

EQUAÇÕES DO TIPO GINZBURG-LANDAU NA TEORIA DO ANTIFERROMAGNETISMO

TESE DE MESTRADO

defendida por

RAMON FRANCISCO HERNANDEZ PÁVEZ

no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Orientador: A. M. de Graaf

em 28 de Setembro de 1965

perante a banca integrada pelos senhores professores:

A. M. de Graaf

John Sullivan

Luiz Guimarães Ferreira

537.26
H 557

P 337

ÍNDICE

RESUMO	i
1 INTRODUÇÃO	I
2 FUNÇÕES DE GREEN NO ESTADO ODS	
FUNDAMENTAL DE OVERHAUSER	1
2.1 Generalidades	1
2.2 Breve introdução aos campos quantizados.	
Sistema de Partículas de Fermi	2
Operadores de absorção e de criação	2
Campos de absorção e de criação	5
2.3 Representações	8
2.4 Funções de Green de uma partícula	
à temperatura zero absoluto14
Definição14
Propriedades analíticas16
Significado dos polos21
2.5 Funções de Green para o	
estado ODS de Overhauser25
Equação de movimento26
Equação de movimento aproximada31
Soluções no espaço ($k\omega$)33
2.6 Espectro de Energia37
2.7 Equação de Cap de Energia38

3	FUNÇÕES DE GREEN PARA O ESTADO ODS DE OVERHAUSER, PARA TEMPERATURAS DIFERENTES DE ZERO ABSOLUTO41
3.1	Funções de Green termodinâmica de uma partícula .42	
	Definição43
	Relação entre funções de Green43
	Propriedade45
3.2	Funções de Green termodinâmicas, aproximadas, de uma partícula, para o estado ODS de Overhauser .	.47
3.3	Equação do Gap Termodinâmico51
4	EQUAÇÕES DE TIPO GINZBURG-LANDAU EM ANTIFERROMAGNETISMO55
4.1	Soluções integrais para funções de Green aproximadas na presença de um campo elétrico fraco55
4.2	Equação do gap de energia para temperaturas próximas à temperatura crítica59
4.3	Densidade de carga e^{ρ} devida ao campo elétrico .	.63
4.4	Equações de tipo Ginzburg-Landau65
4.5	Soluções limite66
5	CONCLUSÕES67
6	AGRADECIMENTOS68
7	REFERÊNCIAS69

RESUMO

A presente tese é dedicada ao estudo de algumas possíveis consequências da teoria de ondas estáticas de densidade de spin num sistema de elétrons em interação. Esta teoria foi recentemente proposta por Overhauser, que introduziu autoconsistentemente um potencial periódico dependente de spin. O espectro das excitações tem um gap de energia Δ , que deve ser determinado a partir de uma relação de autoconsistência, isto é, a equação do gap. Quando aplicada a uma banda estreita de elétrons de Bloch em interação (tal qual seja muito maior que a largura da banda), esta teoria descreve a baixas temperaturas um estado isolante antiferromagnético, capaz de sofrer uma transição térmica a um estado metálico não magnético. Neste ponto, a teoria é formalmente muito similar à teoria microscópica da supercondutividade, onde, do mesmo modo, se tem um gap de energia no espectro de excitações e uma equação de gap correspondente.

Ginzburg e Landau introduziram um parâmetro de ordem, ψ , e consideraram um supercondutor na presença de um potencial vetor magnético $A(r)$. Desenvolvendo a energia livre total, em termos de $(\nabla\psi)^2$, próximo à temperatura de transição, e

minimizando-a com respeito a ψ^* e $A(r)$, Ginzburg e Landau chegaram a um par de equações diferenciais acopladas para ψ e $A(r)$. Em virtude de $A(r)$ depender das coordenadas espaciais, ψ terá também dependência espacial. Gor'kov deduziu estas equações utilizando a técnica das funções de Green. Concluiu que a primeira equação corresponde à equação do gap, enquanto a segunda não é nada mais do que a densidade de corrente. A partir de então, as equações de Ginzburg-Landau vêm sendo aplicadas à explicação de grande variedade de propriedades de supercondutores. Por exemplo, permitiram uma interpretação do chamado estado intermediário. Ademais, explicam satisfatoriamente o efeito Meissner-Ochsenfeld e as propriedades das camadas finas supercondutoras.

O propósito do presente trabalho é estabelecer, análogamente, equações de tipo Ginzburg-Landau, aplicáveis a substâncias que sofrem uma transição isolante-metálica. Mostramos que isto, de fato, é possível. Uma dessas equações deve ser novamente identificada com a equação do gap. Entretanto, agora, a segunda equação corresponde à densidade de carga induzida por um campo elétrico aplicado, ao invés da densidade de corrente, como no caso da supercondutividade.

Nosso método de cálculo equivale ao introduzido por Gor'kov. Dado que nessas equações são bastante complexas, não é possível, no momento, apresentar soluções exatas. Somente no caso de um campo elétrico fraco há indicações de obter-se

uma equação que descreve a penetração do campo no estado isolante e a expulsão no estado metálico. Isto seria o análogo do efeito Meissner-Ochsenfeld, no caso da supercondutividade.

1 INTRODUÇÃO

Hamerlingh Onnes (L), em 1911, descobriu a supercondutividade ao observar a queda súbita da resistência elétrica, em uma amostra de mercúrio, a uma temperatura bem definida, T_c . Este comportamento foi interpretado como condutividade infinita. Entretanto, este fenômeno, comum a muitos metais e ligas, só após o conhecimento do efeito Meissner - Ochsenfeld (L) foi possível compreender relativamente bem. Meissner e Ochsenfeld, em 1933, observaram que um supercondutor, submetido a um campo magnético, H , expulsa as linhas de indução magnética do interior do corpo quando é esfriado até à temperatura de transição ao estado supercondutor. Esta temperatura depende de H . Além disso, se a amostra for esfriada até à temperatura de transição ou abaixo dela, e em seguida aplicado um campo magnético, H , as linhas de indução magnética não entram no interior do corpo. Estas importantes observações permitiram concluir que o estado supercondutor é um estado termodinamicamente em equilíbrio. Isto significa que o estado final independe da ordem de proceder - esfriar primeiro o supercondutor e depois submetê-lo a um campo magnético, o vice-versa. O fato deste processo ser reversível e

da temperatura de transição depender do campo aplicado, permite concluir pela existência de um campo crítico, H_c , capaz de destruir a supercondutividade. Em seguida conseguiu-se um avanço rápido, que se concretizou com apresentação da primeira teoria, fenomenológica, da supercondutividade. Esta teoria, devida a F. e H. London (L) (1935), explicava a condutividade infinita e o efeito Meissner. Muitos trabalhos posteriores se baseiam fundamentalmente nesta teoria. Assim, teve-se uma continuidade no estudo macroscópico, porém não surgiram idéias precisas sobre o mecanismo microscópico que rege a supercondutividade.

Ginzburg e Landau (A2), em 1950, propuzeram outra teoria fenomenológica da supercondutividade, que era uma extensão não linear da teoria de F. e H. London. Obtiveram, como caso limite para campo magnético suficientemente fraco, justamente a equação de London. Consideraram que a densidade de energia livre, na ausência de campo magnético, para temperatura próxima a T_c , pode ser escrita como

$$F_B = F_n + a(T)\omega + \frac{1}{2}b(T)\omega^2 + \dots$$

onde:

F_n representa a energia livre no estado normal

$a(T)$ e $b(T)$ são funções somente da temperatura e

ω é um parâmetro de ordem.

Pode supor-se o estado supercondutor constituído de uma mistura de elétrons normais e superelétrons, chamado modelo de dois fluidos (6). O parâmetro de ordem, ω , interpreta-se como a fração de superelétrons.

Ginzburg e Landau propuzeram que ω devia ser o quadrado de uma certa função de onda, ψ , função de onda dos superelétrons, isto é

$$\omega = \psi \psi^*$$

introduzindo assim um parâmetro de ordem complexa em sua teoria.

Quando se inclui um campo magnético, ψ depende geralmente da coordenada espacial, r . A densidade de energia foi por eles expressa como

$$F_{SH}[\omega(r)] = F_S[\omega(r)] + \frac{\hbar^2(r)}{8\pi} - \frac{1}{2m^*} |[-i\hbar \nabla_r - \frac{e}{c} A(r)] \psi(r)|^2$$

onde m^* representa a massa efetiva dos superelétrons e $A(r)$ o potencial vetor magnético. O segundo termo é a densidade de energia magnética, supondo unitária a permeabilidade magnética. O terceiro termo representa a densidade de energia cinética dos superelétrons.

IV

Por minimização da energia livre com respeito a $A(\mathbf{r})$ e $\psi^*(\mathbf{r})$, obtiveram duas equações que determinam, consistentemente, o campo magnético e a função de onda dos superelétrons. Essas equações são, respectivamente

$$\frac{1}{2m^*}[-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{e}{c}A_1(\mathbf{r})]^2 \psi(\mathbf{r}) + \frac{\partial E_S[\psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r})]}{\partial \psi^*(\mathbf{r})} = 0 \quad (\text{I})$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 A_1(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi i e \hbar}{2m^* c} [\psi^*(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \psi^*(\mathbf{r})] + \\ + \frac{4\pi e^2}{m^* c^2} |\psi(\mathbf{r})|^2 \end{aligned} \quad (\text{II})$$

com as condições de contorno

$$\text{div } A_1(\mathbf{r}) = 0$$

$$[-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}) - \frac{e}{c}A_1(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})]_{\perp} = 0 \quad \text{sobre a superfície,}$$

sendo $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ a corrente devida aos superelétrons, chamada supercorrente.

Estas equações tem uma solução limite. Quando o campo magnético é suficientemente fraco, pode-se considerar $\psi(\mathbf{r})$ constante. Deste modo, a equação (II) dá-nos

$$j(x) = -\frac{c}{4\pi} \nabla^2 A_1(x) = -\frac{c^2}{m^*c} |\psi(x)|^2 A_1(x)$$

uma relação linear entre a supercorrente e o potencial vetor: a equação de London. Se observa que, para o caso unidimensional, obtém-se explicitamente o efeito Meissner, isto é

$$A_1(x) = A_0 e^{-x/\lambda_0}$$

onde $\lambda_0 = (m^*c^2 / 4\pi c^2 |\psi|^2)^{1/2}$, se identifica como a distância de penetração de London.

Argumentos teóricos levavam a acreditar que, quando se aplicam campos magnéticos da ordem do maior campo crítico (não esquecendo que este depende da temperatura), se produz uma quebra numa estrutura de domínios. Formam-se regiões alternadas de material normal e supercondutoras. Além de sua verificação experimental no corpo da amostra, também foi observado na superfície da mesma. A viabilidade deste último resultado, sobre a superfície, havia sido prevista com a introdução de uma energia superficial positiva. Esta energia estava associada à criação de uma interface entre a região normal e a supercondutora, na presença de um campo magnético.

Existem certos supercondutores, chamados tipo London, que numa região de campo, $H_{c1} < H < H_{c2}$, apresentam finos filamentos ou linhas de fluxo (AL). Aquêles filamentos, no

limite superior H_{c2} , estão separados por espaços menores que a distância de penetração de London, permitindo a penetração total das linhas de indução magnética no interior da amostra. Entretanto, à medida que a intensidade de campo diminui, as linhas de indução magnética são gradualmente expulsas. No campo crítico inferior, H_{c1} , sua expulsão é total. Abaixo de H_{c1} o material é supercondutor e o efeito Meissner é perfeito.

Experiências sobre a distância de penetração colocaram em evidência sua dependência do campo aplicado. Ela variava levemente, em alguns por cento, para campos próximos ao campo crítico, permanecendo praticamente inalterada para campos inferiores. Apenas uma teoria não linear podia explicar tal comportamento, bem como a existência de uma energia superficial positiva. As equações de Ginzburg-Landau não só lograram tais objetivos como também previam o pequeno desvio da linearidade do efeito Meissner, antes de sua verificação experimental.

As equações de GL deram conta, além disso, dos campos críticos H_{c1} e H_{c2} (A1), bem como do problema de camadas finas supercondutoras (D2). Assim, as equações de GL obtiveram êxito na descrição dos resultados experimentais de um supercondutor submetido a um campo magnético, para temperaturas próximas à temperatura crítica. Isto motivou muitas contribuições teóricas para tentar justificá-las, mediante uma teoria microscópica com base nas teorias de Bardeen-Cooper-

Schrieffer (A2), 1957 ou Bogoliubov (A2), 1957.

A teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer foi a primeira teoria microscópica de supercondutividade a obter êxito. Introduziu de um modo simples a correlação de um par de elétrons com uma interação predominante atrativa. Mostra o importante fato da existência de um gap de energia no espectro de excitação. Logo em seguida, Gorkov (A2), 1958, conseguiu rederivar, mediante o formalismo das funções de Green, o espectro de energia e a equação de gap de energia de um supercondutor. Em seguida, em 1959, generalizou o método para o caso da inclusão de um campo magnético (A2). Usando uma série de aproximações, obteve duas equações que identificou como equações de Ginzburg-Landau. Uma delas era a equação de gap de energia, onde observou a proporcionalidade entre o gap e o parâmetro de ordem complexa, $\psi(r)$. A outra equação corresponde à expressão da supercorrente. Deste modo, não só fez uma dedução microscópica das equações de GL, como também determinou a relação entre os parâmetros fenomenológicos e as grandezas microscópicas comensuráveis, de bom acôrdo com os resultados experimentais.

Existem certos compostos dos elementos de transição que, similarmente ao fenômeno da supercondutividade, apresentam uma transição térmica de um estado isolante antiferromagnético a um estado metálico não-magnético, como por e-

VIII

exemplo o sesquióxido de titânio. A característica das substâncias antiferromagnéticas é o alinhamento antiparalelo de seus momentos magnéticos.

A primeira teoria do antiferromagnetismo para isolantes foi a teoria de superintercâmbio de Kramers (A3). Superintercâmbio é a interação de intercâmbio entre elétrons magnéticos, através de íons diamagnéticos que separam os momentos magnéticos.

Um grande avanço na teoria de superintercâmbio deve-se a Anderson (A3), em 1959. Propôs que, de início, se considere o movimento dos elétrons magnéticos na rede diamagnética. Como consequência, elimina a interação dos elétrons magnéticos com os íons diamagnéticos. Introduziu a representação de Wannier, conseguindo mostrar que a interação entre os elétrons renormalizados é antiferromagnética. Sua teoria contém dois parâmetros fundamentais: a correlação, U , entre dois elétrons no mesmo íon e a integral de transferência, b , para a transferência de um elétron a um íon vizinho. Em vista da transferência conservar o spin, conclui-se que a interação é antiferromagnética.

A teoria de Anderson explica qualitativamente o comportamento de substâncias como o sesquióxido de titânio, do seguinte modo: quando a integral de transferência, b , é muito menor que a correlação, U , o que lhes atribui características isolantes. Por outro lado, quando b chega a ser compa-

rável com U , os elétrons magnéticos tendem a mover-se livremente, dando lugar às propriedades metálicas.

Uma teoria desenvolvida por De Graaf, López e Luzzi (DL) [¶], descreve uma transição magneto-metálica. A teoria se baseia em idéias recentemente propostas por Overhauser (O), em 1962, que postula, em um gás de elétrons, um potencial dependente do spin, mediante a interação com uma onda estática de densidade de spin (vetor de onda Q). Overhauser prova que, na aproximação de Hartree-Fock, o estado com uma onda estática de densidade de spin, ODS, é mais estável que o estado não polarizado. A criação de um gap de energia 2Δ no espectro de excitação é consequência do estado ODS.

De Graaf et al. analisam o estado ODS numa banda estreita de elétrons de Bloch com interação. Ao introduzir a representação de Wannier, obtêm os três parâmetros da teoria: b , U , e Δ . Provam que, quando $\Delta \gg b$, a teoria de Overhauser é capaz de descrever uma transição isolante antiferromagnética a um estado metálico não-magnético. Concluem pela correspondência entre o estado ODS e a formação de pares ligados elétrons-buraco e colocam em evidência a analogia formal entre o estado ODS e o estado supercondutor.

No presente trabalho preocupamos-nos com a transição

¶ Agradecemos a De Graaf, López e Luzzi por nos terem facilitado o manuscrito da teoria

magneto-metálica, somente para temperaturas próximas à temperatura de transição. Se caracterizarmos o estado metálico pela expulsão do campo elétrico do interior do corpo e admitirmos que um campo elétrico penetra totalmente à temperatura zero absoluto, teremos um equivalente do efeito Meissner. É possível portanto, pensar na existência de um campo crítico e definir uma distância de penetração. Em analogia com a supercondutividade, poderemos ter equações do tipo Ginzburg-Landau. Neste caso tem-se também uma equação do gap de energia, que corresponderia à primeira equação de tipo GL. Por outro lado, a segunda equação será a expressão da densidade de carga elétrica devida à presença do campo elétrico, em lugar da expressão da supercorrente devida a um campo magnético, como na supercondutividade.

O objeto do presente trabalho é obter equações do tipo Ginzburg-Landau, em termos da teoria de Overhauser, mediante o formalismo das funções de Green. O problema se resolve apenas para o caso limite de um campo elétrico muito fraco. A solução da segunda equação corresponderia à equação de London (02) [¶]. Esta solução dá conta da penetração do campo à temperatura zero e incide na dependência da distância de penetração da temperatura. Diminui à medida que a temperatura aumenta, de modo que à temperatura crítica se tem comportamento

¶ Agradecemos a R. Oyarzún por nos ter facilitado o manuscrito de sua tese.

metálico. Devido a complexidade das equações, não se determinam outras soluções. Entretanto, espera-se que a resolução completa das equações possa fornecer dados sobre as propriedades dos antiferromagnetos que sofrem transição magneto-metálica. Por exemplo, a existência de campos críticos, estado intermediário e o comportamento de camadas finas.

No capítulo 2 após uma breve introdução aos campos quantizados, uma apresentação das representações de Schrödinger, Heisenberg e de interação, definimos a função de Green de uma partícula, para o estado fundamental. Vemos algumas propriedades úteis ao desenvolvimento posterior. Obtemos assim as funções de Green aproximadas no estado OMS de Overhauser, diretamente no espaço de momento. O espectro de energia é obtido imediatamente dos polos das funções de Green. Uma relação de autoconsistência conduz-nos à equação do gap. No capítulo 3 estendemos o estado a temperatura finita. O capítulo 4 é dedicado à derivação das equações de tipo GL e obtêm-se soluções limites para campos extremamente fracos. As conclusões do presente trabalho estão contidas no capítulo 5.

2 FUNÇÕES DE GREEN NO ESTADO ODS FUNDAMENTAL DE OVERHAUSER

2.1.- Generalidades

O problema dos muitos corpos consiste em compreender o comportamento de um sistema de muitas partículas com interação. A solução do problema deveria dar informações sobre o estado fundamental e o espectro das excitações elementares. Até ao presente momento não existe nenhum método que resolva exatamente este problema, nem sequer uma solução completa para o comportamento de cada partícula individual constituinte do sistema. Em última instância, as propriedades macroscópicas dos sólidos, líquidos e gases se determinam apenas como determinados valores médios no sistema, consequência da interação microscópica entre as partículas que o formam. Logo, a atenção volta-se para a definição de valores médios apropriados, combinando inteligentemente os conhecimentos sobre termodinâmica, o método de matriz densidade e a teoria dos campos quantizados. São três estudos, que tentaram dar conta de um sistema de muitas partículas.

O formalismo das funções de Green, cujo estudo se acentuou nos últimos anos, revelou-se o método microscópico mais efetivo, para a obtenção das propriedades macroscópicas de um sistema de muitos corpos. Tendo definido as funções de Green como o valor médio no estado fundamental do sistema, esse formalismo proveu sua efetividade na resolução de problemas da física estatística. Generalizado para temperaturas diferentes de zero, combinando as idéias do método de matriz densidade com a teoria dos campos quantizados, revelou-se um método realmente poderoso.

O propósito do presente capítulo, além de fazer uma breve introdução aos campos quantizados e representações, consiste em aplicar o formalismo das funções de Green ao caso do antiferromagnetismo, com base no estado ODS de Overhauser, reproduzindo o espectro de energia e a equação do gap de energia.

2.2.- Breve introdução aos campos quantizados.

Sistema de partículas de Fermi.

Operadores de Absorção e de criação.- Um sistema físico, em mecânica quântica, precisa de um conjunto de valores médios, os números quânticos n , que o definem ou determinam. Um sistema consistindo de N partículas sem interação, pode-se imaginar representado por

um conjunto de auto-funções $\phi_1(z), \phi_2(z), \dots$, ortogonal, completo e normalizado, onde $\phi_n(z)$ são as funções de onda e z as variáveis, que caracterizam o estado de uma partícula. Podemos associar a cada número quântico n um operador a_n que opera sobre os estados ϕ_1, ϕ_2, \dots , agora especificados pelos números de partículas. Obtem-se assim uma nova descrição do sistema, denominada "representação em segunda quantização", onde os números de ocupação são as novas variáveis. O operador a_n tem um adjunto que designaremos por a_n^+ .

Aos operadores a_n e a_n^+ vamos impor as regras de anti-comutação e anetataremos no final que esta restrição nos permite descrever um sistema de Fermi. As regras de anti-comutação são as seguintes:

$$1) \quad a_n a_n + a_n a_n = 0$$

$$2) \quad a_n^+ a_n^+ + a_n^+ a_n^+ = 0$$

$$3) \quad a_m a_n^+ + a_n^+ a_m = 0_{mn} \quad ,$$

sendo uma consequência imediata

$$a_m a_m = 0$$

Trabalhar com os operadores a_n e a_n^+ , não tem muito

sentido físico, pois não comutam. Por isso introduzimos operadores que sejam hermitianos, como por exemplo

$$n_m = a_m^\dagger a_m = 1 - a_m a_m^\dagger = n_m^\dagger$$

onde n_m^\dagger é o hermitiano conjugado de n_m . A este operador podemos atribuir um sentido físico:

n_m é o operador número de partículas do nível m , e

$(1 - n_m)$ é o operador número de buracos do nível m .

Postulando um estado vácuo, $|0\rangle$, para o operador n_m , obtém-se por definição de estado vácuo

$$n_m |0\rangle = 0 |0\rangle = 0$$

Então, aplicando as regras de anticomutação a $n_m a_m^\dagger |0\rangle$, obtém-se

$$n_m a_m^\dagger |0\rangle = a_m^\dagger |0\rangle = 1 (a_m^\dagger |0\rangle)$$

onde $a_m^\dagger |0\rangle$, é auto-estado de n_m com auto-valor 1, que designaremos por $|1\rangle$. Calculando

$$a) \quad a_m^\dagger |1\rangle = a_m^\dagger a_m^\dagger |0\rangle = 0$$

não se obtém um novo estado, pois não existe; calculando a-
gora

$$b) a_m |1\rangle = a_m a_m^\dagger |0\rangle = (1 - n_m) |0\rangle = |0\rangle$$

obtem-se um dos estados que já tínhamos.

A principal consequência das regras de anticomutação é a existência de dois estados, e só dois, para estes opera-
dores.

Em resumo, temos:

$$\begin{array}{ll} a_m^\dagger & \text{conduz o estado } |0\rangle \text{ ao estado } |1\rangle \\ a_m & \text{conduz o estado } |1\rangle \text{ ao estado } |0\rangle \end{array}$$

razão pela qual chama-se a a_m operador de absorção e a a_m^\dagger o-
perador de criação.

Os autovalores do operador número de partículas, n , são zero e um, que correspondem à ocupação das partículas de Fermi, isto é, cumprem a estatística de Fermi-Dirac.

Campos de Absorção e de Criação.— Tendo um conjunto de auto-
funções, $\phi_i(\tau)$, ortonormal e completo, definimos os campos de absorção e criação, res-
pectivamente por:

$$\psi(\tau) = \sum_{\mathbf{i}} a_{\mathbf{i}} \phi_{\mathbf{i}}(\tau)$$

$$\psi^*(\tau) = \sum_{\mathbf{i}} a_{\mathbf{i}}^* \phi_{\mathbf{i}}^*(\tau)$$

onde τ representa a coordenada espacial, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, e o spin, σ . As funções $\phi_{\mathbf{i}}(\tau)$ satisfazem a relação de um conjunto completo

$$\sum_{\mathbf{i}} \phi_{\mathbf{i}}(\tau') \phi_{\mathbf{i}}^*(\tau) = \delta(\tau' - \tau)$$

Como consequência tem-se que estes operadores satisfazem as regras de anticomutação com respeito ao argumento τ , como se pode verificar. Por exemplo

$$\begin{aligned} \psi(\tau) \psi^*(\tau') + \psi^*(\tau') \psi(\tau) &= \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} [a_{\mathbf{i}} a_{\mathbf{j}}^* \phi_{\mathbf{i}}(\tau) \phi_{\mathbf{j}}^*(\tau') + a_{\mathbf{j}}^* a_{\mathbf{i}} \phi_{\mathbf{j}}^*(\tau') \phi_{\mathbf{i}}(\tau)] \\ &= \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \phi_{\mathbf{i}}(\tau) \phi_{\mathbf{j}}^*(\tau') [a_{\mathbf{i}} a_{\mathbf{j}}^* + a_{\mathbf{j}}^* a_{\mathbf{i}}] \end{aligned}$$

e de acôrdo com a terceira regra de anticomutação para $a_{\mathbf{i}}$ e $a_{\mathbf{j}}$

$$\psi(\tau) \psi^*(\tau') + \psi^*(\tau') \psi(\tau) = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \phi_{\mathbf{i}}(\tau) \phi_{\mathbf{j}}^*(\tau') \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}$$

Usando a relação de um conjunto completo, tem-se

$$\psi(z) \psi^\dagger(z') + \psi^\dagger(z') \psi(z) = \delta(z-z')$$

e, análogamente,

$$\psi(z) \psi(z') + \psi(z') \psi(z) = 0$$

$$\psi^\dagger(z) \psi^\dagger(z') + \psi^\dagger(z') \psi^\dagger(z) = 0$$

Um operador de uma partícula, $\Lambda(z)$, no formalismo dos campos quantizados, é definido por

$$\Lambda = \int d^3z \psi^\dagger(z) \Lambda(z) \psi(z) = \sum_{\sigma} \int d^3x \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \Lambda_{\sigma}(x) \psi_{\sigma}(x)$$

Por exemplo, o operador densidade (número) de partículas

$$n(x) = \int d^3z' \psi^\dagger(z') \delta(x-z') \psi(z') = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x)$$

Se definimos um vácuo para o operador $\psi_{\sigma}(x)$, podemos mostrar que o operador $\psi_{\sigma}^{\dagger}(x)$ adiciona uma partícula com spin σ , num ponto x .

