

Aline Ramires Neves de Oliveira

# Ponto crítico quântico supercondutor em sistemas multi-bandas



**INSTITUTO DE FÍSICA**  

---

**Universidade Federal Fluminense**

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense  
como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Mucio Amado Continentino

Niterói - Rio de Janeiro

2010

# Agradecimentos

Primeiramente agradeço aos meus pais, por me oferecerem uma boa educação desde cedo e por entenderem a minha vontade de buscar uma melhor formação, mesmo que para isso tenha que viver longe da família;

Agradeço ao meu orientador, professor Mucio Amado Continentino, pela orientação no tortuoso caminho da matéria condensada, pelas longas discussões que valeram muito mais do que aulas, pela motivação, e por me passar um pouco de sua visão tão ampla;

Aos meus amigos de graduação, Pablo Ferreira de Souza e Douglas Delgado de Souza, pelo companheirismo e incentivo ao longo do curso. Aos amigos que conheci durante o mestrado: Francisco Dinóla Neto, Isabel Cristina Souza Dinóla, Igor Tavares Padilha, e Daniel Reyes Lopez pela ótima acolhida na cidade do Rio de Janeiro e por todas dúvidas tiradas; Victor Leonardo Fernandez e Pedro Renaut, pelo companheirismo durante as disciplinas; Mônica Batista, pela companhia e pelas conversas na cidade de Niterói;

Agradeço também a todos os professores que contribuíram direta ou indiretamente na minha formação como Física, a todos os funcionários que fizeram o dia-a-dia mais simples, e ao CNPQ pelo suporte financeiro ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

# Resumo

O estudo de transições de fase quânticas tem se mostrado como um novo método para o entendimento de fases não convencionais em Física da Matéria Condensada. Nas últimas décadas houve um aumento substancial no interesse nessa área, causado pelos novos experimentos com cupratos supercondutores, férmions pesados, condutores orgânicos e compostos relacionados. Apesar disso, as transições envolvendo fases supercondutoras não estão tão bem exploradas quanto as transições envolvendo fases magnéticas. Assim, o estudo de sistemas supercondutores com tratamentos além de uma teoria de campo médio mostra-se necessário para verificar o comportamento das flutuações na fase normal, próxima ao estado supercondutor.

Propomos uma generalização do método da equação de movimento para funções de Green em equilíbrio para tratar sistemas com perturbações dependentes do tempo. Esta generalização é baseada nas propriedades das funções de Green e no fato da aplicação da perturbação ser feita de forma adiabática. Estudamos o modelo de um supercondutor de onda- $s$  com duas bandas entre as quais há hibridização, com base no modelo de Hubbard atrativo. Consideramos o sistema sob a ação de um campo fictício, dependente do tempo e do vetor de onda, que se acopla ao parâmetro de ordem supercondutor.

Calculamos os propagadores de ordem zero no campo, usando o método da equação de movimento convencional e os propagadores de ordem um, utilizando a equação de movimento generalizada. A resposta ao campo é dada por uma susceptibilidade generalizada, que no caso de uma banda se reduz àquela obtida por Thouless. Associamos o surgimento de supercondutividade com a divergência da susceptibili-

dade estática. A vantagem deste método é sua simplicidade, pois lidamos apenas com propagadores de um corpo. Analisamos esta susceptibilidade supercondutora, o que permite encontrar uma hibridização crítica acima da qual não há supercondutividade, determinar a linha crítica e a linha de *crossover*, além de determinar o expoente crítico dinâmico  $z$  para este sistema. Consequentemente, podemos prever o comportamento de algumas grandezas mensuráveis experimentalmente a baixas temperaturas, próximo ao ponto crítico quântico supercondutor.

# Abstract

The study of quantum phase transitions provides a new route to find and understand unconventional phases in Condensed Matter Physics. The past decades have seen a substantial rejuvenation of interest in this area of study, driven by experiments on the cuprate superconductors, heavy fermions' materials, organic conductors and related compounds. Nevertheless, the transitions involving superconducting phases are not as well explored theoretically as transitions involving magnetic phases. Thus, the study of superconducting systems with treatments beyond mean field theories seems to be necessary to verify the behavior of fluctuations in the normal phase near the transition to the superconductor state.

We propose a generalization of the equation of motion method for equilibrium Green's functions to handle systems with time-dependent perturbations. This generalization is based on the properties of Green's functions and in the adiabatic application of the disturbance. We study a two band *s*-wave superconductor with hybridization, based on an attractive Hubbard model. We consider the system under the action of a fictitious field, time and wave vector dependent, which couples to the superconducting order parameter.

We calculate the zero order propagators in the field, using the conventional equation of motion method, and the first order ones, using the generalized equation of motion. The response to the field is given by a generalized susceptibility, which in the one-band case reduces to the one obtained by Thouless. We associate the emergence of superconductivity with the divergence of the static part of the generalized susceptibility. The advantage of this method is its simplicity, because we only deal with single-particle propagators. We

analyze this superconducting susceptibility, which allows us to find a critical hybridization above which there is no superconducting phase, determine the critical and the crossover lines and determine the dynamical critical exponent  $z$  for this system. Therefore we can predict the behavior of some quantities measured experimentally at low temperatures close to the superconducting quantum critical point.

# Conteúdo

Agradecimentos . . . . .	i
Resumo . . . . .	ii
Abstract . . . . .	iv
Conteúdo . . . . .	vi
Lista de Figuras . . . . .	viii
Lista de Tabelas . . . . .	ix
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Transições de Fase Quânticas</b>	<b>5</b>
2.1 Física na vizinhança de um ponto crítico . . . . .	6
2.2 Expoentes Críticos . . . . .	8
2.3 Teoria de Escala . . . . .	9
2.4 A linha de <i>crossover</i> , a linha crítica, a trajetória crítica e a dimensão crítica superior . . . . .	14
2.5 Sistemas Magnéticos . . . . .	18
2.6 Sistemas Supercondutores . . . . .	20
<b>3 O Método das Funções de Green</b>	<b>26</b>
3.1 A equação de movimento para perturbação harmônica no tempo . . . . .	26

3.2 Os propagadores para perturbação harmônica no tempo . . . . .	30
<b>4 O Modelo</b>	<b>33</b>
4.1 O Hamiltoniano . . . . .	33
4.2 Propagadores de ordem zero ( $\hbar = 0$ ) . . . . .	35
4.3 Propagadores de primeira ordem em $\hbar$ . . . . .	39
4.3.1 Determinação do critério para o surgimento de supercondutividade . . . . .	41
<b>5 Análise da susceptibilidade generalizada</b>	<b>45</b>
5.1 Considerações sobre as bandas . . . . .	48
5.2 Determinação da hibridização crítica . . . . .	51
5.3 Determinação da linha de transição . . . . .	56
5.4 Determinação dos expoentes críticos . . . . .	57
<b>6 Conclusões e Perspectivas</b>	<b>69</b>
<b>Apêndice 1</b>	<b>71</b>
6.1 A equação de movimento . . . . .	72
6.2 A função de correlação . . . . .	73
<b>Apêndice 2</b>	<b>75</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>80</b>



# Lista de Figuras

2.1	Diagrama de fases genérico, $T$ versus um parâmetro de controle $r$ , para um sistema que apresenta ordem a temperatura finita. . . . .	7
2.2	Transformação de escala. . . . .	12
2.3	Diagrama de fases esquemático indicando a linha crítica, a trajetória crítica e a linha de <i>crossover</i> . . . . .	16
2.4	Gap em função da temperatura obtido por Suhl <i>et al.</i> . . . . .	22
2.5	Diagrama da temperatura crítica versus hibridização obtido por Padilha e Continentino. . . . .	23
2.6	Diagrama de fases para o composto $CeCoInSn$ obtido por Ramos <i>et al.</i> . . . . .	24
2.7	Diagrama de fases temperatura crítica versus pressão com dados obtidos experimentalmente para o composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ para diversos valores de dopagem e curvas obtidas teoricamente por Ramos <i>et al.</i> . . . . .	25
5.1	Representação esquemática das bandas. . . . .	48
5.2	Representação esquemática das bandas híbridas no limite $V \gg \mu$ . . . . .	50
5.3	Esquema dos possíveis valores de $k_C$ . . . . .	53
5.4	Diagrama pictórico de $U_C$ em função de $V$ . . . . .	55
5.5	Diagrama pictórico da temperatura crítica versus hibridização. . . . .	57
5.6	Diagrama de fases para sistemas supercondutores multibandas com hibridização. . . . .	67

# Lista de Tabelas

2.1	Tabela com os principais expoentes críticos e seus valores obtidos em campo médio. . . . .	18
-----	--	----

# Capítulo 1

## Introdução

Tradicionalmente, em Física do Estado Sólido estudamos fases estáveis da matéria, como diferentes fases magnéticas e a fase supercondutora. Acontece que, atualmente, temos em mãos materiais complexos que podem ser sintetizados com muito controle, o que permite estudar fases quânticas instáveis da matéria em torno de pontos críticos quânticos <sup>1</sup>. As propriedades dos materiais como os supercondutores de alta temperatura crítica, férmions pesados, condutores orgânicos, etc. nesta região crítica têm sido um importante objeto de estudo nos últimos anos [1].

O comportamento dos sólidos depende da dinâmica de um número muito grande de átomos e de elétrons que os formam, o que não permite que estudemos os mesmos considerando as interações de cada elemento destes com os demais. Felizmente, a mecânica estatística nos fornece aparatos para tratar sistemas de muitos corpos. Assim, apesar do movimento de cada partícula ser algo muito complexo, o comportamento coletivo das mesmas passa a ter uma representação relativamente simples. Algumas fases que surgem devido a fenômenos coletivos são: fases com ordenamento magnético; a fase superfluida, na qual verifica-se viscosidade nula; e a fase supercondutora, na qual verifica-se resistividade nula. Todas estas fases são estáveis, mas podemos ter transições de uma para outra

---

<sup>1</sup>Estes conceitos serão introduzidos no capítulo 2.

variando parâmetros externos.

Transições de fase ocorrem nos sistemas mais diversos: líquidos que se condensam ou evaporam, materiais que se tornam magnéticos ou supercondutores abaixo de determinadas temperaturas, etc. Apesar da diversidade de sistemas, diferentes transições de fase podem ter características semelhantes, ou seja, apresentar um comportamento universal. Isto porque próximo às transições temos a formação de pequenas regiões nas quais as partículas se comportam de modo organizado, que vão aumentando quanto mais nos aproximamos da fase ordenada através do ponto crítico. Apesar dessa *universalidade*, há uma diferença importante entre algumas transições que deve ser destacada: algumas são mediadas por variação de temperatura, ou seja, pelo aumento ou diminuição do agito térmico das partículas; mas há transições que são mediadas por aplicação de campo magnético, campo elétrico ou pressão, por variação do grau de dopagem ou pela variação de algum outro agente externo que mude a intensidade ou a natureza das interações entre as partículas. Estas últimas podem ocorrer independentemente da temperatura, de forma que podem ser analisadas a temperatura nula e assim ser entendidas em termos de flutuações quânticas, regidas pelo princípio de incerteza de Heisenberg, e são chamadas de transições de fase quânticas [2]. Nos próximos capítulos estes conceitos serão introduzidos de forma mais cuidadosa.

As fases mais estudadas no âmbito de transições de fase são as fases magnéticas. Há diversos modelos que podem gerar diferentes fases de interesse. Um exemplo simples, é a Teoria de Stoner para o ferromagnetismo, a partir da qual pode-se encontrar um critério para o surgimento da fase ordenada em termos da susceptibilidade e da intensidade da interação entre os elétrons. A generalização deste critério para uma susceptibilidade dependente de um número de onda e de uma frequência pode ser feita aplicando-se um campo magnético com dependências espacial e temporal. Esta susceptibilidade generalizada pode ser útil na determinação dos expoentes críticos quânticos que regem a transição entre as fases ordenada e desordenada, permitindo assim o estudo da transição de fase quântica do sistema.

Já transições de fase quânticas supercondutoras ainda não estão tão bem estudadas. Há evidências que tais transições possam ser mediadas por desordem e também pela hibridização em caso de sistemas multi-bandas. Neste cenário, este trabalho propõe então, em analogia ao caso magnético, encontrar uma susceptibilidade generalizada para o caso supercondutor, ou seja, uma susceptibilidade referente ao acoplamento do parâmetro de ordem supercondutor com um campo externo fictício com dependência espacial e temporal, que entrará como uma perturbação aplicada adiabaticamente, gerando flutuações no parâmetro de ordem no estado normal. Para tanto usaremos uma generalização do método da equação de movimento para as funções de Green para o caso de uma perturbação dependente do tempo. Finalmente analisaremos tal susceptibilidade e encontraremos os expoentes que regem a transição de fase quântica desse sistema.

No Cap. 2 faremos uma breve introdução às transições de fase quânticas, definindo os expoentes críticos mais utilizados e encontrando relações entre eles através da teoria de escala. Em seguida é feita uma breve análise das transições em sistemas magnéticos, principalmente baseada na teoria de Stoner para o ferromagnetismo, a qual define um critério para existência de ordem magnética no estado fundamental. Neste critério está envolvida uma susceptibilidade que pode ter dependência espacial e temporal, dependendo do campo externo aplicado. A partir deste tipo de função resposta dinâmica é possível encontrar o expoente dinâmico da transição de fase quântica. Discutimos rapidamente os principais resultados obtidos por Hertz para sistemas magnéticos. Finalmente, apresentamos alguns resultados a respeito de transições de fase quânticas em sistemas supercondutores.

No Cap. 3 introduzimos o método da equação de movimento para funções de Green de forma detalhada, e propomos uma generalização do mesmo para tratar sistemas com perturbações dependentes do tempo. Esta generalização é baseada nas propriedades das funções de Green e no fato da aplicação da perturbação ser feita de forma adiabática.

No Cap. 4 estudamos o modelo de um supercondutor de onda- $s$  com duas bandas híbridas, sendo que apenas em uma delas há interação efetiva atrativa entre as quasipartículas. Consideramos também que há uma perturbação atuando sobre o sistema,

dependente da frequência e do número de onda, como um campo fictício que se acopla ao parâmetro de ordem supercondutor. Calculamos os propagadores de ordem zero, usando o método da equação de movimento convencional e os propagadores de ordem um, utilizando a equação de movimento proposta no Cap. 3. Encontramos uma susceptibilidade generalizada para o caso supercondutor e um critério “à la Stoner” para o surgimento de supercondutividade conhecido como critério de Thouless.

No Cap. 5 analisamos a susceptibilidade generalizada encontrada no Cap. 4, o que permite encontrar uma hibridização crítica acima da qual não há fase supercondutora, e determinar os expoentes críticos para este sistema. Consequentemente, podemos prever o comportamento de algumas grandezas mensuráveis experimentalmente a baixas temperaturas.

Nas Conclusões descrevemos sucintamente os principais resultados obtidos neste trabalho, seus diferenciais e limitações e propomos problemas que podem ser abordados futuramente relacionados a esta dissertação.

No Apêndice explicitamos os cálculos feitos por Thouless para o caso de um sistema supercondutor de uma banda a partir de teoria de perturbação por expansão diagramática.

## Capítulo 2

# Transições de Fase Quânticas

Em seu trabalho de 1976, Hertz [3] faz um dos primeiros estudos sobre a influência da mecânica quântica em fenômenos críticos. Mostra que se a energia das flutuações quânticas é muito menor que a energia térmica, um tratamento clássico é apropriado. Mas, se analisamos uma transição a temperatura nula, que ocorre devido à mudança de algum parâmetro, como o campo magnético ou a pressão sobre o material, que estão relacionadas diretamente com a intensidade ou a natureza de alguma interação do sistema, não temos flutuações térmicas envolvidas, de forma que um tratamento baseado simplesmente na estatística clássica é inapropriado. A temperaturas muito baixas, ou seja,  $k_B T$  muito menor que as energias características do sistema (onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura), também espera-se que as flutuações não térmicas tenham um papel importante.

A introdução dos efeitos quânticos não só afeta propriedades de equilíbrio, mas leva a dinâmicas muito diferentes das que ocorrem no limite clássico. Isto porque não se pode separar a estática da dinâmica no caso quântico, já que estas estão intimamente ligadas pelo expoente dinâmico  $z$ , como veremos a seguir na seção 2.3.

A partir da formalização deste tipo de análise, ela foi aplicada a modelos simples, como o modelo de Ising em campo transversal e o modelo do rotor quântico. Em seguida

o foco foi para as transições metal-isolante, usando o modelo de Anderson para elétrons não interagentes, sendo que a transição nesses casos se dá pela localização dos estados eletrônicos na presença de um potencial randômico [2]. No entanto, as classes de materiais que temos hoje envolvem sistemas com fortes interações e correlações, e suas transições de fase quânticas ainda não estão completamente exploradas.

A utilidade da análise das transições de fase quânticas (TFQ) está principalmente no fato de ela permitir uma nova perspectiva no estudo de sistemas de muitos corpos. Tradicionalmente, parte-se do limite de acoplamento fraco e posteriormente as interações são consideradas sobre os estados originais de partícula livre; ou parte-se do limite de acoplamento forte, com interações localizadas bem definidas, mas com interações de longo alcance não tão bem determinadas. Já no estudo das TFQ parte-se de um regime intermediário, podendo-se dirigir para os dois limites de acoplamento extremos [2].

Mas afinal o que é uma transição de fase quântica? Uma TFQ é uma transição que ocorre devido à competição entre diferentes parâmetros que descrevem as interações básicas de um sistema. Apesar das TFQ serem definidas a temperatura zero, os pontos críticos quânticos (PCQ), pontos em que ocorrem as transições a temperatura nula, influenciam a física a temperaturas finitas. Desta forma, o estudo da criticalidade quântica passa de uma abstração intelectual para um fenômeno verificável, que pode influenciar muito as características das diferentes fases dos materiais [4].

## 2.1 Física na vizinhança de um ponto crítico

No limite em que as flutuações quânticas começam a ser importantes temos uma combinação de aspectos clássicos e quânticos, o que dá origem a um diagrama de fases interessante nesta região.

No caso de sistemas que apresentam fases ordenadas a temperaturas finitas, podemos encontrar um diagrama de fases muito rico da temperatura *versus* um parâmetro que



controla a intensidade das interações a nível microscópico. Neste caso mesmo a baixas temperaturas podemos variar o parâmetro de controle e encontrar uma transição de fase, ou seja, temos uma linha de transição, sendo que o ponto crítico quântico localiza-se no final desta, a  $T = 0$ . Tal diagrama pode ser representado pela Fig. 2.1.

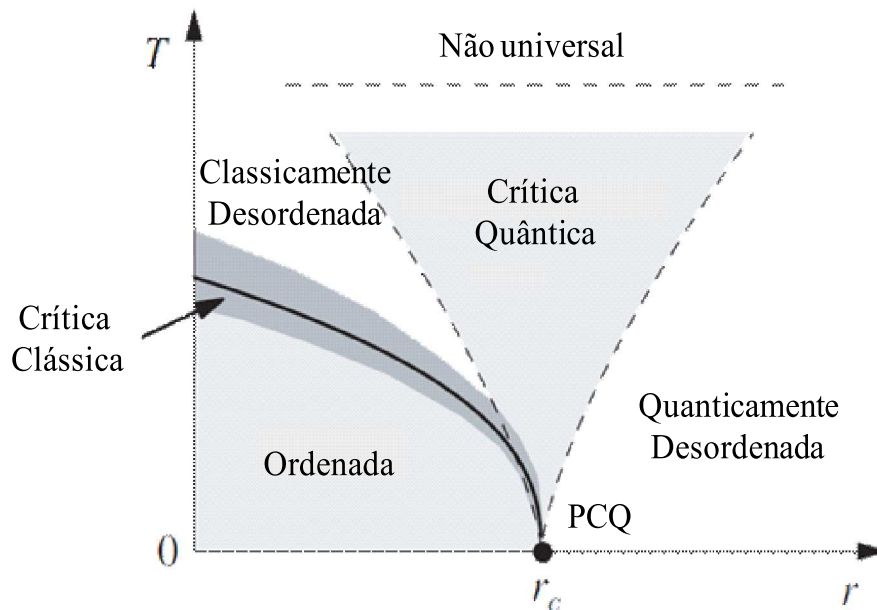


Figura 2.1: Diagrama de fases genérico,  $T$  versus um parâmetro de controle  $r$ , para um sistema que apresenta ordem a temperatura finita. Figura retirada da referência [2].

As flutuações clássicas dominarão o entorno da linha de transição (região mais escura em torno da linha sólida na Fig. 2.1), mas com a diminuição da temperatura esta região se estreita e fica arbitrariamente pequena quando  $T \rightarrow 0$ , e não deve ser verificada experimentalmente neste limite. Além disso pode-se observar três fases não ordenadas que representam regimes bem diferentes, separadas por linhas de *crossover* que dependem se as flutuações dominantes são clássicas ou quânticas. Na região chamada de “classicamente desordenada”, a ordem de longo alcance é destruída por flutuações térmicas. Já na região “quanticamente desordenada” a ordem é destruída por flutuações quânticas devido à grande intensidade do parâmetro de controle. Entre estas duas regiões está a chamada região “crítica quântica”, na qual os dois tipos de flutuação são importantes,

sendo que suas linhas de *crossover* para as outras fases desordenadas são determinadas por condições sobre a energia térmica,  $k_B T$ , e a energia das flutuações quânticas, que dependerá do parâmetro de controle. Nesta região são verificados comportamentos não usuais dos sistemas, com leis de potência diferentes das esperadas nas outras regiões desordenadas. Acima de determinada temperatura que excede as energias características do sistema temos apenas desordem térmica.

