T^2 (e^{\frac{\omega}{k_B T}} + 1)^2}. \quad (3.155)$$

Então, com as equações (3.154, 3.153 e 3.155), escrevemos

$$c = \frac{i}{2N} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{\vec{k},\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\omega + \mu + \epsilon_{\vec{k}}) \omega e^{\frac{\omega}{k_B T}} \frac{G_{\vec{k},\sigma}^{cc}(\omega + i\delta) - G_{\vec{k},\sigma}^{cc}(\omega - i\delta)}{k_B T^2 (e^{\beta\omega} + 1)^2}. \quad (3.156)$$

Com o calor específico eletrônico (equação (3.156)) determinado numericamente, poderemos comparar os resultados da aproximação de dois polos com resultados obtidos por outros métodos, por exemplo, Monte Carlo (Duffy e Moreo (1997)).

4 FORMULAÇÃO GERAL DO PROBLEMA

No capítulo 4, serão calculadas as funções de Green para o estado normal de um sistema supercondutor de alta temperatura submetido à presença de um campo magnético estático e uniforme h . Esse sistema vem descrito por um modelo de Hubbard estendido com potencial atrativo, de uma banda e em duas dimensões. Na seção 4.1, apresentaremos a formulação geral para a construção das funções de Green do modelo no estado normal. Na seção 4.2, conhecendo as funções de Green calculamos a função espectral para o modelo. Na seção 4.3, serão desenvolvidos os cálculos dos termos de primeira ordem no campo magnético h para as funções de Green. Na seção 4.4, apresentaremos o cálculo analítico de α_σ , β_σ , φ_σ e λ_σ , quantidades essas envolvidas no cálculo da susceptibilidade magnética.

4.1 O modelo

O modelo de interesse vem do Hamiltoniano de Hubbard, apresentado na equação (2.3), modificado pela presença de um potencial atrativo U ($U < 0$) não local e ainda na presença de um campo magnético h . Na representação da segunda quantização temos:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,\sigma} (h\sigma - \mu) n_{i,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} n_{i,\sigma} n_{j,-\sigma} \quad (4.1)$$

em que as notações $\langle \dots \rangle$ e $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ indicam, respectivamente, a soma sobre os primeiros e segundos vizinhos mais próximos do sítio i , e μ é o potencial químico. Em duas dimensões, a relação de dispersão, para uma rede quadrada, é dada por

$$\varepsilon_{\vec{k}} = 2t((\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) + 4t_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a)). \quad (4.2)$$

sendo t e t_2 as amplitudes do “hopping” para primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

Para descrever o estado normal de um sistema fortemente correlacionado na aproximação de dois polos Roth (1969), escolhemos um conjunto de operadores $A_n = \{c_{i,\sigma}, n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}\}$ e seus respectivos complexos conjugados, conforme foi apresentado no capítulo 3. Considerando que o sistema possui invariância translacional, podemos escrever o operador número de

ocupação independente do sítio,

$$\langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle = \langle n_{j,-\sigma}(h) \rangle = n_{-\sigma}(h). \quad (4.3)$$

O número de ocupação é apresentado aqui com dependência no campo magnético h .

A matriz das funções de Green, na aproximação de dois polos, equação (3.68), é escrita em termos da matriz normalização $N_{n,p} = \langle [A_n, A_p^\dagger]_+ \rangle$

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} 1 & n_{-\sigma}(h) \\ n_{-\sigma}(h) & n_{-\sigma}(h) \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

e da matriz energia $E_{n,p} = \langle [[A_n, \mathcal{H}]_-, A_p^\dagger]_+ \rangle$. As equações de movimento, presentes na matriz energia, para o conjunto A_n e o Hamiltoniano (4.1) são dadas por:

$$[c_{i,\sigma}, \mathcal{H}]_- = (h\sigma - \mu)c_{i,\sigma} + 2U \sum_j c_{i,\sigma} n_{j,-\sigma} + \sum_j t_{ij} c_{j,\sigma} \quad (4.5)$$

e

$$[n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}, \mathcal{H}]_- = (h\sigma - \mu)n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} + 2U \sum_j n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} n_{j,-\sigma} + \sum_j t_{ij} \pi_{ij,\sigma} \quad (4.6)$$

em que

$$\pi_{ij,\sigma} = n_{i,-\sigma} c_{j,\sigma} + c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{i,\sigma} - c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}. \quad (4.7)$$

Com esses resultados, podemos obter os elementos da matriz energia, com dependência no campo magnético h , como:

$$\begin{aligned} E_{ij,\sigma}^{11}(h) &= (h\sigma - \mu)\delta_{ij} + t_{ij} + U_1\delta_{ij} \\ E_{ij,\sigma}^{12}(h) &= (h\sigma - \mu)\langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle\delta_{ij} + t_{ij}\langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle + U_2\delta_{ij} \\ E_{ij,\sigma}^{21}(h) &= E_{ij,\sigma}^{12}(h) \\ E_{ij,\sigma}^{22}(h) &= (h\sigma - \mu)\langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle\delta_{ij} + U_2\delta_{ij} + t_{ij}\langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle^2 + \langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle(1 - \langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle)W_{ij,-\sigma}(h) \end{aligned} \quad (4.8)$$

em que

$$U_1 = 2U \sum_l \langle n_{l,-\sigma}(h) \rangle, \quad (4.9)$$

$$U_2 = 2U \sum_l \langle n_{l,-\sigma}(h) n_{l,-\sigma}(h) \rangle, \quad (4.10)$$

e

$$t_{ij}\langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle^2 + \langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle(1 - \langle n_{i,-\sigma}(h) \rangle)W_{ij,-\sigma}(h) = \sum_j t_{ij}\langle [\pi_{lj,\sigma}, n_{i,-\sigma}c_{i,\sigma}^\dagger]_+ \rangle_h. \quad (4.11)$$

Considerando a transformada de Fourier da equação (4.11), ver equação (3.124), temos:

$$\begin{aligned} n_{-\sigma}(h)[1 - n_{-\sigma}(h)]W_{\vec{k},-\sigma}(h) &= - \sum_{j \neq 0} t_{0j}[n_{0j,-\sigma}(h) - 2m_{0j,-\sigma}(h)] \\ &\quad - \sum_{j \neq 0} t_{0j}e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}[h_{j,-\sigma}^{(1)}(h) + h_{j,-\sigma}^{(2)}(h) + h_{j,-\sigma}^{(3)}(h)], \end{aligned} \quad (4.12)$$

em que

$$n_\sigma(h) = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h), \quad (4.13)$$

$$n_{0j,\sigma}(h) = \langle c_{0,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle_h = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h)e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}, \quad (4.14)$$

$$m_\sigma(h) = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h), \quad (4.15)$$

$$m_{0j,\sigma}(h) = \langle c_{0,\sigma}^\dagger n_{j,-\sigma} c_{j,\sigma} \rangle_h = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h)e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}, \quad (4.16)$$

$$h_{j,-\sigma}^{(1)}(h) = \frac{a_{j,-\sigma}(h)n_{0j,-\sigma}(h) + b_{j,-\sigma}(h)m_{0j,-\sigma}(h)}{1 - b_{-\sigma}(h)b_\sigma(h)}, \quad (4.17)$$

$$h_{j,-\sigma}^{(2)}(h) = \frac{a_{j,-\sigma}(h)n_{0j,\sigma}(h) + b_{j,-\sigma}(h)m_{0j,\sigma}(h)}{1 + b_{-\sigma}(h)}, \quad (4.18)$$

$$h_{j,-\sigma}^{(3)}(h) = \frac{a_{j,-\sigma}(h)n_{0j,\sigma}(h) - b_{j,-\sigma}(h)m_{0j,\sigma}(h) + b_{j,-\sigma}(h)n_{0j,\sigma}(h)}{1 - b_{-\sigma}(h)} \quad (4.19)$$

com

$$a_{j,-\sigma}(h) = \frac{n_{0j,-\sigma}(h) - m_{0j,-\sigma}(h)}{1 - n_\sigma(h)} \quad (4.20)$$

e

$$b_{j,-\sigma}(h) = \frac{m_{0j,-\sigma}(h) - n_{0j,-\sigma}(h)n_\sigma(h)}{n_\sigma(h)(1 - n_\sigma(h))}. \quad (4.21)$$

Tomando a transformada de Fourier da matriz energia \mathbf{E} no espaço (ver equação (3.80)),

escrevemos os elementos da matriz energia como:

$$\begin{aligned}
E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h) &= h\sigma - \mu + \varepsilon_{\vec{k}} + U_1 \\
E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) &= E_{\vec{k},\sigma}^{21}(h) = (h\sigma - \mu + \varepsilon_{\vec{k}}) n_{-\sigma}(h) + U_2 \\
E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h) &= (h\sigma - \mu + \varepsilon_{\vec{k}} n_{-\sigma}(h)) n_{-\sigma}(h) + n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h))W_{\vec{k},-\sigma}(h) + U_2
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Com as equações (4.4) e (4.22), podemos construir a matriz das funções de Green no espaço recíproco, na aproximação de dois polos (ver equação (3.68)). Para começar, determinamos a matriz $\mathbf{X}_{\vec{k},\sigma}$

$$\mathbf{X}_{\vec{k},\sigma} = [\omega\mathbf{N} - \mathbf{E}] = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \tag{4.23}$$

sendo

$$\begin{aligned}
A &= \omega - E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h) \\
B &= C = \omega n_{-\sigma}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) \\
D &= \omega n_{-\sigma}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h)
\end{aligned} \tag{4.24}$$

A matriz inversa de $\mathbf{X}_{\vec{k},\sigma}$ é dada por

$$[\omega\mathbf{N} - \mathbf{E}]^{-1} = \frac{1}{\det\mathbf{X}_{\vec{k},\sigma}} \begin{pmatrix} \omega n_{-\sigma}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h) & \omega n_{-\sigma}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) \\ \omega n_{-\sigma}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) & \omega - E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h) \end{pmatrix}, \tag{4.25}$$

em que

$$\det\mathbf{X}_{\vec{k},\sigma} = \left(\omega - E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h)\right) \left(\omega n_{-\sigma}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h)\right) - \left(-\omega n_{-\sigma}(h) + E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h)\right)^2. \tag{4.26}$$