Designaremos por $|\text{vac}\rangle$ o estado vácuo. Então $n(x') \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) |\text{vac}\rangle$ deveria fornecer-nos o autovalor de $n(x')$ com autoestado $\psi_{\sigma}^{\dagger}(x) |\text{vac}\rangle$.

$$n(x') \psi_{\sigma'}^+(x) |vac\rangle = \sum_{\sigma'} \psi_{\sigma'}^+(x') \psi_{\sigma'}(x') \psi_{\sigma'}^+(x) |vac\rangle$$

Entretanto

$$\psi_{\sigma'}(x') \psi_{\sigma'}^+(x) = \delta(x'-x) \delta_{\sigma'\sigma} - \psi_{\sigma'}^+(x) \psi_{\sigma'}(x')$$

e, por definição $\psi_{\sigma'}(x') |vac\rangle = 0$; logo

$$n(x') \psi_{\sigma'}^+(x) |vac\rangle = \delta(x'-x) \psi_{\sigma'}^+(x) |vac\rangle$$

que é o resultado esperado.

Aplicando o operador $\psi(x)$ ao estado $\psi^+(z) |vac\rangle$, ter-se-á como consequência a remoção da partícula adicionada por $\psi^+(z)$ a $|vac\rangle$.

2.3.- Representações

Tendo um sistema de partículas com Hamiltoniana H , e desejando conhecer como o estado evolui no tempo, precisaremos resolver a equação de Schrödinger

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} = H \phi \quad (\hbar=1)$$

onde ϕ é a função de onda do sistema que depende do tempo.

A Hamiltoniana, H , como qualquer outro operador do sistema, não depende do tempo. Esta descrição se chama de representação de Schrödinger.

A equação de Schrödinger tem uma solução formal

$$\psi(t) = e^{-iHt} \psi_0$$

onde ψ_0 é uma função independente do tempo.

As grandezas mensuráveis, com sentido físico, são os valores médios dos operadores. Se tomar-mos o valor médio do operador F , temos

$$\langle \psi^*(t) F \psi(t) \rangle = \langle \psi_0^* e^{iHt} F e^{-iHt} \psi_0 \rangle$$

O segundo membro desta expressão diz-nos que podemos pensar em funções de onda independentes do tempo, ψ_0 , e em operadores que dependem do tempo na forma

$$F(t) = e^{iHt} F e^{-iHt}$$

e, fisicamente, obtemos o mesmo resultado, apesar de ter-se uma nova descrição do sistema, chamada representação de Heisenberg.

Agora, não temos uma equação para a função de onda (equação de Schrödinger), mas sim uma equação de movimento para o operador $F(t)$. Derivando $F(t)$ com respeito ao tempo, tem-se

$$\frac{\partial F(t)}{\partial t} = i[HF(t) - F(t)H] = i[H, F(t)]$$

onde $[H, F(t)]$ é o comutador de H e $F(t)$.

Quando o comutador de H com o $F(t)$ é nulo, diz-se que o operador $F(t)$ é uma constante de movimento. Obviamente, H é uma constante de movimento, igual para ambas as representações.

Podemos observar que os operadores de Heisenberg $\psi(z,t)$ não satisfazem as regras de anticomutação para os correspondentes operadores de Schrödinger, a menos que eles sejam considerados no mesmo instante. Por exemplo

$$\begin{aligned} \psi(z,t)\psi^*(z',t) + \psi^*(z',t)\psi(z,t) &= \\ &= e^{\frac{iHt}{\hbar}} \psi(z) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} e^{\frac{iHt}{\hbar}} \psi^*(z') e^{-\frac{iHt}{\hbar}} + e^{\frac{iHt}{\hbar}} \psi^*(z') e^{-\frac{iHt}{\hbar}} e^{\frac{iHt}{\hbar}} \psi(z) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \\ &= e^{\frac{iHt}{\hbar}} [\psi(z)\psi^*(z') + \psi^*(z')\psi(z)] e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = \\ &= e^{\frac{iHt}{\hbar}} \delta(z-z') e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = \delta(z-z') \end{aligned}$$

Outra representação, muito útil na teoria dos campos quantizados, é do tipo intermediário, chamada representação de interação.

Seja a Hamiltoniana H e separemos a parte de interação entre partículas H_{int}

$$H = H_0 + H_{int}$$

Transformando a função de onda de Schrödinger, $\phi(t)$, como segue

$$\phi_1(t) = e^{iH_0 t} \phi(t)$$

e derivando $\phi_1(t)$ respeito ao tempo

$$\frac{\partial \phi_1(t)}{\partial t} = i e^{iH_0 t} H_0 \phi(t) + e^{iH_0 t} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} =$$

$$= i e^{iH_0 t} H \phi(t) - i H_0 \phi(t) = -i e^{iH_0 t} H_{int} e^{-iH_0 t} \phi_1(t) =$$

$$= -i \tilde{H}_{int}(t) \phi_1(t)$$

$$i \frac{\partial \phi_1(t)}{\partial t} = \tilde{H}_{int}(t) \phi_1(t)$$

onde

$$\tilde{H}_{int}(t) = e^{iH_0 t} H_{int} e^{-iH_0 t}$$

Qualquer operador na representação de Schrödinger obtém-se nesta representação mediante a mesma fórmula de \tilde{H}_{int} . Assim

$$\tilde{F}(t) = e^{iH_0 t} F e^{-iH_0 t}$$

Podemos obter uma solução para $\phi_1(t)$ resolvendo a equação mediante aproximações sucessivas (A2). A solução pode ser escrita como

$$\phi_1(t) = S(t) \phi_0$$

onde a matriz $S(t)$ é dada por

$$S(t) = T_t \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t dt' \tilde{H}_{int}(t') \right\}$$

T_t é o operador ordenador de tempo ou operador cronológico de Wick

Podemos ainda escrever $\phi_1(t)$ da seguinte maneira

$$\phi_1(t) = S(t)S^{-1}(t')S(t')\phi_0 = S(t)S^{-1}(t')\phi_1(t')$$

onde S^{-1} é o operador inverso de S .

Com estes resultados podemos obter uma relação entre os operadores da representação de Heisenberg e de interação. Sabendo que

$$\langle \phi^*(t) F \phi(t) \rangle = \langle \phi_0^* F(t) \phi_0 \rangle$$

e que, por definição

$$\phi(t) = e^{-iH_0 t} \phi_1(t)$$

substituindo o valor de $\phi_1(t)$, obtém-se

$$\langle \phi_0^* S^{-1}(t) e^{iH_0 t} F e^{-iH_0 t} S(t) \phi_0 \rangle = \langle \phi_0^* F(t) \phi_0 \rangle$$

Logo

$$F(t) = S^{-1}(t) \tilde{F}(t) S(t)$$

que é a relação existente entre ambas as representações.

2.4.- Funções de Green de uma partícula à
temperatura zero absoluto.

Definição.- A função de Green de uma partícula se define como o valor médio no estado fundamental, para todo o domínio de tempo, de dois operadores de campo na representação de Heisenberg:

$$G(\tau't', \tau t) = -i \langle T_{\tau} [\psi(\tau't') \psi^*(\tau t)] \rangle$$

onde $\langle \rangle$ representa o valor médio no estado fundamental e T_{τ} é o operador cronológico de Wick, definido por

$$T_{\tau} [\psi(\tau') \psi^*(\tau)] = \begin{cases} \psi(\tau') \psi^*(\tau) & \text{si } \tau' > \tau \\ * \psi^*(\tau) \psi(\tau') & \text{si } \tau' < \tau \end{cases}$$

sendo o sinal $+$ para as partículas de Bose e o sinal $-$ para as partículas de Fermi.

O operador T_{τ} ordena os operadores de campo segundo os tempos, em ordem decrescente, da esquerda para a direita.

O conhecimento da função de Green permite determinar o valor médio de qualquer operador de uma partícula. Por definição:

$$A(t) = \sum_{\sigma} \int d^3x \psi_{\sigma}^{\dagger}(xt) A(tx) \psi_{\sigma}(xt)$$

Logo

$$A(t) = \pm \int d^3x \lim_{\substack{x \rightarrow x' \\ t \rightarrow t' + 0}} \sum_{\sigma} A(xt) G(x'\sigma t'x\sigma t) \quad \begin{array}{l} + \text{ Fermi} \\ - \text{ Bose} \end{array}$$

Como exemplos, temos o operador de densidade de partículas e de densidade de corrente, respectivamente

$$n(x) = \pm \lim_{\substack{x \rightarrow x' \\ t \rightarrow t' + 0 \\ t' \rightarrow 0}} \sum_{\sigma} G(x'\sigma t'x\sigma t) \quad \begin{array}{l} + \text{ Fermi} \\ - \text{ Bose} \end{array}$$

$$\vec{j}(x) = \pm \lim_{\substack{x \rightarrow x' \\ t \rightarrow t' + 0 \\ t' \rightarrow 0}} \sum_{\sigma} \frac{1}{m} (\nabla_{x'} - \nabla_x) G(x'\sigma t'x\sigma t) \quad \begin{array}{l} + \text{ Fermi} \\ - \text{ Bose} \end{array}$$

Daremos a seguir algumas propriedades destas funções, sintetizadas do livro de A.A. Abrikosov-L.P. Gorkov-I.E. Dzyaloshinski (A2).

Uma propriedade muito importante, para o nosso caso, das funções de Green refere-se aos polos. Os polos da transformada de Fourier das funções de Green dão o espectro de excitações. Para sua demonstração faremos uma revisão da analiticidade das funções de Green. Restringimos nosso estudo, exclusivamente, ao sistema de Fermi

Propriedades analíticas.- Por definição

$$C(x't'-zt) = -i \langle T_t [\psi(x't') \psi^*(zt)] \rangle$$

Para um sistema homogêneo isolado, as funções de Green têm invariância Galileana e invariância de rotação, isto é, dependem da diferença de coordenadas espaciais x , e do tempo t :

$$C(x'-xt'-t) = -i \langle \phi_0^* T_t [\psi(x't') \psi^*(xt)] \phi_0 \rangle$$

A transformada de Fourier no espaço de momento da

$$G(kt'-t) = -i \langle \phi_0^* T_t [\psi(kt') \psi^*(kt)] \phi_0 \rangle$$

e, expressando os operadores na representação de Schrödinger, tem-se

$$G(kt'-t) = -i \langle \phi_0^* T_t [e^{iHt'} \psi(k) e^{-iHt'} e^{iHt} \psi^*(k) e^{-iHt} \phi_0] \rangle$$

de onde

$$G(kt'-t) = -i \sum_B e^{iE_0 t'} \langle \phi_0^* \psi(k) e^{-iHt'} \phi_B \rangle \langle \phi_B^* e^{iHt} \psi^*(k) \phi_0 \rangle e^{-iE_0 t}$$

$t' > t$

$$\begin{aligned}
 G(k, t' - t) &= -i \sum_s \langle \phi_0^* \psi(k) \phi_s \rangle \langle \phi_s^* \psi^*(k) \phi_0 \rangle e^{-i(E_s - E_0)(t' - t)} \\
 &= -i \sum_s |\langle \phi_s^* \psi^*(k) \phi_0 \rangle|^2 e^{-i(E_s - E_0)(t' - t)} \quad t' > t
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G(k, t' - t) &= i \langle \phi_0^* e^{iHt} \psi^*(k) e^{-iHt} e^{iHt'} \psi(k) e^{-iHt'} \phi_0 \rangle \\
 &= i \sum_s |\langle \phi_s^* \psi(k) \phi_0 \rangle|^2 e^{i(E_s - E_0)(t' - t)} \quad t' < t
 \end{aligned}$$

Se nosso sistema consiste de N partículas, e considerando que $\psi^*(x)$ cria uma partícula, então, a soma em s , para $t' > t$, deve ser sobre estados de $(N+1)$ partículas. Por razões similares, para $t' < t$, a soma em s deve ser sobre estados de $(N-1)$ partículas.