## 2.2 Expoentes Críticos

Na vizinhança de uma transição de fase contínua, muitas quantidades físicas apresentam comportamento não analítico, divergindo com uma lei de potência, o que é caracterizado por expoentes críticos. Seja  $|g|$  uma distância genérica a um ponto crítico quântico. Podemos definir os expoentes críticos mais comuns, relacionados com  $f$ , a densidade de energia livre;  $\xi$ , o comprimento de correlação;  $m = -\partial f / \partial h$ , o parâmetro de ordem;  $\chi = -\partial^2 f / \partial h^2$ , a susceptibilidade associada a esse parâmetro de ordem, onde  $h$  é a variável conjugada a esse parâmetro de ordem; e  $\tau_\xi$ , um tempo característico, da seguinte forma:

$$f \propto |g|^{2-\alpha}, \quad (2.1)$$

$$\xi \propto |g|^{-\nu}, \quad (2.2)$$

$$m \propto |g|^\beta, \quad (2.3)$$

$$\chi \propto |g|^{-\gamma}, \quad (2.4)$$

$$\tau_\xi \propto |g|^{-\nu z}, \quad (2.5)$$

$$m(|g| = 0) \propto h^{1/\delta}, \quad (2.6)$$

sendo  $\alpha, \nu, \beta, \gamma, \delta$  os expoentes críticos e  $z$  um expoente especial conhecido como expoente dinâmico. Note que na última equação o expoente é determinado sobre o ponto crítico quântico,  $|g| = 0$ .

Além destes expoentes, temos que, no ponto crítico quântico, o comprimento de correlação se torna infinito, e a função de correlação relativa ao parâmetro de ordem decai algebricamente com a distância  $r$  como

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d+z-2+\eta}}. \quad (2.7)$$

O conjunto de expoentes críticos associados a um ponto crítico caracterizam a classe de universalidade da transição. Além de descrever como propriedades (como o comprimento de correlação e a susceptibilidade) se comportam a baixas temperaturas em torno do ponto crítico, eles permitem que deduzamos também o comportamento crítico de outras propriedades físicas. Tais expoentes críticos não são independentes, mas estão ligados por relações de escala [4], como será visto na próxima seção.

## 2.3 Teoria de Escala

As propriedades de escala de um sistema próximo a uma transição de fase quântica podem ser derivadas considerando-se um conjunto de transformações de escala nas dimensões de espaço e tempo. Isto porque, quando um sistema está próximo a um ponto crítico, o tamanho das regiões no espaço e no tempo onde os graus de liberdade encontram-se correlacionados aumentam. O tamanho destas regiões são determinados pelo comprimento de correlação,  $\xi$ , e pelo tempo característico,  $\tau_\xi$ . Exatamente sobre o ponto crítico o comprimento de correlação e o tempo característico divergem, e o sistema passa a ser invariante por transformações de escala [4]. Analisando primeiro a densidade de energia livre  $f$ , na região crítica, como função da variável conjugada  $h$  e da distância ao ponto crítico  $|g|$ , a teoria de escala parte da simples suposição de que  $f$  depende de  $h$  e  $|g|$  numa combinação bem definida:

$$f = |g|^{2-\alpha} \phi \left( \frac{h}{|g|^\Delta} \right), \quad (2.8)$$

onde  $\Delta$  é chamado de expoente do gap (que será utilizado apenas como um suporte para a determinação dos expoentes de interesse) e  $\phi$  uma função de escala. A determinação da estrutura destas funções de escala parte da seguinte convenção: dado o observável de interesse, analisamos sua dimensão de escala (a potência a qual o fator de reescala para o comprimento deve ser elevado de forma a obter o fator correto de reescala para  $h$ ) e então o escrevemos com um pré fator em termos da distância ao ponto crítico,  $g$ , com tal expoente que a razão entre essas grandezas seja adimensional [2].

Como o parâmetro de ordem e a susceptibilidade associada também são derivadas da energia livre, temos que seus expoentes estão relacionados com  $\alpha$ :

$$m = -\left.\frac{\partial f}{\partial h}\right|_{h=0} \propto \phi'(0)|g|^{2-\alpha-\Delta}, \quad (2.9)$$

e da definição dos expoentes críticos, temos que:

$$\beta = 2 - \alpha - \Delta. \quad (2.10)$$

Analisando agora a susceptibilidade:

$$\chi = \left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{h=0} \propto \phi''(0)|g|^{2-\alpha-2\Delta}, \quad (2.11)$$

de forma que

$$-\gamma = 2 - \alpha - 2\Delta. \quad (2.12)$$

Destas duas relações podemos eliminar  $\Delta$  e obter a relação de escala conhecida como relação de Rushbrooke:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (2.13)$$

Para encontrar a relação com o expoente  $\delta$  devemos analisar a equação de estado no ponto crítico, fazendo  $g \rightarrow 0$ .

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h} \propto \phi'\left(\frac{h}{|g|^\Delta}\right)|g|^{2-\alpha-\Delta}. \quad (2.14)$$

Neste limite a função de escala diverge, assim para a expressão toda não divergir, devemos ter:

$$\phi' \left( \frac{h}{|g|^\Delta} \right) \propto \left( \frac{h}{|g|^\Delta} \right)^{\frac{2-\alpha-\Delta}{\Delta}}, \quad (2.15)$$

consequentemente

$$m \propto h^{\frac{2-\alpha-\Delta}{\Delta}}, \quad (2.16)$$

e considerando a definição dos expoentes temos:

$$\frac{2-\alpha-\Delta}{\Delta} = \frac{1}{\delta}. \quad (2.17)$$

Assim, utilizando as relações encontradas anteriormente, podemos escrever:

$$\beta\delta = \beta + \gamma. \quad (2.18)$$

Para determinarmos a terceira lei de escala precisamos analisar a função de correlação. Agora a hipótese de escala pode ser escrita em termos de uma nova função de escala  $\Gamma$ :

$$G(r) = r^{-(d-2+\eta)} \Gamma \left( \frac{r}{\xi} \right). \quad (2.19)$$

Lembrando que a integral de  $G(r)$  sobre todo o espaço nos fornece a susceptibilidade:

$$\begin{aligned} \chi &\propto \int d\mathbf{r} G(r) \propto \int r^{d-1} dr G(r) \\ &= \int dr \frac{r^{d-1}}{r^{(d-2+\eta)}} \Gamma \left( \frac{r}{\xi} \right) = \int dr r^{1-\eta} \Gamma \left( \frac{r}{\xi} \right), \end{aligned} \quad (2.20)$$

mudando de variável  $x = \frac{r}{\xi}$

$$\chi \propto \xi^{2-\eta} \int dx x^{1-\eta} \Gamma(x), \quad (2.21)$$

lembrando das definições dos expoentes do comprimento de correlação e da susceptibilidade, temos:

$$\nu(2-\eta) = \gamma. \quad (2.22)$$

Consideremos agora uma transformação de escala no comprimento  $L$ , dada por um fator  $b = L/L'$ , sendo  $L$  o comprimento original e  $L'$  o comprimento reescalado, de acordo com a Fig. 2.2. Consequentemente, teremos uma mudança de escala na intensidade das interações no sistema,  $E$ , que será caracterizada por um expoente  $y$ ; uma mudança de escala na distância ao ponto crítico, caracterizada por um expoente  $a$ , e em um parâmetro externo ao sistema,  $H$ , que pode competir com as interações intrínsecas deste, caracterizada por um expoente  $x$ , como proposto por Kadanoff [5]:

$$E' = b^{-y}E, \quad (2.23)$$

$$g' = b^a g, \quad (2.24)$$

$$H' = b^x H. \quad (2.25)$$

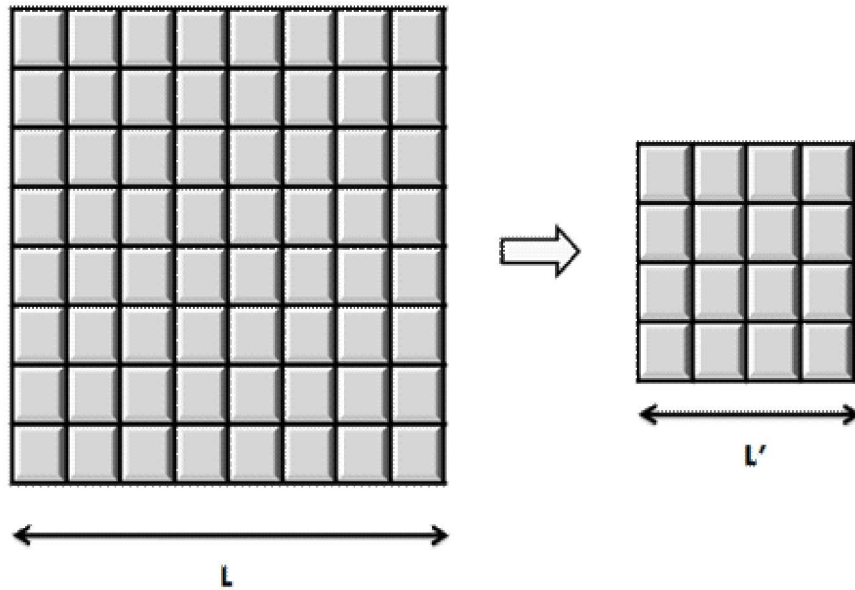


Figura 2.2: Transformação de escala por um fator  $b = 2$ .

Note que se reescalamos o sistema tal que  $b > 1$ , a intensidade das interações no sistema reescalado diminui. Analisando novamente a densidade de energia livre, escrevendo-a

agora em termos dos parâmetros introduzidos acima:

$$f = \frac{F}{L^d} = E\Phi(g, H/E), \quad (2.26)$$

onde  $F$  é a energia livre total e  $d$  a dimensão euclidiana do sistema. A densidade de energia livre e o comprimento de correlação reescalados ficam:

$$f' = b^d f = E'\Phi(g', H'/E'), \quad (2.27)$$

$$\xi' = b^{-1}\xi. \quad (2.28)$$

Usando as relações acima, temos:

$$f = b^{-(d+y)} E\Phi(gb^a, (H/E)b^{x+y}), \quad (2.29)$$

$$\xi = b\xi'. \quad (2.30)$$

Como  $b$  é arbitrário, podemos fazer:

$$b^a g = 1 \Rightarrow b = g^{-1/a}, \quad (2.31)$$

de forma que:

$$f = g^{(d+y)/a} E\Phi(1, (H/E)g^{-(x+y)/a}), \quad (2.32)$$

$$\xi = g^{-1/a}\xi'. \quad (2.33)$$

Usando agora as primeiras definições dos expoentes críticos, encontramos que:

$$2 - \alpha = \nu(d + y), \quad (2.34)$$

conhecida como relação quântica de hiperscala, que relaciona os expoentes críticos com a dimensão e com o expoente  $y$  que escala as interações do sistema.

Lembrando agora que o tempo característico escala como:

$$\tau_\xi \propto g^{-\nu z} = b^z, \quad (2.35)$$

podemos relacionar o expoente  $z$  com o expoente  $y$  considerando que a relação de incerteza de Heisenberg seja invariante de escala:

$$\Delta E' = b^{-y} \Delta E, \quad (2.36)$$

$$\Delta \tau'_\xi = b^z \Delta \tau_\xi, \quad (2.37)$$

$$\Delta E' \Delta \tau'_\xi = b^{z-y} \Delta E \Delta \tau_\xi \geq \hbar. \quad (2.38)$$

Consequentemente

$$y = z, \quad (2.39)$$

e a relação de hiperescala pode ser escrita como:

$$2 - \alpha = \nu(d + z). \quad (2.40)$$

Note que agora temos uma espécie de dimensão efetiva  $d_{eff} = d + z$ , o que terá importantes consequências nas transições de fase quânticas. Como em teorias clássicas temos esta mesma relação a menos da presença do expoente  $z$ , os expoentes críticos de teorias quânticas serão os mesmos de teorias clássicas em  $d + z$  dimensões. Além disso, pode-se mostrar que se  $d_{eff}$  está acima de uma dimensão crítica, os expoentes passam a assumir valores obtidos pela teoria gaussiana [3].

## 2.4 A linha de *crossover*, a linha crítica, a trajetória crítica e a dimensão crítica superior

Nesta seção serão introduzidos mais alguns conceitos importantes da teoria de transições de fase quânticas. Partindo de um tratamento na teoria do grupo de renormalização, podemos encontrar, para temperaturas finitas, que o comprimento de correlação diverge com o parâmetro externo como:

$$\xi \propto |g - g_c(T)|^{-\nu}, \quad (2.41)$$



onde  $g_c(T)$  é o valor crítico de  $g$  dependente da temperatura. Também pode-se verificar a existência de uma linha de *crossover* que separa dois regimes do sistema na região não crítica do diagrama de fases, dada por:

$$T_{cross} = |g - g_c(T)|^\phi, \quad (2.42)$$

onde  $\phi = \nu z$ . Na realidade não temos uma transição de fase ao longo dessa linha, ela somente separa a região em que o parâmetro de controle da transição sofre influência da temperatura da região na qual ele é constante. Apesar da ausência de transições nessa linha, ela pode incluir diversas anomalias nas quantidades físicas, como máximos ou inflexões, que são acessíveis experimentalmente.

Do comprimento de correlação dado pela Eq. 2.41, podemos também determinar a linha crítica. Para isso devemos analisar os pontos nos quais  $\xi$  diverge:

$$|g - g_c(T)|^{-\nu} = 0, \quad (2.43)$$

ou melhor,

$$T_c \propto |g - g_c|^\psi, \quad (2.44)$$

sendo  $\psi$  conhecido como o expoente de deslocamento, que depende de como  $g_c(T)$  varia com a temperatura, próximo de  $g_c(T = 0)$ .

Uma característica interessante da abordagem da teoria de escala é que podemos determinar o comportamento singular de quantidades físicas de interesse como função da temperatura sobre o ponto crítico quântico, ou seja, sobre uma trajetória crítica a  $|g| = 0$ . Dada uma quantidade física, podemos conhecer a lei de potência com a qual ela diverge e a respectiva função de escala dependente da temperatura. A princípio, nesta trajetória a função de escala diverge. Para que isto não aconteça devemos supor uma dependência conveniente para o argumento da função de escala de forma a cancelar a dependência original em  $|g|$ . Desta forma encontraremos uma lei de potência que nos diz como esta grandeza diverge com a diminuição da temperatura na trajetória crítica.



dimensão crítica, a partir da qual há transições de fase a temperaturas finitas. Sejam os expoentes ao longo da linha crítica dados por  $\tilde{\nu}$ ,  $\tilde{\gamma}$ , etc, em geral diferentes dos expoentes  $\nu$  e  $\gamma$ , etc determinados pelo PCQ. Para um tratamento generalizado devemos supor a densidade de energia livre na forma:

$$f = |g(T)|^{2-\alpha} \tilde{F}(t), \quad (2.45)$$

onde  $\tilde{F}(t)$  é uma função de escala,  $t = T/|g(T)|^{\nu z}$  e  $g(T) = g(T = 0) - uT^{1/\psi}$ , sendo  $u$  uma constante. Assim as singularidades na linha crítica,  $|g(T_c)| = 0$  são dadas pelos expoentes *til*. A função de escala tem que satisfazer

$$\tilde{F}_c(t = 0) = cte, \quad \tilde{F}_c(t \rightarrow 0) \propto t^x. \quad (2.46)$$

A primeira equação garante que em  $T = 0$  recobremos o resultado  $f \propto |g|^{2-\alpha}$ . Na segunda equação temos  $x = (\tilde{\alpha} - \alpha)/\nu z$  e esta garante que no limite  $|g(T)| \rightarrow 0$  tenhamos o comportamento assintótico correto, dado por  $\tilde{\alpha}$ .

Até agora falamos de relações entre expoentes críticos, mas não como calculá-los efetivamente. Para isso precisamos de modelos. Como uma primeira abordagem temos a teoria de Landau para transições de fase, na qual o conceito de parâmetro de ordem tem um papel fundamental por representar a quebra de simetria na fase desordenada. Para isso escrevemos uma energia livre em potências desse parâmetro de ordem,  $m$ , perto da transição e encontramos como as grandezas físicas se comportam nessa região derivando a energia livre:

$$F = \int d^d x [a_0 + am^2 + um^4 - Hm], \quad (2.47)$$

onde  $a_0$  é uma constante que pode ser feita igual a zero,  $a = a_1 + a_2\epsilon + O(\epsilon^2)$  onde  $a_1$  e  $a_2$  são constantes e  $\epsilon$  a temperatura reduzida  $\epsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$ , e  $u$  e  $H$  constantes. Analisando esta energia livre, derivando-a em relação a  $T$  e  $m$ , encontramos os expoentes críticos de campo médio que satisfazem as relações de escala obtidas na seção anterior.

Desta forma encontramos expoentes sem definir um modelo microscópico, os quais são chamados de expoentes de campo médio, com os seguintes valores [4]:

Quantidade Física	Expoente Crítico	Valor em Campo Médio
Calor Específico	$\alpha$	0
Comprimento de Correlação	$\nu$	1/2
Parâmetro de Ordem	$\beta$	1/2
Susceptibilidade	$\gamma$	1
Parâmetro de Ordem ( $ g  = 0$ )	$\delta$	3
Função de Correlação	$\eta$	0

Tabela 2.1: Tabela com os principais expoentes críticos e seus valores obtidos em campo médio.

Estes valores obtidos por campo médio só são válidos na região crítica acima de uma dimensão  $d_{cs}$ , chamada de dimensão crítica superior, que é determinada pelo critério de Ginzburg [4]. Propondo uma energia livre dentro de uma aproximação gaussiana, verifica-se que acima desta dimensão as flutuações não geram mais comportamentos divergentes nas grandezas físicas, e assim recaímos nos expoentes de campo médio [4].

## 2.5 Sistemas Magnéticos

Os casos mais estudados de transições de fase quânticas envolvem fases magnéticas em metais. Nestes, os spins dos elétrons que os constituem podem formar determinados padrões que definirão a fase magnética do mesmo. No estado desordenado seus spins estão orientados aleatoriamente, na fase ferromagnética todos os spins estão alinhados na mesma direção, já na fase antiferromagnética os spins alternam suas orientações. Ainda é possível existir fases nas quais os spins são modulados por uma onda, sendo estas conhecidas como onda de densidade de spin. Para estudar tais transições podemos analisar funções resposta dinâmicas, como proposto por Hertz [3], pois a partir delas podemos prever o comportamento da energia livre.

Do modelo de Stoner, podemos analisar a instabilidade da fase paramagnética e en-

contrar um critério que nos diz se a fase ferromagnética é estável:

$$1 - U\chi_P < 0, \quad (2.48)$$

onde  $U$  é a intensidade da interação repulsiva coulombiana local entre as partíulas e  $\chi_P$  é a susceptibilidade de Pauli obtida na fase paramagnética, ou seja, a densidade de estados no nível de Fermi. Este critério é obtido ao aplicarmos um campo homogêneo e estático ao sistema [6].

Posteriormente, Overhauser percebeu que um campo externo com dependência espacial poderia produzir uma magnetização com tal dependência, ou melhor, uma susceptibilidade dependente de um vetor de onda  $\mathbf{q}$ . Neste caso podemos encontrar um critério similar ao critério de Stoner para a existência de ordem magnética:

$$1 - U\chi_0(\mathbf{q}) < 0, \quad (2.49)$$

sendo

$$\chi_0(\mathbf{q}) = \sum_k \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}, \quad (2.50)$$

que é calculada a partir do sistema na ausência de magnetização [?].

Assim, podemos ter a relação  $1 = U\chi_0(\mathbf{q})$  satisfeita para algum  $\mathbf{q}$  não nulo. Teremos então um ordenamento não uniforme, com uma modulação espacial da distribuição dos spins, o que é chamado de onda de densidade de spins. Se tivermos  $\mathbf{q} = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ , onde  $a$  é o parâmetro de rede, temos ordem anti-ferromagnética para uma rede cúbica simples. Se  $\mathbf{q} = 0$  recaímos no critério de Stoner e temos ordem ferromagnética. É possível também termos componentes de  $\mathbf{q}$  que não são comensuráveis com os parâmetros de rede, e nesse caso temos o que é chamado de onda de densidade de spins incomensurável.

Há também a possibilidade de definirmos uma dependência temporal para o campo externo. Com isto obteremos uma susceptibilidade dinâmica:

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega_0) = \sum_k \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_0}. \quad (2.51)$$

Esta função é conhecida como função de Lindhard, uma função resposta dinâmica referente à carga para um gás de elétrons interagentes em uma aproximação de campo

médio. Ela é importante pois pode ser obtida de forma fechada e ter suas propriedades analíticas bem estudadas. A partir dela pode-se determinar uma série de propriedades do sistema [8].