Segue que da equação (3.70), $\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{N}(\omega\mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1}$, logo

$$\tilde{\mathbf{G}}(\omega, h) = \frac{1}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h)} \begin{pmatrix} \omega + \frac{n_{-\sigma}(h)E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h)}{n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h))} & \frac{E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - n_{-\sigma}(h)E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h)}{n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h))} \\ \frac{n_{-\sigma}(h)(E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h))}{n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h))} & \omega + \frac{(E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - n_{-\sigma}(h)E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h))}{n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h))} \end{pmatrix} \tag{4.27}$$

com

$$D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h) = \frac{\det\mathbf{X}_{\vec{k},\sigma}}{n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h))}. \tag{4.28}$$

Finalmente, podemos escrever a matriz função de Green (ver equação (3.68)) para o nosso

modelo. Os elementos de matriz, com dependência no campo magnético h , são:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h) = \frac{\omega n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h)) + 2n_{-\sigma}(h)E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - n_{-\sigma}^2(h)E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h)}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h)}, \quad (4.29)$$

$$G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h) = \frac{\omega n_{-\sigma}^2(h)(1 - n_{-\sigma}(h)) + n_{-\sigma}^2(h) \left(E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h) \right) + n_{-\sigma}(h) \left(E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h) \right)}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h)}, \quad (4.30)$$

$$G_{\vec{k},\sigma}^{21}(\omega, h) = G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h) \quad (4.31)$$

e

$$G_{\vec{k},\sigma}^{22}(\omega, h) = \frac{\omega n_{-\sigma}^2(h)(1 - n_{-\sigma}(h)) + n_{-\sigma}^2(h) \left(2E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h) - E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h) \right)}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h)}. \quad (4.32)$$

A função de Green $G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h)$ é um dos elementos mais importantes da matriz das funções de Green, pois, com ela, podemos obter o valor médio do número de ocupação por sítio $n_{-\sigma}(h)$ e também calcular o potencial químico para um determinado número de ocupação. Os dois polos de $G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h)$, na condição de campo magnético externo h nulo, são os valores de ω , para os quais $D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0) = 0$. Antes de encontrar as raízes desse binômio, assumimos aqui uma notação mais simples:

$$\begin{aligned} n_{-\sigma}(0) &= n_{-\sigma}, \\ E_{\vec{k},\sigma}^{11}(0) &= E_{11}, \\ E_{\vec{k},\sigma}^{12}(0) &= E_{12}, \\ E_{\vec{k},\sigma}^{22}(0) &= E_{22}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

As raízes da equação (4.26), os polos das funções de Green que descrevem as energias de excitações do sistema, são $\omega_{1\vec{k},\sigma}$ e $\omega_{2\vec{k},\sigma}$:

$$\omega_{\frac{1}{2}\vec{k},\sigma} = -\frac{b}{2} \pm \left[b^2 + \frac{4(E_{12}^2 - E_{11}E_{22})}{2n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \right]^{1/2} \quad (4.34)$$

com

$$b = -\frac{(n_{-\sigma}E_{11} + E_{22} - 2n_{-\sigma}E_{12})}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})}. \quad (4.35)$$

Podemos escrever ainda, que

$$\omega_{2\vec{k},\sigma} = \omega_{1\vec{k},\sigma} + \left[b^2 + \frac{4(E_{12}^2 - E_{11}E_{22})}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \right]^{1/2} \quad (4.36)$$

e

$$D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0) = (\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma}). \quad (4.37)$$

Conhecendos os parâmetros do modelo (ver equação 4.39) poderemos produzir resultados numéricos para $\omega_{1\vec{k},\sigma}$ em termos do número de ocupação $n_{-\sigma}$.

4.2 Cálculo da função espectral

A função de Green permite também definir a função espectral ($A_{\vec{k},\sigma}(\omega)$) e a superfície de Fermi. Para obter a função espectral, tomamos a equação (4.29), na condição de $h = 0$,

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) = \frac{\omega n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma}) + 2n_{-\sigma}E_{\vec{k},\sigma}^{12} - n_{-\sigma}^2 E_{\vec{k},\sigma}^{11} - E_{\vec{k},\sigma}^{22}}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})} \quad (4.38)$$

e substituímos os elementos da matriz energia (ver equação 4.22)

$$\begin{aligned} E_{\vec{k},\sigma}^{11} &= -\mu + \varepsilon_{\vec{k}} + U_1 \\ E_{\vec{k},\sigma}^{12} &= E_{\vec{k},\sigma}^{21} = (-\mu + \varepsilon_{\vec{k}}) n_{-\sigma} + U_2 \\ E_{\vec{k},\sigma}^{22} &= (-\mu + \varepsilon_{\vec{k}} n_{-\sigma}) n_{-\sigma} + n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})W_{\vec{k},-\sigma} + U_2 \end{aligned} \quad (4.39)$$

das substituições realizadas, resulta que

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) = \frac{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})} \left[\omega + \mu - W_{\vec{k},-\sigma} - \frac{n_{-\sigma}^2 U_1 + (1 - 2n_{-\sigma})U_2}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \right] \quad (4.40)$$

sendo que as energias de excitações do sistema, os polos das funções de Green do modelo, são:

$$\omega_{1\vec{k},\sigma} = \frac{-2\mu + \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma} + \hat{U}}{2} + \frac{X_{\vec{k},\sigma}}{2} \quad (4.41)$$

e

$$\omega_{2\vec{k},\sigma} = \frac{-2\mu + \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma} + \hat{U}}{2} - \frac{X_{\vec{k},\sigma}}{2} \quad (4.42)$$

com

$$\hat{U} = \frac{n_{-\sigma}U_1 + (1 - 2n_{-\sigma})U_2}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \quad (4.43)$$

e

$$X_{\vec{k},\sigma} = [(\hat{U} - \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k},-\sigma})^2 + \frac{4(U_2^2 - U_2U_1)}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} + 4U_1(\varepsilon_{\vec{k}} - W_{\vec{k},-\sigma})]^{1/2}. \quad (4.44)$$

As integrais $G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega \pm i\delta)$ podem ser calculadas através da seguinte identidade

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\delta} = P \frac{1}{E - \omega} \mp i\pi\delta(E - \omega) \quad (4.45)$$

sendo P o valor principal de Cauchy. Para usar essa identidade, equação (4.45), precisamos escrever $G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega)$ na forma de frações parciais

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) = \frac{a}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})} + \frac{b}{(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})} \quad (4.46)$$

do tratamento analítico das equações (4.40) e (4.46), resultam que

$$a = \frac{1}{2} + \frac{\hat{U} - 2U_1 + W_{\vec{k},-\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}}}{2X_{\vec{k},\sigma}} \quad (4.47)$$

e

$$b = 1 - a = \frac{1}{2} - \frac{\hat{U} - 2U_1 + W_{\vec{k},-\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}}}{2X_{\vec{k},\sigma}}. \quad (4.48)$$

A função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(\omega)$, é então definida através da relação

$$A_{\vec{k},\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega). \quad (4.49)$$

Impondo a condição $A_{\vec{k},\sigma}(\omega = 0)$, poderemos definir também a superfície de Fermi do modelo proposto, que será apresentada no capítulo seguinte, o qual trata dos resultados numéricos.

4.3 Cálculos em primeira ordem do campo magnético

Partindo das equações (4.29) e (4.30), é possível obter as funções correlação necessárias para determinar a susceptibilidade magnética, em um caso geral para temperaturas finitas. Como um dos objetivos desse trabalho é calcular a susceptibilidade magnética para o modelo de elétrons fortemente correlacionados, faz-se necessário conhecer as expansões no campo magnético h , do número de ocupação $n_\sigma(h)$, do deslocamento de banda $W_{\vec{k},-\sigma}(h)$ e das próprias funções de Green (4.29) e (4.30). Antes de fazer as expansões necessárias para o

cálculo da susceptibilidade, chamamos a atenção para o fato de que as funções envolvidas guardam uma relação de mútua dependência, ou seja,

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h) = G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, n_{0j,-\sigma}(h), m_{0j,-\sigma}(h)), \quad (4.50)$$

$$G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h) = G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, n_{0j,-\sigma}(h), m_{0j,-\sigma}(h)), \quad (4.51)$$

$$n_{0j,\sigma}(h) = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}, \quad (4.52)$$

e

$$m_{0j,\sigma}(h) = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \quad (4.53)$$

em que \mathcal{F}_ω está definida na equação (3.100).

A relação entre a magnetização M e a susceptibilidade magnética χ devido à presença de um campo magnético uniforme é dada por

$$M = \chi h \quad (4.54)$$

ou, em termos da ocupação por sítio,

$$M = g_e \mu_B [n_\uparrow(h) - n_\downarrow(h)] \quad (4.55)$$

sendo g_e o fator de giro do elétron e μ_B o magneton de Bohr.

Para obter a susceptibilidade magnética precisamos expandir as funções de Green em termos do campo magnético h . Para isso necessitamos, inicialmente, fazer as expansões dos elementos da matriz energia (4.22) em primeira ordem do campo h . Começamos com as expansões das funções correlação presentes no deslocamento de banda e em U_2 . Para expandir $h_{j,-\sigma}^{(1)}(h)$, $h_{j,-\sigma}^{(2)}(h)$ e $h_{j,-\sigma}^{(3)}(h)$ escrevemos:

$$h_{j,-\sigma}^{(1)}(h) = h_{j,-\sigma}^{(1)}(0) + \Omega_{j,-\sigma}^{(1)} h, \quad (4.56)$$

$$h_{j,-\sigma}^{(2)}(h) = h_{j,-\sigma}^{(2)}(0) + \Omega_{j,-\sigma}^{(2)} h, \quad (4.57)$$

e

$$h_{j,-\sigma}^{(3)}(h) = h_{j,-\sigma}^{(3)}(0) + \Omega_{j,-\sigma}^{(3)}h. \quad (4.58)$$