Introduzimos a seguinte notação

$$\omega_n = E_n(N+1) - E_0(N+1) \quad \text{tal que}$$

$$\omega_n \sim E_n(N-1) - E_0(N-1) \quad \text{para } N \gg 1$$

e também

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N} \sim E_0(N+1) - E_0(N) \sim E_0(N) - E_0(N-1) \quad \text{para } N \gg 1$$

onde μ é o potencial químico. Logo, podemos escrever

$$G(k, t' - t) = \begin{cases} -i \sum_{\mathbf{s}} |\langle \beta_{\mathbf{s}}^* \psi(\mathbf{k}) \beta_0 \rangle|^2 e^{-i(\omega_{\mathbf{s}} + \mu)(t' - t)} & t' > t \\ i \sum_{\mathbf{s}} |\langle \beta_{\mathbf{s}}^* \psi(\mathbf{k}) \beta_0 \rangle|^2 e^{i(\omega_{\mathbf{s}} - \mu)(t' - t)} & t' < t \end{cases}$$

Usando a definição da função espectral

$$\rho^+(k, \omega) = \sum_{\mathbf{s}} |\langle \beta_{\mathbf{s}}^* \psi(\mathbf{k}) \beta_0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{s}})$$

$$\rho^-(k, \omega) = \sum_{\mathbf{s}} |\langle \beta_{\mathbf{s}}^* \psi(\mathbf{k}) \beta_0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{s}})$$

obtemos

$$G(k, t' - t) = \begin{cases} -i \int_0^{\infty} d\omega \rho^+(k, \omega) e^{-i(\omega + \mu)(t' - t)} & t' > t \\ i \int_0^{\infty} d\omega \rho^-(k, \omega) e^{i(\omega - \mu)(t' - t)} & t' < t \end{cases}$$

que também pode ser escrito sobre a forma

$$G(k\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} d\omega' \left[\frac{\rho^+(k\omega')}{\omega - \mu - \omega' + i\varepsilon} + \frac{\rho^-(k\omega')}{\omega - \mu + \omega' - i\varepsilon} \right]$$

conhecida como representação de Lehmann. Isto pode verificarse tomando a transformada de Fourier de $G(kt)$ no espaço de frequência.

Separando as partes real e imaginária de $G(k\omega)$ e usando

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{E} \mp i\pi \delta(E)$$

obtemos

$$\operatorname{Re} G(k\omega) = P \int_0^{\infty} d\omega' \left[\frac{\rho^+(k\omega')}{\omega - \mu - \omega'} + \frac{\rho^-(k\omega')}{\omega - \mu + \omega'} \right]$$

$$\operatorname{Im} G(k\omega) = \begin{cases} -\pi \rho^+(k\omega - \mu) & \omega > \mu \\ \pi \rho^-(k\omega - \mu) & \omega < \mu \end{cases}$$

e, a partir disto, tem-se uma relação entre as partes real e imaginária de $G(k\omega)$

$$\operatorname{Re} G(k\omega) = \frac{P}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega' \left[\frac{-\operatorname{Im} G(k\omega' + \mu)}{\omega - \mu - \omega'} + \frac{\operatorname{Im} G(k\mu - \omega')}{\omega - \mu + \omega'} \right]$$

$$\operatorname{Re} G(k\omega) = \frac{P}{\pi} \left[\int_{\mu}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\mu} \right] d\omega' \frac{\operatorname{Im} G(k\omega')}{\omega' - \omega} = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} G(k\omega') \operatorname{sg}(\omega' - \mu)}{\omega' - \omega}$$

onde

$$\operatorname{sg}(\omega' - \mu) = \begin{cases} + & \text{si } \omega' > \mu \\ - & \text{si } \omega' < \mu \end{cases}$$

Devemos ter presente que uma função é analítica no semiplano superior ou inferior, quando verifica

$$\operatorname{Re} L(\omega) = \pm \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} L(\omega')}{\omega' - \omega} \quad \begin{array}{l} + \text{ semiplano superior} \\ - \text{ semiplano inferior} \end{array}$$

Definimos duas funções de Green com as seguintes propriedades analíticas:

G_R função analítica no semiplano superior, chamada função de Green retardada.

G_A função analítica no semiplano inferior, chamada função de Green avançada.

$$\operatorname{Re} G_R = \operatorname{Re} G_A = \operatorname{Re} G$$

$$\operatorname{Im} G_R = \operatorname{Im} G \operatorname{sg}(\omega - \mu)$$

$$\operatorname{Im} G_A = -\operatorname{Im} G \operatorname{sg}(\omega - \mu)$$

Com esta definição vemos que G_R coincide com G^* no semi-eixo $(\omega - \mu) < 0$, enquanto que G_A coincide com G^* para $(\omega - \mu) > 0$, isto é

$$G_R(k\omega) = \begin{cases} G(k\omega) & \omega > \mu \\ G^*(k\omega) & \omega < \mu \end{cases}$$

$$G_A(k\omega) = \begin{cases} G^*(k\omega) & \omega > \mu \\ G(k\omega) & \omega < \mu \end{cases}$$

Significado dos polos.- Vamos agora abordar a interpretação dos polos da função de Green.

Se tivermos um sistema de Fermi descrito no instante t' pela função de onda

$$\psi_0(t') = \tilde{\Psi}_k^*(t') \phi_1(t')$$

onde $\tilde{\Psi}_k^*(t')$ é o operador de criação na representação de interação para uma partícula com momento k . $\phi_1(t')$ é a função de onda do estado fundamental do sistema na mesma representação.

Em um tempo $t > t'$, a função de onda do sistema terá a forma

$$\psi(t) = S(t)S^{-1}(t')\psi_0(t') = S(t)S^{-1}(t')\tilde{\psi}^+(t')\phi_1(t')$$

A amplitude de probabilidade do estado $\psi_0(t)$ é

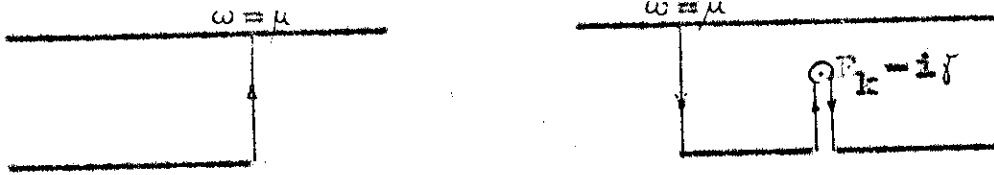
$$\begin{aligned} \langle \psi_0^*(t)\psi(t) \rangle &= \langle \phi_1^*(t)\tilde{\psi}_k(t)S(t)S^{-1}(t')\tilde{\psi}_k^+(t')\phi_1(t') \rangle = \\ &= \langle \phi_0^*S^{-1}(t)\tilde{\psi}_k(t)S(t)S^{-1}(t')\tilde{\psi}_k^+(t')S(t')\phi_0 \rangle = \\ &= \langle \phi_0^*\tilde{\psi}_k(t)\tilde{\psi}_k^+(t')\phi_0 \rangle = iG(kt-t') \quad t > t' \end{aligned}$$

Para calcular $G(kt-t')$ a partir de $G(k\omega)$ devemos considerar sua expressão transformada

$$G(kt-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} G(k\omega) e^{-i\omega(t-t')}$$

Em vista da função $G(k\omega)$ não ser em geral analítica em todo o espaço, podemos expressá-la pelas funções G_R e G_A nas regiões respectivas em que são analíticas. Dividimos a integral em duas partes, uma de $-\infty$ a μ e a outra de μ a ∞ . Na primeira, $G = G_A$ e na segunda $G = G_R$.

Conforme mostramos anteriormente, G_A é analítica no plano inferior. G_R tem, em geral, uma singularidade que suponemos ser um polo simples, muito próxima do eixo real, $\omega = \Gamma_k - i\gamma$, onde $\gamma \ll \Gamma_k - \mu$. Para nosso cálculo, vamos deformar o contorno, conforme mostram as figuras:



Se as partes horizontais se levam ao infinito no semi-plano inferior, então, devido ao factor exponencial, $\exp\{-i\omega t\}$ ($t > 0$), esta contribuição tende a anular-se. Então só nos restam as integrações ao longo das linhas verticais e da parte que rodeia o polo. Temos assim

$$G(kt) = \int_{\mu - i\infty}^{\mu} \frac{d\omega}{2\pi} G_A(k\omega) e^{-i\omega t} + \int_{\mu}^{\mu - i\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_R(k\omega) e^{-i\omega t} - i a e^{-iE_k t - \gamma t}$$

onde a é o resíduo de G_R no polo. Reduzindo as integrais, resulta

$$G(kt) = \int_{\mu}^{\mu - i\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (G_R - G_A) e^{-i\omega t} - i a e^{-iE_k t - \gamma t}$$

Por agora vamos-nos preocupar com a integral, deixando de lado o termo do resíduo

$$\int_{\mu}^{\mu - i\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (G_R - G_A) e^{-i\omega t} = \int \frac{d\omega}{2\pi} (G_R - G_A) e^{-i\omega t} = 2i \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} G_R e^{-i\omega t}$$

Se considerarmos $t \gg \frac{1}{E_k - \mu}$, isto é, um tempo longo, e substituindo, aproximadamente, G_R por

$$G_R \sim \frac{a}{\omega - E_k + i\gamma}$$

tem-se

$$i \int_{\mu}^{\mu-i\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{-a e^{-i\omega t}}{\gamma^2 + [\omega - E_k]^2} = - \frac{\gamma e^{-i\mu t}}{\pi} a \int_0^{\infty} \frac{e^{-ut} du}{\gamma^2 + [iu + E_k - \mu]^2}$$

onde se fez uma mudança de variável de integração, $u = i(\omega - \mu)$

Dado que $t \gg \frac{1}{E_k - \mu}$, esta integral é aproximadamente igual a

$$- \frac{\gamma a e^{-i t}}{\pi t [E_k - \mu]}$$

Supondo t grande, mas não tão grande comparado com $1/\gamma$, resulta que a integral é desprezível face ao termo do resíduo. Então tem-se

$$iG(k,t) \sim a e^{-iE_k t - \gamma t}$$

Se no estado inicial havia uma partícula livre com

momentum k e energia E_k^0 , o valor da amplitude de probabilidade para $\psi_0(t)$ deveria ser da ordem de $\exp[-i E_k^0 (t-t')]$. O que nesse resultado indica, é um pacote de onda que se comporta como uma quase-partícula com energia E_k . Assim, a energia da quase-partícula é determinada pelos polos de G_R no semiplano inferior.

Uma análise análoga permite-nos afirmar que os polos de G_A no semiplano superior são a energia de um buraco.

2.5.- Funções de Green para o estado ODS de Overhauser

Consideremos o Hamiltoniano efetivo, da forma em que é escrito em segunda quantização

$$H = \int d\tau \psi^\dagger(\tau t) \frac{\nabla^2}{2m} \psi(\tau t) + \\ + \frac{1}{2} \int d\tau_1 d\tau_2 \psi^\dagger(\tau_1 t) \psi^\dagger(\tau_2 t) V(x_1 - x_2) \psi(\tau_2 t) \psi(\tau_1 t)$$

onde $\psi(\tau t)$ e $\psi^\dagger(\tau t)$ são os operadores de campo, de absorção e de criação, respectivamente, para partículas de Fermi, na representação de Heisenberg. A integral em τ indica soma sobre spin e a integração sobre o espaço.