Este tipo de função resposta dinâmica é útil no estudo das transições de fase quânticas, como já foi destacado nas seções anteriores, pois permite analisar como o tempo entra na dinâmica do sistema e desta forma podemos determinar o expoente crítico dinâmico  $z$ .

Em seu trabalho [3], Hertz analisa esta função para  $q \ll k_F$  e  $\omega/qv_F$  pequeno, e a partir dela constrói uma generalização quântica do funcional da energia livre de Landau-Ginzburg-Wilson. Encontra que no caso ferromagnético há um mecanismo de decaimento das excitações, conhecido como amortecimento de Landau. Além disso é capaz de determinar o expoente dinâmico  $z$  através de leis de escala, encontrando  $z = 3$  neste caso. Discute também outros sistemas, como o antiferromagneto, encontrando  $z = 2$ .

## 2.6 Sistemas Supercondutores

Já foi comentado neste capítulo que as transições de fase quânticas envolvem a competição entre parâmetros que regem as interações microscópicas do sistema em estudo, ou seja, valores finitos destes parâmetros (sendo um deles a intensidade da interação atrativa entre os elétrons, no caso supercondutor). Assim, a uma primeira vista, não teríamos pontos críticos quânticos em sistemas supercondutores, já que pela teoria BCS [9] a supercondutividade pode surgir para um valor arbitrariamente pequeno da interação. Mas se temos algum mecanismo que suprima a supercondutividade, tornando necessário um valor finito da interação, podemos estudar o comportamento crítico destes sistemas [10]. A aplicação de campo magnético para suprimir a fase supercondutora é o mais conhecido destes mecanismos, o que já era explicado pelas primeiras teorias a respeito de supercondutividade [6],[9].

Um outro mecanismo que pode suprimir a fase supercondutora é a dopagem com impurezas magnéticas, introduzindo desordem no sistema. Ramazashvili e Coleman [10] estudaram o ponto crítico supercondutor neste caso, e encontraram que as flutuações supercondutoras são caracterizadas pelo expoente crítico dinâmico  $z = 2$ . Para tanto, analisam a contribuição de flutuações gaussianas no campo referente aos pares de Cooper para um supercondutor de onda- $s$ . Num trabalho mais recente, Galitski [11] analisa um ponto crítico quântico também associado a desordem, encontrando um expoente crítico  $z = 2$ . Parte de uma teoria microscópica não perturbativa com um gap anisotrópico próximo a um ponto crítico quântico, baseado no hamiltoniano BCS, e analisa a susceptibilidade magnética.

Um terceiro mecanismo que pode suprimir a supercondutividade, mesmo em sistemas sem impurezas, é a hibridização,  $V$ , entre diferentes bandas do material, sendo este um parâmetro muito útil pois pode ser relacionado com a pressão externa aplicada à amostra, possibilitando a análise do diagrama de fases  $T_c$  versus  $P$  ou  $T_c$  versus  $V$ . Uma das primeiras propostas de modelagem neste sentido foi feita por Suhl [12] como uma extensão da teoria BCS numa tentativa de modelar sistemas supercondutores mais complexos, introduzindo uma interação interbanda. Considerando, por exemplo, metais de transição, estes possuem elétrons de condução no nível  $d$ , que contribuem consideravelmente para a resistividade no estado normal, estando relacionados da mesma forma com a supercondutividade nestes materiais. Se considerarmos férmions pesados, a banda de condução coexiste com uma banda estreita de elétrons  $f$  apresentando um comportamento instável entre itinerante e localizado, complicando ainda mais sua análise. Este trabalho mostra que mesmo para supercondutores do tipo  $s-d$  que não apresentam elétrons  $d$  participando efetivamente da supercondutividade (interação intrabanda na banda  $d$  nula), os elétrons  $s$  se beneficiam da densidade de estados presentes na banda  $d$ , fazendo com que a temperatura crítica aumente consideravelmente, como esquematizado na Fig. 2.4.

Japiassu e colaboradores [13] propõem uma abordagem ligeiramente diferente. A hibridização entra como um mecanismo que permite a troca de elétrons individuais entre as

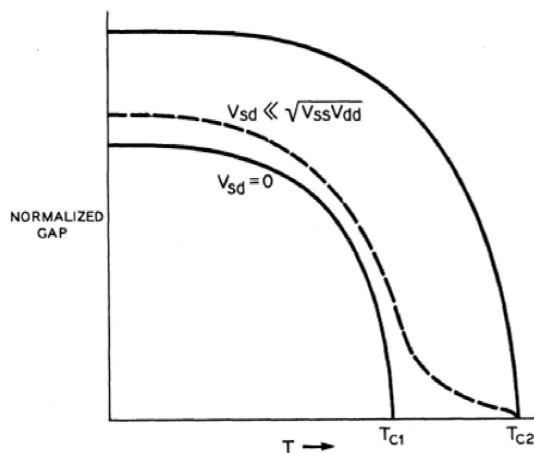


Figura 2.4: Gap em função da temperatura, obtido por Suhl *et al.* [12]. Quando a interação interbanda é nula, temos duas temperaturas críticas (linhas contínuas), mas quando esta interação é ligada temos uma temperatura crítica que coincide com a maior das anteriores (linha tracejada).

bandas. Desta forma,  $V$  pode influenciar as bandas mesmo no estado normal, gerando novas bandas com características que misturam as das bandas originais.

Em trabalhos mais recentes como o de Padilha e Continentino [14], são considerados sistemas supercondutores de duas bandas híbridas, com interações interbanda e/ou intrabanda, dentro da proposta de hibridização de Japiassu *et al.* [13]. Nestes casos é verificada a necessidade de um valor finito da interação atrativa entre as partículas, em contraste com a teoria BCS, na qual esse valor pode ser arbitrariamente pequeno. Os cálculos são feitos dentro de uma abordagem de campo médio. No caso interbanda, com o aumento da hibridização, é encontrada uma transição descontínua do estado supercondutor para o estado normal, devido a uma maior separação das superfícies de Fermi; e uma fase supercondutora meta estável, com superfície de Fermi sem gap. No caso intrabanda, encontram uma transição de fase quântica contínua, que pode ser verificada em experimentos sob pressão e associada a um ponto crítico quântico, como pode ser visto na Fig. 2.5. Assim, como em sistemas reais alguma hibridização está sempre presente devido à sobreposição



de funções de onda de partículas de diferentes bandas, um ponto crítico quântico pode existir em sistemas supercondutores multibandas com interação atrativa intrabanda.

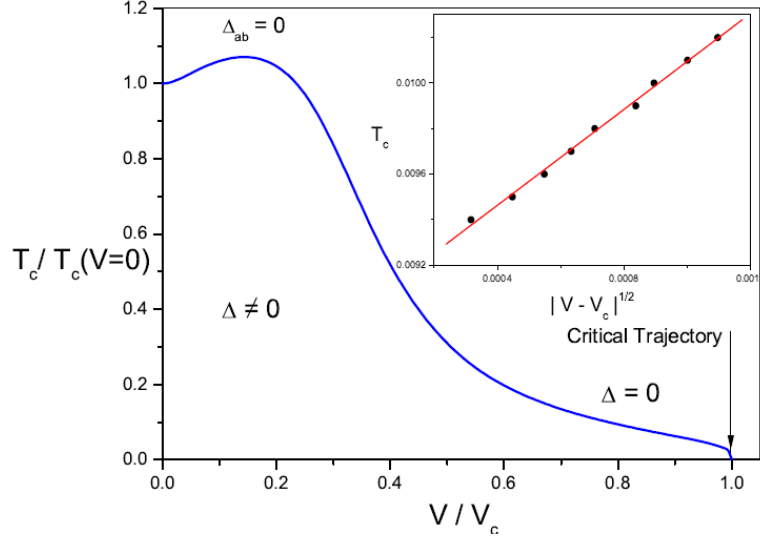


Figura 2.5: Diagrama de fases normalizado mostrando a temperatura crítica em função da hibridização obtido por Padilha e Continentino [14] para um sistema supercondutor de duas bandas com interação intrabanda. As transições através da linha crítica são contínuas e em  $V_c$  temos um ponto crítico quântico. No *inset* temos o comportamento de  $T_c$  próximo ao ponto crítico quântico supercondutor, onde verifica-se o expoente  $\psi = 1/2$ .

No caso com ambas as interações, verifica-se que voltamos a ter um gap na superfície de Fermi. Conhecendo o comportamento de  $T_c$  próximo ao ponto crítico quântico, vide *inset* da Fig. 2.5, pode-se encontrar o expoente  $\psi$ . Acontece que os expoentes encontrados são expoentes de campo médio, devido ao fato de os cálculos serem feitos dentro deste tipo de aproximação, que não inclui flutuações.

Pontos críticos quânticos em sistemas supercondutores têm sido recentemente estudados experimentalmente, principalmente em sistemas de férmions pesados envolvendo lantanídeos. Um exemplo é o férmion pesado  $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ , com  $T_c \approx 2.3K$ , que deixa de ser supercondutor a uma dopagem de  $x \approx 0,18$  e a uma pressão de aproximadamente  $13kbar$ , como mostrado na Fig. 2.6 [15]. É proposto que este tipo particular de dopagem aumente a hibridização entre os elétrons da banda localizada e os elétrons de condução

devido ao elétron extra que surge pela substituição de  $In$  por  $Sn$  [15].

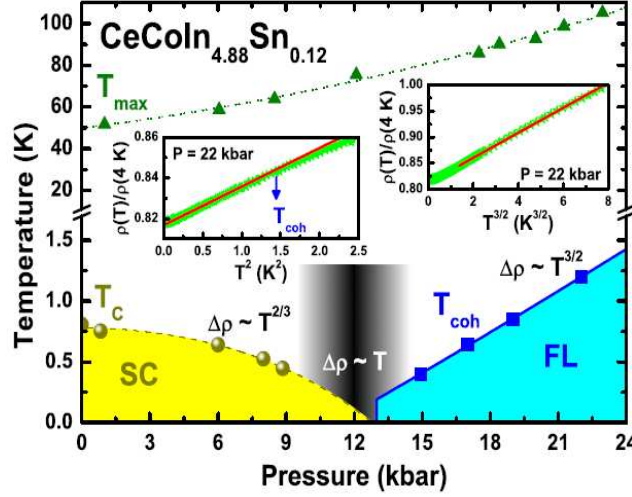


Figura 2.6: Diagrama de fases pressão *versus* temperatura para o composto  $CeCoIn_{4.88}Sn_{0.12}$  obtido por Ramos *et al.* [15].

Para estudar estes sistemas foi proposto um modelo de duas bandas híbridas, sendo que há interação atrativa entre as partículas da banda mais estreita (de partículas mais pesadas) [15]. Tal modelo mostra-se muito eficiente para este tipo de materiais já que pode-se contruir uma curva universal com quantidades físicas normalizadas, como mostrado na Fig. 2.7, que coincide muito bem com os dados experimentais.

É interessante citar aqui que a hibridização também está envolvida em outros tipos de transições de fase quânticas, como por exemplo transições metal-isolante [16], e entre fases de líquido de spin e fases Kondo [17].

Outro ponto interessante está no fato de que a pressão, além de poder simplesmente suprimir a fase supercondutora, é capaz de mudar a natureza das interações microscópicas que regem o mecanismo para a formação dos pares de Cooper. Miyake e colaboradores [19] estudando o composto  $CeCu_2Si_2$ , sugerem que este apresenta duas regiões supercondutoras distintas: a primeira a baixas pressões, sendo flutuações antiferromagnéticas o mecanismo para formação de pares de Cooper; e uma segunda região, a altas pressões, na

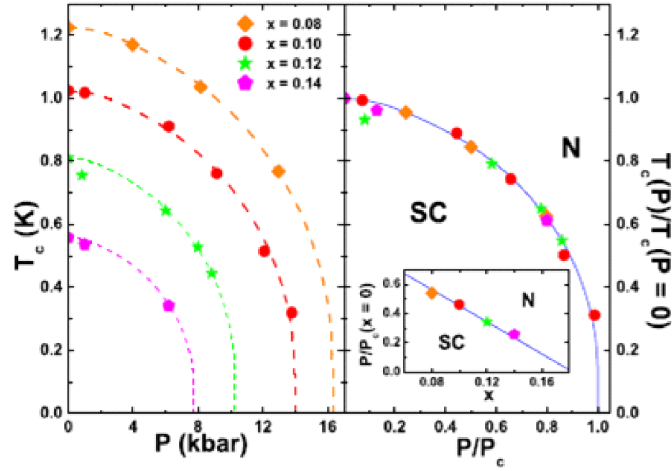


Figura 2.7: À esquerda, diagrama de fases temperatura crítica *versus* pressão com dados obtidos experimentalmente para o composto  $CeCoIn_{5-x}Sn_x$  para diversos valores de dopagem e curvas obtidas teoricamente por Ramos *et al.* [15]. À direita, o mesmo diagrama com as quantidades normalizadas.

qual flutuações de valência geram a fase supercondutora.

Neste contexto, vemos a necessidade de se estudar sistemas supercondutores num tratamento além campo médio a fim de verificar o comportamento das flutuações supercondutoras. Para tanto, propomos uma abordagem semelhante à de Stoner para o caso magnético, considerando uma perturbação no estado normal (desordenado) através de um campo fictício com dependência espacial e temporal que se acopla com o parâmetro de ordem supercondutor, e definindo uma espécie de susceptibilidade supercondutora associada a este campo. Tal tratamento recai no chamado critério de Thouless [18], sendo que o aparecimento de supercondutividade está relacionado com a divergência de uma susceptibilidade generalizada, de forma muito parecida com o critério de Stoner para o surgimento de ordem magnética. A partir desta susceptibilidade podemos analisar a dinâmica do sistema e encontrar o expoente dinâmico, o que não é possível dentro de uma abordagem de campo médio.

# Capítulo 3

## O Método das Funções de Green

O método das funções de Green (FG) é muito adequado para a análise de sistemas de muitas partículas, principalmente em casos nos quais há interação. Por serem uma generalização do conceito de função de correlação, a partir das FG podemos encontrar as energias de excitação do sistema ou estudar a resposta de um sistema a uma perturbação externa [20]. No Apêndice 1 são introduzidas as principais definições, de acordo com a notação do trabalho de Zubarev [21].

### 3.1 A equação de movimento para perturbação harmônica no tempo

Partindo do método da equação de movimento para funções de Green tradicional, podemos encontrar um método generalizado para tratar hamiltonianos com uma parte perturbativa envolvendo dependência temporal harmônica explícita. Para tanto, consideremos o caso de um hamiltoniano formado por uma parte independente do tempo,  $\mathcal{H}_0$ , e

uma parte com dependência temporal,  $\mathcal{H}_1(t) = \sum_j h_j(t)\mathcal{O}_j$ :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_j h_j(t)\mathcal{O}_j, \quad (3.1)$$

sendo  $\mathcal{O}_j$  um operador que não depende explicitamente do tempo na representação de Schrödinger, mas que depende do sítio, e  $h_j(t) = h e^{i(\omega_0 t + \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j)}$ , com  $\mathbf{q}$  um vetor de onda real e  $\omega_0$  uma frequência complexa com parte imaginária positiva e muito pequena, que pode ser escrita explicitamente como  $\omega_0 + i\eta$ ,  $\eta > 0$ , para que o processo de aplicação da perturbação seja adiabático e que em  $t_0 = -\infty$  o sistema esteja em equilíbrio [22]. No caso considerado,  $\mathcal{H}_1(t)$  deve ser entendido como uma perturbação externa ao sistema que se acopla a algum parâmetro de ordem de interesse. Trataremos a perturbação em primeira ordem em  $h$ , num estudo similar ao de Kadanoff [23], com a diferença de lidarmos apenas com propagadores de um corpo, e não de dois corpos.

Para analisarmos o que acontecerá com as médias estatísticas calculadas para o sistema perturbado, vamos supor que em  $t_0$ , antes da perturbação ser “ligada”, o sistema se encontre em um autoestado do hamiltoniano, denotado por  $|i, t_0\rangle$ :

$$\mathcal{H}_0|i, t_0\rangle = E_i|i, t_0\rangle. \quad (3.2)$$

Como na representação de Heisenberg os estados permanecem fixos e os operadores evoluem no tempo, e como a perturbação é aplicada de forma adiabática, não mudando o estado do sistema [24], o valor esperado para um operador  $A$  num tempo  $t$  será:

$$\langle A(t) \rangle_H = \langle i, t_0 | A(t) | i, t_0 \rangle, \quad (3.3)$$

mas como em geral o sistema não se encontra em um auto-estado bem determinado do hamiltoniano em  $t_0$ , considerando que o sistema esteja em equilíbrio térmico a temperatura  $T$  e potencial químico  $\mu$ , podemos determinar o valor esperado utilizando o ensemble grão-canônico:

$$\langle A(t) \rangle_H = \frac{\sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N)} \langle i, t_0 | A(t) | i, t_0 \rangle}{\sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N)}}. \quad (3.4)$$

Desta forma, as médias estatísticas ainda são realizadas sobre o ensemble do sistema não perturbado.

Para determinar, ao menos formalmente, a evolução dos operadores nesta nova situação, analisemos o problema na representação de interação. Os operadores na representação de interação,  $A_I(t)$ , se relacionam com os operadores na representação de Heisenberg,  $A(t)$ , por:

$$A(t) = \mathcal{U}^{-1}(t)A_I(t)\mathcal{U}(t), \quad (3.5)$$

onde  $\mathcal{U}(t)$  é dado por

$$\mathcal{U}(t) = e^{-i \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_1(t')}. \quad (3.6)$$

Nesta representação tanto os estados como os operadores evoluem, sendo que os últimos obedecem a:

$$i \frac{dA_I(t)}{dt} = [A_I(t), \mathcal{H}_0(t)]. \quad (3.7)$$

Utilizando esta representação, a média estatística pode ser escrita como:

$$\langle A(t) \rangle_H = \langle \mathcal{U}^{-1}(t)A_I(t)\mathcal{U}(t) \rangle = \frac{\sum_i e^{-\beta(\mathcal{H}_0 - \mu N)} \langle \mathcal{U}^{-1}(t)A_I(t)\mathcal{U}(t) \rangle}{\sum_i e^{-\beta(\mathcal{H}_0 - \mu N)}}. \quad (3.8)$$

Note que no expoente referente à média estatística temos apenas  $\mathcal{H}_0$ , e na representação de interação a equação de movimento é dada pela Eq. 3.7. Novamente neste caso a média é feita sobre o sistema em equilíbrio, e toda a dependência na perturbação, ou seja, a dependência temporal, encontra-se explicitada em  $\mathcal{U}(t)$ , que pode ser calculado.

Agora, a evolução temporal de um operador  $A(t)$  qualquer, na representação de Heisenberg, para o sistema perturbado é dada por:

$$\begin{aligned} i \frac{dA(t)}{dt} &= i \frac{d[\mathcal{U}^{-1}(t)A_I(t)\mathcal{U}(t)]}{dt} \\ &= i \frac{d\mathcal{U}^{-1}(t)}{dt} A_I(t)\mathcal{U}(t) + i\mathcal{U}^{-1}(t) \frac{dA_I(t)}{dt} \mathcal{U}(t) + i\mathcal{U}^{-1}(t)A_I(t) \frac{d\mathcal{U}(t)}{dt} \\ &= [A(t), \mathcal{H}_0(t)] + [A(t), \mathcal{H}_1(t)]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

É interessante destacar que agora  $\mathcal{H}_0$  também depende do tempo, já que o hamiltoniano obedece à mesma equação de movimento que  $A(t)$ , e a princípio não comuta com o operador  $\mathcal{O}_j$ .

Assim, conhecendo esta equação para a evolução dos operadores, a equação de movimento fica, derivando a FG em relação ao tempo (para o caso da FG retardada):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}G_{AB}(t, t') = & - i\delta(t - t')\langle\{A(t), B(t')\}\rangle \\ & - \theta(t - t')\langle\{[A(t), \mathcal{H}_0]|B(t')\}\rangle \\ & - h\theta(t - t')\sum_j\langle\{[A(t), \mathcal{O}_j]|B(t')\}\rangle e^{i(\omega_0 t + \mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j)}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Consideramos que a perturbação é aplicada adiabaticamente sobre o sistema, assim a variação do parâmetro de ordem devido à perturbação  $\mathcal{H}_1(t)$  oscilará com frequência  $\omega_0$ , de forma que esta dependência não entra diretamente na dinâmica dos operadores.