As quantidades $\Omega_{j,-\sigma}^{(1)}$, $\Omega_{j,-\sigma}^{(2)}$ e $\Omega_{j,-\sigma}^{(3)}$ são obtidas por:

$$\Omega_{j,-\sigma}^{(1)} = \frac{X_1 + Y_1 - h_{j,-\sigma}^{(1)}(0) (R_1 b_\sigma(0) + R_2 b_{-\sigma}(0))}{1 - b_{-\sigma}(0) b_\sigma(0)}, \quad (4.59)$$

$$\Omega_{j,-\sigma}^{(2)} = \frac{X_2 + Y_2 + h_{j,-\sigma}^{(2)}(0) R_1}{1 + b_{-\sigma}(0)} \quad (4.60)$$

e

$$\Omega_{j,-\sigma}^{(3)} = \frac{X_2 - Y_2 + Z_2 - h_{j,-\sigma}^{(3)}(0) R_1}{1 - b_{-\sigma}(0)} \quad (4.61)$$

com

$$X_1 = \beta_{-\sigma} a_{j,-\sigma}(0) + S_0 n_{0j,-\sigma}(0), \quad (4.62)$$

$$Y_1 = \lambda_{-\sigma} b_{j,-\sigma}(0) - R_0 m_{0j,-\sigma}(0), \quad (4.63)$$

$$R_0 = \frac{\alpha_\sigma b_{j,-\sigma}(0) (1 - 2n_\sigma(0)) - \lambda_{-\sigma} + \beta_{-\sigma} n_\sigma(0) + \alpha_\sigma n_{0j,-\sigma}(0)}{n_\sigma(0) (1 - n_\sigma(0))}, \quad (4.64)$$

$$R_1 = \frac{\alpha_\sigma b_{-\sigma}(0) (1 - 2n_\sigma(0)) - \varphi_{-\sigma} + \alpha_\sigma n_{-\sigma}(0) + \alpha_{-\sigma} n_\sigma(0)}{n_\sigma(0) (1 - n_\sigma(0))}, \quad (4.65)$$

$$R_2 = \frac{\alpha_{-\sigma} b_\sigma(0) (1 - 2n_{-\sigma}(0)) - \varphi_\sigma + \alpha_{-\sigma} n_\sigma(0) + \alpha_\sigma n_{-\sigma}(0)}{n_{-\sigma}(0) (1 - n_{-\sigma}(0))}, \quad (4.66)$$

$$S_0 = \frac{\beta_{-\sigma} - \lambda_{-\sigma} + \alpha_\sigma a_{j,-\sigma}(0)}{1 - n_\sigma(0)}, \quad (4.67)$$

$$X_2 = \beta_\sigma a_{j,-\sigma}(0) + S_0 n_{0j,\sigma}(0), \quad (4.68)$$

$$Y_2 = \lambda_\sigma b_{j,-\sigma}(0) - R_0 m_{0j,\sigma}(0) \quad (4.69)$$

e

$$Z_2 = \beta_\sigma b_{j,-\sigma}(0) - R_0 n_{0j,\sigma}(0). \quad (4.70)$$

Para expandir $m_{0j,\sigma}(h)$ e $n_{0j,\sigma}(h)$ escrevemos:

$$n_\sigma(h) = n_\sigma(0) + \alpha_\sigma h, \quad (4.71)$$

$$n_{0j,\sigma}(h) = n_{0j,\sigma}(0) + \beta_\sigma h, \quad (4.72)$$

$$m_\sigma(h) = m_\sigma(0) + \varphi_\sigma h, \quad (4.73)$$

e

$$m_{0j,\sigma}(h) = m_{0j,\sigma}(0) + \lambda_\sigma h. \quad (4.74)$$

Assim escrevemos, a expansão no termo que envolve o deslocamento de banda

$$\begin{aligned} & n_{-\sigma}(h)(1 - n_{-\sigma}(h))W_{\vec{k},-\sigma}(h) \\ &= \sum_{j \neq 0} t_{0j} (n_{0j,-\sigma}(h) - 2m_{0j,-\sigma}(h)) - \sum_{j \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} t_{0j} (h_{j,-\sigma}^{(1)}(h) + h_{j,-\sigma}^{(2)}(h) + h_{j,-\sigma}^{(3)}(h)) \\ &= n_{-\sigma}(0)(1 - n_{-\sigma}(0))W_{\vec{k},-\sigma}(0) + \sum_{j \neq 0} t_{0j} \left[\beta_{-\sigma} - 2\lambda_{-\sigma} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} (\Omega_{j,-\sigma}^{(1)} + \Omega_{j,-\sigma}^{(2)} + \Omega_{j,-\sigma}^{(3)}) \right] h \end{aligned} \quad (4.75)$$

e a expansão em U_2 , tomada em $i = 0$,

$$\langle n_{l,-\sigma}(h) n_{0,-\sigma}(h) \rangle = n_{-\sigma}^2(h) - h_{j,-\sigma}^{(1)}(h) = \langle n_{l,-\sigma} n_{0,-\sigma} \rangle_{h=0} + (2\alpha_{-\sigma} n_{-\sigma}(0) - \Omega_{j,-\sigma}^{(1)})h. \quad (4.76)$$

Agora, escrevemos as expansões nos elementos da matriz energia (ver equações em (4.22)), em primeira ordem de h , na forma:

$$\begin{aligned} E_{\vec{k},\sigma}^{11}(h) &= E_{\vec{k},\sigma}^{11}(0) + e_{\vec{k},\sigma}^{11} h \\ E_{\vec{k},\sigma}^{12}(h) &= E_{\vec{k},\sigma}^{12}(0) + e_{\vec{k},\sigma}^{12} h \\ E_{\vec{k},\sigma}^{22}(h) &= E_{\vec{k},\sigma}^{22}(0) + e_{\vec{k},\sigma}^{22} h \end{aligned} \quad (4.77)$$

sendo que:

$$E_{\vec{k},\sigma}^{11}(0) = -\mu + \varepsilon_{\vec{k}} + 2U \sum_l n_{l,-\sigma}(0), \quad (4.78)$$

$$E_{\vec{k},\sigma}^{12}(0) = (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) n_{-\sigma}(0) + 2U \sum_l \langle n_{l,-\sigma}(0) n_{0,-\sigma}(0) \rangle, \quad (4.79)$$

$$E_{\vec{k},\sigma}^{22}(0) = -\mu n_{-\sigma}(0) + \varepsilon_{\vec{k}} n_{-\sigma}^2(0) + n_{-\sigma}(0) (1 - n_{-\sigma}(0)) W_{\vec{k},-\sigma}(0) + 2U \sum_l \langle n_{l,-\sigma}(0) n_{0,-\sigma}(0) \rangle, \quad (4.80)$$

e

$$e_{\vec{k},\sigma}^{11} = \sigma + 2zU\beta_{-\sigma}, \quad (4.81)$$

$$e_{\vec{k},\sigma}^{12} = \sigma n_{-\sigma}(0) + (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) \alpha_{-\sigma} + 2Uz \left(2\alpha_{-\sigma} n_{-\sigma}(0) - \Omega_{j,-\sigma}^{(1)} \right), \quad (4.82)$$

$$e_{\vec{k},\sigma}^{22} = \sigma n_{-\sigma}(0) - \mu \alpha_{-\sigma} + 2\varepsilon_{\vec{k}} \alpha_{-\sigma} n_{-\sigma}(0) - V_0 + 2UzV_1, \quad (4.83)$$

em que z é o número de primeiros vizinhos do sítio i ,

$$V_0 = (\beta_{-\sigma} - 2\lambda_{-\sigma}) + e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} (\Omega_{j,-\sigma}^{(1)} + \Omega_{j,-\sigma}^{(2)} + \Omega_{j,-\sigma}^{(3)}) \quad (4.84)$$

e

$$V_1 = 2z\alpha_{-\sigma} n_{-\sigma}(0) - \sum_l \Omega_{j,-\sigma}^{(1)}. \quad (4.85)$$

Prosseguindo, podemos agora expandir também as funções de Green, equações (4.29) e (4.30). As expansões dessas duas funções podem ser apresentadas na forma que segue:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h) = G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, 0) + I_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega)h, \quad (4.86)$$

$$G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h) = G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, 0) + I_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega)h \quad (4.87)$$

As funções $I_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega)$ e $I_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega)$ serão determinadas na sequência do trabalho. Por meio dessas expansões, será possível obter uma expressão para a susceptibilidade magnética χ do sistema representado pelo Hamiltoniano, equação (4.1). Para tornar o trabalho mais simples, serão expandidos em separado o numerador e o denominador dessas funções de Green, e sempre que for possível, simplificaremos a notação (por exemplo: passamos a escrever $e_{\vec{k},\sigma}^{nm}$ como e_{nm} ,

sem esquecer sua dependência em \vec{k} e σ).

$$G_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h) = \frac{A_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h)}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h)}, \quad (4.88)$$

$$G_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h) = \frac{A_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h)}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h)}. \quad (4.89)$$

Expandindo o denominador das equações (4.88) e (4.89):

$$D_{\vec{k},\sigma}(\omega, h) = D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0) + d_{\vec{k},\sigma}(\omega)h \quad (4.90)$$

em que $D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0)$ e $d_{\vec{k},\sigma}(\omega)$ são:

$$D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0) = (\omega - E_{11})(\omega n_{-\sigma} - E_{22}) - (-\omega n_{-\sigma} + E_{12})^2 \quad (4.91)$$

e

$$d_{\vec{k},\sigma}(\omega) = d_1 + \omega d_2 + \omega^2 d_3, \quad (4.92)$$

com

$$d_1 = e_{11}E_{22} + e_{22}E_{11} - 2e_{12}E_{12}, \quad (4.93)$$

$$d_2 = -e_{22} - n_{-\sigma}(e_{11} - 2e_{12}) - \alpha_{-\sigma}(E_{11} - 2E_{12}), \quad (4.94)$$

$$d_3 = \alpha_{-\sigma}(1 - 2n_{-\sigma}(0)). \quad (4.95)$$

Agora, expandindo o numerador das equações (4.88) e (4.89)

$$A_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, h) = A_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, 0) + g_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega)h, \quad (4.96)$$

$$A_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, h) = A_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, 0) + g_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega)h, \quad (4.97)$$

para estas equações, temos que:

$$A_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, 0) = A_1 + \omega A_2, \quad (4.98)$$

$$A_1 = 2n_{-\sigma}E_{12} - n_{-\sigma}^2E_{11} - E_{22}, \quad (4.99)$$

$$A_2 = n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma}), \quad (4.100)$$

$$A_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega, 0) = A'_1 + \omega A'_2, \quad (4.101)$$

$$A'_1 = n_{-\sigma}^2(E_{12} - E_{11}) + n_{-\sigma}(E_{12} - E_{22}), \quad (4.102)$$

$$A'_2 = n_{-\sigma}^2(1 - n_{-\sigma}), \quad (4.103)$$

e

$$g_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) = g_1 + \omega g_2, \quad (4.104)$$

$$g_1 = 2\alpha_{-\sigma}E_{12} - 2\alpha_{-\sigma}n_{-\sigma}E_{11} + 2e_{12}n_{-\sigma} - n_{-\sigma}^2e_{11} - e_{22}, \quad (4.105)$$

$$g_2 = \alpha_{-\sigma}(1 - 2n_{-\sigma}), \quad (4.106)$$

$$g_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega) = g'_1 + \omega g'_2, \quad (4.107)$$