Equação de movimento.- A equação de movimento do operador de campo é

$$\frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} = i [\mathbb{H}, \psi(z, t)]_-$$

ou melhor

$$i \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} = [\psi(z, t), \mathbb{H}]_-$$

onde $[\mathbb{H}, \psi]_-$ representa o comutador dos operadores \mathbb{H} e ψ .
Substituindo a expressão do Hamiltoniano, temos

$$i \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} = \int dz_1 [\psi(z, t), \psi^*(z_1, t) \frac{p^2}{2m} \psi(z_1, t)]_- + \\ + \frac{1}{2} \int dz_1 dz_2 [\psi(z, t), \psi^*(z_1, t) V(z_1 - z_2) \psi(z_2, t) \psi(z_1, t)]_-$$

Analisando o primeiro termo do segundo membro

$$I = \int dz_1 [\psi(z, t), \psi^*(z_1, t) \frac{p^2}{2m} \psi(z_1, t)]_- \\ = \int dz_1 [\psi(z, t) \psi^*(z_1, t) \frac{p^2}{2m} \psi(z_1, t) - \psi^*(z_1, t) \frac{p^2}{2m} \psi(z_1, t) \psi(z, t)]$$

Entretanto, segundo as regras de anticomutação

$$\psi(z_1 t') \psi(z' t') = -\psi(z' t') \psi(z_1 t')$$

$$\psi(z' t') \psi^*(z_1 t') + \psi^*(z_1 t') \psi(z' t') = \delta(z_1 - z')$$

obtemos

$$\begin{aligned} \text{I} &= \int dz_1 [\psi(z' t') \psi^*(z_1 t') + \psi^*(z_1 t') \psi(z' t')] \frac{p^2}{2m} \psi(z_1 t') \\ &= \int dz_1 \delta(z_1 - z') \frac{p^2}{2m} \psi(z_1 t') = \frac{p^2}{2m} \psi(z' t') \end{aligned}$$

Agora, o segundo termo do segundo membro

$$\begin{aligned} \text{II} &= \int dz_1 dz_2 [\psi(z' t'), \psi^*(z_1 t') \psi^*(z_2 t') V(x_1 - x_2) \psi(z_2 t') \psi(z_1 t')] - \\ &= \int dz_1 dz_2 V(x_1 - x_2) [\psi(z' t') \psi^*(z_1 t') \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') - \\ &\quad - \psi^*(z_1 t') \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t')] \end{aligned}$$

Por simplicidade vamos-nos preocupar apenas com

$$\psi(z' t') \psi^*(z_1 t') \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') =$$

$$\begin{aligned}
&= [\delta(z_1 - z') - \psi^*(z_1 t') \psi(z' t')] \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \\
&= \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \delta(z_1 - z') - \\
&\quad - \psi^*(z_1 t') [\delta(z_2 - z') - \psi^*(z_2 t') \psi(z' t')] \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \\
&= \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \delta(z_1 - z') - \\
&\quad - \psi^*(z_1 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \delta(z_2 - z') + \\
&\quad + \psi^*(z_1 t') \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t')
\end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned}
\text{II} &= \int dz_1 dz_2 V(x_1 - x_2) \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \delta(z_1 - z') - \\
&\quad - \int dz_1 dz_2 V(x_1 - x_2) \psi^*(z_1 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \delta(z_2 - z')
\end{aligned}$$

e, na segunda integral, substituindo z_1 por z_2 e vice-versa, resulta

$$\begin{aligned}
\text{II} &= \int dz_1 dz_2 [V(x_1 - x_2) + V(x_2 - x_1)] \psi^*(z_2 t') \psi(z_2 t') \psi(z_1 t') \delta(z_1 - z') \\
&= \int dz_1 [V(x_1 - x_1) + V(x_1 - x_1)] \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t')
\end{aligned}$$

Admitindo que o potencial de interação $V(x)$ depende apenas do módulo, tem-se

$$II = 2 \int d^3x_1 V(x_1 - x') \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t')$$

Substituindo I e II na equação de movimento, obtemos

$$i \frac{\partial \psi(z' t')}{\partial t'} = \frac{p^2}{2m} \psi(z' t') + \int d^3x_1 V(x_1 - x') \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t')$$

e portanto

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2}{2m} \right) \psi(z' t') - \int d^3x_1 V(x_1 - x') \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t') = 0$$

Operando pela esquerda sobre $\psi^*(zt)$ e formando o valor médio sobre o estado fundamental do sistema (estado ODS de Overhauser), temos

$$\begin{aligned} \langle T_t \left[i \frac{\partial}{\partial t'} \psi(z' t') \psi^*(zt) \right] \rangle - \langle T_t \left[\frac{p^2}{2m} \psi(z' t') \psi^*(zt) \right] \rangle - \\ - \int d^3x_1 V(x_1 - x') \langle T_t \left[\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t') \psi^*(zt) \right] \rangle = 0 \end{aligned}$$

porém, tendo em conta que

$$\begin{aligned} \langle T_t [\psi(z't') \psi^*(zt)] \rangle &= \theta(t'-t) \langle \psi^*(zt) \psi(z't') \rangle - \\ &= [1 - \theta(t'-t)] \langle \psi^*(zt) \psi(z't') \rangle \end{aligned}$$

onde

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

resulta

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t'} \langle T_t [\psi(z't') \psi^*(zt)] \rangle &= \delta(t'-t) \langle \psi(z't') \psi^*(zt) \rangle + \\ &+ \delta(t'-t) \langle \psi^*(zt) \psi(z't') \rangle + \theta(t'-t) \left\langle \frac{\partial}{\partial t'} \psi(z't') \psi^*(zt) \right\rangle - \\ &- [1 - \theta(t'-t)] \left\langle \psi^*(zt) \frac{\partial}{\partial t'} \psi(z't') \right\rangle = \\ &= \delta(t'-t) \langle [\psi(z't'), \psi^*(zt)]_+ \rangle + \langle T_t \left[\frac{\partial}{\partial t'} \psi(z't') \psi^*(zt) \right] \rangle \end{aligned}$$

Assim

$$\begin{aligned} \pm \frac{\partial}{\partial t'} G(z't', zt) &= \frac{\partial}{\partial t'} \langle T_t [\psi(z't') \psi^*(zt)] \rangle = \\ &= \langle T_t \frac{\partial}{\partial t'} \psi(z't') \psi^*(zt) \rangle + \delta(t'-t) \delta(z'-z) \end{aligned}$$

logo

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right] G(z't', zt) +$$

$$+ \int d^3x_1 V(x_1 - x') \langle T_{t'} [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z't') \psi^*(zt)] \rangle =$$

$$= \delta(t' - t) \delta(z' - z)$$

que é a equação de movimento para a função de Green.

Equação de movimento aproximada.— Usaremos agora a idéia de Overhauser, com respeito à formação de pares ligados elétron-buraco, com spins opostos, cujos momentum diferem de um valor fixo C .

É importante observar que, no que segue usaremos unidades naturais.

A idéia de pares ligados permite considerar que a diferença entre o estado fundamental e o da esfera cheia de Fermi é devida apenas a estes pares. Estes encontram-se em repouso, como um todo, no estado fundamental. Isto equivale a dizer que a interação apenas deu origem à formação de pares ligados. Se, além disso, desprezamos o efeito de espalhamento, podemos escrever uma equação aproximada da função de Green, $G(z't', zt)$. O fato de desprezar o efeito de espalha-

mento permite expressar o valor médio de um produto de operadores como um produto de valores médios. Como nesse interesse reside nos pares elétron-buraco, que são interpretados por uma função de Green de uma partícula, podemos omitir os produtos de operadores: $\psi\psi$ e $\psi^*\psi^*$. De acordo com isto, escrevemos a seguinte aproximação:

$$\begin{aligned}
 & \langle T_t [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z_1 t) \psi^*(z_1 t)] \rangle = \\
 & = \langle \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \rangle \langle T_t [\psi(z_1 t') \psi^*(z_1 t)] \rangle = \\
 & = - \langle \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \rangle \langle T_t [\psi(z_1 t') \psi^*(z_1 t)] \rangle = \\
 & = G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z_1 t' z_1 t) - G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z_1 t' z_1 t)
 \end{aligned}$$

que, substituída na equação do movimento, nos dá

$$\begin{aligned}
 & [i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{\nabla^2(z')}{2m}] G(z' t' z t) + \\
 & + i \int d^3z_1 V(z_1 - z') [G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z' t' z t) - G(z' t' z t + 0) G(z_1 t' z t)] = \\
 & = \delta(t' - t) \delta(z' - z)
 \end{aligned}$$



Observamos que, por $t' \rightarrow 0$ queremos expressar um tempo infinitesimalmente superior a t' , não obstante seja idêntico a t' . Serve apenas para indicar a ordem em que os operadores devem aparecer na função de Green. Por vezes não se escreve $t' \rightarrow 0$, subentendendo-se que eles respeitam essa ordem.

Soluções no espaço ($k\omega$).— Tendo-se invariância rotacional, a função de Green depende apenas da diferença ($t'-t$). Dêste modo, sua transformada no espaço de frequência, ω , só depende de uma frequência. Sua transformada no espaço de momento depende, em geral, de dois momentos.

Logo

$$G(t't'zt) = G(x't't'xzt) = \sum_{kk'} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(k't'\omega k\omega) e^{-i\omega(t'-t) + i(k'x' - kx)}$$

onde o volume se considera unitário.

Esse sistema consiste de um gás de elétrons movendo-se num potencial autoconsistente, que depende do spin. Se se considera que os elétrons com spin paralelo formam um sistema homogêneo, a função de Green para spins iguais depende da diferença de coordenadas espaciais ($x'-x$). Isto implica na dependência de um só k , no espaço de momento.

Por sua própria definição, a função de Green corres-

ponde à criação de uma partícula (absorção de um buraco) e à absorção de outra ou da mesma partícula (criação de outro ou de mesmo buraco), ou vice-versa. Isto significa que, em geral, a função de Green está ligada à formação de pares partícula-buraco. Em nosso caso, quando os spins são antiparalelos, a função de Green refere-se somente aos pares ligados elétron-buraco. Por esta razão, a transformada de Fourier da função de Green de spins opostos depende ainda de um só k , devido à condição $k - k' = Q$.

Overhauser estabelece que a elétrons com spin para cima se associa um vetor de onda k , enquanto aos com spin para baixo o vetor de onda $k + Q$. Introduzindo a notação

$$k_{\sigma} = \begin{cases} k & \text{para } \sigma = \uparrow \\ k + Q & \text{para } \sigma = \downarrow \end{cases}$$

a transformada de Fourier de $G(x' \sigma' t' x \sigma t)$, pode ser expressada como

$$G(x' \sigma' t' x \sigma t) = \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(k_{\sigma}, \sigma' \omega k_{\sigma} \sigma) e^{-i\omega(t'-t) + i(k_{\sigma}, x' - k_{\sigma} x)}$$

de onde

$$i \frac{\partial}{\partial t'} G(x' \sigma' t' | x \sigma t) = \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(k_{\sigma'} \sigma' \omega k_{\sigma}) e^{-i[\omega(t'-t) + (k_{\sigma'} x' - k_{\sigma} x)]} \omega$$

$$\frac{\partial^2(x')}{2m} G(x' \sigma' t' | x \sigma t) = \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(k_{\sigma'} \sigma' \omega k_{\sigma}) e^{-i[\omega(t'-t) + (k_{\sigma'} x' - k_{\sigma} x)]} \frac{k_{\sigma'}^2}{2m}$$

A equação de movimento expressada em componentes de Fourier é

$$\begin{aligned} & \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} \left(\omega - \frac{k^2}{2m} \right) G(k_{\sigma'} \sigma' \omega k_{\sigma}) e^{i[(k_{\sigma'} x' - k_{\sigma} x) - \omega(t'-t)]} + \\ & i \int dx_1 \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\sigma_1 q k k'} V_q e^{iq(x'-x_1)} [G(k_{\sigma_1'} \sigma_1' - 0 k_{\sigma_1'} \sigma_1') G(k_{\sigma'} \sigma' \omega k_{\sigma}) e^{i(k_{\sigma'} x' - k_{\sigma} x)} - \\ & - G(k_{\sigma'} \sigma' - 0 k_{\sigma_1'} \sigma_1') G(k_{\sigma_1'} \sigma_1' \omega k_{\sigma}) e^{i(k_{\sigma_1'} x' - k_{\sigma_1'} x_1 + k_{\sigma_1} x_1 - k_{\sigma} x)}] e^{-i\omega(t'-t)} = \\ & = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} e^{i(kx' - kx) - i\omega(t'-t)} \delta_{\sigma' \sigma} \end{aligned}$$

Integrando em x_1 e observando que $k_{\sigma} - k_{\sigma'} = k_{\sigma_1} - k_{\sigma_1'}$, podemos tomar a componente (k, ω)

$$\begin{aligned}
 & \left(\omega - \frac{k_\sigma^2}{2m} \right) G(k_\sigma, \sigma; \omega, k_\sigma, \sigma) + \\
 & + i \sum_{\sigma_1 k'} V_0 G(k_{\sigma_1}^{\sigma_1} - 0, k_{\sigma_1}^{\sigma_1}) G(k_\sigma, \sigma; \omega, k_\sigma, \sigma) - \\
 & - i \sum_{\sigma_1 k'} V(k' - k) G(k_{\sigma_1}^{\sigma_1} - 0, k_{\sigma_1}^{\sigma_1}) G(k_{\sigma_1}^{\sigma_1}, \omega, k_\sigma, \sigma) = \delta_{\sigma, \sigma}
 \end{aligned}$$