Agora, partindo da definição da transformada de Fourier no tempo da função de Green, derivando  $G_{AB}(t, t')$  em relação a  $t$  e notando que as FG não dependem mais simplesmente de  $t - t'$ :

$$\frac{d}{dt}G_{AB}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{de^{-i\omega t}}{dt} G_{AB}(\omega, t') = -i \int_{-\infty}^{\infty} \omega d\omega e^{-i\omega t} G_{AB}(\omega, t'). \quad (3.11)$$

Substituindo na Eq. (3.10), omitindo o índice  $t'$ , que é arbitrário:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \omega d\omega e^{-i\omega t} G_{AB}(\omega) = & \delta(t - t')\langle\{A(t), B(t')\}\rangle + G_{[A, \mathcal{H}_0]B}(t) \\ & + h \sum_j G_{[A, \mathcal{O}_j]B}(t) e^{i(\omega_0 t + \mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j)}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Escrevendo os  $G(t)$  em termos dos  $G(\omega)$  e escrevendo a função delta em sua forma integral, obtemos:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \omega d\omega e^{-i\omega t} G_{AB}(\omega) = & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \langle\{A(t), B(t)\}\rangle \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{[A, \mathcal{H}_0]B}(\omega) \\ & + h \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i(\omega - \omega_0)t} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} G_{[A, \mathcal{O}_j]B}(\omega). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Reindexando o último termo  $\omega - \omega_0 = \omega' \rightarrow \omega$ , podemos agora englobar a frequência da perturbação na dinâmica dos propagadores, através da seguinte equação de movimento:

$$\begin{aligned} \omega \ll A, B(t') \gg_{\omega} &= \frac{1}{2\pi} \langle \{A, B(t')\} \rangle + \ll [A, \mathcal{H}_0], B(t') \gg_{\omega} \\ &+ h \sum_j \ll [A, \mathcal{O}_j], B(t') \gg_{\omega+\omega_0} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

A exponencial  $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$  pode ser englobada nos propagadores ao fazermos a transformada de Fourier no espaço, reindexando a exponencial de forma análoga à frequência na Eq. 3.13, o que é feito normalmente.

É importante enfatizar que este resultado é válido apenas para o caso de perturbação harmônica, e que o operador  $\mathcal{O}_j$  na representação de Schrödinger e a constante  $h$  que aparecem na equação de movimento não dependem explicitamente do tempo. Além disso, a partir de agora passa a ser importante explicitar o índice  $\omega$  nos propagadores.

## 3.2 Os propagadores para perturbação harmônica no tempo

Como o interesse deste trabalho é analisar o efeito da perturbação sobre o sistema, vamos explicitá-la em termos de propagadores. Para isto associaremos ao sistema não perturbado, regido por  $\mathcal{H}_0$ , o que chamaremos de propagadores de ordem zero, que denotaremos como:

$$\ll \dots | \dots \gg^{(0)}, \quad (3.15)$$

e que serão determinados através da equação de movimento convencional. Ao sistema perturbado, regido por  $\mathcal{H}$ , associaremos propagadores tais que:

$$\ll \dots | \dots \gg^{\mathcal{H}} = \ll \dots | \dots \gg^{(0)} + \ll \dots | \dots \gg^{(1)}, \quad (3.16)$$



que serão obtidos a partir da equação de movimento proposta, incluindo explicitamente a dependência com a frequência. Os propagadores do tipo  $\ll \dots | \dots \gg^{(1)}$  serão chamados de propagadores de ordem um, e são propagadores em primeira ordem em  $h$ .

Teremos assim uma equação de movimento em termos de propagadores  $\ll \dots | \dots \gg^{(0)}$  e  $\ll \dots | \dots \gg^{(1)}$ , que poderá ser simplificada se conhecermos a equação de movimento para o sistema não perturbado que envolve apenas  $\ll \dots | \dots \gg^{(0)}$ . Desprezaremos termos nos quais aparecem multiplicações de dois fatores de primeira ordem, sejam eles propagadores de ordem um ou variações do parâmetro de ordem. Desta forma poderemos escrever os propagadores de ordem um em termos dos propagadores de ordem zero, determinando-os completamente. Naturalmente, estes  $\ll \dots | \dots \gg^{(1)}$  devem aparecer em termos de  $\ll \dots | \dots \gg^{(0)}$  multiplicados por quantidades pequenas envolvidas no problema, como por exemplo a própria amplitude de oscilação da perturbação, denotada por  $h$ . Além disso, como podemos escrever os propagadores de ordem um em termos dos de ordem zero, os  $\ll \dots | \dots \gg^{(1)}$  serão, dentro desta aproximação, funções de  $t - t'$ .

Como foi dito anteriormente, supomos que a perturbação é aplicada adiabaticamente ao sistema, de forma que a variação dos parâmetros de ordem oscilem de acordo com a frequência e o vetor de onda determinados pela perturbação. Considerando um parâmetro de ordem genérico  $\Phi$ , podemos calculá-lo para o sistema não perturbado, o que chamaremos de  $\Phi^0$ .

Para o sistema perturbado, podemos escrever:

$$\Phi^{\mathcal{H}} = \Phi^0 + \delta\Phi e^{i(\omega_0 t + \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j)}, \quad (3.17)$$

onde  $\delta\Phi$  é de primeira ordem em  $h$ .

Isto deve ser considerado na equação de movimento para o sistema perturbado e sempre que se fizer algum desacoplamento dos propagadores que gere um parâmetro de ordem  $\Phi$ .

Desta forma, trabalhando no estado normal mas em primeira ordem na perturbação (ou seja, com  $\Phi = 0$  mas  $\delta\Phi \neq 0$ ) os propagadores de ordem zero aparecerão multiplicados por  $e^{i\omega_0 t}$ . Este fator entrará na integral para o cálculo da função de correlação, e como

este envolve uma integral em  $\omega$  de  $-\infty$  a  $\infty$ , podemos reindexa-lo e resolver a integral normalmente, de modo análogo à reindexação feita na seção anterior.

Estas simplificações e propriedades dos propagadores de ordem um serão mais claramente expostas e comentadas ao longo dos cálculos no próximo capítulo.

# Capítulo 4

## O Modelo

### 4.1 O Hamiltoniano

A partir das motivações sugeridas no capítulo 2, neste trabalho vamos partir de um hamiltoniano do tipo modelo de Hubbard atrativo que represente um sistema de duas bandas: uma banda estreita,  $a$ , na qual há uma interação local efetiva atrativa entre suas quasi-partículas, cuja intensidade será denotada por  $U > 0$ , e uma banda larga,  $b$ , na qual não há interação. Não estamos interessados aqui em discutir a origem desta interação atrativa, que a princípio poderia ser o mecanismo usual pela interação elétron-fônon [9], ou por mecanismos menos usuais como flutuação de spin [25] ou flutuação de valência [26]. Além disso, consideramos uma hibridização,  $V$ , entre as mesmas, que é responsável pela transmutação de um tipo de partícula em outra, e ocorre devido à sobreposição das funções de onda de diferentes orbitais. O termo de hibridização faz com que tenhamos um parâmetro muito útil em mãos, já que pode ser relacionado, por exemplo, com a pressão externa, permitindo assim estudar o diagrama de fases temperatura *versus* pressão. Consideramos apenas o caso de supercondutividade de onda- $s$ .

No formalismo de segunda quantização tal hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^a a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^b b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} - \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^a n_{i-\sigma}^a + \sum_{i,j,\sigma} V_{ij} (b_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma}), \quad (4.1)$$

onde  $a_{i\sigma}^\dagger$  e  $a_{i\sigma}$  são os operadores de criação e destruição de partículas  $a$  no sítio  $i$  com spin  $\sigma$ ,  $t_{ij}^a$  representa a energia de *hopping*, referente ao movimento das partículas pela rede (definições análogas para a banda  $b$ ). Usamos  $\frac{U}{2}$  no hamiltoniano por conveniência, para não ser necessário carregar um fator 2 nos cálculos.

Além deste hamiltoniano que representa o sistema, propomos um segundo hamiltoniano que atuará como uma perturbação. Ele representa um campo fictício que se acopla ao parâmetro de ordem superconductor, induzindo supercondutividade, de modo análogo ao que acontece no caso magnético, no qual o acoplamento se dá entre o campo magnético e a magnetização. Para um tratamento mais genérico consideramos a perturbação com dependência espacial (com vetor de onda  $\mathbf{q}$ ) e temporal (com frequência  $\omega_0$ ). Tal hamiltoniano pode ser escrito, de forma simétrica, como:

$$\mathcal{H}_1 = -h \sum_i e^{i(\omega_0 t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i)} (a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}^\dagger + a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}), \quad (4.2)$$

onde  $h$  é a intensidade do campo fictício. Note que a perturbação só se acopla à banda na qual há interação atrativa. Um tratamento similar é feito por Côté e Griffin [27], que propõem um campo fictício como este para determinar uma função resposta referente aos pares de Cooper. A diferença do seu método, que os autores chamam de aproximação de fase aleatória generalizada, para o deste trabalho é que tratamos sempre funções de Green de um corpo, e a função resposta encontrada pode ser escrita como uma FG de dois corpos, mas sem supor nenhum desacoplamento extra.

É importante salientar aqui que trataremos estes hamiltonianos com o método da equação de movimento para FG, fazendo desacoplamentos dentro de uma abordagem de campo médio dos propagadores de muitos corpos. Apesar disso estamos além de um simples tratamento de campo médio por considerarmos uma dependência temporal na perturbação, sendo este o principal diferencial deste trabalho.

## 4.2 Propagadores de ordem zero ( $\hbar = 0$ )

Usando o método da equação de movimento, podemos encontrar os propagadores referentes ao parâmetro de ordem supercondutor. Encontremos primeiramente os propagadores na ausência da perturbação, para a banda na qual há interação. A primeira equação de movimento pode ser escrita como:

$$\omega \ll a_{i\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\langle \{ a_{i\sigma}^\dagger, a_{j\sigma'}^\dagger \} \rangle}{2\pi} + \ll [a_{i\sigma}^\dagger, \mathcal{H}_0] | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}. \quad (4.3)$$

Conhecendo as relações de anti-comutação entre os operadores fermiônicos:

$$\{ a_{i\sigma}^\dagger, a_{j\sigma'} \} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (4.4)$$

$$\{ a_{i\sigma}^\dagger, a_{j\sigma'}^\dagger \} = \{ a_{i\sigma}, a_{j\sigma'} \} = 0, \quad (4.5)$$

$$\{ a_{i\sigma}^\dagger, b_{j\sigma'}^\dagger \} = \{ a_{i\sigma}, b_{j\sigma'} \} = \{ a_{i\sigma}^\dagger, b_{j\sigma'} \} = \{ a_{i\sigma}, b_{j\sigma'}^\dagger \} = 0, \quad (4.6)$$

podemos escrever:

$$\begin{aligned} \omega \ll a_{i\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} &= - \sum_m t_{mi}^a \ll a_{m\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ &+ U \ll a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger a_{i-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ &- \sum_m V_{mi} \ll b_{m\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Assim, no segundo termo do lado direito da equação temos um propagador de ordem superior, no qual faremos um desacoplamento tipo BCS, dentro de uma aproximação de campo médio, explicitando a quantidade de interesse que é o parâmetro de ordem supercondutor  $\Delta_i^{aa} = \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger \rangle$ :

$$\begin{aligned} \ll a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger a_{i-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} &= \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger \rangle \ll a_{i-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ &= \Delta_i^{aa} \ll a_{i-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

de forma que obtemos:

$$\begin{aligned}
\omega \ll a_{i\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} &= - \sum_m t_{mi}^a \ll a_{m\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\
&+ U \Delta_i^{aa} \ll a_{i-\sigma} | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\
&- \sum_m V_{mi} \ll b_{m\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}. \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Neste ponto podemos fazer a transformada de Fourier, passando do espaço das posições para o espaço dos momentos. Usando as definições:

$$\epsilon_k^{a,b} = \sum_i t_{mi}^{a,b} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_m)}, \tag{4.10}$$

$$V_k = \sum_i V_{mi} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_m)}, \tag{4.11}$$

e supondo-as independentes de  $m$ , a equação de movimento fica:

$$(\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = U \Delta_k^{aa} \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} - V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}. \tag{4.12}$$

Assim, de forma análoga, precisamos encontrar os demais propagadores para poder resolver completamente o problema. Considerando as demais equações de movimento, e o parâmetro de ordem supercondutor real, temos o sistema  $SC_0^a$  para os propagadores referentes à banda  $a$  no estado supercondutor em ordem zero:

$$SC_0^a = \begin{cases} (\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = U \Delta_k^{aa} \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} - V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^a) \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'}}{2\pi} - U \Delta_k^{aa} \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ \quad + V_k \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega + \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = -V_k \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^b) \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = V_k \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}. \end{cases}$$

No estado normal, ( $\Delta_i^{aa} = 0$ ), temos o sistema  $N_0^a$ :

$$N_0^a = \begin{cases} (\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = -V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^a) \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'}}{2\pi} + V_k \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega + \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = -V_k \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^b) \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = V_k \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}, \end{cases}$$

que pode ser facilmente resolvido, encontrando-se:

$$\ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = 0, \quad (4.13)$$

$$\ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'} (\omega - \epsilon_k^b)}{2\pi [(\omega - \epsilon_k^a)(\omega - \epsilon_k^b) - V_k^2]}, \quad (4.14)$$

$$\ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = 0, \quad (4.15)$$

$$\ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'} V_k}{2\pi [(\omega - \epsilon_k^a)(\omega - \epsilon_k^b) - V_k^2]}. \quad (4.16)$$

Para a banda  $b$ , sem interação, temos o sistema  $SC_0^b$  de equações de movimento em ordem zero:

$$SC_0^b = \begin{cases} (\omega + \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = -V_k \ll a_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^b) \ll b_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'}}{2\pi} + V_k \ll a_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = U \Delta_k^{aa} \ll a_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ \quad - V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^a) \ll a_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = -U \Delta_k^{aa} \ll a_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ \quad + V_k \ll b_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}. \end{cases}$$

No estado normal temos o sistema  $N_0^b$  para estes propagadores em ordem zero:

$$N_0^b = \begin{cases} (\omega + \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = -V_k \ll a_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^b) \ll b_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'}}{2\pi} + V_k \ll a_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = -V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^a) \ll a_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = V_k \ll b_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}, \end{cases}$$

resolvendo o sistema encontramos:

$$\ll b_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = 0, \quad (4.17)$$

$$\ll b_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'} (\omega - \epsilon_k^a)}{2\pi [(\omega - \epsilon_k^a)(\omega - \epsilon_k^b) - V_k^2]}, \quad (4.18)$$

$$\ll a_{k\sigma}^\dagger | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = 0, \quad (4.19)$$

$$\ll a_{k-\sigma} | b_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'} V_k}{2\pi [(\omega - \epsilon_k^a)(\omega - \epsilon_k^b) - V_k^2]}. \quad (4.20)$$

Desta forma temos todos os propagadores envolvidos no problema para o sistema não perturbado no estado normal, ou seja, todos os propagadores de ordem zero. É importante frisar que estas equações são as mesmas obtidas por Padilha e Continentino [14] no caso intrabanda, num tratamento de campo médio, sem considerar flutuações, sendo que o estado normal é metálico.



### 4.3 Propagadores de primeira ordem em $\hbar$

Consideremos agora os propagadores de ordem um. Para o primeiro propagador teremos, como descrito no capítulo 3:

$$\ll a_{i\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg \rightarrow \ll a_{i\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} + \ll a_{i\sigma}^\dagger | a_{j\sigma'}^\dagger \gg^{(1)}, \quad (4.21)$$

e o parâmetro de ordem superconductor terá uma variação que oscila no tempo e no espaço de acordo com a frequência e o número de onda da perturbação devido ao campo fictício:

$$\Delta_i^{aa} \rightarrow \Delta_i^{aa} + \delta \Delta_i^{aa} e^{i(\omega_0 t - \mathbf{q}\mathbf{r}_i)}, \quad (4.22)$$

lembrando que tanto o propagador de ordem um quanto a variação do parâmetro de ordem são considerados em primeira ordem em  $\hbar$ . Desta forma a primeira equação de movimento fica:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} (\ll a_{i\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(0)} + \ll a_{i\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)}) = \\ - \sum_m t_{mi}^a (\ll a_{m\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(0)} + \ll a_{m\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)}) \\ + U (\Delta_i^{aa} + \delta \Delta_i^{aa} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i + i\omega_0 t}) (\ll a_{i-\sigma}(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(0)} + \ll a_{i-\sigma}(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)}) \\ - \sum_m V_{mi} (\ll b_{m\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(0)} + \ll b_{m\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)}) \\ + \hbar \tilde{\sigma} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i + i\omega_0 t} (\ll a_{i-\sigma}(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(0)} + \ll a_{i-\sigma}(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)}), \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde  $\tilde{\sigma}$  no último termo admite valores  $\pm 1$  para  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ .

Conhecendo a equação de movimento de ordem zero, podemos simplificar a equação de ordem um e, desprezando os termos de segunda ordem em  $\hbar$  (que envolvem multiplicações

de propagadores de ordem um por variações do parâmetro de ordem), obter:

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \ll a_{i\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)} &= - \sum_m t_{mi}^a \ll a_{m\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)} \\
&+ U \delta \Delta_i^{aa} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i + i\omega_0 t} \ll a_{i-\sigma}(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(0)} \\
&+ U \Delta_i^{aa} \ll a_{i-\sigma}(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)} \\
&- \sum_m V_{mi} \ll b_{m\sigma}^\dagger(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(1)} \\
&+ h\tilde{\sigma} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i + i\omega_0 t} \ll a_{i-\sigma}(t) | a_{j\sigma'}^\dagger(t') \gg^{(0)}. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

Fazendo a transformada de Fourier no tempo  $t$  e no espaço, obtemos uma equação de movimento que depende de propagadores de ordem um e de ordem zero, explicitando o índice  $\omega$  dos propagadores a partir de agora:

$$\begin{aligned}
(\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} &= U \delta \Delta_k^{aa} \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\
&+ U \Delta_k^{aa} \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\
&- V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\
&+ h\tilde{\sigma} \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)}. \tag{4.25}
\end{aligned}$$

De forma completamente análoga podemos encontrar as demais equações para os outros propagadores de ordem um, formando o sistema  $SC_1^a$  de propagadores referentes à banda  $a$  no estado supercondutor em primeira ordem:

$$SC_1^a = \left\{ \begin{array}{l} (\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = U\delta\Delta_k^{aa} \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ \quad + U\Delta_k^{aa} \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ \quad - V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ \quad + h\tilde{\sigma} \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^a) \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = -U\delta\Delta_k^{aa} \ll a_{(k-q)\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ \quad - U\Delta_k^{aa} \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ \quad + V_k \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ \quad + h\tilde{\sigma} \ll a_{(k-q)\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ (\omega + \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = -V_k \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ (\omega - \epsilon_k^b) \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = V_k \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \end{array} \right.$$

Tal sistema dará origem a um critério de instabilidade, que será obtido na próxima seção. Há um sistema  $SC_1^b$  similar a este, cujas equações não dão origem a um critério de instabilidade. Como neste trabalho estamos interessados em analisar a transição entre as fases normal e supercondutora não explicitaremos este sistema e trabalharemos a partir de agora apenas com o sistema  $SC_1^a$ .

### 4.3.1 Determinação do critério para o surgimento de supercondutividade

Até então trabalhamos no estado normal, ou seja, em ordem zero em  $h$ . Trabalhando agora em primeira ordem na perturbação, considerando  $\Delta^{aa} = 0$  e  $\delta\Delta^{aa} \neq 0$  no sistema de equações  $SC_1^a$ , chamando-o a partir de agora de  $P_1^a$ , temos:

$$P_1^a = \begin{cases} (\omega + \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = U\delta\Delta_k^{aa} \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ \quad -V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ \quad +h\tilde{\sigma} \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ (\omega - \epsilon_k^a) \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = -U\delta\Delta_k^{aa} \ll a_{(k-q)\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ \quad +V_k \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ \quad +h\tilde{\sigma} \ll a_{(k-q)\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} \\ (\omega + \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = -V_k \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} \\ (\omega - \epsilon_k^b) \ll b_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = V_k \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)}. \end{cases}$$

Substituindo as duas últimas equações nas duas primeiras obtemos:

$$\begin{aligned} [(\omega + \epsilon_k^a)(\omega + \epsilon_k^b) - V_k^2] \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = \\ U\delta\Delta_k^{aa}(\omega + \epsilon_k^b) \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} + h\tilde{\sigma}(\omega + \epsilon_k^b) \ll a_{(k-q)-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)}, \end{aligned} \quad (4.26)$$

e

$$\begin{aligned} [(\omega - \epsilon_k^a)(\omega - \epsilon_k^b) - V_k^2] \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = \\ -U\delta\Delta_k^{aa}(\omega - \epsilon_k^b) \ll a_{(k-q)\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)} + h\tilde{\sigma}(\omega - \epsilon_k^b) \ll a_{(k-q)\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_{\omega+\omega_0}^{(0)}, \end{aligned} \quad (4.27)$$

de onde podemos ver que, de acordo com os propagadores de ordem zero, o propagador  $\ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)}$  de ordem um na perturbação é nulo. Note também que da terceira equação do sistema  $P_1^a$  o propagador  $\ll b_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)}$  pode ser escrito em termos do propagador  $\ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)}$ , de forma que pode ocorrer o pareamento entre partículas de bandas diferentes, o que é possível devido ao termo de hibridização, mesmo na ausência de uma interação inter-banda efetiva.