$$g'_1 = 2\alpha_{-\sigma}n_{-\sigma}E_{12} - 2\alpha_{-\sigma}n_{-\sigma}E_{11} + n_{-\sigma}^2e_{12} - n_{-\sigma}^2e_{11} + \alpha_{-\sigma}E_{12} + \alpha_{-\sigma}E_{22} + n_{-\sigma}e_{12} - n_{-\sigma}e_{22}, \quad (4.108)$$

$$g'_2 = \alpha_{-\sigma}n_{-\sigma}(2 - 3n_{-\sigma}). \quad (4.109)$$

Das expansões em primeira ordem, em h do numerador e denominador das funções (4.29) e (4.30), resultam para $I_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega)$ e $I_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega)$, presentes nas equações (4.86) e (4.87), que:

$$I_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) = \frac{g_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega)}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0)} - \frac{A_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega, 0)d_{\vec{k},\sigma}(\omega)}{\left[D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0)\right]^2}, \quad (4.110)$$

$$I_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega) = \frac{g_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega)}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega,0)} - \frac{A_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega,0)d_{\vec{k},\sigma}(\omega)}{[D_{\vec{k},\sigma}(\omega,0)]^2} \quad (4.111)$$

ou

$$I_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega) = \frac{g_1 + \omega g_2}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega,0)} - \frac{A_1 d_1 + \omega(A_1 d_2 + A_2 d_1) + \omega^2(A_2 d_2 + A_1 d_3) + \omega^3 A_2 d_3}{[D_{\vec{k},\sigma}(\omega,0)]^2}, \quad (4.112)$$

$$I_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega) = \frac{g'_1 + \omega g'_2}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega,0)} - \frac{A'_1 d_1 + \omega(A'_1 d_2 + A'_2 d_1) + \omega^2(A'_2 d_2 + A'_1 d_3) + \omega^3 A'_2 d_3}{[D_{\vec{k},\sigma}(\omega,0)]^2}. \quad (4.113)$$

4.4 Cálculo analítico de α_σ , β_σ , φ_σ e λ_σ

Através da definição da função correlação dada pela equação (3.3), podemos obter a quantidade número de ocupação como:

$$n_{-\sigma}(h) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \text{Im}\{G_{\vec{k},-\sigma}^{11}(\omega, h)\} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},-\sigma}^{11}(\omega, h). \quad (4.114)$$

Com a equação (4.114), ou a equação (4.52), e a expansão linear em h para as funções de Green (ver equação (4.86)), escrevemos que

$$n_{0j,-\sigma}(h) = n_{0j,-\sigma}(0) + \beta_{-\sigma} h = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},-\sigma}^{11}(\omega, 0) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} + \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega I_{\vec{k},-\sigma}^{11}(\omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} h. \quad (4.115)$$

Assim, de acordo com as equações (4.71 e 4.72), chegamos em:

$$\beta_{-\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega I_{\vec{k},-\sigma}^{11}(\omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \quad (4.116)$$

e

$$\alpha_{-\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega I_{\vec{k},-\sigma}^{11}(\omega). \quad (4.117)$$

Repetindo o processo anterior para as equações (4.53) e (4.87), escrevemos

$$m_{0j,-\sigma}(h) = m_{0j,-\sigma}(0) + \lambda_{-\sigma} h = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega G_{\vec{k},-\sigma}^{12}(\omega, h) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} + \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega I_{\vec{k},-\sigma}^{12}(\omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} h. \quad (4.118)$$

De acordo com as equações (4.73 e 4.74), chegamos em:

$$\lambda_{-\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega I_{\vec{k},-\sigma}^{12}(\omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \quad (4.119)$$

e

$$\varphi_{-\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_\omega I_{\vec{k},-\sigma}^{12}(\omega). \quad (4.120)$$

Como próximo passo, preciso separar as equações (4.110) e (4.111) em frações parciais, mas antes é necessário prepararmos uma forma generalizada $I_{\vec{k},\sigma}^{mn}(\omega)$ para essas equações

$$I_{\vec{k},\sigma}^{mn}(\omega) = \frac{g_1 + \omega g_2}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0)} - \frac{C_{1\vec{k},\sigma} + \omega C_{2\vec{k},\sigma} + \omega^2 C_{3\vec{k},\sigma} + \omega^3 C_{4\vec{k},\sigma}}{[D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0)]^2}. \quad (4.121)$$

Usando o tratamento de separação em frações parciais, temos que

$$\frac{g_1 + \omega g_2}{D_{\vec{k},\sigma}(\omega, 0)} = \left(\frac{g_1 + \omega_{1\vec{k},\sigma} g_2}{\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma}} \right) \frac{1}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})} - \left(\frac{g_1 + \omega_{2\vec{k},\sigma} g_2}{\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma}} \right) \frac{1}{(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})} \quad (4.122)$$

e

$$\frac{C_1 + \omega C_2 + \omega^2 C_3 + \omega^3 C_4}{[(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)]^2} = \frac{\Gamma^{(1)}}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})^2} + \frac{\Gamma^{(2)}}{(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})^2} + \frac{\Gamma^{(3)}}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})} + \frac{\Gamma^{(4)}}{(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})} \quad (4.123)$$

com

$$\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{(1)} = \frac{C_1 + C_2 \omega_{2\vec{k},\sigma} + C_3 \omega_{1\vec{k},\sigma}^2 + C_4 \omega_{1\vec{k},\sigma}^3}{(\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma})^2}, \quad (4.124)$$

$$\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{(2)} = \frac{C_1 + C_2 \omega_{2\vec{k},\sigma} + C_3 \omega_{2\vec{k},\sigma}^2 + C_4 \omega_{2\vec{k},\sigma}^3}{(\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma})^2}, \quad (4.125)$$

$$\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{(3)} = -\frac{2C_1 + C_2(\omega_{1\vec{k},\sigma} + \omega_{2\vec{k},\sigma}) + 2C_3(\omega_{1\vec{k},\sigma} \omega_{2\vec{k},\sigma}) + C_4(3\omega_{2\vec{k},\sigma} \omega_{1\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{1\vec{k},\sigma}^3)}{(\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma})^3} \quad (4.126)$$

e

$$\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{(4)} = \frac{2C_1 + C_2(\omega_{1\vec{k},\sigma} + \omega_{2\vec{k},\sigma}) + 2C_3(\omega_{1\vec{k},\sigma} \omega_{2\vec{k},\sigma}) + C_4(3\omega_{1\vec{k},\sigma} \omega_{2\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{2\vec{k},\sigma}^3)}{(\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma})^3}. \quad (4.127)$$

Retornando à equação (4.121), com as devidas substituições das funções $\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{(i)}$, escrevemos que

$$I(\omega) = \left(\Gamma^{(3)} + \frac{g_1 + \omega_1 g_2}{\omega_1 - \omega_2} \right) \frac{1}{(\omega - \omega_1)} + \left(\Gamma^{(4)} - \frac{g_1 + \omega_2 g_2}{\omega_1 - \omega_2} \right) \frac{1}{(\omega - \omega_2)} + \frac{\Gamma^{(1)}}{(\omega - \omega_1)^2} + \frac{\Gamma^{(2)}}{(\omega - \omega_2)^2} \quad (4.128)$$

ou

$$I_{\vec{k},\sigma}^{mn}(\omega) = \frac{\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(a)}}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})} + \frac{\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(b)}}{(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})} + \frac{\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{(1)}}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})^2} + \frac{\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{(2)}}{(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})^2}. \quad (4.129)$$

em que

$$\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(a)} = \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(3)} + \frac{g_1 + \omega_{1\vec{k},\sigma} g_2}{(\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma})} \quad (4.130)$$

e

$$\Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(b)} = \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(4)} - \frac{g_1 + \omega_{2\vec{k},\sigma} g_2}{(\omega_{1\vec{k},\sigma} - \omega_{2\vec{k},\sigma})}. \quad (4.131)$$

Retornando para as equações (4.116) e (4.119), podemos representá-las pela equação

$$\rho_{-\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_{\omega} I_{\vec{k},\sigma}^{mn}(\omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \quad (4.132)$$

e as outras (4.117) e (4.120) por

$$\nu_{-\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \mathcal{F}_{\omega} I_{\vec{k},\sigma}^{mn}(\omega). \quad (4.133)$$

Resolvendo primeiro $\nu_{-\sigma}$

$$\begin{aligned} \nu_{-\sigma} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(a)} \delta(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma}) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(b)} \delta(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma}) \\ &+ \frac{1}{i2\pi} \oint d\omega f(\omega) \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(1)} \left[\frac{1}{(\omega - \omega_{1\vec{k},\sigma})^2} \right] \\ &+ \frac{1}{i2\pi} \oint d\omega f(\omega) \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(2)} \left[\frac{1}{(\omega - \omega_{2\vec{k},\sigma})^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.134)$$

Assim, para $\nu_{-\sigma}$, representando $\alpha_{-\sigma}$ e $\varphi_{-\sigma}$, temos que:

$$\nu_{-\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} [f(\omega_{1\vec{k},\sigma}) \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(a)} + f(\omega_{2\vec{k},\sigma}) \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(b)}] - \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \sum_{j=1}^2 \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(j)} \frac{e^{-\frac{\omega_{j\vec{k},\sigma}}{\theta}}}{(e^{-\frac{\omega_{j\vec{k},\sigma}}{\theta}} + 1)^2} \quad (4.135)$$

e, para $\rho_{-\sigma}$, representando $\beta_{-\sigma}$ e $\lambda_{-\sigma}$,

$$\rho_{-\sigma} = \frac{1}{z(t_1 + t_2)} \left[\frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} [f(\omega_{1\vec{k},\sigma}) \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(a)} + f(\omega_{2\vec{k},\sigma}) \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(b)}] - \frac{1}{L} \sum_{\vec{k}} \sum_{j=1}^2 \Gamma_{\vec{k},\sigma}^{mn-(j)} \frac{e^{\frac{\omega_{j\vec{k},\sigma}}{\theta}}}{(e^{\frac{\omega_{j\vec{k},\sigma}}{\theta}} + 1)^2} \right] \epsilon_{\vec{k}} \quad (4.136)$$

em que $\epsilon_{\vec{k}}$ está definida na equação (2.16).