Definindo

$$\tilde{E}_{k_\sigma} = \frac{k_\sigma^2}{2m} - iV_0 \sum_{\sigma_1 k'} G(k_{\sigma_1}^{\sigma_1} - 0, k_{\sigma_1}^{\sigma_1}) + i \sum_{k'} V(k' - k) G(k_{\sigma_1}^{\sigma_1} - 0, k_{\sigma_1}^{\sigma_1})$$

$$\Delta_k^\sigma = -i \sum_{k'} V(k' - k) G(k_{\sigma_1}^{\sigma_1} - 0, k_{\sigma_1}^{\sigma_1}) = (\Delta_k^{-\sigma})^*$$

e efetuando o somatório em σ_1 , obtemos duas equações

$$\sigma' = \sigma \quad \left(\omega - \tilde{E}_{k_\sigma} \right) G(k_\sigma, \sigma; \omega, k_\sigma, \sigma) + \Delta_k^\sigma G(k_{\sigma_1}^{\sigma_1} - 0, k_{\sigma_1}^{\sigma_1}) = 1$$

$$\sigma' = -\sigma \quad \left(\omega - \tilde{E}_{k_{-\sigma}} \right) G(k_{-\sigma}, -\sigma; \omega, k_\sigma, \sigma) + \Delta_k^{-\sigma} G(k_\sigma, \sigma; \omega, k_\sigma, \sigma) = 0$$

de onde resulta

$$G(\underline{k}, \omega | \underline{k}_\sigma, \sigma) = \frac{\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma}}{(\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}})(\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma}) - \Delta_{\underline{k}}^2}$$

$$G(\underline{k}_{-\sigma}, \omega | \underline{k}_\sigma, \sigma) = \frac{-\Delta_{\underline{k}}^{-\sigma}}{(\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma})(\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_{-\sigma}}) - \Delta_{\underline{k}}^2}$$

que são as funções de Green, aproximadas, para o estado de Overhauser.

2.6.- Espectro de Energia

Sabemos que o espectro de energia é dado pelos polos da função de Green. Assim, temos

$$(\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma})(\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_{-\sigma}}) - \Delta_{\underline{k}}^2 = 0$$

de onde resulta

$$\omega_{\underline{k}} = \frac{1}{2}(\tilde{\epsilon}_{\underline{k}_{-\sigma}} - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\tilde{\epsilon}_{\underline{k}_{-\sigma}} - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma})^2 + \Delta_{\underline{k}}^2}$$

sendo

$$\epsilon_{k\sigma}^{\sigma} = \frac{k^2}{2m} + V_0 \sum_{k'} \langle c_{k'\sigma}^+ c_{k'\sigma} \rangle - \sum_{k'} V(k'-k) \langle c_{k'\sigma}^+ c_{k'\sigma} \rangle$$

$$\Delta_k^{\sigma} = \sum_{k'} V(k'-k) \langle c_{k'\sigma}^+ c_{k'\sigma} \rangle$$

Os valores médios não são nada mais do que as funções de Green exprimidas explicitamente nos operadores de absorção e de criação.

2.7.- Equação do gap de Energia

Temos uma relação de autoconsistência na própria definição do gap de energia

$$\begin{aligned} \Delta_k^{\sigma} &= -i \sum_{k'} V(k'-k) G(k'\sigma - 0, k'_{\sigma} - \sigma) = \\ &= -i \sum_{k'} V(k'-k) \lim_{t \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\omega} e^{-i\omega t} G(k'\sigma, \omega, k'_{\sigma} - \sigma) \end{aligned}$$

ou, substituindo a função de Green

$$\Delta_k^G = -i \sum_{k'} V(k'-k) \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{-\Delta_{k'}^G}{(\omega - \tilde{\omega}_{k'}^+)(\omega - \tilde{\omega}_{k'}^-) - \Delta_{k'}^2}$$

Observamos que esta integral é divergente nos polos da função de Green, ω_k^+ e ω_k^- .

Passando ao plano complexo de ω , obtemos a equação do gap de energia dado por Overhauser, se usamos de contorno



Como a integral é tomada no limite $t \rightarrow -0$, isto implica que a integral deve ser avaliada no semiplano superior

$$\Delta_k^G = i \sum_{k'} V(k'-k) \Delta_{k'}^G \oint \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_{k'}^+)(\omega - \omega_{k'}^-)}$$

e, pelo teorema do resíduo

$$\Delta_k^G = i \sum_{k'} V(k'-k) \Delta_{k'}^G \frac{1}{2\pi} 2\pi i \frac{1}{\omega_{k'}^- - \omega_{k'}^+}$$

portanto

$$\Delta_k^G = \sum_{k'} V(k'-k) \frac{\Delta_{k'}^G}{2 \sqrt{\frac{1}{4} (\epsilon_{k'_G} - \epsilon_{k_G})^2 + \Delta_{k'}^2}}$$

que é a equação do gap de energia apresentada por Overhauser.

3 FUNÇÕES DE GREEN PARA O ESTADO ODS DE OVERHAUSER PARA TEMPERATURAS DIFERENTES DE ZERO ABSOLUTO

Os resultados para o estado ODS de Overhauser, obtidos no capítulo anterior, se aplicam apenas à temperatura zero absoluto. É nesse propósito generalizar o estudo para temperaturas diferentes de zero. Desde já, devemos definir novas funções de Green que terão características essencialmente diferentes das já definidas. Uma vez isto alcançado, o tratamento será muito similar. Conservaremos a convenção de utilizar unidades naturais.

No formalismo das funções de Green existe a chamada "função de Green termodinâmica" (A2), cuja principal característica, que a distingue da já definida para temperatura zero, é sua dependência de um tempo imaginário, fictício, definido no intervalo $(0, 1/T)$, sendo T a temperatura em unidades de frequência. Assim sendo, os limites de integração no tempo não são mais $(-\infty, \infty)$, como no caso de temperatura zero absoluto, mas sim $(0, 1/T)$. Vejamos sua definição e algumas implicações da mesma.

3.1. - Função de Green Termodinâmica de uma partícula

Definição.- A função de Green termodinâmica de uma partícula se define como o valor médio térmico de dois operadores de campo:

$$G(z't'; zt) = - \text{Sp} \left\{ e^{\frac{(\Omega + \mu N - H)}{T}} T_t \psi(z't') \psi^\dagger(zt) \right\}$$

os operadores de campo ψ e ψ^\dagger se definem como

$$\psi(z't') = e^{(H - \mu N)t'} \psi(z') e^{-(H - \mu N)t'}$$

$$\psi^\dagger(zt) = e^{(H - \mu N)t} \psi^\dagger(z) e^{-(H - \mu N)t}$$

onde $\psi(z')$ e $\psi^\dagger(z)$ são os operadores de campo na representação de Schrödinger.

É fácil observar que os operadores de campo $\psi(zt)$ e $\psi^\dagger(zt)$ não são hermitianos conjugados um a outro. Podemos dizer que são operadores do tipo Heisenberg.

T_t é ainda o operador cronológico de Wick e μ o potencial químico. O operador $\text{Sp} \{ \exp [(\Omega + \mu N - H)/T] \dots \}$ é o valor médio estatístico de Gibbs que, a seguir, denotaremos

simplesmente por $\langle \quad \rangle$.

Esta função de Green é também descontínua para $t' = t$.

A densidade de partículas, como no caso anterior, é dada por

$$n(x) = \pm \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ t' \rightarrow t-0 \\ t \rightarrow 0}} \sum_{\sigma} G(x'_{\sigma} t'_{\sigma} | x_{\sigma} t) \quad \begin{array}{l} + \text{ Fermi} \\ - \text{ Bose} \end{array}$$

agora como uma função de temperatura.

Relação entre funções de Green.— Ser-nos-á útil, para observar algumas propriedades da função de Green termodinâmica, expressá-la diretamente em função dos operadores de Schrödinger:

$$G(z' t' | z t) = -\text{Sp} \left\{ e^{-\frac{\Omega + \mu N - H}{T}} e^{(H - \mu N)t'} \psi(z') e^{-(H - \mu N)(t' - t)} \psi^*(z) e^{-(H - \mu N)t} \right\}$$

$t' > t$

$$G(z' t' | z t) = \pm \text{Sp} \left\{ e^{-\frac{\Omega + \mu N - H}{T}} e^{(H - \mu N)t} \psi^*(z) e^{-(H - \mu N)(t' - t)} \psi(z) e^{-(H - \mu N)t'} \right\}$$

$t' < t$

sendo o sinal $+$ para um sistema de Fermi e o sinal $-$ para um sistema de Bose.

Usando a propriedade do Spur, Sp , ou traço de um produto de operadores, temos

$$Sp(AB\dots DF) = \sum_{ijk\dots} A_{ij} B_{jk} \dots D_{lm} F_{mi} = \sum_{ijk\dots} B_{jk} \dots D_{lm} F_{mi} A_{ij}$$

$$Sp(AB\dots DF) = Sp(B\dots DFA)$$

isto é, o resultado não se altera se permutarmos cíclicamente os operadores. Vemos que a função de Green depende da diferença de tempo $(t'-t)$, portanto definida no intervalo $(-1/T, 1/T)$.

Usando o anterior, podemos escrever para $t' < t$

$$\begin{aligned} G(t'-t < 0) &= \pm Sp \left\{ e^{-\frac{\Omega}{T} (H-N)(t'-t)} \psi(z') e^{-\frac{1}{T} (H-N)(t'-t+\frac{1}{T})} \psi^*(z) \right\} = \\ &= \pm Sp \left\{ e^{-\frac{\Omega + H - N}{T} (H-N)(t'-t+\frac{1}{T})} \psi(z') e^{-\frac{1}{T} (H-N)(t'-t+\frac{1}{T})} \psi^*(z) \right\} \end{aligned}$$

mas como

$$t'-t < 0 \quad e \quad |t'-t| < \frac{1}{T}$$

tem-se

$$0 < t' - t + \frac{1}{T} < \frac{1}{T}$$

e, portanto

$$G(t' - t < 0) = \mp G(t' - t + \frac{1}{T})$$

relação importante entre a função de Green para $t' - t < 0$ e o "tempo" positivo (as aspas indicam que se trata, como já sabemos, de um tempo imaginário).

Esta propriedade vai permitir-nos dizer algo, da função de Green transformada no tempo.

Propriedade.— Como vimos, a função de Green é definida no intervalo $(-1/T, 1/T)$ e, conseqüentemente, seu desenvolvimento natural em série de Fourier é dado por

$$G(t) = T \sum_n e^{-i\omega_n t} G(\omega_n)$$

$$G(\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-1/T}^{1/T} dt e^{i\omega_n t} G(t)$$

onde $\omega_n = n\pi T$.

Não é necessário efetuar o somatório em n , tanto para Bosons quanto para Fermions. As funções de Green não são em cada caso, tódas diferentes de zero, conformas mostraremos a seguir.

Considerando $G(\omega_n)$, vamos separar a integral em duas

$$G(\omega_n) = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} dt e^{i\omega_n t} G(t) + \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^0 dt e^{i\omega_n t} G(t)$$

Na segunda integral $t < 0$. Logo

$$G(t) = \mp G(t + \frac{1}{T}) \quad \begin{array}{l} - : \text{ Fermion} \\ + : \text{ Boson} \end{array}$$

e, portanto

$$\begin{aligned} G(\omega_n) &= \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} dt e^{i\omega_n t} G(t) \mp \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^0 dt e^{i\omega_n t} G(t + \frac{1}{T}) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} dt e^{i\omega_n t} G(t) \mp \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} dt e^{i\omega_n (t - \frac{1}{T})} G(t) \\ &= \frac{1}{2} (1 \mp e^{-i\omega_n \frac{1}{T}}) \int_0^{\frac{1}{T}} dt e^{i\omega_n t} G(t) \end{aligned}$$

como ω_n é um múltiplo inteiro de π/T e levando em conta os respectivos sinais, temos sempre que

$$G(\omega_n) = \int_0^{\frac{1}{T}} dt e^{i\omega_n t} G(t)$$

com

$$\omega_n = \begin{cases} (2n+1)\pi/T & \text{para Fermion} \\ 2n\pi/T & \text{para Boson} \end{cases}$$

3.2.- Funções de Green termodinâmicas, aproximadas, de uma partícula, para o estado ODS de Overhauser

Deveríamos começar pela Hamiltoniana efetiva e obter as equações de movimento. Ocorre, entretanto, que o processo é inteiramente análogo ao caso de temperatura zero, salvo os valores médios são termodinâmicos. Teremos novamente o valor médio de quatro operadores e admitiremos que podem ser expressos pela função de Green de uma partícula, tal como no caso anterior. Isto significa que desprezamos o efeito de espalhamento e fazemos a mesma aproximação.