Neste ponto é importante notar que o propagador  $\ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg_\omega^{(1)}$  de primeira ordem na perturbação pode ser escrito em termos dos propagadores de ordem zero. Desta

forma, podemos usar o teorema do salto normalmente sobre estes propagadores de ordem um (vide Eq. 6.27), já que eles são escritos em termos de propagadores do sistema em equilíbrio.

Escrevendo explicitamente os propagadores de ordem zero na Eq. 4.26, encontramos o único propagador de primeira ordem não nulo:

$$\begin{aligned} \ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k-q, -\sigma}^\dagger \gg_\omega^{(1)} = \\ U\delta\Delta_k^{aa} \frac{(\omega + \epsilon_k^b)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b)}{2\pi[(\omega + \epsilon_k^a)(\omega + \epsilon_k^b) - V_k^2][(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^a)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b) - V_{k-q}^2]} \\ + h\tilde{\sigma} \frac{(\omega + \epsilon_k^b)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b)}{2\pi[(\omega + \epsilon_k^a)(\omega + \epsilon_k^b) - V_k^2][(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^a)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b) - V_{k-q}^2]}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Calculando a função de correlação para  $\ll a_{k\sigma}^\dagger | a_{k-q, -\sigma}^\dagger \gg_\omega^{(1)}$  podemos escrever:

$$\delta\Delta_k^{aa} = U\delta\Delta_k^{aa} \chi_k^{aa}(q, \omega_0) + h\tilde{\sigma} \chi_k^{aa}(q, \omega_0), \quad (4.29)$$

onde

$$\begin{aligned} \chi_k^{aa}(q, \omega_0) = \\ F_\omega \left[ \frac{(\omega + \epsilon_k^b)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b)}{2\pi[(\omega + \epsilon_k^a)(\omega + \epsilon_k^b) - V_k^2][(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^a)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b) - V_{k-q}^2]} \right], \end{aligned} \quad (4.30)$$

que definimos como uma susceptibilidade supercondutora generalizada. Por conveniência vamos escrever esta susceptibilidade numa forma mais simétrica, fazendo  $k \rightarrow k + q/2$  e em seguida  $q/2 \rightarrow q$ :

$$\begin{aligned} \chi_k^{aa}(2q, \omega_0) = \\ F_\omega \left[ \frac{(\omega + \epsilon_{k+q}^b)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b)}{2\pi[(\omega + \epsilon_{k+q}^a)(\omega + \epsilon_{k+q}^b) - V_{k+q}^2][(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^a)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b) - V_{k-q}^2]} \right]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

De forma mais sucinta, podemos definir o propagador  $\ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)}$ , dado pela Eq. 4.14, como:

$$G_k^{aa}(\omega) = \ll a_{k-\sigma} | a_{k'\sigma'}^\dagger \gg^{(0)} = \frac{\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,-\sigma'} (\omega - \epsilon_k^b)}{2\pi [(\omega - \epsilon_k^a)(\omega - \epsilon_k^b) - V_k^2]}, \quad (4.32)$$

e assim podemos escrever a susceptibilidade generalizada como:

$$\chi_k^{aa}(2q, \omega_0) = -2\pi F_\omega [G_{k+q}^{aa}(-\omega) G_{k-q}^{aa}(\omega + \omega_0)]. \quad (4.33)$$

Voltando à Eq. 4.29 encontramos:

$$\delta\Delta^{aa} = h\tilde{\sigma} \frac{\chi^{aa}(2q, \omega_0)}{1 - U\chi^{aa}(2q, \omega_0)}, \quad (4.34)$$

ao somar em  $k$ , supondo a simetria translacional de  $\delta\Delta_k^{aa}$ , ou seja, sua independência de  $k$ , e onde  $\chi^{aa}(2q, \omega_0) = \sum_k \chi_k^{aa}(2q, \omega_0)$ .

Assim temos um critério de instabilidade:

$$1 - U\chi^{aa}(2q, \omega_0) = 0 \quad (4.35)$$

já que mesmo a campo nulo ( $h = 0$ ) teremos um parâmetro de ordem superconductor não nulo, ou seja, surgimento de supercondutividade. Não é possível encontrar tal critério para uma susceptibilidade referente à banda  $b$  ou para uma susceptibilidade mista, já que não há interação na banda  $b$ .

# Capítulo 5

## Análise da susceptibilidade generalizada

Analisemos agora mais a fundo a susceptibilidade generalizada  $\chi^{aa}(2q, \omega_0)$ . Para tanto, é conveniente definir antes novas relações de dispersão, o que chamaremos de relações de dispersão para as bandas híbridas, através das raízes do denominador da susceptibilidade:

$$[(\omega + \epsilon_{k+q}^b)(\omega + \epsilon_{k+q}^a) - V_{k+q}^2][(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^a) - V_{k-q}^2] = 0,$$

cujas raízes tem a forma geral (a menos de  $\omega_0$  e  $q$ ):

$$\omega_k^{a,b} = \frac{\epsilon_k^a + \epsilon_k^b}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_k^a - \epsilon_k^b}{2}\right)^2 + V_k^2}. \quad (5.1)$$

Note que no limite de hibridização nula ( $V \rightarrow 0$ ),  $\omega_k^{a,b}$  recaem nas relações de dispersão originais  $\epsilon_k^{a,b}$ , respectivamente.

Em termos dessas novas relações a susceptibilidade  $\chi_k^{aa}(2q, \omega_0)$  fica:

$$\chi_k^{aa}(2q, \omega_0) = F_w \left[ \frac{(\omega + \epsilon_{k+q}^b)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b)}{2\pi(\omega + \omega_{k+q}^b)(\omega + \omega_{k+q}^a)(\omega + \omega_0 - \omega_{k-q}^b)(\omega + \omega_0 - \omega_{k-q}^a)} \right]. \quad (5.2)$$

Separando em frações parciais:

$$\begin{aligned} \chi_k^{aa}(2q, \omega_0) &= F_w \left[ \frac{(\omega + \epsilon_{k+q}^b)(\omega + \omega_0 - \epsilon_{k-q}^b)}{2\pi} \times \right. \\ &\times \left. \left\{ \frac{A}{(\omega + \omega_{k+q}^a)} + \frac{B}{(\omega + \omega_{k+q}^b)} + \frac{C}{(\omega + \omega_0 - \omega_{k-q}^a)} + \frac{D}{(\omega + \omega_0 - \omega_{k-q}^b)} \right\} \right], \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde

$$A = \frac{1}{(\omega_{k+q}^b - \omega_{k+q}^a)(\omega_{k+q}^a + \omega_{k-q}^a - \omega_0)(\omega_{k+q}^a + \omega_{k-q}^b - \omega_0)}, \quad (5.4)$$

$$B = \frac{1}{(\omega_{k+q}^a - \omega_{k+q}^b)(\omega_{k+q}^b + \omega_{k-q}^a - \omega_0)(\omega_{k+q}^b + \omega_{k-q}^b - \omega_0)}, \quad (5.5)$$

$$C = \frac{1}{(\omega_{k-q}^a - \omega_{k-q}^b)(\omega_{k+q}^a + \omega_{k-q}^a - \omega_0)(\omega_{k+q}^b + \omega_{k-q}^a - \omega_0)}, \quad (5.6)$$

$$D = \frac{1}{(\omega_{k-q}^b - \omega_{k-q}^a)(\omega_{k+q}^a + \omega_{k-q}^b - \omega_0)(\omega_{k+q}^b + \omega_{k-q}^b - \omega_0)}. \quad (5.7)$$

Aplicando o teorema do salto, Eq. 6.27, a cada termo separadamente, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \chi_k^{aa}(2q, \omega_0) &= [A f(-\omega_{k+q}^a)(\omega_{k+q}^a - \epsilon_{k+q}^b)(\omega_{k+q}^a + \epsilon_{k-q}^b - \omega_0) \\ &+ B f(-\omega_{k+q}^b)(\omega_{k+q}^b - \epsilon_{k+q}^b)(\omega_{k+q}^b + \epsilon_{k-q}^b - \omega_0) \\ &+ C f(\omega_{k-q}^a)(\omega_{k-q}^a - \epsilon_{k-q}^b)(\omega_{k-q}^a + \epsilon_{k+q}^b - \omega_0) \\ &+ D f(\omega_{k-q}^b)(\omega_{k-q}^b - \epsilon_{k-q}^b)(\omega_{k-q}^b + \epsilon_{k+q}^b - \omega_0)], \end{aligned} \quad (5.8)$$

já que  $\omega_0$  é muito menor que as energias características do sistema.

Sabendo que:

$$f(-\omega) = 1 - f(\omega), \quad (5.9)$$



e escrevendo as constantes  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  explicitamente, temos:

$$\begin{aligned}
\chi_k^{aa}(2q, \omega_0) = & \\
& \frac{1}{(\omega_{k+q}^a + \omega_{k-q}^a - \omega_0)} \left[ [1 - f(\omega_{k+q}^a)] \frac{(\omega_{k+q}^a - \epsilon_{k+q}^b)(\omega_{k+q}^a + \epsilon_{k-q}^b - \omega_0)}{(\omega_{k+q}^b - \omega_{k+q}^a)(\omega_{k+q}^a + \omega_{k-q}^b - \omega_0)} \right. \\
& \quad \left. + f(\omega_{k-q}^a) \frac{(\omega_{k-q}^a - \epsilon_{k-q}^b)(\omega_{k-q}^a + \epsilon_{k+q}^b - \omega_0)}{(\omega_{k-q}^a - \omega_{k-q}^b)(\omega_{k+q}^b + \omega_{k-q}^a - \omega_0)} \right] \\
& + \frac{1}{(\omega_{k+q}^b + \omega_{k-q}^b - \omega_0)} \left[ [1 - f(\omega_{k+q}^b)] \frac{(\omega_{k+q}^b - \epsilon_{k+q}^a)(\omega_{k+q}^b + \epsilon_{k-q}^a - \omega_0)}{(\omega_{k+q}^a - \omega_{k+q}^b)(\omega_{k+q}^b + \omega_{k-q}^a - \omega_0)} \right. \\
& \quad \left. + f(\omega_{k-q}^b) \frac{(\omega_{k-q}^b - \epsilon_{k-q}^a)(\omega_{k-q}^b + \epsilon_{k+q}^a - \omega_0)}{(\omega_{k-q}^b - \omega_{k-q}^a)(\omega_{k+q}^a + \omega_{k-q}^b - \omega_0)} \right].
\end{aligned} \tag{5.10}$$

A esta altura é interessante verificar o limite de hibridização nula,  $V \rightarrow 0$ :

$$\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) = - \sum_k \frac{[1 - f(\epsilon_{k+q}^a) - f(\epsilon_{k-q}^a)]}{(\epsilon_{k+q}^a + \epsilon_{k-q}^a - \omega_0)}. \tag{5.11}$$

Este resultado está de acordo com o fato de termos bandas isoladas, assim a banda  $b$  não influenciaria na existência de supercondutividade na banda  $a$ . Este resultado é semelhante ao obtido por Thouless [18] e Nozières [29] e será desenvolvido e discutido no Apêndice. Esta função pode ser comparada à função de Lindhard (Eq. 2.51) do caso magnético, sendo que a diferença básica entre os dois casos é o sinal no denominador, que levará a diferenças fundamentais ao longo da análise da mesma. Dentro deste limite, no caso em que  $q \rightarrow 0$  e  $\omega_0 \rightarrow 0$ , substituindo esta susceptibilidade na equação para o critério, Eq. 4.35, temos exatamente a equação para determinação da temperatura crítica do caso BCS [9].

Outro limite interessante é o de  $q \rightarrow 0$  e  $\omega_0 \rightarrow 0$ :

$$\chi^{aa}(0, 0) = - \sum_k \frac{1}{(\omega_k^{b^2} - \omega_k^{a^2})} \left[ [1 - 2f(\omega_k^a)] \frac{(\epsilon_k^{b^2} - \omega_k^{a^2})}{2\omega_k^a} - [1 - 2f(\omega_k^b)] \frac{(\epsilon_k^{b^2} - \omega_k^{b^2})}{2\omega_k^b} \right], \tag{5.12}$$

no qual a susceptibilidade toma uma forma bem simplificada e podemos analisar o sistema como duas bandas híbridas separadas que contribuem para a supercondutividade. Sempre devemos recair nesta susceptibilidade após tratamento de  $\chi_k^{aa}(2q, \omega_0)$  para encontrá-la em termos de série de potências de  $q$  e  $\omega$  ao fazer o limite  $q \rightarrow 0$  e  $\omega \rightarrow 0$ . É importante notar que tal função, se colocada na equação para o critério de instabilidade obtido no capítulo anterior, Eq. 4.35, é idêntica à equação para a determinação da temperatura crítica encontrada pelo tratamento em campo médio [14].

## 5.1 Considerações sobre as bandas

Considerando as bandas inicialmente com relações de dispersão quadráticas na forma:

$$\epsilon_k^b = \frac{k^2}{2m_b} - \mu_b, \quad \epsilon_k^a = \frac{k^2}{2m_a} - \mu_a, \quad (5.13)$$

onde  $m = m_{a,b}$  e  $\mu = \mu_{a,b}$  são a massa e o potencial químico das partículas na banda  $a$  (estreita e formada por partículas mais pesadas) e na banda  $b$  (larga e formada por partículas mais leves), respectivamente.

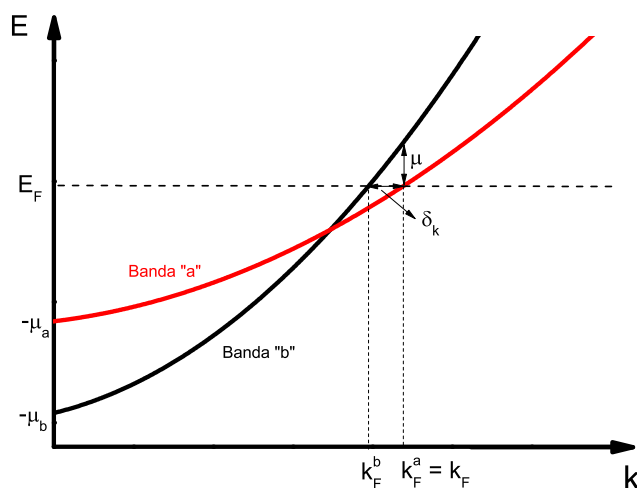


Figura 5.1: Representação esquemática das bandas.

Definindo  $k_F = k_F^a$  como o vetor de Fermi da banda mais estreita, com a energia de Fermi em  $E = 0$ , temos:

$$\epsilon_k^b = \frac{k^2}{2m_b} - \mu_b, \quad (5.14)$$

$$\epsilon_k^a = \frac{(k^2 - k_F^2)}{2m_a}, \quad (5.15)$$

onde  $k_F^a/2m_a = k_F^b/2m_b = \mu_a$ . Podemos reescrever convenientemente:

$$\epsilon_k^b = \frac{(k^2 - k_F^2)}{2m_b} \frac{m_a}{m_a} + \frac{k_F^2}{2m_b} \frac{m_a}{m_a} - \mu_b, \quad (5.16)$$

$$\epsilon_k^a = \frac{(k^2 - k_F^2)}{2m_a}, \quad (5.17)$$

e definir a grandeza  $\alpha = m_a/m_b$ , ou seja, a razão entre a massa das partículas mais pesadas e a massa das partículas mais leves, de forma que  $\alpha > 1$ . Assim temos:

$$\epsilon_k^b = \alpha \frac{(k^2 - k_F^2)}{2m_a} + \mu, \quad (5.18)$$

$$\epsilon_k^a = \frac{(k^2 - k_F^2)}{2m_a}, \quad (5.19)$$

onde definimos  $\mu = \alpha\mu_a - \mu_b = (k_F^{a2} - k_F^{b2})/2m_b > 0$ , que nos dá uma medida da diferença de energia entre as bandas em  $k = k_F = k_F^a$ , e está indicado na Fig. 5.1. Este é um parâmetro muito importante, e iremos comparar sua magnitude com a da hibridização.

Como, de acordo com a teoria BCS [9], o pareamento de partículas para o surgimento da supercondutividade ocorre principalmente em um pequeno intervalo em torno da energia de Fermi, podemos linearizar essas relações de dispersão neste intervalo, ou seja, no limite de  $k \rightarrow k_F$ :

$$\epsilon_k^b = \alpha \frac{(k + k_F)(k - k_F)}{2m_a} + \mu \approx \alpha v_F(k - k_F) + \mu, \quad (5.20)$$

$$\epsilon_k^a = \frac{(k + k_F)(k - k_F)}{2m_a} \approx v_F(k - k_F), \quad (5.21)$$

onde  $v_F = v_F^a = k_F^a/m_a$ . Note que  $\mu$  tem dimensão de energia, assim como  $v_F k$ , lembrando que estamos trabalhando com  $\hbar = 1$ , e os vetores de onda  $k$  tem dimensão de inverso de comprimento.

Podemos introduzir mais uma definição muito útil, o chamado *mismatch* das superfícies de Fermi, ou seja, a diferença entre os vetores de Fermi das duas bandas, também indicado na Fig. 5.1. Dentro desta linearização das relações de dispersão das bandas originais:

$$\delta_{k_F} = k_F^a - k_F^b = k_F - \left( k_F - \frac{\mu}{\alpha v_F} \right) = \frac{\mu}{\alpha v_F}, \quad (5.22)$$

de onde pode-se verificar a relação entre  $\mu$  e  $\delta_{k_F}$ .

Analisemos agora as relações de dispersão para as bandas híbridas:

$$\omega_k^{a,b} = \frac{\epsilon_k^a + \epsilon_k^b}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\epsilon_k^a - \epsilon_k^b}{2} \right)^2 + V_k^2}. \quad (5.23)$$

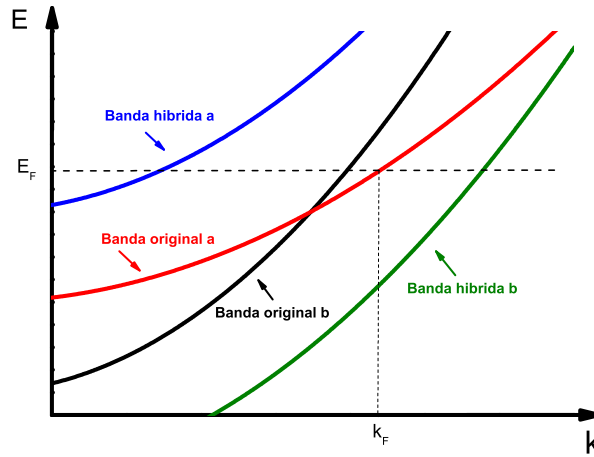


Figura 5.2: Representação esquemática das bandas híbridas no limite  $V \gg \mu$ .

Considerando a linearização em torno do vetor de Fermi, e a hibridização independente do vetor de onda:

$$\omega_k^{a,b} = \frac{v_F(1 + \alpha)(k - k_F) + \mu}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{v_F(1 - \alpha)(k - k_F) - \mu}{2} \right)^2 + V^2}, \quad (5.24)$$

podemos reescrever as relações de dispersão para as bandas híbridas no limite  $k \rightarrow k_F$ :

$$\omega_k^{a,b} = \frac{v_F(1 + \alpha)(k - k_F) + \mu}{2} \pm V \sqrt{1 + \left( \frac{\mu}{2V} \right)^2}, \quad (5.25)$$

pois o termo  $v_F(1 - \alpha)(k - k_F)$  terá no máximo a mesma ordem de grandeza que  $\mu$ , e agora considerar o limite  $V \gg \mu$ , desprezando a relação  $\mu/V$  em segunda ordem, de forma que obtemos:

$$\omega_k^{a,b} = \frac{v_F(1 + \alpha)(k - k_F) + \mu}{2} \pm V. \quad (5.26)$$

Assim, utilizando esta forma para as relações de dispersão das bandas híbridas, estamos trabalhando numa aproximação com precisão de  $\mu/V$ . A Fig. 5.2 é uma representação esquemática destas bandas no limite  $V \gg \mu$ .