As quantidades α_{σ} , β_{σ} , φ_{σ} e λ_{σ} podem agora ser determinadas a partir de $I_{\vec{k},\sigma}^{11}(\omega)$ (ver equação (4.112)) e $I_{\vec{k},\sigma}^{12}(\omega)$ (ver equação (4.113)). Sendo que $I_{\vec{k},\sigma}^{mn}(\omega)$ é obtido por: $I_{\vec{k},\sigma}^{mn-(a)}(\omega)$, $I_{\vec{k},\sigma}^{mn-(b)}(\omega)$, $I_{\vec{k},\sigma}^{(1)}(\omega)$ e $I_{\vec{k},\sigma}^{(2)}(\omega)$ respectivamente, as equações (4.130, 4.131, 4.124 e 4.125).

No capítulo seguinte, trataremos numericamente às quantidades α_{σ} , β_{σ} , φ_{σ} e λ_{σ} para que possamos analisarmos o comportamento de algumas propriedades do modelo apresentado para descrever o estado normal dos supercondutores de altas temperaturas, como:

1. Susceptibilidade magnética estática χ

A relação entre a magnetização M e a susceptibilidade magnética devido à presença de um campo magnético uniforme (ver seção 4.3) é dada por

$$M = \chi h$$

ou, em termos da ocupação ($n_{\sigma}(h) = \langle c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} \rangle_h$) por sítio,

$$M = g_e \mu_B [n_{\uparrow}(h) - n_{\downarrow}(h)]$$

sendo g_e o fator de giro do elétron e μ_B o magneton de Bohr. Em termos de uma expansão de $n_{\sigma}(h)$, em primeira ordem no campo, escrevemos

$$\chi = g_e \mu_B (\alpha_{\uparrow} - \alpha_{\downarrow})$$

onde, α_{σ} é o coeficiente dessa expansão (em primeira ordem no campo).

2. Função correlação spin-spin $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$

No deslocamento de banda ($W_{ij,-\sigma}$), obtido com a aprox. de dois polos para o modelo (ver seção 3.8), uma das funções correlação presentes é

$$\langle (c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{j,-\sigma}) (c_{i,-\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}) \rangle = \langle S_j^+ S_i^- \rangle.$$

Essa correlação para o estado paramagnético pode ser escrita na forma

$$\langle S_j^+ S_i^- \rangle = \langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle - \langle S_j^z S_i^z \rangle,$$

sendo que o primeiro termo da equação (3.78) é conhecido por função correlação spin-spin.

3. Função espectral $A_{\vec{k}\sigma}(\omega)$ e superfície de Fermi (SF)

A técnica de ARPES permite associar os resultados de um modelo teórico com seus resultados experimentais. A função espectral $A_{\vec{k}\sigma}(\omega)$ está diretamente relacionada com a parte imaginária das funções de Green, que podem ser obtidas como resultados de um modelo teórico (ver seção 4.2),

$$A_{\vec{k}\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\vec{k}\sigma}(\omega).$$

A superfície de Fermi pode ser definida através da função espectral.

4. Energia interna (E) e calor específico eletrônico (c)

A energia por átomo de um sistema com N partículas (férmions) interagentes é (ver seção 3.10)

$$E = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = \frac{i}{2N} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{\vec{k}, \sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\omega + \mu + \epsilon_{\vec{k}}) \frac{G_{\vec{k}, \sigma}^{cc}(\omega + i\delta) - G_{\vec{k}, \sigma}^{cc}(\omega - i\delta)}{e^{\beta\omega} + 1}.$$

Com a Energia interna (E) podemos determinar o calor específico eletrônico (a volume constante) (ver seção 3.11) por:

$$c = \frac{\partial E}{\partial T}.$$

Para o modelo de Hubbard estendido com interação atrativa, o calor específico eletrônico é:

$$c = \frac{i}{2N} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{\vec{k}, \sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\omega + \mu + \epsilon_{\vec{k}}) \omega e^{\frac{\omega}{k_B T}} \frac{G_{\vec{k}, \sigma}^{cc}(\omega + i\delta) - G_{\vec{k}, \sigma}^{cc}(\omega - i\delta)}{k_B T^2 (e^{\beta\omega} + 1)^2}.$$

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo, apresentaremos os resultados numéricos relativos aos cálculos analíticos desenvolvidos para o modelo de Hubbard estendido com potencial atrativo e não local. Os resultados foram obtidos através de um programa computacional, desenvolvendo em linguagem Fortran 77, no Laboratório de Teoria da Matéria Condensada, LabTMC-UFSM.

5.1 Susceptibilidade magnética estática

A figura 5.1, mostra o comportamento da susceptibilidade magnética estática (χ) em função da temperatura (T) e do número de ocupação (n_T). Uma característica importante na

Figura 5.1: Susceptibilidade magnética estática χ em função da temperatura T e da ocupação n_T para o modelo de Hubbard estendido com potencial atrativo e não local. Os parâmetros do modelo são $t = -1.0 eV$, $t_2 = 0.3|t|$ e $U = 8.0|t|$.

figura 5.1 é a existência de um pico na susceptibilidade magnética, localizado em $n_T \simeq 0.80$, mostrando dois tipos de comportamento para χ . No lado esquerdo do pico ($n_T < 0.80$), a susceptibilidade mostra-se fracamente dependente da temperatura, lembrando um metal normal. No lado direito do pico ($n_T > 0.80$), a susceptibilidade é fortemente dependente da temperatura. A presença de um pico na susceptibilidade como uma função da dopagem tem sido observada em supercondutores de altas temperaturas (Torrance (1989)).

A análise da densidade de estados (DOS ou $\rho(\omega)$) do modelo em estudo pode ajudar a entender a natureza do pico na susceptibilidade. Na figura 5.2, o painel da esquerda mostra as bandas renormalizadas pela interação U , para diferentes ocupações n_T . As bandas são interceptadas pelo potencial químico (μ) em $\omega = 0$. Na figura 5.2, o painel da direita mostra a densidade de estados para diferentes n_T . O detalhe nesse painel mostra que, para $n_T = 0.80$, a DOS no potencial químico é a maior, quando comparada com os outros valores de n_T , e a menor é verificada para $n_T = 0.90$.

Nas figuras 5.1 e 5.2, fica claro que a magnitude da susceptibilidade está relacionada com a DOS localizada no potencial químico. Podemos ver que, para $n_T = 0.80$, a banda de quasipartículas ao longo de $(0, \pi)$ - $(0, 0)$ é mais plana (achatada) do que as bandas para

Figura 5.2: O painel do lado esquerdo na figura 5.2 mostra as bandas de quasipartículas, para diferentes números de ocupação n_T , interceptadas pelo potencial químico em $\omega = 0$. O painel da direita mostra a densidade de estados correspondente às bandas presentes no painel da esquerda e o detalhe no painel da direita mostra a *DOS* no potencial químico. Os parâmetros do modelo são $t = -1.0 \text{ eV}$, $t_2 = 0.3|t|$ e $U = 8.0|t|$.

as outras ocupações n_T . Um achatamento da banda dá origem a um pico na densidade de estados. As regiões planas nas bandas de quasipartículas estão associadas às singularidades de van Hove (Markiewicz (1997)) na *DOS*. Se o potencial químico estiver perto de uma singularidade de van Hove, um grande número de estados ocupados estão sob influência do campo magnético externo, resultando em um alto valor para a susceptibilidade magnética. Portanto, podemos concluir que o pico observado na susceptibilidade magnética está associado às singularidades de van Hove na *DOS*.

Na figura 5.3, o painel do lado esquerdo apresenta cortes no eixo $k_B T/|t|$ da figura 5.1. O maior pico na susceptibilidade ocorre para $n_T = 0.80$ e $k_B T/|t| = 0.10$. Esse pico diminui significativamente com o aumento da temperatura. Isso ocorre porque, quando a temperatura aumenta, o potencial químico é deslocado para energias que estão fora da singularidade de van Hove. Na figura 5.3, o painel do lado direito mostra a íntima relação entre a susceptibilidade e a *DOS* no potencial químico. Nos dois casos, o ponto de máximo ocorre para $n_T = 0.80$.

Figura 5.3: O painel do lado esquerdo na figura 5.3 apresenta cortes no eixo $k_B T/|t|$ da figura 5.1. O painel da direita mostra a intensidade do *DOS* ($\rho(\omega, n_T)$) no potencial químico. Os parâmetros do modelo são $t = -1.0 \text{ eV}$, $t_2 = 0.3|t|$ e $U = 8.0|t|$.

A figura 5.4 mostra a susceptibilidade magnética em função da temperatura para diferentes dopagens ($\delta = 1 - n_T$). Podemos confirmar que a dopagem ($\delta = 0.20$) separa χ em duas regiões de comportamentos distintos. A explicação para essa separação envolve a existência de uma singularidade de van Hove, conforme já foi comentado acima. No painel do lado direito, para $0.20 \leq \delta < 0.25$, observamos que a susceptibilidade diminui fracamente com o aumento da temperatura. Já em $\delta \geq 0.25$, a susceptibilidade apresenta-se praticamente independente da temperatura, que é um comportamento característico de um metal normal. No painel da esquerda, para $\delta < 0.20$, vemos um comportamento bem diferente, uma vez que a susceptibilidade aumenta com a dopagem e com a temperatura. Em particular, as

susceptibilidades nas dopagens entre 0.136 e 0.100 tendem a zero em baixas temperaturas.

Figura 5.4: Susceptibilidade magnética versus temperatura para diferente dopagens. Os parâmetros do modelo são $t = -1.0 eV$, $t_2 = 0.3|t|$ e $U = 8.0|t|$.

O comportamento da susceptibilidade em baixas dopagens será melhor entendido se analisarmos a função correlação spin-spin ($\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$) em função da temperatura e da ocupação.

5.2 Correlações spin-spin

A figura 5.5, mostra o comportamento da função correlação $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ em função da ocupação n_T e $k_B T / |t|$ para o modelo de Hubbard estendido com potencial atrativo e não local. É importante observar que um valor máximo em $|\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle|$ deve acontecer para temperaturas baixas e ocupação máxima. No entanto, a figura 5.5 mostra um máximo na susceptibilidade em $n_T = 0.83$ e não para $n_T = 1$, como seria esperado (Korshunov e Ovchinnikov (2007)). A razão para tal comportamento provavelmente esteja na aproximação de dois polos (Roth (1969)), utilizada neste trabalho, para tratar as funções de Green. Com essa aproximação, encontramos um comportamento não-físico para a compressibilidade ($\frac{\partial \mu}{\partial n_T}$) em baixas dopagens, o que torna o valor $n_T = 1$ inatingível, em contraste com outros métodos (Korshunov e Ovchinnikov (2007) e Ovchinnikov, Shneyder e Korshunov (2011)). Quando a temperatura aumenta, o ponto de máximo em $|\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle|$ tende a desaparecer.