É importante observar que agora a derivada, na equação de movimento, será simplesmente $-\partial/\partial t$ pois a primeira função de Green depende do tempo imaginário, it , que de-

sigamos por t .

O resultado que se obtém é

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) G(z't', zt) -$$

$$- \int dz_1 V(x' - x_1) [G(z_1 t', z_1 t') G(z't', zt) - G(z't', z_1 t') G(z_1 t', zt)] =$$

$$= \delta(t' - t) \delta(z' - z)$$

A transformada em série de Fourier será agora

$$G(x'_\sigma, t' - t, x_\sigma) = T \sum_n \sum_k e^{-i\omega_n(t' - t)} e^{i(k'_\sigma x' - k_\sigma x)} G(k'_\sigma, \omega_n, k_\sigma)$$

onde, por convenção, o volumen = 1 e $\omega_n = (2n+1)\pi T$ para Fermion. Obtemos também

$$-\frac{\partial}{\partial t'} G(x'_\sigma, t' - t, x_\sigma) = T \sum_{\omega k} i\omega e^{-i\omega(t' - t) + i(k'_\sigma x' - k_\sigma x)} G(k'_\sigma, \omega, k_\sigma)$$

$$\frac{p_1^2}{2m} G(x_1, \sigma_1, t' - t, x_0) = T \sum_{\omega k} \frac{k_0^2}{2m} e^{-i\omega(t'-t) + i(k_0, x' - k_0 x)} G(k_0, \sigma_0, \omega, k_0, \sigma_0)$$

Assim, a equação de movimento, expressada em componentes de Fourier, é

$$\begin{aligned} T \sum_{\omega k} \left(i\omega - \frac{k_0^2}{2m} \right) G(k_0, \sigma_0, \omega, k_0, \sigma_0) e^{-i\omega(t'-t) + i(k_0, x' - k_0 x)} &= \\ -T \sum_{\omega k} \frac{e^{-i\omega(t'-t)}}{\omega k} \int d^3x V_q \left[G(k_0, \sigma_0, \omega, k_0, \sigma_0) e^{i(k_0, x' - k_0 x)} \right. &= \\ \left. - G(k_0, \sigma_0, \omega, k_0, \sigma_0) e^{i(k_0, x' - k_0 x)} \right] e^{-i\omega(t'-t) + i(k_0, x' - k_0 x)} &= \\ = T \sum_{\omega k} e^{-i\omega(t'-t) + i(k_0, x' - k_0 x)} \delta_{\sigma_0, \sigma_0} &= \end{aligned}$$

Integrando em x_1 , reordenando e tomando a componente (ωk) , obtemos

$$\begin{aligned}
 \left(i\omega - \frac{k^2}{2m} \right) G(k_{\sigma}, \sigma; \omega, k_{\sigma}) - \sum_{\underline{k}'} [V_0 G(k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1 - \sigma; k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1) G(k_{\sigma_1}, \sigma_1; \omega, k_{\sigma}) - \\
 - V(k-k') G(k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1 - \sigma; k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1) G(k_{\sigma_1}, \sigma_1; \omega, k_{\sigma})] = \delta_{\sigma, \sigma}
 \end{aligned}$$

Definindo as expressões

$$\tilde{\Sigma}_{k_{\sigma}} = \frac{k^2}{2m} + V_0 \sum_{\underline{k}'} G(k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1 - \sigma; k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1) - \sum_{\underline{k}'} V(k-k') G(k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1 - \sigma; k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1)$$

$$\Delta_{\underline{k}}^{\sigma} = \sum_{\underline{k}'} V(k-k') G(k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1 - \sigma; k_{\sigma_1}^{\prime}, \sigma_1) = (\Delta_{\underline{k}}^{-\sigma})^*$$

e efetuando o somatório em σ_1 podemos escrever

$$\left(i - \tilde{\Sigma}_{k_{\sigma}} \right) G(k_{\sigma}, \sigma; \omega, k_{\sigma}) + \Delta_{\underline{k}}^{\sigma} G(k_{\sigma}, -\sigma; \omega, k_{\sigma}) = \delta_{\sigma, \sigma}$$

de onde se obtêm as duas equações

$$\sigma' = \sigma \quad \left(i\omega - \tilde{\Sigma}_{k_{\sigma}} \right) G(k_{\sigma}, \sigma; \omega, k_{\sigma}) + \Delta_{\underline{k}}^{\sigma} G(k_{\sigma}, -\sigma; \omega, k_{\sigma}) = 1$$

$$\sigma' = -\sigma \quad \left(i\omega - \tilde{\Sigma}_{k_{-\sigma}} \right) G(k_{-\sigma}, -\sigma; \omega, k_{-\sigma}) + \Delta_{\underline{k}}^{-\sigma} G(k_{\sigma}, \sigma; \omega, k_{\sigma}) = 0$$

Resolvendo este sistema, resulta

$$G(\underline{k}_\sigma \omega \underline{k}'_\sigma) = \frac{i\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}'_\sigma}}{(i\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma})(i\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}'_\sigma}) - \Delta_{\underline{k}}^2}$$

$$G(\underline{k}_\sigma - \sigma \omega \underline{k}'_\sigma) = \frac{-\Delta_{\underline{k}}^{-\sigma}}{(i\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}_\sigma})(i\omega - \tilde{\epsilon}_{\underline{k}'_\sigma}) - \Delta_{\underline{k}}^2}$$

que são as funções de Green aproximadas para o estado ODS de Overhauser.

Formalmente, este resultado obtém-se a partir do obtido para temperatura zero, substituindo ω por $i\omega$. Agora o gap de energia, Δ , e as energias reduzidas, $\tilde{\epsilon}_{\underline{k}}$, dependem da temperatura.

3.3.- Equação do Gap Termodinâmico

Por definição

$$\Delta_{\underline{k}}^{\sigma} = \sum_{\underline{k}'} V(\underline{k}-\underline{k}') G(\underline{k}'_\sigma - \sigma \underline{k}'_\sigma) = T \sum_{\omega \underline{k}'} V(\underline{k}-\underline{k}') G(\underline{k}'_\sigma \omega \underline{k}'_\sigma - \sigma)$$

e substituindo a função de Green, por sua expressão calculada,

temos

$$\begin{aligned}\Delta_k^\sigma &= -T \sum_{k'} V(k-k') \frac{\Delta_{k'}^\sigma}{(i\omega - E_{k'})(i\omega - E_{k'}) - \Delta_{k'}^2} \\ &= - \sum_{k'} V(k-k') \Delta_{k'}^\sigma T \sum_{\omega} \frac{1}{(i\omega - \omega_k^+)(i\omega - \omega_k^-)}\end{aligned}$$

onde ω_k^+ e ω_k^- são as raízes da equação

$$(\omega - E_{k'}) (\omega - E_{k'}) - \Delta_{k'}^2 = 0$$

que já calculamos no Cap 2.

Como $\omega = \omega_n = (2n+1)\pi T$, temos que

$$\Delta_k^\sigma = - \sum_{k'} V(k-k') \Delta_{k'}^\sigma T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{[(2n+1)i\pi T - \omega_k^+][(2n+1)\pi T - \omega_k^-]}$$

Para o cálculo desta soma recordemos o método no plano complexo (T):

Tendo uma função $f(z)$ com polos em a_1, a_2, \dots, a_k , sendo os respectivos resíduos b_1, b_2, \dots, b_k , e convergindo

a zero como z^{-2} ou mais rapidamente, quando $z \rightarrow \infty$, resulta

$$1) \quad \sum_n f(n) = -\pi [b_1 \cot a_1 + b_2 \cot a_2 + \dots + b_k \cot a_k]$$

Em nosso caso vamos que

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{[(2n+1)i\pi T - \omega_k^+][(2n+1)i\pi T - \omega_k^-]} &= \\ &= \frac{T}{(2i\pi T)^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{[n + \frac{1}{2}(1 + i\frac{\omega_k^+}{T})][n + \frac{1}{2}(1 + i\frac{\omega_k^-}{T})]} \end{aligned}$$

cumpra a condição de tender a zero como z^{-2} , quando $z \rightarrow \infty$.

Usando a relação 1) tem-se

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \dots = \frac{\operatorname{th} \frac{\omega_k^+}{2T} - \operatorname{th} \frac{\omega_k^-}{2T}}{2(\omega_k^+ - \omega_k^-)}$$

Finalmente, obtém-se

$$\Delta_k^\sigma = \sum_{k'} V(k-k') \Delta_{k'}^\sigma = \frac{\operatorname{th} \frac{\omega_k^+}{2T} - \operatorname{th} \frac{\omega_k^-}{2T}}{2(\omega_k^+ - \omega_k^-)}$$

que é a equação do gap termodinâmico.

Esta equação dá-nos também a temperatura crítica - temperatura para a qual o estado ODS se anula - caracterizada por

$$\Delta_k = 0$$

É fácil confirmar que a equação do gap termodinâmico se reduz à equação do gap obtida no Cap. 2, fazendo convergir T a zero.

4 EQUAÇÕES DE TIPO GINZBURG-LANDAU EM ANTIFERROMAGNETISMO

4.1.- Soluções integrais para funções de Green aproximadas na presença de um campo elétrico fraco

Na presença de um potencial elétrico, $\phi(x)/e$, a energia cinética de um elétron será

$$\frac{p^2}{2m} + \phi(x)$$

Assim, a equação de movimento para a função de Green no estado de Overhauser é

$$\begin{aligned} & [-i \frac{\partial}{\partial t'} - \left(\frac{p^2(x')}{2m} + \phi(x') \right)] G(z', t'; zt) = \\ & - \int dx_1 V(x_1 - x') [G(z_1 t', z_1 t') G(z', t'; zt) - G(z', t'; z_1 t') G(z_1 t'; zt)] = \\ & = \delta(z' - z) \delta(t' - t) \end{aligned}$$

Já que a perturbação externa é constante no tempo, as funções

de Green continuam a depender da diferença $(t'-t)$. Logo, a componente de Fourier no espaço ω é

$$[i\omega - \frac{p^2}{2m} - \phi]G(z', \omega z) =$$

$$- \int dx_1 V(x_1 - x') [G(z_1 - 0, z_1) G(z', \omega z) - G(z' - 0, z_1) G(z_1, \omega z)] = \delta(z - z')$$

Realizando o somatório em ζ_1 , teremos

$$[i\omega - \frac{p^2}{2m} - \phi]G(z', \omega z) =$$

$$- \int dx_1 V(x_1 - x') \left[\sum_{\zeta_1} G(x_1 \zeta_1 - 0, x_1 \zeta_1) G(z', \omega z) - \right.$$

$$\left. - \sum_{\zeta_1} G(z' - 0, x_1 \zeta_1) G(x_1 \zeta_1, \omega z) \right] = \delta(z - z')$$

Para continuar, vamos primeiro admitir que a interação $V(x-x')$ é constante no espaço de momento, isto é, $V(x-x') = V \delta(x-x')$. Então, a equação se reduz a

$$[i\omega - \frac{p^2}{2m} - \phi]G(z', \omega z) =$$

$$- V \sum_{\zeta_1} G(x' \zeta_1 - 0, x' \zeta_1) G(z', \omega z) - V \sum_{\zeta_1} G(z' - 0, x' \zeta_1) G(x' \zeta_1, \omega z) = \delta(z - z')$$

Definimos agora as seguintes expressões

$$\xi^{\sigma'}(x') = \sqrt{\sum_{\sigma_1} G(x'_{\sigma_1} - 0, x'_{\sigma_1}) - G(x'_{\sigma_1} - 0, x'_{\sigma'})}$$

$$\Delta^{\sigma'}(x') = \sqrt{G(x'_{\sigma'} - 0, x'_{-\sigma'})} e^{iQ^{\sigma'} x'}$$

O fator $\exp(iQ^{\sigma'} x')$ é introduzido para ser uma definição consistente com a definição no espaço k . Aqui

$$Q^{\sigma} = \begin{cases} Q & \sigma = \uparrow \\ -Q & \sigma = \downarrow \end{cases}$$

Esta notação implica $Q^{-\sigma} = -Q^{\sigma}$.