## 5.2 Determinação da hibridização crítica

A partir destas considerações sobre as bandas podemos encontrar a hibridização crítica a partir de  $\chi^{aa}(0, 0)$ , já que associamos o surgimento de supercondutividade com a divergência da susceptibilidade estática. No limite de baixas temperaturas,  $\beta \rightarrow \infty$ , temos:

$$1 - 2f(\omega) = \tanh\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) = \begin{cases} 1, & \omega > 0, \\ -1, & \omega < 0. \end{cases} \quad (5.27)$$

Com base nas bandas descritas acima, a condição para que  $\omega_k^a$  seja sempre positiva e  $\omega_k^b$  sempre negativa no intervalo de integração é:

$$V > \frac{v_F(1 + \alpha)(k - k_F) + \mu}{2}, \quad (5.28)$$

o que admitiremos sempre acontecer já que estamos trabalhando no limite  $V \gg \mu$  e  $k \rightarrow k_F$ . Assim, no limite de baixas temperaturas, temos:

$$\chi^{aa}(0, 0) = \sum_k \frac{1}{(\omega_k^{b2} - \omega_k^{a2})} \left\{ \frac{(\epsilon_k^{b2} - \omega_k^{a2})}{2\omega_k^a} + \frac{(\epsilon_k^{b2} - \omega_k^{b2})}{2\omega_k^b} \right\}. \quad (5.29)$$

Escrevendo explicitamente as relações de dispersão:

$$\begin{aligned}\chi^{aa}(0,0) &= \sum_k \frac{1}{2V[v_F(1+\alpha)(k-k_F)+\mu]} \times \\ &\times \left\{ \frac{V}{2} \frac{v_F(1+3\alpha)(k-k_F)+3\mu+2V}{v_F(1+\alpha)(k-k_F)+\mu+2V} - \frac{V}{2} \frac{v_F(1+3\alpha)(k-k_F)+3\mu-2V}{v_F(1+\alpha)(k-k_F)+\mu-2V} \right\},\end{aligned}\quad (5.30)$$

reescrevendo,

$$\begin{aligned}\chi^{aa}(0,0) &= \sum_k \frac{1}{4[v_F(1+\alpha)(k-k_F)+\mu]} \times \\ &\times \left\{ \frac{v_F(1+3\alpha)(k-k_F)+3\mu+2V}{v_F(1+\alpha)(k-k_F)+\mu+2V} - (V \rightarrow -V) \right\},\end{aligned}\quad (5.31)$$

onde  $(V \rightarrow -V)$  significa que temos um termo idêntico ao primeiro, a menos de troca do sinal de  $V$ . Transformando a soma em uma integral em  $k$ , introduzindo um vetor de onda de *cutoff*,  $k_C$ , em torno do vetor de Fermi, temos:

$$\begin{aligned}\chi^{aa}(0,0) &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_{k_F-k_C}^{k_F+k_C} k^2 dk d\cos\theta d\phi \frac{1}{4[v_F(1+\alpha)(k-k_F)+\mu]} \times \\ &\times \left\{ \frac{v_F(1+3\alpha)(k-k_F)+3\mu+2V}{v_F(1+\alpha)(k-k_F)+\mu+2V} - (V \rightarrow -V) \right\},\end{aligned}\quad (5.32)$$

onde  $\mathcal{V}$  representa o volume do sistema. Definindo o limite de integração desta forma, podemos reescrever a condição dada pela Eq. 5.28:

$$V > \frac{v_F k_C (1+\alpha) + \mu}{2},\quad (5.33)$$

ou melhor,

$$k_C < \frac{2V - \mu}{v_F(1+\alpha)},\quad (5.34)$$

de forma que podemos entender que o vetor  $k_C$  limita a região de integração em torno de  $k_F$  de forma que os vetores de Fermi das bandas híbridas não são englobados, conforme esquematizado na figura abaixo, onde  $\delta_{k_F}$  é o *mismatch* entre as bandas originais, e  $d_b^h$  e  $d_a^h$  as distâncias dos vetores de Fermi das bandas híbridas ao vetor de Fermi da banda  $a$  original.

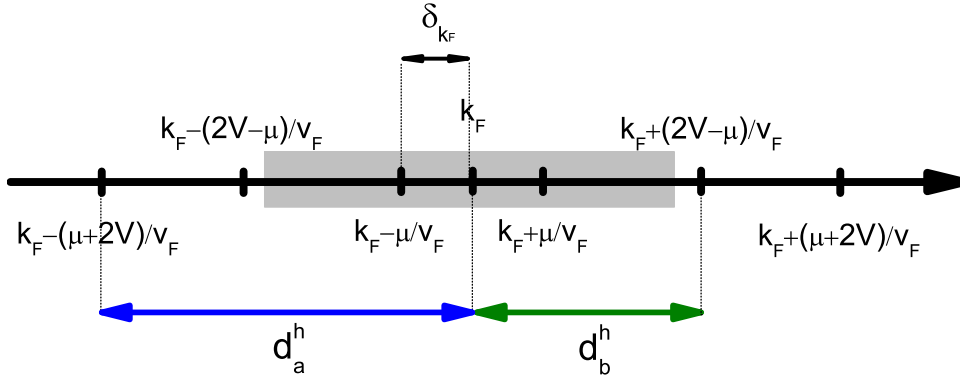


Figura 5.3: Esquema dos possíveis valores de  $k_C$ , determinados pela região destacada, de acordo com a consideração dada pela Eq. 5.34.

É conveniente definirmos uma nova variável  $x = v_F(k - k_F)$ , e a susceptibilidade em termos de  $x$  fica, já integrando a parte angular:

$$\chi^{aa}(0,0) = \frac{\mathcal{V}}{8\pi^2} \frac{k_F^2 (1+3\alpha)}{v_F (1+\alpha)^2} \left\{ \int_{-\kappa}^{\kappa} dx \frac{(x+b)}{(x+a)(x+c)} - (V \rightarrow -V) \right\}, \quad (5.35)$$

onde

$$\kappa = v_F k_C, \quad a = \frac{\mu}{(1+\alpha)}, \quad b = \frac{3\mu + 2V}{(1+3\alpha)}, \quad c = \frac{\mu + 2V}{(1+\alpha)}. \quad (5.36)$$

Calculando a integral:

$$\int_{-\kappa}^{\kappa} dx \frac{(x+b)}{(x+a)(x+c)} = \frac{(a-b) \ln\left(\frac{a+\kappa}{a-\kappa}\right) + (b-c) \ln\left(\frac{c+\kappa}{c-\kappa}\right)}{(a-c)}. \quad (5.37)$$

No limite em que estamos trabalhando  $a \gg \kappa$  e  $c \gg \kappa$ , de forma que podemos expandir os logaritmos:

$$\begin{aligned} \int_{-\kappa}^{\kappa} dx \frac{(x+b)}{(x+a)(x+c)} &= \frac{(a-b) \ln\left(\frac{1+\kappa/a}{1-\kappa/a}\right) + (b-c) \ln\left(\frac{1+\kappa/c}{1-\kappa/c}\right)}{(a-c)} \\ &\approx (a-b) 2\frac{\kappa}{a} + (b-c) 2\frac{\kappa}{c} \\ &\approx 2\frac{b\kappa}{ac}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Substituindo as constantes encontramos:

$$\chi^{aa}(0,0) = \frac{\mathcal{V}}{8\pi^2} \frac{k_F^2 (1+3\alpha)}{v_F (1+\alpha)^2} \left\{ \frac{2v_F k_C}{\mu} \frac{(1+\alpha)^2 (3\mu + 2V)}{(1+3\alpha)(\mu + 2V)} - (V \rightarrow -V) \right\}, \quad (5.39)$$

e subtraindo o termo em  $-V$ , no limite  $V \gg \mu$  desprezando termos da ordem de  $(\mu/V)^2$ , temos:

$$\chi^{aa}(0,0) = \frac{\mathcal{V}k_F^3 k_C}{2\pi^2 k_F V} = \frac{3}{16\pi^3} \frac{k_C}{k_F} \frac{1}{V}, \quad (5.40)$$

onde usamos o número de estados acessíveis por unidade de volume em três dimensões para eliminar o volume da relação,  $1/\mathcal{V} = \frac{8\pi}{3}k_F^3$ , já levando em conta a degenerescência de spin.

Do critério de instabilidade encontrado na Eq. 4.35 podemos determinar  $V_c$ :

$$V_C = \frac{3}{16\pi^3} \frac{k_C}{k_F} U. \quad (5.41)$$

Assim obtemos um  $V_c$  proporcional à intensidade da interação atrativa entre as partículas e dependente do intervalo de vetores de onda em que essa interação ocorre, determinado por  $k_C$ , de acordo com os resultados já obtidos em campo médio.

Analisando o valor de  $V_C$  encontrado sobre a condição dada pela Eq. 5.34:

$$V_C = \frac{3}{16\pi^3} \frac{v_F k_C}{E_F} U > \frac{v_F k_C (1 + \alpha) + \mu}{2}, \quad (5.42)$$

ou

$$v_F k_C > \frac{\mu}{2 \left( \frac{3}{16\pi^3} \frac{U}{E_F} - \frac{(1+\alpha)}{2} \right)}, \quad (5.43)$$

verifica-se que, para  $v_F k_C > 0$ , devemos ter  $U > \frac{(1+\alpha)8\pi^3}{3} E_F$ . Consequentemente temos um valor de  $U$  muito grande, o que pode ser entendido pois estamos partindo do limite de  $V$  muito grande, e assim esta condição deve ser satisfeita para que exista fase supercondutora. Desta forma, o limite no qual estamos trabalhando é um limite de acoplamento forte, mais conhecido como *strong coupling*.

Podemos entender este critério de uma outra forma: dado um valor de hibridização, ele nos diz qual o valor mínimo de  $U$ , ou seja,  $U_C$ , para que exista supercondutividade:

$$U_C = \frac{16\pi^3}{3} \frac{k_F}{k_C} V, \quad (5.44)$$



assim temos que na presença de hibridização é necessário que a intensidade da atração entre as partículas tenha um valor mínimo não nulo. Este resultado contrasta com o resultado usual obtido para supercondutividade tipo BCS, que ocorre para um valor de  $U$  arbitrariamente pequeno, o que será enfatizado no Apêndice.

É importante enfatizar neste ponto que se não consideramos a condição dada pela Eq. 5.33, recaímos na divergência da susceptibilidade encontrada no caso BCS, e assim  $U_C = 0$  e existe fase supercondutora para qualquer  $U$  não nulo, além de um amortecimento de Landau das excitações. Conhecemos assim o comportamento nos dois limites extremos, mas não no regime intermediário, o que é possível fazer numericamente, como por foi feito em [30]. Podemos então esquematizar pictoricamente o seguinte diagrama  $U_C$  versus  $V$ , sendo que a linha pontilhada é referente ao comportamento intermediário que não tratamos neste trabalho.

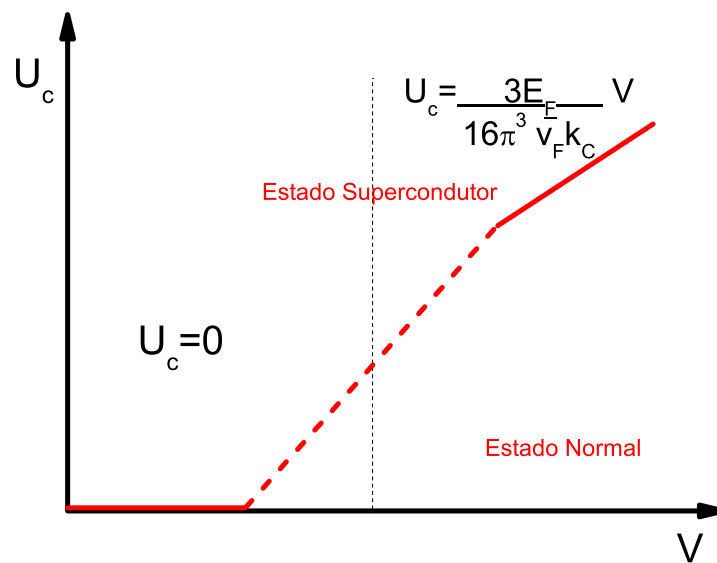


Figura 5.4: Diagrama pictórico de  $U_C$  em função de  $V$ .

### 5.3 Determinação da linha de transição

Para determinar a linha de transição, devemos analisar o critério dado pela Eq. 4.35 a temperatura não nula. Neste caso não é possível calcular a integral em  $k$  analiticamente como na seção anterior. Desta forma vamos determinar apenas a dependência com a temperatura de forma qualitativa.

Podemos passar da integral em  $k$  para a integral em energia utilizando o conceito de densidade de estados. Temos então uma integral que envolve a função de distribuição  $f(\epsilon)$  a baixas temperaturas, de forma que podemos fazer uma expansão de Sommerfeld [31] e obter:

$$\chi^{aa}(T, 0, 0) = \chi^{aa}(0, 0)(1 + \mathcal{A}T^2 + \dots), \quad (5.45)$$

onde  $\mathcal{A}$  é uma constante, e assim o critério pode ser reescrito como:

$$1 = U\chi^{aa}(T, 0, 0) = U\chi^{aa}(0, 0)(1 + \mathcal{A}T^2 + \dots) \quad (5.46)$$

Em termos de  $V_C$ , temos:

$$V - V_C = V_C\mathcal{A}T^2, \quad (5.47)$$

de onde podemos identificar o expoente de deslocamento  $\psi = 1/2$ .

Este resultado está de acordo com o obtido por Padilha e Continentino [14] numa aproximação de campo médio, sendo que os autores encontram esta dependência fazendo uma análise numérica, de acordo com a Fig. 2.5.

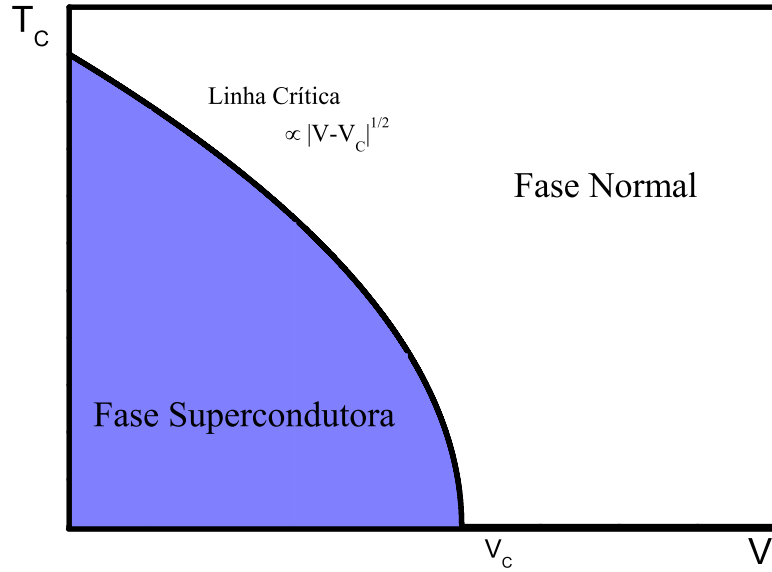


Figura 5.5: Diagrama pictórico da temperatura crítica *versus* hibridização.

Se verificássemos este critério considerando  $\chi^{aa}(T, 2q, \omega_0)$ , ou seja, a dependência em  $q$  e  $\omega_0$ , teríamos a influência das flutuações supercondutoras nesta linha a baixas temperaturas. Como esta análise exige um estudo mais aprofundado, iremos tratar em trabalhos futuros.

## 5.4 Determinação dos expoentes críticos

Sabemos que o expoente crítico dinâmico  $z$  pode ser determinado através do conhecimento das excitações do sistema. No caso, temos uma susceptibilidade dinâmica generalizada que depende de  $q$  e  $\omega_0$ , da qual podemos extrair informações sobre estas excitações. Para determinar o expoente, vamos explicitar a dependência de  $\chi^{aa}(2q, \omega_0)$  nestas variáveis através de uma expansão em série de potências. Para tanto, vamos escrever explicitamente a dependência em  $q$  das relações de dispersão:

$$\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^b = \frac{(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})^2}{2m_b} - \mu_b, \quad (5.48)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^a = \frac{(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})^2}{2m_a} - \mu_a, \quad (5.49)$$

que podem ser reescritas como:

$$\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^b = \frac{\mathbf{k}^2}{2m_b} - \mu_b + \frac{\mathbf{q}^2}{2m_b} \pm \frac{kq \cos \theta}{m_b}, \quad (5.50)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^a = \frac{\mathbf{k}^2}{2m_a} - \mu_a + \frac{\mathbf{q}^2}{2m_a} \pm \frac{kq \cos \theta}{m_a}, \quad (5.51)$$

usando a definição de  $\alpha$ , podemos escrever todas as massas explícitas como a massa da banda mais estreita:

$$\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^b = \epsilon_k^b + \alpha \left( \epsilon_q \pm \frac{kq \cos \theta}{m_a} \right), \quad (5.52)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^a = \epsilon_k^a + \left( \epsilon_q \pm \frac{kq \cos \theta}{m_a} \right), \quad (5.53)$$

onde definimos  $\epsilon_q = q^2/2m_a$ .

Para as relações de dispersão das bandas híbridas:

$$\omega_{k\pm q}^{a,b} = \frac{\epsilon_{k\pm q}^a + \epsilon_{k\pm q}^b}{2} \pm V \quad (5.54)$$

$$= \frac{\epsilon_k^a + \epsilon_k^b + (1 + \alpha) \left( \epsilon_q \pm \frac{kq \cos \theta}{m_a} \right)}{2} \pm V \quad (5.55)$$

$$= \omega_k^{a,b} + \frac{(1 + \alpha)}{2} \left( \epsilon_q \pm \frac{kq \cos \theta}{m_a} \right). \quad (5.56)$$

A partir da forma simétrica de  $\chi_k^{aa}(2q, \omega_0)$  dada pela Eq.5.10, e das relações de dispersão escritas acima, temos <sup>1</sup>:

$$\begin{aligned}
\chi^{aa}(2q, \omega_0) = & \sum_k \frac{1}{(\omega_k^b - \omega_k^a)(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \times \\
& \times \left\{ \frac{1}{(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \left[ [1 - f(\omega_{k+q}^a)] \left( \omega_k^a - \epsilon_k^b + \frac{(1 - \alpha)}{2}\epsilon_q + (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \times \right. \right. \\
& \quad \times \left( \omega_k^a + \epsilon_k^b - \omega_0 + \frac{(1 + 3\alpha)}{2}\epsilon_q + (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \\
& \quad + [f(\omega_{k-q}^a)] \left( \omega_k^a - \epsilon_k^b + \frac{(1 - \alpha)}{2}\epsilon_q - (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \times \\
& \quad \left. \left. \times \left( \omega_k^a + \epsilon_k^b - \omega_0 + \frac{(1 + 3\alpha)}{2}\epsilon_q - (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \right] \right. \\
& + \frac{1}{(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \left[ [1 - f(\omega_{k+q}^b)] \left( \omega_k^b - \epsilon_k^a + \frac{(1 - \alpha)}{2}\epsilon_q + (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \times \right. \\
& \quad \times \left( \omega_k^b + \epsilon_k^a - \omega_0 + \frac{(1 + 3\alpha)}{2}\epsilon_q + (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \\
& \quad + [f(\omega_{k-q}^b)] \left( \omega_k^b - \epsilon_k^a + \frac{(1 - \alpha)}{2}\epsilon_q - (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \times \\
& \quad \left. \left. \times \left( \omega_k^b + \epsilon_k^a - \omega_0 + \frac{(1 + 3\alpha)}{2}\epsilon_q - (1 - \alpha)\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{2m} \right) \right] \right\}. \tag{5.57}
\end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>A partir de agora escreveremos  $m_a = m$  por simplicidade.