Figura 5.5: Função correlação spin-spin ($\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$) em função da temperatura T e da ocupação n_T . Os parâmetros do modelo são $t = -1.0 eV$, $t_2 = 0.3|t|$ e $U = 8.0|t|$.

Figura 5.6: A figura 4.6 mostra cortes no eixo da temperatura da figura 5.5. Os parâmetros do modelo são $t = -1.0 eV$, $t_2 = 0.3|t|$ e $U = 8.0|t|$.

Nas figuras 5.5 e 5.6, a função correlação $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ é negativa. Uma função correlação spin-spin negativa indica que as correlações são do tipo antiferromagnéticas (AF) (Beenen e Edwards (1995)). As funções correlações AF são fortes no regime de alta ocupação e baixas temperaturas. Retornando à figura 5.1, observamos que, no regime de alta ocupação e baixas temperaturas, a susceptibilidade magnética é nula. Isso pode ter duas explicações: a primeira

é, principalmente, porque os efeitos de uma temperatura baixa são fracos; a segunda, porque as correlações AF desempenham um papel importante nesse regime, elas alcançam até os segundos vizinhos mais próximos, quando favorecidas por uma alta ocupação. Portanto, em regime de alta ocupação, a presença de um campo magnético fraco (externo) não afeta significativamente o estado magnético do sistema. Todavia, quando a ocupação diminui, as correlações AF também diminuem e, assim a resposta ao campo magnético externo aumenta, ou seja, a susceptibilidade magnética aumenta. Mas um aumento na temperatura destruirá as correlações AF e a susceptibilidade tenderá para um mesmo valor comum conforme mostra a figura 5.4.

5.3 Função espectral e a superfície de Fermi

A superfície de Fermi pode ser definida através da função espectral, equação (4.49), na condição em que $\omega = 0$, ou seja, $A_{\vec{k},\sigma}(0) \neq 0$ somente para aqueles valores de \vec{k} que satisfazem

$$\omega_{1\vec{k},\sigma} = \mu,$$

em que $\omega_{1\vec{k},\sigma}$ é a energia de dispersão renormalizada pela interação U , equações (4.41) e (4.42), e μ é o potencial químico.

O painel do lado esquerdo da figura 5.2 contém informações que permitem identificar a formação de “pockets” no plano k_x k_y , mas não permitem dizer nada em relação às intensidades de $A_{\vec{k},\sigma}(\omega = 0)$ na formação de um “pocket”.

A figura 5.7 mostra a função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(0) \neq 0$ para $t = -1.0$ eV, $t_2 = 0.30|t|$, $k_B T = 0.3|t|$, $U = 8|t|$ e nas ocupações: $n_T = 0.70$, $n_T = 0.80$, $n_T = 0.85$ e $n_T = 0.90$. Na figura 5.7(a), a função $A_{\vec{k},\sigma}(0)$ para $n_T = 0.70$ produz uma superfície de Fermi bem definida no plano k_x k_y . Porém, para $n_T = 0.80$ (figura 5.7(b)) a função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(0)$

Figura 5.7: Função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(\omega = 0)$ para $t = -1.0$ eV, $t_2 = 0.30|t|$, $k_B T = 0.3|t|$, $U = 8.0|t|$ em diferentes ocupações: (a) $n_T = 0.70$, (b) $n_T = 0.80$, (c) $n_T = 0.85$ e (d) $n_T = 0.90$.

evolui para um “pocket” centrado em torno de $(\pi/2, \pi/2)$ e a presença de pseudogaps nos pontos antinodais, $(0, \pi)$ e $(\pi, 0)$, é verificada. Os “pockets” persistem até, pelo menos, $n_T = 0.90$ (figuras 5.7(c) e 5.7(d)). Resultados semelhantes são encontrados em Korshunov e

Ovchinnikov (2007), Ovchinnikov, Shneyder e Korshunov (2011), Barabanov (2001), Plakida e Oudovenko (2007), Sakai, Motome e Imada (2009) e Sakai, Motome e Imada (2010). Uma característica importante a destacar é a diferença de intensidades da função espectral entre os lados interno (mais próximo ao ponto $(0, 0)$) e externo (mais próximo ao ponto (π, π)) dos “pockets” formados nas figuras 5.7(b), 5.7(c) e 5.7(d). É essa diferença de picos na direção $(0, 0) - (\pi, \pi)$ do “pocket” que projeta a forma de um arco no plano $k_x k_y$. Mas, conforme n_T aumenta, a intensidade do lado de externo do “pocket” sofre um aumento maior que a do lado interno. Essa diferença de intensidades nos dois lados do “pocket” é melhor observada na figura 5.8, a qual mostra a função espectral ao longo da direção $(\pi, \pi)-(0, 0)$ para os mesmos parâmetros da figura 5.7. Com um aumento na ocupação n_T , a diferença de intensidades nos lados interno e externo tende a desaparecer, conseqüentemente, fechando o arco no plano $k_x k_y$. Na figura 5.8, observamos também que um aumento na ocupação desloca os picos externos no sentido de (π, π) para $(\pi/2, \pi/2)$, enquanto os picos internos não são afetados significativamente.

Figura 5.8: Função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(\omega = 0)$ ao longo da direção $(\pi, \pi)-(0, 0)$ para os mesmos parâmetros da figura 5.7.

A figura 5.9 mostra também o caminho descrito pela função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(\omega = 0)$ em um dos quadrantes da primeira zona de Brillouin, na região de baixas dopagens ($n_T = 0.90$) e para valores de potencial U .

Para $U = 2|t|$, o “pocket” se alonga e a intensidade do lado de fora (lado mais próximo ao

Figura 5.9: Função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(\omega = 0)$ para $n_T = 0.90$, $t = -1.0$ eV, $t_2 = 0.30|t|$, $k_B T = 0.3|t|$ e para três intensidades do potencial U : (a) $U = 2|t|$, (b) $U = 5|t|$ e (c) $U = 8|t|$.

ponto $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$) mostra-se bem menor do que a do lado interno (lado mais próximo ao ponto $(0, 0)$), projetando a forma de um arco no plano $k_x k_y$. Conforme U aumenta, a intensidade do lado de fora do “pocket” também aumenta e tende a fechar o arco no plano $k_x k_y$.

Os resultados apresentados acima foram publicados na referência **Calegari et al. (2012)**.

Figura 5.10: O painel da esquerda compara os resultados obtidos através do método proposto por Roth (1969) e resultados de Monte Carlo Quântico (QMC) (Duffy e Moreo (1997)) mostra a energia em função da temperatura. O painel da direita compara os resultados do calor específico eletrônico. Os parâmetros do modelo são $t = -1eV$ e $t_2 = 0$.

5.4 Calor específico eletrônico

O comportamento do calor específico eletrônico pode apresentar informações importantes a respeito dos efeitos das correlações antiferromagnéticas e também do pseudogap (Duffy e Moreo (1997), Loram et al. (2000)). Vários cálculos do calor específico eletrônico foram desenvolvidos para o modelo de Hubbard de uma banda. No entanto, não há resultados (pelo menos não é do nosso conhecimento) para o modelo de Hubbard estendido com interação atrativa. Com o objetivo de comparar resultados da aproximação de dois polos com resultados de Monte Carlo (Duffy e Moreo (1997)), primeiramente apresentaremos alguns resultados obtidos nesse trabalho para o modelo de Hubbard repulsivo (Hubbard (1963)).

No painel esquerdo da figura 5.10 temos a energia interna $E = \frac{\langle H \rangle}{N}$ em função da temperatura. A linha azul com triângulos apresenta os resultados obtidos com a aproximação de dois pólos proposta por Roth (1969). A linha vermelha com os círculos mostra os resultados de Monte Carlo Quântico (Duffy e Moreo (1997)). Como podemos ver, há uma concordância significativa entre os resultados Roth e Monte Carlo Quântico (QMC). No painel da direita da figura 5.10 o calor específico eletrônico é apresentado em função da temperatura. Nesse caso, vemos que a curva obtida no presente trabalho possui um pico pronunciado para $T/|t|$ entre 0 e 1. Conforme discutido nas referências (Paiva et al. (2001), Duffy e Moreo (1997)), esse pico se desenvolve devido à flutuações de spin associadas a correlações antiferromagnéticas de curto alcance. Além do pico devido a flutuações de spin, o calor específico eletrônico para o modelo de Hubbard é caracterizado também pela presença de um pico devido à flutuações de carga, localizado em temperaturas mais altas. Por estar associado a correlações antiferromagnéticas, o pico de spin aparece no regime de correlações moderadas e fortes. Na figura 5.10, vemos que o pico de spin só está presente no resultado da Roth. A ausência de um pico de spin pronunciado nos resultados QMC, provavelmente se deve ao tamanho da rede considerada na simulação numérica. Se o comprimento de correlação excede o tamanho da rede se torna difícil avaliar corretamente essas correlações (Odashima, Avella e Mancini (2005)).

A figura 5.11 apresenta resultados para a energia interna e para o calor específico eletrônico para $n_T = 0,75$ e $U = 8t$. Nesse caso, em que o sistema encontra-se em um regime

Figura 5.11: Mesmos resultados mostrados na figura 5.10, aqui com $U = 8t$.

mais fortemente correlacionado em relação a $U = 4t$, verificamos a presença dos picos de spin e de carga tanto no resultado da Roth quanto no de QMC. O pico de spin aparece para $0 < T/|t| < 1$ e o pico de carga aparece em torno de $T/|t| = 3$.

Figura 5.12: Mesmos resultados mostrados na figura 5.11, aqui com $n_T = 0,90$.

Como podemos ver na figura 5.12, a presença dos picos se torna mais clara no regime de alta ocupação onde as correlações antiferromagnéticas devem ser mais fortes.

Apresentaremos a seguir um estudo do calor específico eletrônico para o modelo de Hubbard estendido com interação atrativa descrito na equação (4.1). Nos limitaremos a faixa de temperatura entre 0 e 3 já que para $T/|t| > 3$ os efeitos da temperatura são pouco significantes. O painel esquerdo da figura 5.13 mostra o calor específico eletrônico na região de alta ocupação e vários valores de interação U . Observamos que para valores moderados de U ($U = 4t$) o pico de spin, em baixas temperaturas, não aparece. No entanto, conforme U aumenta o pico de spin começa a se manifestar. Para $U = 7t$ é possível identificar claramente o pico de spin em $T/|t| \simeq 0,3$ e o pico de carga em $T/|t| \simeq 1,0$. Aumentando ainda mais o valor de U , o pico de spin passa a dominar devido as fortes correlações antiferromagnéticas como podemos ver na figura 5.14. O painel da direita na figura 5.13 mostra o comportamento da energia em função da temperatura.

Figura 5.13: O painel da esquerda apresenta o calor específico eletrônico em função da temperatura no regime de alta ocupação e diferentes valores de interação U . O painel da direita mostra o comportamento da energia em função da temperatura. Os parâmetros do modelo são $t = -1eV$ e $t_2 = 0$.

Na figura 5.14, vemos que as correlações $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ aumentam significativamente com o aumento da interação U . Além disso, $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ é mais robusta aos efeitos da temperatura no regime de forte acoplamento.

A figura 5.15 (painel esquerdo) mostra o comportamento do calor específico eletrônico em função da temperatura para diferentes ocupações. Vemos uma grande semelhança entre os efeitos de U e de n_T em relação as correlações spin-spin. Ou seja, para valores menores de U (ver figura 5.13) e n_T , o pico de spin localizado na região de baixas temperaturas, não

Figura 5.14: Função correlação spin-spin em função da temperatura e diferentes valores de U . Os parâmetros do modelo são $t = -1eV$ e $t_2 = 0$.

Figura 5.15: Calor específico eletrônico e energia para $U = 8t$ e diferentes ocupações n_T . Os parâmetros do modelo são $t = -1eV$ e $t_2 = 0$.

está presente. No entanto, para n_T a partir de $0,85$, o pico de spin começa a se manifestar e se torna saliente na região de altas ocupações. O painel direito da figura 5.15 mostra o comportamento da energia em função da temperatura para os mesmos parâmetros do painel esquerdo. Conforme podemos ver na figura 5.16, as correlações spin-spin se tornam mais fortes e mais robustas com o aumento de n_T . Nesse caso, também há uma clara relação entre as correlações spin-spin e o comportamento do calor específico eletrônico.

Na figura 5.17, apresentamos resultados com $t_2 \neq 0$. No painel esquerdo da figura 5.17, é importante notar o aumento significativo em $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ quando comparada com o resultado para $t_2 = 0$ apresentado na figura 5.16. Como resultado das fortes correlações spin-spin, o pico associado as flutuações de spin domina o comportamento do calor específico eletrônico apresentado no painel da esquerda da figura 5.17. As mesmas correlações responsáveis pelo pico de spin no calor específico eletrônico também são responsáveis pelo aparecimento de pseudogaps na superfície de Fermi. Portanto, o comportamento do calor específico eletrônico do modelo estudado neste trabalho, está de acordo com o cenário no qual as correlações antiferromagnéticas de curto alcance desempenham um papel importante na formação dos pseudogaps presentes no estado normal dos supercondutores de altas temperaturas.

Figura 5.16: Correlações spin-spin em função da temperatura para $U = 8t$ e diferentes ocupações n_T . Os parâmetros do modelo são $t = -1eV$ e $t_2 = 0$.

Figura 5.17: O painel da esquerda apresenta o calor específico eletrônico para $U = 8t$, diferentes valores de n_T , $t = -1eV$ e $t_2 = 0.30|t|$. O painel da direita exhibe $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$ em função da temperatura.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho investigamos o estado normal de um modelo de Hubbard estendido em duas dimensões e com interação atrativa U . O modelo foi estudado usando a técnica das funções de Green, em que as equações de movimento das funções de Green foram tratadas na aproximação de dois polos conforme a proposta de Laura Roth (1969). Nessa aproximação, obtém-se um deslocamento de banda que desloca os polos das funções de Green. Esse deslocamento desempenha um papel importante porque inclui correções na estrutura da dispersão das quasipartículas. O modelo proposto foi estudado sistematicamente, investigando os efeitos da dopagem, da interação atrativa e da temperatura no estado normal.

Um dos principais objetivos desse trabalho foi a análise da susceptibilidade magnética estática e uniforme (χ), em função da temperatura e ocupação n_T . Os resultados obtidos para a susceptibilidade magnética mostram duas regiões distintas separadas por um pico em $n_T \simeq 0.80$. A região à esquerda do pico, mostra a susceptibilidade fracamente dependente da temperatura, lembrando o comportamento de um metal normal. A região à direita do pico, apresenta uma susceptibilidade dependente da temperatura. Resultados semelhantes para susceptibilidade foram obtidos em medidas experimentais para alguns compostos de cupratos (Torrance (1989), Nakano (1994), Naqib e Islam (2008)).

Uma análise da densidade de estados DOS do modelo, para diferentes ocupações n_T , mostra que a magnitude da susceptibilidade está relacionada com a DOS no potencial químico. Isso ocorre porque na região $(0, \pi) - (0, 0)$, a banda correspondente à ocupação $n_T = 0,80$ sofre um maior achatamento em relação às outras bandas (associadas as outras ocupações), produzindo um pico na DOS e consequentemente um pico na susceptibilidade.

A função espectral $A_{\vec{k},\sigma}(\omega)$, em $\omega = 0$, mostra para ocupações menores $0,80$ uma superfície de Fermi fechada como é o esperado para um metal normal. Contudo, para ocupações igual ou maior que $0,80$ a superfície de Fermi apresenta “pockets” centrados em torno do ponto nodal $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. A formação dos “pockets” é acompanhada do surgimento de pseudogaps perto dos pontos antinodais $(0, \pi)$ e $(\pi, 0)$. A forma dos “pockets” depende da ocupação n_T e

também da interação atrativa U . Uma diferença entre intensidades na direção $(0, 0) - (\pi, \pi)$ do “pocket” projeta a forma de um arco no plano $k_x k_y$. Mas, conforme a ocupação aumenta, a diferença entre intensidades tende a desaparecer, tendendo a fechar o arco. A diferença de intensidades nos dois referidos lados do “pocket” tem sido observada recentemente em cupratos por Jianqiao Meng (2009).

Investigamos também o comportamento da função correlação spin-spin ($\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$), associadas às correlações AF (Beenen e Edwards (1995), Korshunov e Ovchinnikov (2007) e Calegari et al. (2011)). A função correlação spin-spin desloca para baixo da linha do potencial químico os estados localizados nas proximidades do ponto (π, π) na DOS . Então, quando estados localizados na região em torno de $(\pi, 0)$ (e $(0, \pi)$) estão abaixo da linha do potencial químico, um pseudogap surge na DOS .

É importante ressaltar que a ocupação $n_T = 0.80$ a partir da qual os pseudogaps aparecem na superfície de Fermi é a mesma ocupação que a susceptibilidade se torna fortemente dependente da temperatura. O mecanismo que está por trás desses dois comportamentos está associado às correlações antiferromagnéticas de curto alcance.

O estudo do calor específico eletrônico para o modelo de Hubbard estendido também sugere que as correlações antiferromagnéticas de curto alcance são as principais responsáveis pelo surgimento do pseudogap na densidade de estados e na superfície de Fermi. No regime de acoplamento forte (U grande) e altas ocupações, o calor específico eletrônico apresenta um pico pronunciado na região de baixas temperaturas. Esse pico devido a flutuações de spin reflete o efeito das fortes correlações antiferromagnéticas presentes nesse regime de U e n_T .

Fica como perspectiva futura, investigar o pico de carga no calor específico eletrônico para o estado normal e estender o cálculo do calor específico eletrônico para a região $T < T_c$, o estado supercondutor.

Para finalizar concluímos que apesar das limitações de nossos cálculos, os resultados obtidos nesta tese contribuem com o cenário no qual as correlações antiferromagnéticas desempenham um papel importante na região pseudogap.

A Apêndice

A.1 Segunda Quantização

O modelo de Hubbard (1963) em sua versão mais simples descreve a competição entre dois termos: o termo dinâmico (“hopping”), representado por t e o termo de repulsão Coulombiana intrasítios, representado pela energia U . O modelo de Hubbard, na forma da segunda quantização, é descrito pela hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} \quad (\text{A.1})$$

em que o número de ocupação $n_{i,\sigma}$ ($n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$) conta o número de partículas com spin σ ($\sigma = \uparrow$ ou \downarrow) em um dado sítio i da rede. Os operadores de criação ($c_{i,\sigma}^\dagger$) e destruição ($c_{i,\sigma}$) são operadores fermiônicos e, assim, obedecem ao Princípio de exclusão de Pauli, o qual garante que em qualquer estado as possibilidades são de encontrar uma partícula ou nenhuma partícula. A ação dos operadores criação e destruição no estado vazio (vácuo) $|0\rangle$ é

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}^\dagger |0\rangle &= |1\rangle \\ c_{i,\sigma} |0\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

e num estado ocupado por uma partícula $|1\rangle$

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}^\dagger |1\rangle &= 0 \\ c_{i,\sigma} |1\rangle &= |0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Já a ação do operador número de ocupação é como segue

$$\begin{aligned} n_{i,\sigma} |0\rangle &= 0 \\ n_{i,\sigma} |1\rangle &= |1\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Jordan-Wigner (1928) mostrou que os férmions poderiam ser representados por relações de anticomutação. Para os operadores $c_{i,\sigma}$, $c_{i,\sigma}^\dagger$, $n_{i,\sigma}$, $\eta_{i,\sigma}$ ($\eta_{i,\sigma} = n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}$), $n_i = (n_{i,\sigma} + n_{i,-\sigma})$

e ainda $\eta_{i,\sigma}^\dagger$ ($\eta_{i,\sigma}^\dagger = n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger$), escrevemos:

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha} c_{b,\beta} &= -c_{b,\beta} c_{a,\alpha} \\
c_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta}^\dagger &= -c_{b,\beta}^\dagger c_{a,\alpha}^\dagger \\
n_{a,\alpha} n_{b,\beta} &= n_{b,\beta} n_{a,\alpha} \\
\eta_{a,\alpha} \eta_{b,\beta} &= -\eta_{b,\beta} \eta_{a,\alpha} \\
\eta_{a,\alpha}^\dagger \eta_{b,\beta}^\dagger &= -\eta_{b,\beta}^\dagger \eta_{a,\alpha}^\dagger
\end{aligned} \tag{A.5}$$

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha} c_{b,\beta}^\dagger &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} - c_{b,\beta}^\dagger c_{a,\alpha} \\
c_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} - c_{b,\beta} c_{a,\alpha}^\dagger
\end{aligned} \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha} n_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} c_{a,\alpha} + n_{b,\beta} c_{a,\alpha} \\
n_{a,\alpha} c_{b,\beta} &= -\delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} c_{b,\beta} + c_{b,\beta} n_{a,\alpha}
\end{aligned} \tag{A.7}$$