Fazendo as mesmas considerações a respeito do limite de baixas temperaturas feitas para o caso  $\chi^{aa}(0, 0)$ , encontramos:

$$\begin{aligned}
\chi^{aa}(2q, \omega_0) &= \sum_k \frac{-1}{(\omega_k^b - \omega_k^a)(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \times \\
&\times \left\{ \frac{1}{(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \left[ (\omega_k^a - \epsilon_k^b)(\omega_k^a + \epsilon_k^b) - (\omega_k^a - \epsilon_k^b)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^a\epsilon_q \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q + \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m^2} \right) \cos^2 \theta + (2\omega_k^a - \omega_0) \frac{kq}{2m} (1 - \alpha) \cos \theta \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \left[ (\omega_k^b - \epsilon_k^b)(\omega_k^b + \epsilon_k^b) - (\omega_k^b - \epsilon_k^b)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^b\epsilon_q \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q + \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m^2} \right) \cos^2 \theta + (2\omega_k^b - \omega_0) \frac{kq}{2m} (1 - \alpha) \cos \theta \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{5.58}$$

Neste ponto é importante lembrar que a frequência  $\omega_0$  é uma quantidade complexa, que pode ser escrita como  $\omega_0 + i\eta$ , o que fará com que tenhamos uma parte real e uma parte imaginária para a susceptibilidade generalizada. Utilizando a relação 6.23 e lembrando que  $\eta$  é muito pequeno, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
Re[\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)] &= \sum_k \frac{-1}{(\omega_k^b - \omega_k^a)(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \times \\
&\times \left\{ \frac{1}{(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \left[ (\omega_k^a - \epsilon_k^b)(\omega_k^a + \epsilon_k^b) - (\omega_k^a - \epsilon_k^b)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^a\epsilon_q \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q + \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m^2} \right) \cos^2 \theta + (2\omega_k^a - \omega_0) \frac{kq}{2m} (1 - \alpha) \cos \theta \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \left[ (\omega_k^b - \epsilon_k^b)(\omega_k^b + \epsilon_k^b) - (\omega_k^b - \epsilon_k^b)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^b\epsilon_q \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q + \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m^2} \right) \cos^2 \theta + (2\omega_k^b - \omega_0) \frac{kq}{2m} (1 - \alpha) \cos \theta \right] \right\},
\end{aligned} \tag{5.59}$$

e

$$\begin{aligned}
Im[\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)] &= \sum_k \frac{-\pi}{(\omega_k^b - \omega_k^a)} \times \\
&\times \left\{ \left[ \frac{\delta(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} + \frac{\delta(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \right] \times \right. \\
&\times \left[ (\omega_k^a - \epsilon_k^b)(\omega_k^a + \epsilon_k^b) - (\omega_k^a - \epsilon_k^b)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^a\epsilon_q - 2\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q \right. \\
&\quad \left. + \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m^2} \right) \cos^2 \theta + (2\omega_k^a - \omega_0) \frac{kq}{2m} (1 - \alpha) \cos \theta \right] \\
&+ \left[ \frac{\delta(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(\omega_k^b + \omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} + \frac{\delta(\omega_k^b + \omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \right] \times \\
&\times \left[ (\omega_k^b - \epsilon_k^a)(\omega_k^b + \epsilon_k^a) - (\omega_k^b - \epsilon_k^a)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^b\epsilon_q - 2\alpha\epsilon_k^a\epsilon_q \right. \\
&\quad \left. + \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m^2} \right) \cos^2 \theta + (2\omega_k^b - \omega_0) \frac{kq}{2m} (1 - \alpha) \cos \theta \right] \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{5.60}$$

Analisando primeiramente a parte real, passando da soma em  $k$  para uma integral, as integrais angulares são facilmente calculadas, resultando em:

$$\begin{aligned}
Re[\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)] &= -\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{k_F - k_C}^{k_F + k_C} k^2 dk \frac{1}{(\omega_k^b - \omega_k^a)(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \times \\
&\times \left\{ \frac{2[(\omega_k^a - \epsilon_k^b)(\omega_k^a + \epsilon_k^b) - (\omega_k^a - \epsilon_k^b)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^a\epsilon_q - 2\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q] + \frac{2}{3}(1 - \alpha)\frac{k^2 q^2}{4m^2}}{(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \right. \\
&+ \left. \frac{2[(\omega_k^b - \epsilon_k^a)(\omega_k^b + \epsilon_k^a) - (\omega_k^b - \epsilon_k^a)\omega_0 + (1 + \alpha)\omega_k^b\epsilon_q - 2\alpha\epsilon_k^a\epsilon_q] + \frac{2}{3}(1 - \alpha)\frac{k^2 q^2}{4m^2}}{(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \right\}.
\end{aligned} \tag{5.61}$$

Escrevendo explicitamente as relações de dispersão, já no limite de  $k \rightarrow k_F$ , chegamos a uma integral semelhante à obtida no caso  $\chi^{aa}(0,0)$ , já escrita em termos da mesma variável  $x$ :

$$\begin{aligned} \text{Re}[\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)] &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \frac{k_F^2}{2V^*v_F} \frac{1}{(1+\alpha)^2} \left\{ [V(1+3\alpha) + ((1+\alpha)^2 - 4)q^2] \times \right. \\ &\times \left. \int_{-\kappa}^{\kappa} dx \frac{(x+b)}{(x+a)(x+c)} + (V \rightarrow -V) \right\}, \end{aligned} \quad (5.62)$$

sendo que  $V^*$  não muda de sinal no termo  $-V$  e agora as constantes são:

$$\kappa = v_F k_C, \quad (5.63)$$

$$a = \frac{\mu - \omega_0 + (1+\alpha)\epsilon_q}{(1+\alpha)}, \quad (5.64)$$

$$b = \frac{V(3\mu + 2V) - 2V\omega_0 + [(\mu + 2V)(1+\alpha) - 4\alpha\mu + \frac{2(1-\alpha)^2}{3}k_F v_F]\epsilon_q}{V(3+\alpha) + ((1+\alpha)^2 - 4)\epsilon_q}, \quad (5.65)$$

$$c = \frac{\mu + 2V - \omega_0 + (1+\alpha)\epsilon_q}{(1+\alpha)}. \quad (5.66)$$

Note que no limite  $q \rightarrow 0$  e  $\omega_0 \rightarrow 0$  retomamos as constantes do caso  $\chi^{aa}(0,0)$ . Utilizando o resultado da seção anterior para a integral no limite em que estamos trabalhando, substituindo as constantes e fazendo uma expansão em série de potências para  $q$  e  $\omega_0$  pequenos, encontramos:

$$\text{Re}[\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)] = \frac{3}{16\pi^3} \frac{k_C}{k_F} \frac{1}{V} \left[ 1 + \frac{\omega_0}{2\mu} - \frac{1}{4} \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 \frac{k_F}{\delta_{k_F}} F(\alpha, V, \mu, k_F) \right], \quad (5.67)$$

onde  $F(\alpha, V, \mu, k_F) = 10(1+\alpha) + \frac{(1-\alpha)^2}{3} \frac{\mu}{V} \frac{E_F}{V}$ , e escrevemos a massa como  $m = k_F/v_F$ .



Analisando agora a parte imaginária, passando da soma em  $k$  para uma integral, já realizando a integração nos ângulos, encontramos:

$$\begin{aligned}
Im[\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)] &= -\frac{\mathcal{V}}{4\pi} \int_k \frac{k^2 dk}{(\omega_k^b - \omega_k^a)} \times \\
&\times \left\{ \left[ \frac{\delta(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} + \frac{\delta(\omega_k^a + \omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(2\omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \right] \times \right. \\
&\times \left[ 2(\omega_k^a - \epsilon_k^b)(\omega_k^a + \epsilon_k^b) - 2(\omega_k^a - \epsilon_k^b)\omega_0 + 2(1 + \alpha)\omega_k^a\epsilon_q - 4\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q + \frac{2}{3} \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m} \right) \right] \\
&\quad + \left[ \frac{\delta(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(\omega_k^b + \omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} + \frac{\delta(\omega_k^b + \omega_k^a - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)}{(2\omega_k^b - \omega_0 + (1 + \alpha)\epsilon_q)} \right] \times \\
&\times \left. \left[ (\omega_k^b - \epsilon_k^b)(\omega_k^b + \epsilon_k^b) - 2(\omega_k^b - \epsilon_k^b)\omega_0 + 2(1 + \alpha)\omega_k^b\epsilon_q - 4\alpha\epsilon_k^b\epsilon_q + \frac{2}{3} \left( (1 - \alpha)^2 \frac{k^2 q^2}{4m} \right) \right] \right\}. \tag{5.68}
\end{aligned}$$

Podemos fazer a integral em  $k$  diretamente devido à presença das funções delta de Dirac. Para tanto, precisamos analisar o valor de  $k_C$  em termos dos parâmetros  $\mu$  e  $V$ , ou seja, se os valores de  $k$  determinados pelas deltas estarão ou não dentro do limite de integração.

Dentro do limite que consideramos na Eq.5.33 temos duas situações a analisar. Numa primeira situação temos  $\mu/v_F < k_C < (2V - \mu)/v_F$ , de forma que  $k_C$  engloba apenas os vetores de Fermi das bandas originais. A parte imaginária da susceptibilidade neste caso pode ser escrita como:

$$Im[\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)] = \frac{3}{64\pi^2 V} \frac{(1 - \alpha)}{(1 + \alpha)} \left[ \alpha \frac{\delta_{k_F}}{k_F} - \frac{\omega_0}{E_F} - \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 \frac{(1 - \alpha)}{2} \right]. \tag{5.69}$$

Note que se  $\alpha = 1$  a parte imaginária neste caso é nula, e que sempre há um amortecimento finito das excitações mesmo se  $q \rightarrow 0$  e  $\omega_0 \rightarrow 0$ . Isto pode ser entendido já que neste caso a interação  $U$  atua num intervalo onde se encontram partículas “normais” da banda sem interação, pela influência da hibridização.

Conhecendo a dependência em  $q$  e  $\omega_0$  da parte real e imaginária de  $\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta)$ , podemos escrever o critério  $1 - U\chi^{aa}(2q, \omega_0 + i\eta) = 0$  explicitamente, identificando  $\chi^{aa}(0, 0)$ :

$$1 = U\chi^{aa}(0, 0) \left\{ 1 + \frac{\omega_0}{2\mu} - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{E_F}{4\mu} F(\alpha, V, \mu, k_F) + i \frac{\pi k_F (1 - \alpha)}{4 k_C (1 + \alpha)} \left[ \alpha \frac{\delta_{k_F}}{k_F} - \frac{\omega_0}{E_F} - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{(1 - \alpha)}{2} \right] \right\}. \quad (5.70)$$

Reescrevendo em termos da distância ao ponto crítico  $V - V_C$ , utilizando as Eqs. 5.40 e 5.41:

$$V_C - V = V_C \left\{ \frac{\omega_0}{2\mu} - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{E_F}{4\mu} F(\alpha, V, \mu, k_F) + i \frac{\pi k_F (1 - \alpha)}{4 k_C (1 + \alpha)} \left[ \alpha \frac{\delta_{k_F}}{k_F} - \frac{\omega_0}{E_F} - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{(1 - \alpha)}{2} \right] \right\}, \quad (5.71)$$

de modo que, no PCQ ( $V = V_C$ ) temos excitações com a seguinte dispersão:

$$\omega_0 = \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{E_F}{2} F(\alpha, V, \mu, k_F) - i \frac{\pi \mu k_F (1 - \alpha)}{2 k_C (1 + \alpha)} \left[ \alpha \frac{\delta_{k_F}}{k_F} - \frac{\omega_0}{E_F} - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{(1 - \alpha)}{2} \right] \quad (5.72)$$

Este tipo de relação de dispersão com amortecimento finito não é usual, e deixaremos a discussão deste caso para um trabalho futuro.

Numa segunda situação, se  $k_C < \mu/v_F$ , fisicamente temos que  $k_C$  não engloba nenhuma das bandas além da banda  $a$  original em torno do qual a integração em  $k$  é feita. Lembrando que  $k_C$  nos fornece a menor escala de energia do sistema, esta é a situação mais interessante. Numericamente encontramos que a parte imaginária da susceptibilidade neste caso é nula, ou seja, não há amortecimento das excitações.

Podemos escrever o critério explicitamente:

$$1 = U\chi^{aa}(0, 0) \left\{ 1 + \frac{\omega_0}{2\mu} - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{E_F}{4\mu} F(\alpha, V, \mu, k_F) \right\}, \quad (5.73)$$

ou ainda,

$$V_C - V = V_C \left\{ \frac{\omega_0}{2\mu} - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \frac{E_F}{4\mu} F(\alpha, V, \mu, k_F) \right\}, \quad (5.74)$$

de modo que, no PCQ ( $V = V_C$ ) temos excitações com a seguinte dispersão:

$$\omega_0 = \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 \frac{E_F}{2} F(\alpha, V, \mu, k_F). \quad (5.75)$$

Reescrevendo de forma mais conveniente:

$$\omega_0 = \frac{q^2}{4m_a} F(\alpha, V, \mu, k_F), \quad (5.76)$$

podemos identificar:

$$m_{exc} = \frac{2m_a}{F(\alpha, V, \mu, k_F)}, \quad (5.77)$$

ou seja, as excitações possuem uma massa que é duas vezes a massa das partículas da banda mais estreita (mais pesada) normalizada pela quantidade  $F(\alpha, V, \mu, k_F)$ , de forma que  $m_{exc}$  é menor que a massa das partículas da banda mais larga.

No capítulo 2, foi mostrado que o expoente dinâmico  $z$  pode ser obtido através de uma simples análise de escala, de acordo com os trabalhos de Hertz [3]. Da forma da susceptibilidade generalizada encontrada, temos que ela apresenta dependência linear na frequência e quadrática no comprimento de onda. A dependência da energia livre com estes parâmetros deve ser da mesma forma, já que a susceptibilidade generalizada pode ser encontrada como uma derivada segunda no campo fictício (variável conjugada a esta grandeza). Assim podemos supor uma transformação de escala para os vetores de onda  $\tilde{q} = qc^l$  e uma transformação para as frequências  $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 c^{lz}$  onde  $z$  é o expoente dinâmico que queremos determinar. A susceptibilidade reescrita convenientemente e reescalada fica, sabendo que a energia reescala com  $c^{2l}$ :

$$\begin{aligned} \chi^{aa}(2q, \omega_0) &= \chi^{aa}(0, 0) \left\{ 1 + \frac{\omega_0}{2\mu} - \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 \frac{E_F}{4\mu} F(\alpha, V, \mu, k_F) \right\} \\ &\Downarrow \\ \tilde{\chi}^{aa}(2q, \omega_0) &= \tilde{\chi}^{aa}(0, 0) \left\{ 1 + \frac{\tilde{\omega}_0}{2\tilde{\mu}} - \left( \frac{\tilde{q}}{\tilde{k}_F} \right)^2 \frac{\tilde{E}_F}{4\tilde{\mu}} F(\alpha, \tilde{V}, \tilde{\mu}, \tilde{k}_F) \right\} \\ &= \chi^{aa}(0, 0) c^{-2l} \left\{ 1 + \frac{\omega_0}{2\mu} c^{(z-2)l} - \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 \frac{E_F}{4\mu} F(\alpha, V, \mu, k_F) \right\}. \end{aligned} \quad (5.78)$$

Como a energia livre reescalada deve ser proporcional à energia original (no caso a susceptibilidade generalizada), ou seja, invariante de escala, temos que os termos entre colchetes devem reescalar por um mesmo fator. Para que isso aconteça temos a condição:

$$c^{(z-2)l} = 1 \quad \Rightarrow \quad z = 2, \quad (5.79)$$

de forma que podemos determinar o expoente dinâmico  $z = 2$ . Este é um resultado muito importante, pois não pode ser previsto por estudos dentro de uma aproximação de campo médio. Este expoente possibilita a previsão do comportamento do sistema a baixas temperaturas e sobre a trajetória crítica. Conhecendo o expoente  $z$  podemos determinar a dimensão efetiva:

$$d_{eff} = \begin{cases} 4, & \text{se } d = 2 \\ 5, & \text{se } d = 3 \end{cases}$$

Note que essas dimensões efetivas estão acima da dimensão crítica superior,  $d_{cs} = 4$ , e desta forma os expoentes críticos apresentarão valores de expoentes de campo médio, de acordo com a tabela 2.1.

Da definição de linha de *crossover*, temos que o expoente que governa esta linha é  $\phi = \nu z$ , assim neste caso temos  $\phi = 1$ , já que o valor de  $\nu$  em campo médio é  $1/2$ . Finalmente, com estas informações podemos construir um diagrama representativo de tipo de transição de fase quântica para sistemas supercondutores multi-bandas com hibridização.

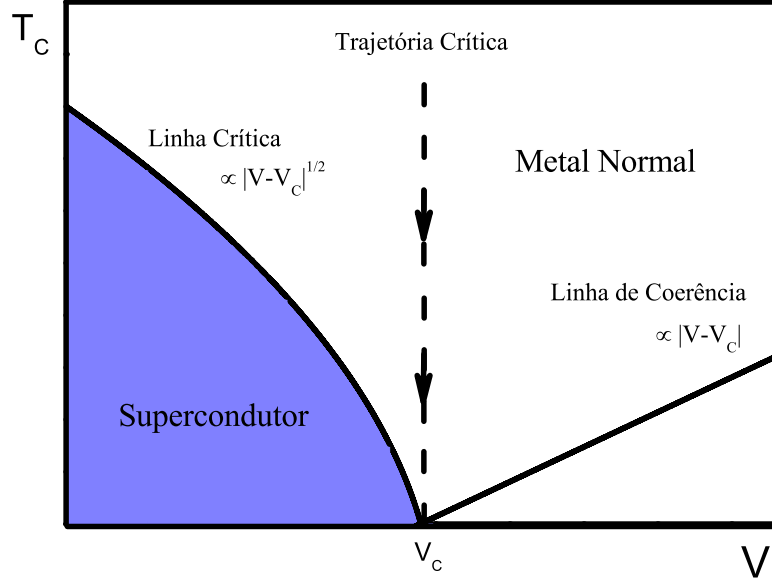


Figura 5.6: Diagrama de fases para sistemas supercondutores multibandas com hibridização.

Podemos agora prever o comportamento do calor específico sobre a trajetória crítica a baixas temperaturas. Lembrando que a energia livre é definida como:

$$f \propto |g(T)|^{2-\alpha} \tilde{F}(t), \quad (5.80)$$

onde  $\tilde{F}(t)$  é uma função de escala e  $t = T/|g(T)|^{\nu z}$ . Para a energia livre não divergir ao longo desta trajetória, em  $g = 0$ , temos que a função de escala deve ser uma potência de  $t$  de forma a cancelar a dependência explícita em  $g(T)$ . Se supomos

$$\tilde{F}(t) = \left( \frac{T}{|g(T)|^{\nu z}} \right)^x, \quad (5.81)$$

utilizando a relação de hiperescala, Eq. 2.40, temos que  $x = (d+z)/z$ , de forma que a dependência com a temperatura fica:

$$f \propto T^{(d+z)/z}. \quad (5.82)$$

O calor específico pode ser encontrado derivando-se a energia livre em relação à temperatura:

$$\frac{C}{T} = -\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \propto T^{(d+z)/z-2} = T^{(d-z)/z}, \quad (5.83)$$

de forma que, para o valor de  $z = 2$  temos:

$$C \propto \begin{cases} T \ln T & \text{se } d = 2, \\ T^{3/2} & \text{se } d = 3, \end{cases}$$

o que é esperado de uma excitação bosônica com relação de dispersão quadrática, como é verificado também no caso de fônons [6].

Ainda pelo motivo de nossas excitações se tratarem de bósons com relação de dispersão quadrática, podemos comparar nossas excitações com o caso já bem conhecido de mágnons para estudar o espalhamento de elétrons e analisar o comportamento da resistividade. No caso de mágnons sabe-se que a dependência da resistividade com a temperatura apresenta dois comportamentos: um referente ao espalhamento elástico com dependência em  $T^2$ , e outro referente ao espalhamento inelástico com dependência em  $T^{3/2}$  [32].

Trabalhos relativos à supressão da fase supercondutora por desordem também encontram o expoente dinâmico  $z = 2$ , [10][11]. Apesar da concordância no resultado do expoente dinâmico, [11] analisam seus sistemas no limite de acoplamento fraco, e somente [10] analisa também o caso de acoplamento forte. Ramazashvili e Coleman encontram no limite de acoplamento forte em  $d = 3$  que a correção na resistividade teria o comportamento  $T^{1/4}$ , e além disso preveem a correção no coeficiente do calor específico com dependência na temperatura como  $T^{3/2}$ , de acordo com o encontrado neste trabalho. Já Mineev e Sigrist analisam o limite de acoplamento fraco e encontram uma correção para a resistividade em  $T^{-1/2}$  com a temperatura, e outras grandezas termodinâmicas que não podem ser analisadas partindo do tipo de análise que propomos.

Estes comportamentos, do calor específico e da resistividade, podem ser verificados experimentalmente, sendo então uma maneira de validar nosso estudo (apesar da medida de calor específico ser extremamente difícil de ser realizada). Particularmente para o material  $CeCoIn_{5-x}Sn_x$  verifica-se o comportamento com a temperatura acima da linha de coerência como  $T^{3/2}$ , de acordo com os resultados encontrados neste trabalho em três dimensões.

# Capítulo 6

## Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho formalizamos um método para a introdução de perturbações com dependência temporal na prescrição tradicional do método da equação de movimento para funções de Green. Esta metodologia mostrou-se de acordo com outros métodos já extensivamente utilizados, pois obtivemos os mesmos resultados para as funções resposta que aqui chamamos de susceptibilidade generalizada. A vantagem deste tratamento é lidarmos apenas com propagadores de um corpo e não de dois corpos como nos demais casos.

Utilizando este método analisamos um sistema supercondutor multi-banda com uma perturbação dependente do tempo, o que permitiu estudar o sistema além de um tratamento de campo médio. Expandindo a susceptibilidade generalizada em potências de  $q$  e  $\omega_0$  foi possível verificar como a frequência entra nas excitações e encontrar um expoente dinâmico  $z = 2$ . Pudemos determinar a forma da linha crítica e da linha de coerência a baixas temperaturas e estudar o comportamento do calor específico sobre a trajetória crítica, encontrando  $C \propto T \ln T$  para  $d = 2$  e  $C \propto T^{3/2}$  para  $d = 3$ . Quanto ao comportamento da resistividade, temos uma dependência de  $T^2$  e  $T^{3/2}$  devido a espalhamento elástico e inelástico, respectivamente, em  $d = 3$ .

Este trabalho motiva um estudo mais aprofundado de como a perturbação influenciará a forma da linha crítica a baixas temperaturas, além de estudos de outros sistemas através deste formalismo para perturbações dependentes do tempo, como por exemplo sistemas com interação inter-banda ou simetrias do parâmetro de ordem além da simetria de onda- $s$ .