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha}^\dagger n_{b,\beta} &= -\delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} c_{a,\alpha}^\dagger + n_{b,\beta} c_{a,\alpha}^\dagger \\
n_{a,\alpha} c_{b,\beta}^\dagger &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} c_{b,\beta}^\dagger + c_{b,\beta}^\dagger n_{a,\alpha}
\end{aligned} \tag{A.8}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{a,\alpha} n_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} \eta_{a,\alpha} + n_{b,\beta} \eta_{a,\alpha} \\
n_{a,\alpha} \eta_{b,\beta} &= -\delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} \eta_{b,\beta} + \eta_{b,\beta} n_{a,\alpha}
\end{aligned} \tag{A.9}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{a,\alpha}^\dagger n_{b,\beta} &= -\delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} \eta_{a,\alpha}^\dagger + n_{b,\beta} \eta_{a,\alpha}^\dagger \\
n_{a,\alpha} \eta_{b,\beta}^\dagger &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} \eta_{b,\beta}^\dagger + \eta_{b,\beta}^\dagger n_{a,\alpha}
\end{aligned} \tag{A.10}$$

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha} \eta_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha} c_{b,\beta} - \eta_{b,\beta} c_{a,\alpha} \\
\eta_{a,\alpha} c_{b,\beta} &= -\delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha} c_{b,\beta} - c_{b,\beta} \eta_{a,\alpha}
\end{aligned} \tag{A.11}$$

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha} \eta_{b,\beta}^\dagger &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} n_{a,-\alpha} + \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha} c_{b,\beta}^\dagger - \eta_{b,\beta}^\dagger c_{a,\alpha} \\
\eta_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} n_{a,-\alpha} - \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta} - c_{b,\beta} \eta_{a,\alpha}^\dagger
\end{aligned} \tag{A.12}$$

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha}^\dagger \eta_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} n_{a,-\alpha} - \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta} - \eta_{b,\beta} c_{a,\alpha}^\dagger \\
\eta_{a,\alpha} c_{b,\beta}^\dagger &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} n_{a,-\alpha} + \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha} c_{b,\beta}^\dagger - c_{b,\beta}^\dagger \eta_{a,\alpha}
\end{aligned} \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
c_{a,\alpha}^\dagger \eta_{b,\beta}^\dagger &= -\delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta}^\dagger - \eta_{b,\beta}^\dagger c_{a,\alpha}^\dagger \\
\eta_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta} - c_{b,\beta} \eta_{a,\alpha}^\dagger
\end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{a,\alpha} \eta_{b,\beta}^\dagger &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} n_{a,-\alpha} + \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha} c_{b,\beta}^\dagger n_a - \eta_{b,\beta}^\dagger \eta_{a,\alpha} \\
\eta_{a,\alpha}^\dagger \eta_{b,\beta} &= \delta_{ab} \delta_{\alpha,\beta} n_{a,-\alpha} - \delta_{ab} \delta_{\alpha,-\beta} c_{a,\alpha}^\dagger c_{b,\beta} n_a - \eta_{b,\beta} \eta_{a,\alpha}^\dagger .
\end{aligned} \tag{A.15}$$

Referências Bibliográficas

- ABRIKOSOV, A. A.; GORKOV, L.; DZIALOSHINSKI, I. E. Methods of quantum field theory in statistical physics. *Pergamon Press, Oxford*, v. 2, 1980.
- AVELLA, A. e. a. *Intern. Journ. of Modern Phys. B*, v. 12, n. 1, p. 81–97, 1998.
- BABA, T. e. a. Bulk electronic structure superconducting phase in $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$. *Physical Review Letters*, v. 100, p. 017003, 2008.
- BARABANOV, A. F. e. a. *JETP*, v. 92, n. 677, 2001.
- BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHIEFFER, J. R. *Phys. Rev.*, v. 108, p. 1175, 1957.
- BEDNORZ, J. G.; MULLER, K. A. Possible high T_c superconductivity in the BaCuO_2 system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 64, p. 189, 1986.
- BEENEN, J.; EDWARDS, D. M. *Phys. Rev. B*, v. 52, n. 13636, 1995.
- CAIXEIRO, E.; TROPER, A. *Journal of Applied physics*, v. 105, n. 07E307, 2009.
- CAIXEIRO, E.; TROPER, A. *Physica B*, n. 404, p. 3102 – 3105, 2009.
- CAIXEIRO, E.; TROPER, A. *Physical Review B*, v. 82, n. 014502, 2010.
- CALEGARI, E. J. Tese: Supercondutividade em um modelo de hubbard d-p, em duas dimensões. 2006.
- CALEGARI, E. J.; LOBO, C. O.; MAGALHÃES, S. G.; CHAVES, C. M.; TROPER, A. *Supercond. Sci. Technol.*, v. 25, n. 025011, 2012.
- CALEGARI, E. J.; MAGALHÃES, S. G.; GOMES, A. A. Role of hybridization in the superconducting of an extended d - p hubbard model. *Intern. Journ. of Modern. Phys. B*, v. 18, p. 241, 2004.
- CALEGARI, E. J.; MAGALHÃES, S. G.; GOMES, A. A. Role of hybridization in the superconducting of an extended d - p hubbard model: a detailed numerical study. *Physica B*, p. 560, 2005.
- CALEGARI, E. J.; MAGALHÃES, S. G.; CHAVES, C. M.; TROPER, A. *Supercond. Sci. Technol.*, v. 24, n. 035004, 2011.

- DAGOTTO, E. Complexity in strongly correlated electronic systems. *Science.*, v. 309, p. 257, 2005.
- DAMASCELLI, A.; HUSSAIN, Z.; SHEN, Z. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. *Reviews of Modern Physics, APS*, v. 75, n. 2, p. 473, 2003.
- DOIRON-LEYRAUD, N. e. a. *Nature*, v. 447, n. 565, 2007.
- DUFFY, D.; MOREO, A. *Phys. Rev.*, B 55, p. 12918, 1997.
- HARRISON, N.; MCDONALD, R. D.; SINGLETON, J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 99, n. 206406, 2007.
- HUBBARD, J. *Proc. Roy. Soc.*, A, n. 238, 1963.
- IMADA M.; FUJIMORI, A. T. Y. Metal-insulator transitions. *Reviews of Modern Physics*, 1998.
- JIANQIAO MENG, e. a. *Nature*, v. 462, n. 335, 2009.
- JOHNSTON, D. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, n. 952, 1989.
- KISHORE, R.; JOSHI, S. K. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, v. 4, p. 2475, 1971.
- KORSHUNOV, M. M.; OVCHINNIKOV, S. G. *Eur. Phys. J.*, B 57, n. 271, 2007.
- LEE, P. A. *Rep. Prog. Phys.*, v. 71, n. 012501, 2008.
- LEE, P. A. e. a. Doping a metal-insulator transitions. physics of high-temperature superconductivity. *Reviews of Modern Physics*, v. 78, p. 17, 2006.
- LORAM, J. L.; LUO, L.; COOPER, J. R.; LIANG, W. Y.; TALLON, J. L. *Physica C*, v. 341-348, p. 831 – 834, 2000.
- MARKIEWICZ, R. S. *J. Phys. Chem. Solids*, v. 58, n. 1179, 1997.
- MARSHALL, D. S. e. a. *Phys. Rev. Lett.*, v. 76, n. 4841, 1996.
- MOTT, N. F. The transition to the metallic state. *Philos. Mag.*, v. 6, n. 62, p. 287, 1961.
- NAIDYUK, Y. G. e. a. The superconducting gap behavior in the antiferromagnetic nickel-borocarbide compounds Rn_1-2b_2c ($R = Dy, Ho, Er, Tm$) studied by point-contacts spectroscopy. *Journal of Physics: Conference Series.*, v. 150, p. 052178, 2009.

- NAKANO, T. e. a. *Phys. Rev. B*, v. 49, n. 16000, 1994.
- NAQIB, S. H.; ISLAM, R. S. *Supercond. Sci. Technol.*, v. 21, n. 105017, 2008.
- NORMAN, M. R. e. a. *Nature*, v. 392, n. 157, 1997.
- NORMAN, M. R. e. a. Destruction of the fermi surface in underdoped high- t_c superconductors. *Nature*, v. 392, p. 157, 1998.
- ODASHIMA, S.; AVELLA, A.; MANCINI, F. *Phys. Rev.*, B 72, p. 205121, 2005.
- OVCHINNIKOV, S.; SHNEYDER, E.; KORSHUNOV, M. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 23, n. 045701, 2011.
- PAIVA, T.; SCALETTAR, R. T.; HUSCROFT, C.; MCMAHAN, A. K. *Phys. Rev.*, B 63, p. 125116, 2001.
- PLAKIDA, N. M.; OUDOVENKO, V. S. *JETP*, v. 104, n. 230, 2007.
- RANDERIA, M. High- t_c superconductors: New insights from angle-resolved photoemission. *Journal of superconductivity.*, v. 9, n. 4, p. 471, 1996.
- ROTH, L. M. *Phys. Rev.*, v. 184, n. 451, 1969.
- SAKAI, S.; MOTOME, Y.; IMADA, M. *Phys. Rev. Lett.*, v. 102, n. 056404, 2009.
- SAKAI, S.; MOTOME, Y.; IMADA, M. *Phys. Rev.*, B 82, n. 134505, 2010.
- STANESCU, T. D.; MARTIN, I.; PHILLIPS, P. *Physical Review B*, v. 62, n. 7, p. 4300–4308, 2000.
- TALLON, J. L.; LORAM, J. W. *Physica C.*, v. 349, n. 53, 2001.
- TIMUSK, T.; STATT, B. *Rep. Prog. Phys.*, v. 62, 1999.
- TORRANCE, J. B. e. a. *Phys. Rev. B*, v. 40, n. 8872, 1989.
- TRAPPER, U.; IHLE, D.; FEHSKE, H. *Phys. Rev. B*, v. 54, n. 7614, 1996.
- WALSTEDT, R. E. e. a. *Phys. Rev. B*, v. 41, n. 9574, 1990.
- WALSTEDT, R. E. e. a. *Phys. Rev. B*, v. 45, n. 8047, 1992.
- ZUBAREV, D. N. Double-time green functions in statistical physics. *Soviet Physics Uspekhi*, v. 3, p. 320–342, 1960.