# Apêndice 1

Seguindo a notação do trabalho de Zubarev [21], definimos as funções de Green retardada e avançada como

$$G_{r,a}(t, t') \equiv \ll A(t) | B(t') \gg^{r,a} = \mp i \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_T, \quad (6.1)$$

onde  $\theta(t - t')$  é a função de Heaviside:

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 0, & t < t', \\ 1, & t > t'. \end{cases}$$

$A(t)$  e  $B(t)$  são operadores na representação de Heisenberg, que obedecem <sup>1</sup>

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}, \quad (6.2)$$

com  $\mathcal{H} = H - \mu N$ , sendo  $A$  o operador na representação de Schrödinger,  $\mu$  o potencial químico e  $N$  o operador número. É importante explicitar que tal hamiltoniano é independente do tempo, ou seja, representa um sistema em equilíbrio. O comutador pode ser expresso como

$$[A, B] = AB - \eta BA, \quad (6.3)$$

onde  $\eta = \pm$ , dependendo se estamos tratando de bósons ou férmions. A média  $\langle \dots \rangle_T$  é realizada sobre o ensemble grão-canônico

$$\langle A \rangle_T \equiv \Xi^{-1} \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} A \}, \quad (6.4)$$

---

<sup>1</sup>Ao longo deste trabalho assumimos  $\hbar = 1$ .

com

$$\Xi \equiv \text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}}\}, \quad (6.5)$$

sendo  $\Xi$  a função de partição e  $\beta = 1/k_B T$ , onde  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura.

## 6.1 A equação de movimento

A partir desta definição, conhecendo a equação de Heisenberg para operadores:

$$i\frac{dA(t)}{dt} = [A(t), \mathcal{H}], \quad (6.6)$$

pode-se encontrar a equação de movimento para as FG, derivando a definição em relação ao tempo

$$i\frac{d}{dt} \ll A(t)|B(t') \gg^{r,a} = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t)] \rangle_{T+} \ll [A(t), \mathcal{H}]|B(t') \gg^{r,a}. \quad (6.7)$$

onde  $\delta(t-t')$  é a função delta de Dirac, que é a derivada da função de Heaviside.

Como essencialmente as FG envolvem traços de operadores, considerando a propriedade cíclica do traço, temos que estas funções dependem apenas de  $(t-t')$ . Desta forma é possível encontrar uma representação espectral para as mesmas. Definindo a transformada de Fourier e sua inversa:

$$G_{r,a}(t-t') = \ll A(t)|B(t') \gg^{r,a} = \int_{-\infty}^{\infty} G_{r,a}(\Omega) e^{-i\Omega(t-t')} d\Omega, \quad (6.8)$$

$$G_{r,a}(\Omega) = \ll A|B \gg_{\Omega}^{r,a} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{r,a}(\tau) e^{i\Omega\tau} d\tau, \quad (6.9)$$

a equação de movimento também pode ser escrita como:

$$\Omega \ll A|B \gg_{\Omega}^{r,a} = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B] \rangle_{T+} \ll [A, \mathcal{H}]|B \gg_{\Omega}^{r,a}, \quad (6.10)$$

para isso a função delta foi escrita em sua forma integral:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega e^{-i\Omega t}. \quad (6.11)$$

## 6.2 A função de correlação

Além da equação de movimento, uma outra identidade essencial é a que relaciona as FG com as funções de correlação temporal, definidas como

$$F_{AB}(t - t') \equiv \langle A(t)B(t') \rangle_T. \quad (6.12)$$

Realizando explicitamente as médias sobre o ensemble grão canônico, somando sobre os autoestados de  $\mathcal{H}$  denotados por:

$$\mathcal{H}|\mu\rangle = E_\mu|\mu\rangle, \quad (6.13)$$

temos:

$$\begin{aligned} F_{BA}(t' - t) &= \langle B(t')A(t) \rangle_T = \Xi^{-1} \sum_{\nu} \langle \nu | e^{-\beta\mathcal{H}} B(t') A(t) | \nu \rangle \\ &= \Xi^{-1} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | e^{i\mathcal{H}t'} B e^{-i\mathcal{H}t'} | \mu \rangle \langle \mu | e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} \\ &= \Xi^{-1} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | B | \mu \rangle \langle \mu | A | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} e^{i(E_\mu - E_\nu)(t - t')}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Analogamente:

$$F_{AB}(t - t') = \Xi^{-1} \sum_{\nu\mu} \langle \nu | A | \mu \rangle \langle \mu | B | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} e^{i(E_\nu - E_\mu)(t - t')}. \quad (6.15)$$

Note que trocando  $\nu$  por  $\mu$  em  $F_{BA}(t' - t)$  obtemos:

$$F_{BA}(t - t') = \Xi^{-1} \sum_{\mu\nu} \langle \mu | B | \nu \rangle \langle \nu | A | \mu \rangle e^{-\beta E_\mu} e^{i(E_\nu - E_\mu)(t - t')}. \quad (6.16)$$

Introduzindo também a definição de densidade espectral como a transformada de Fourier da função de correlação:

$$\begin{aligned} J_{BA}(w) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(\tau) e^{-iw\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi} \Xi^{-1} \sum_{\mu\nu} \langle \mu | B | \nu \rangle \langle \nu | A | \mu \rangle e^{-\beta E_\mu} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_\nu - E_\mu - w)\tau} d\tau \\ &= \Xi^{-1} \sum_{\mu\nu} \langle \mu | B | \nu \rangle \langle \nu | A | \mu \rangle e^{-\beta E_\mu} \delta(E_\nu - E_\mu - w), \end{aligned} \quad (6.17)$$

temos

$$J_{BA}(\omega) = J_{AB}(\omega)e^{\beta\omega}, \quad (6.18)$$

com  $\omega = E_\nu - E_\mu$ . Assim, com apenas uma das densidades espectrais podemos encontrar ambas as funções de correlação,  $F_{AB}(t - t')$  e  $F_{BA}(t' - t)$ .

Relacionando agora as transformadas de Fourier das FG com sua representação espectral, escrevendo-a explicitamente dentro da integral:

$$\begin{aligned} G_{r,a}(\Omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\Omega\tau} (\mp i) \theta(\tau) \{ \langle A(\tau)B(0) \rangle_T - \eta \langle B(0)A(\tau) \rangle_T \} \\ &= \pm \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\Omega-\omega)\tau} \theta(\tau). \end{aligned} \quad (6.19)$$

Para realizar a integral em  $\tau$ , usemos a seguinte representação integral para  $\theta(\tau)$ :

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iX\tau}}{X \pm i\epsilon} dX \quad \epsilon \rightarrow 0^+, \quad (6.20)$$

com o sinal  $\pm$  para o caso da FG retardada ou avançada, respectivamente. Realizando a integral em  $\tau$ :

$$G_{r,a}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{\Omega - \omega \pm i\epsilon}. \quad (6.21)$$

Assim, vemos que a FG retardada pode ser analiticamente extendida ao semiplano complexo superior, e a FG avançada ao inferior, cobrindo assim todo o plano complexo. Com isso podemos escrever:

$$G(\Omega + i\epsilon) - G(\Omega - i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \left\{ \frac{1}{\Omega - \omega + i\epsilon} - \frac{1}{\Omega - \omega - i\epsilon} \right\} d\omega. \quad (6.22)$$

Usando a relação:

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = P \left( \frac{1}{2\pi} \right) \mp i\pi\delta(x), \quad (6.23)$$

temos:

$$\begin{aligned} G(\Omega + i\epsilon) - G(\Omega - i\epsilon) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \delta(\Omega - \omega) d\omega \\ &= -i (e^{\beta\Omega} - \eta) J(\Omega). \end{aligned} \quad (6.24)$$

Assim:

$$J(\Omega) = i \frac{G(\Omega + i\epsilon) - G(\Omega - i\epsilon)}{e^{\beta\Omega} - \eta}, \quad \epsilon \rightarrow 0^+, \quad (6.25)$$

a partir da qual obtemos:

$$F_{BA}(t' - t) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)}{e^{\beta\omega} - \eta} e^{i\omega(t'-t)} d\omega. \quad (6.26)$$

Desta forma, é possível relacionar a intensidade espectral com as transformadas de Fourier das FG. Escrevendo de forma mais conveniente para o caso de férmions e operadores hermitianos, temos o chamado teorema do salto:

$$\langle A(t)B(0) \rangle_T = F_\omega [\ll A(t)|B(0) \gg] = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \ll A(t)|B(0) \gg_\omega e^{-i\omega t} f(\omega) d\omega, \quad (6.27)$$

onde  $f(\omega)$  é a distribuição de Fermi-Dirac:

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (6.28)$$

## Apêndice 2

A partir do resultado para o caso de apenas uma banda (hibridização nula), temos uma susceptibilidade semelhante à encontrada por Thouless [18] por meio de teoria de perturbação. Tal susceptibilidade é escrita na forma:

$$\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) = \sum_k \frac{[1 - f(\epsilon_{k+q}^a) - f(\epsilon_{k-q}^a)]}{(\epsilon_{k+q}^a + \epsilon_{k-q}^a - \omega_0)}, \quad (6.29)$$

sendo  $\omega_0$  uma frequência complexa, dada por  $\omega_0 + i\eta$ . Escrevendo as  $f(\omega)$  em termos de tangentes hiperbólicas:

$$\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) = \frac{1}{2} \sum_k \frac{\tanh\left(\frac{\beta\epsilon_{k+q}^a}{2}\right) + \tanh\left(\frac{\beta\epsilon_{k-q}^a}{2}\right)}{(\epsilon_{k+q}^a + \epsilon_{k-q}^a - \omega_0)}. \quad (6.30)$$

Passando de soma para integral usando a prescrição usual e escrevendo as relações de dispersão quadráticas explicitamente:

$$\begin{aligned} \chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) &= \frac{1}{2} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_{k_F - k_C}^{k_F + k_C} k^2 dk \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi \times \\ &\times \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 + 2kq \cos \theta + q^2)\right) + \tanh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 - 2kq \cos \theta + q^2)\right)}{\frac{1}{m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2) - \omega_0}. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Integrando em  $\phi$  e separando as integrais em  $\cos \theta$  e  $k$ :

$$\begin{aligned} \chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) &= \frac{1}{2} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{k_F - k_C}^{k_F + k_C} k^2 dk \frac{1}{\frac{1}{m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2) - \omega_0} \int_{-1}^1 d \cos \theta \times \\ &\times \left\{ \tanh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 + 2kq \cos \theta + q^2)\right) + \tanh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 - 2kq \cos \theta + q^2)\right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Renomeando de forma conveniente:

$$x = \cos \theta, \quad (6.33)$$

$$\mathcal{A} = \frac{\beta k q}{2m_a}, \quad (6.34)$$

$$\mathcal{B} = \frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2), \quad (6.35)$$

a integral em  $\cos \theta$  fica:

$$\begin{aligned} I_{\cos \theta} &= \int_{-1}^1 dx \tanh(\mathcal{B} + \mathcal{A}x) + \tanh(\mathcal{B} - \mathcal{A}x) \\ &= \left[ \frac{\ln \cosh(\mathcal{B} + \mathcal{A}x)}{\mathcal{A}} - \frac{\ln \cosh(\mathcal{B} - \mathcal{A}x)}{\mathcal{A}} \right]_{-1}^1 \\ &= \frac{2}{\mathcal{A}} \ln \left[ \frac{\cosh(\mathcal{B} + \mathcal{A})}{\cosh(\mathcal{B} - \mathcal{A})} \right] \\ &= \frac{4m_a}{\beta k q} \ln \left[ \frac{\cosh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2 + 2kq)\right)}{\cosh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2 - 2kq)\right)} \right]. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Voltando a  $\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)$ :

$$\begin{aligned} \chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) &= \frac{2m_a}{\beta q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{k_F - k_C}^{k_F + k_C} k dk \frac{1}{\frac{1}{m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2) - \omega_0} \ln \left[ \frac{\cosh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2 + 2kq)\right)}{\cosh\left(\frac{\beta}{4m_a}(k^2 - k_F^2 + q^2 - 2kq)\right)} \right]. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Como estamos integrando num pequeno intervalo em torno de  $k_F$ , é conveniente trabalhar com as relações de dispersão linearizadas  $(k^2 - k_F^2)/m_a \approx v_F(k - k_F)$ :

$$\begin{aligned} \chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) &= \frac{2m_a}{\beta q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{k_F - k_C}^{k_F + k_C} k_F dk \frac{1}{(2v_F(k - k_F) + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0)} \times \\ &\times \ln \left[ \frac{\cosh\left(\frac{\beta}{2}\left(v_F(k - k_F) + \frac{q^2}{2m_a} + \frac{kq}{m_a}\right)\right)}{\cosh\left(\frac{\beta}{2}\left(v_F(k - k_F) + \frac{q^2}{2m_a} - \frac{kq}{m_a}\right)\right)} \right]. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Fazendo a mudança de variável  $y = v_F(k - k_F)$ :

$$\begin{aligned} \chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) &= \frac{2m_a k_F}{\beta v_F q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{-v_F k_C}^{v_F k_C} dy \frac{1}{(2y + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0)} \times \\ &\times \ln \left[ \frac{\cosh\left(\frac{\beta}{2}\left(y + \frac{q^2}{2m_a} + \frac{kq}{m_a}\right)\right)}{\cosh\left(\frac{\beta}{2}\left(y + \frac{q^2}{2m_a} - \frac{kq}{m_a}\right)\right)} \right]. \end{aligned} \quad (6.39)$$

No limite de baixas temperaturas,  $\beta \rightarrow \infty$ , podemos aproximar:

$$\ln \cosh(\dots) \approx |\dots|, \quad (6.40)$$

de forma que:

$$\begin{aligned} \chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) &= \frac{m_a k_F}{v_F q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{-v_F k_C}^{v_F k_C} dy \frac{1}{(2y + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0)} \times \\ &\times \left[ \left| y + \frac{q^2}{2m_a} + \frac{kq}{m_a} \right| - \left| y + \frac{q^2}{2m_a} - \frac{kq}{m_a} \right| \right]. \end{aligned} \quad (6.41)$$

A esta altura é conveniente já separarmos as partes real e imaginária de  $\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)$ , lembrando que  $\omega_0$  é uma quantidade complexa que pode ser escrita como  $\omega_0 + i\eta$  e usando a Eq.6.23:

$$\begin{aligned} Re[\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)] &= \frac{m_a k_F}{v_F q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{-v_F k_C}^{v_F k_C} dy \frac{1}{(2y + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0)} \times \\ &\times \left[ \left| y + \frac{q^2}{2m_a} + \frac{kq}{m_a} \right| - \left| y + \frac{q^2}{2m_a} - \frac{kq}{m_a} \right| \right], \end{aligned} \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} Im[\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)] &= -\pi \frac{m_a k_F}{v_F q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{-v_F k_C}^{v_F k_C} dy \delta(2y + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0) \times \\ &\times \left[ \left| y + \frac{q^2}{2m_a} + \frac{kq}{m_a} \right| - \left| y + \frac{q^2}{2m_a} - \frac{kq}{m_a} \right| \right]. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Analisando primeiramente a parte real, a integral em  $y$  pode ser feita de forma mais conveniente se fizermos mais uma mudança de variável,  $v = 2y + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0$ :

$$\begin{aligned} Re[\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)] &= \frac{m_a k_F}{2v_F q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \int_{-2v_F k_C + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0}^{2v_F k_C + \frac{q^2}{m_a} - \omega_0} dv \frac{1}{v} \times \\ &\times \left[ \left| \frac{v}{2} + \frac{\omega_0}{2} + \frac{k_F q}{m_a} \right| - \left| \frac{v}{2} + \frac{\omega_0}{2} - \frac{kq}{m_a} \right| \right]. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Esta integral pode ser facilmente resolvida tomando-se cuidado com os módulos no integrando, o que nos levará a separar a integral em duas regiões, dependendo do sinal do



mesmo. Calculando as integrais e impondo os limites de integração obtemos:

$$Re[\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)] = \frac{\mathcal{V}k_F^3}{8\pi^2} \left\{ -\frac{2}{E_F} \frac{q}{k_F} + \frac{\omega_0}{E_F} \frac{1}{v_F q} \ln \left( \frac{[(q/k_F)^2 E_F - \omega_0]^2 - v_F^2 k_C^2}{4 (q/k_F)^2 E_F^2 - \omega_0^2} \right) - \frac{2}{E_F} \ln \left( \frac{2 (q/k_F) E_F - \omega_0}{2 (q/k_F) E_F + \omega_0} \right) \right\}. \quad (6.45)$$

Analisando agora a parte imaginária de  $\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)$ , a integral em  $k$  envolve funções delta de Dirac e resulta em:

$$Im[\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)] = -\pi \frac{m_a k_F}{v_F q} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^2} \left[ \left| \frac{\omega_0}{2} + \frac{kq}{m_a} \right| - \left| \frac{\omega_0}{2} - \frac{kq}{m_a} \right| \right], \quad (6.46)$$

que, no caso de  $\omega_0 < 2k_F q/m_a$  resulta em:

$$Im[\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)] = \frac{\mathcal{V}k_F^3}{8\pi} \frac{1}{E_F} \frac{\omega_0}{v_F q}, \quad (6.47)$$

e a susceptibilidade total pode ser escrita como:

$$\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0) = \frac{\mathcal{V}k_F^3}{8\pi^2} \left\{ -\frac{2}{E_F} \frac{q}{k_F} + \frac{\omega_0}{v_F q} \frac{1}{E_F} \ln \left( \frac{[(q/k_F)^2 E_F - \omega_0]^2 - v_F^2 k_C^2}{4 (q/k_F)^2 E_F^2 - \omega_0^2} \right) - \frac{2}{E_F} \ln \left( \frac{2 (q/k_F) E_F - \omega_0}{2 (q/k_F) E_F + \omega_0} \right) + i\pi \frac{\omega_0}{v_F q} \frac{1}{E_F} \right\}. \quad (6.48)$$

De acordo com esta equação, para o caso de um parâmetro de ordem homogêneo, ou seja,  $q = 0$ , temos que  $\chi_{V \rightarrow 0}^{aa}(2q, \omega_0)$  diverge no limite  $\omega_0 \rightarrow 0$  devido ao primeiro logaritmo, assim como Thouless mostra em seu trabalho [18]. Desta forma, a partir da expressão do critério para o surgimento de supercondutividade observa-se que a intensidade da interação atrativa  $U$  pode ser arbitrariamente pequena para que exista supercondutividade, e neste caso não temos uma transição de fase quântica.

# Bibliografia

- [1] Focus Issue: Quantum Phase Transitions, *Nat. Phys.* **4**, 3, 167(2008);  
Diversos artigos em, *J. of Phys.: Cond. Matt.* **8**, 9675-1048 (1996).
- [2] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge Univ. Press. (1999).
- [3] J. A. Hertz, *Phys. Rev. B* **14**, 3, 1165 (1976).
- [4] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, World Scientific (2001).
- [5] L. P. Kadanoff *et al.*, *Rev. of Mod. Phys.* **39**, 2, 395 (1967).
- [6] I. S. Oliveira, V. L. B. de Jesus, *Introdução à Física do Estado Sólido*, Ed. Livraria da Física, (2005).
- [7] A. Bladin, *Notas de Aula, Cap. 1 Band Magnetism*
- [8] H. Smith, *Physica Scripta* **28**, 287 (1983).
- [9] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 5, 1175 (1957).
- [10] R. Ramazashvili, P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 19, 3752 (1997).
- [11] V. Galitski, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 127001 (2008);  
V. P. Mineev e M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **63**, 172504 (2001);
- [12] H. Suhl *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **3**, 552 (1959).

- [13] G. M. Japiassu *et al.*, *Phys. Rev. B* **45**, 2986 (1992).
- [14] M. A. Continentino, I. T. Padilha *Physica B* **403**, 764 (2008);  
M. A. Continentino, I. T. Padilha *J. of Phys.: Cond. Matt.* **20**, 095216 (2008);  
I. T. Padilha, M. A. Continentino, *J. of Mag. and Mag. Mat.* **321**, 3466 (2009);  
I. T. Padilha, M. A. Continentino, *J. of Phys.: Cond. Matt.* **21**, 095603 (2009).
- [15] S. M. Ramos *et al.*, *a ser publicado*.
- [16] A. Koga *et al.*, *Phys. Rev. B* **72**, 045128 (2005).
- [17] I. Paul *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 026402 (2007).
- [18] J. J. Thouless, *Annals of Physics* **10**, 553-588 (1960).
- [19] E. Lengyel *et al.*, *Phys. Rev. B* **80**, 140513 (2009).
- [20] H. Nazareno, *Mecânica Estatística e Funções de Green*, Ed. Univ. de Brasília (1986).
- [21] D. N. Zubarev, *Sov. Phys. Usp.* **3**, 3, 320 (1960).
- [22] P. Nozières, *Theory of Interacting Fermi Systems*, W. A. Benjamin (1964).
- [23] L. P. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics*, W. A. Benjamin (1962).
- [24] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall (1994).
- [25] D. J. Scalapino *et al.*, *Phys. Rev. B* **34**, 11 (1986).
- [26] P. Monthoux e G. G. Lonzarich, *Phys. Rev. B* **69**, 064517 (2004).
- [27] R. Côté, A. Griffin, *Phys. Rev. B* **48**, 10404 (1993).
- [28] G. D. Mahan, *Many Particle Physics*, Plenum Press, (1981).
- [29] P. Nozières, S. Schmitt-Rink, *J. Low Temp. Phys.* **59**, 3/4 (1985).
- [30] F. D. Neto *et al.*, *Journ. of Phys: Cond. Matt.* **22**, 075701 (2010).

- [31] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing (1976).
- [32] N. Rivier, A. E. Mensah, *Physica B* **91**, 85-88 (1977).