A equação de movimento, com estas definições, se reduz a

$$\begin{aligned} [i\omega - \frac{p^2}{2m} - \beta - \xi^{\sigma'}] G(x'_{\sigma'} \omega, x_{\sigma}) &\rightarrow \\ &\rightarrow \Delta^{\sigma'}(x') G(x'_{-\sigma'} \omega, x_{\sigma}) e^{-iQ^{\sigma'} x'} = \delta(x-x') \delta_{\sigma'\sigma} \end{aligned}$$

de onde se obtém o seguinte par de equações

$$\sigma' = \sigma \quad [i\omega - \frac{p^2}{2m} - \beta - \xi^{\sigma}] G(x'_{\sigma} \omega, x_{\sigma}) + \Delta^{\sigma}(x') G(x'_{-\sigma} \omega, x_{\sigma}) e^{-iQ^{\sigma} x'} = \delta(x-x')$$

$$\sigma' = -\sigma \left[i\omega - \frac{p^2}{2m} - \beta + \xi^{-\sigma} \right] G(x' - \sigma \omega x \sigma) + \Delta^{-\sigma}(x') G(x' \sigma \omega x \sigma) e^{iQ^{\sigma} x'} = 0$$

agora, para o estado normal, isto é, quando $\Delta = 0$, temos

$$\left[i\omega - \frac{p^2}{2m} - \beta - \tilde{\xi}^{\sigma} \right] \tilde{G}(x' \sigma \omega x \sigma) = \delta(x - x')$$

onde \tilde{G} é a função de Green aproximada no estado normal, na presença de um campo elétrico. Considerando que $\tilde{\xi} = \xi$, podemos escrever as seguintes soluções integrais

$$1) \quad G(x' \sigma \omega x \sigma) = \tilde{G}(x' \sigma \omega x \sigma) - \int d^3y \tilde{G}(x' \sigma \omega y \sigma) \Delta^{\sigma}(y) G(y - \sigma \omega x \sigma) e^{-iQ^{\sigma} y}$$

$$2) \quad G(x' - \sigma \omega x \sigma) = - \int d^3y \tilde{G}(x' - \sigma \omega y - \sigma) \Delta^{-\sigma}(y) G(y \sigma \omega x \sigma) e^{iQ^{\sigma} y}$$

Restringindo nosso estado a temperaturas próximas à temperatura crítica, resulta Δ muito pequeno. Então, podemos exprimir as funções em potenciais de Δ . Faremos somente um desenvolvimento até à 3^a ordem, em Δ . Substituindo 2) em 1), obtemos

$$1') \quad G(x' \sigma \omega x \sigma) = \tilde{G}(x' \sigma \omega x \sigma) +$$

$$+ \int d^3y d^3z \tilde{G}(x' \sigma \omega y \sigma) \Delta^{\sigma}(y) \tilde{G}(y - \sigma \omega z - \sigma) \Delta^{-\sigma}(z) \tilde{G}(z \sigma \omega x \sigma) e^{iQ^{\sigma}(z-y)}$$

e análogamente 1') em 2)

$$2') \quad G(x' - \sigma \omega x \sigma) = - \int d^3 y \tilde{G}(x' - \sigma \omega y - \sigma) \Delta^{-\sigma}(y) \tilde{G}(y \sigma \omega x \sigma) - \\ - \int d^3 y d^3 z d^3 u \tilde{G}(x' - \sigma \omega y - \sigma) \Delta^{-\sigma}(y) \tilde{G}(y \sigma \omega z \sigma) \Delta^{\sigma}(z) \tilde{G}(z - \sigma \omega u - \sigma) \Delta^{-\sigma}(u) \times \\ \times \tilde{G}(u \sigma \omega x \sigma) e^{iQ^{\sigma}(y-z+u)}$$

Esta é uma solução integral que permite determinar a equação do gap de energia.

4.2.- Equação do gap de energia para temperaturas próximas à temperatura crítica.

Por definição, temos

$$\Delta^{-\sigma}(x') = V G(x' - \sigma - 0 x' \sigma) e^{-iQ^{\sigma} x'} = VT \sum_{\omega} G(x' - \sigma \omega x \sigma) e^{-iQ^{\sigma} x'}$$

Como já foi assinalado, o fator $\exp\{-iQ^{\sigma} x'\}$ introduziu-se para esta definição seja equivalente àquela no espaço k , com campo elétrico nulo. Sua verificação é imediata, expressando a função de Green em suas componentes de Fourier.

Assim, temos para o gap

$$\begin{aligned} \Delta^{-\sigma}(\mathbf{x}') = & -VT \sum_{\omega} \left[\int d^3y \tilde{G}(\mathbf{x}' - \sigma\omega\mathbf{y} - \sigma) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{y}) \tilde{G}(\mathbf{y}\sigma\omega\mathbf{x}'\sigma) e^{iQ^{\sigma}(\mathbf{y}-\mathbf{x}')} \right. \\ & + \int d^3y d^3z d^3u \tilde{G}(\mathbf{x}' - \sigma\omega\mathbf{y} - \sigma) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{y}) \tilde{G}(\mathbf{y}\sigma\omega\mathbf{z}\sigma) \Delta^{\sigma}(\mathbf{z}) \cdot \\ & \left. \cdot \tilde{G}(\mathbf{z} - \sigma\omega\mathbf{u} - \sigma) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{u}) \tilde{G}(\mathbf{u}\sigma\omega\mathbf{x}'\sigma) e^{iQ^{\sigma}(\mathbf{y}-\mathbf{z}+\mathbf{u}-\mathbf{x}')} \right] \end{aligned}$$

Entretanto, desconhecendo-se como as funções de Green \tilde{G} dependem do potencial, procuramos encontrar-lhe também uma solução integral. As equações de movimento das funções de Green no estado normal na presença de um campo, \tilde{G} , e sem campo, G , são

$$\left[i\omega - \frac{p^2}{2M} - \phi(\mathbf{x}') - \tilde{\xi}^{\sigma}(\mathbf{x}') \right] \tilde{G}(\mathbf{x}'\sigma\omega\mathbf{x}'\sigma) = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\left[i\omega - \frac{p^2}{2M} - \phi(\mathbf{x}') - \xi_0^{\sigma}(\mathbf{x}') \right] G_0(\mathbf{x}'\sigma\omega\mathbf{x}'\sigma) = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

Considerando

$$\tilde{\xi}^{\sigma} = \tilde{\xi}_0^{\sigma} + \xi^1$$

e definindo

$$\phi_T = \phi + \xi^1$$

temos a seguinte solução integral na aproximação linear do campo:

$$\bar{C}(x' \sigma \omega x \sigma) = \bar{C}_0(x' \sigma \omega x \sigma) + \int d^3 y \bar{C}_0(x' \sigma \omega y \sigma) \delta_T(y) \bar{C}(y \sigma \omega x \sigma)$$

Logo, a equação do gap passa a ser

$$\begin{aligned} \Delta^-(x') &= -V T \sum_{\omega} \left[\int d^3 y \bar{C}_0(x' - \sigma \omega y - \sigma) \Delta^{-\sigma}(y) \bar{C}_0(y \sigma \omega x' \sigma) e^{iQ^{\sigma}(y-x')} + \right. \\ &+ \int d^3 y d^3 z \{ \bar{C}_0(x' - \sigma \omega y - \sigma) \bar{C}_0(y \sigma \omega z \sigma) \bar{C}_0(z \sigma \omega x' \sigma) + \\ &+ \bar{C}_0(x' - \sigma \omega z - \sigma) \bar{C}_0(z - \sigma \omega y - \sigma) \bar{C}_0(y \sigma \omega x' \sigma) \} \delta_T(z) \Delta^{-\sigma}(y) e^{iQ^{\sigma}(y-x')} + \\ &+ \int d^3 y d^3 z d^3 u \bar{C}_0(x' - \sigma \omega y - \sigma) \Delta^{-\sigma}(y) \bar{C}_0(y \sigma \omega z \sigma) \Delta^{\sigma}(z) \times \\ &\left. \times \bar{C}_0(z - \sigma \omega u - \sigma) \Delta^{-\sigma}(u) \bar{C}_0(u \sigma \omega x' \sigma) e^{iQ^{\sigma}(y-z+u-x')} \right] + o(\Delta^3 \vartheta) \end{aligned}$$

desprezando os termos de ordem $(\Delta^3 \vartheta)$ e definindo

$$\alpha^{-\sigma}(x'y) = -V T \sum_{\omega} \bar{C}_0(x' - \sigma \omega y - \sigma) \bar{C}(y \sigma \omega x' \sigma) e^{iQ^{\sigma}(y-x')}$$

$$\rho^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}\mathbf{z}) = -VT \sum_{\omega} [\tilde{\zeta}_{\omega}(\mathbf{x}' - \sigma\omega\mathbf{y} - \sigma) \tilde{\zeta}_{\omega}(y\sigma\omega\mathbf{z}\sigma) \tilde{\zeta}_{\omega}(\mathbf{z}\sigma\omega\mathbf{x}'\sigma) + \\ \tilde{\zeta}_{\omega}(\mathbf{x}' - \sigma\omega\mathbf{z} - \sigma) \tilde{\zeta}_{\omega}(\mathbf{z} - \sigma\omega\mathbf{y} - \sigma) \tilde{\zeta}_{\omega}(y\sigma\omega\mathbf{x}'\sigma)] e^{iQ^{\sigma}(\mathbf{y} - \mathbf{x}')}$$

$$\gamma^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}\mathbf{z}\mathbf{u}) = VT \sum_{\omega} \tilde{\zeta}_{\omega}(\mathbf{x}' - \sigma\omega\mathbf{y} - \sigma) \tilde{\zeta}_{\omega}(y\sigma\omega\mathbf{z}\sigma) \tilde{\zeta}_{\omega}(\mathbf{z} - \sigma\omega\mathbf{u} - \sigma) \times \\ \times \tilde{\zeta}_{\omega}(u\sigma\omega\mathbf{x}'\sigma) e^{iQ^{\sigma}(\mathbf{y} - \mathbf{z} + \mathbf{u} - \mathbf{x}')}$$

tem-se

$$\Delta^{-\sigma}(\mathbf{x}') = \int d^3y \alpha^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{y}) + \int d^3y d^3z \rho^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}\mathbf{z}) \phi_{\mathbb{T}}(\mathbf{z}) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{y}) \\ - \int d^3y d^3z d^3u \gamma^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}\mathbf{z}\mathbf{u}) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{y}) \Delta(\mathbf{z}) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{u})$$

que finalmente, podemos escrever como

$$\int d^3y \left[\int d^3z \rho^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}\mathbf{z}) \phi_{\mathbb{T}}(\mathbf{z}) + \{ \alpha^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}) - \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}') \} - \right. \\ \left. - \int d^3z d^3u \gamma^{-\sigma}(\mathbf{x}'\mathbf{y}\mathbf{z}\mathbf{u}) \Delta(\mathbf{z}) \Delta^{-\sigma}(\mathbf{u}) \right] \Delta^{-\sigma}(\mathbf{y}) = 0$$

Esta é a primeira equação de tipo Ginzburg-Landau.

4.3.- Densidade de carga e^{ρ} devida ao campo elétrico

Por definição

$$\begin{aligned} \rho(x') &= \sum_{\sigma} [G(x'\sigma - 0x'\sigma) - G_0(x'\sigma - 0x'\sigma)] \\ &= T \sum_{\omega\sigma} [G(x'\omega x'\sigma) - G_0(x'\omega x'\sigma)] \end{aligned}$$

Vimos que a função de Green em 1') é

$$\begin{aligned} G(x'\omega x'\sigma) &= \tilde{G}(x'\omega x'\sigma) + \\ &+ \int d^3y d^3z \tilde{G}(x'\omega y\sigma) \Delta^{\sigma}(y) \tilde{G}(y-\omega z-\sigma) \Delta^{-\sigma}(z) \tilde{G}(z\omega x'\sigma) e^{iQ^{\sigma}(z-y)} + \dots \end{aligned}$$

Se desprezamos a diferença entre o gap de energia com e sem campo, $\Delta - \Delta_0$, com respeito a Δ , obtemos, ao exprimir as \tilde{G} em termos de \tilde{G}_0 , na aproximação linear de campo

$$\begin{aligned} G(x'\omega x'\sigma) - \tilde{G}_0(x'\omega x'\sigma) &= \int d^3y \tilde{G}_0(x'\omega y\sigma) \tilde{G}_0(y\omega x'\sigma) \phi_T(y) + \\ &+ \int d^3y d^3z d^3u \Delta^{\sigma}(z) \Delta^{-\sigma}(u) [\tilde{G}_0(x'\omega z\sigma) \tilde{G}_0(z-\omega u-\sigma) \tilde{G}_0(u\omega y\sigma) \tilde{G}_0(y\omega x'\sigma) + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \tilde{G}_0(x' \omega z \sigma) \tilde{G}_0(z \omega y \sigma) \tilde{G}_0(y \omega u \sigma) \tilde{G}_0(u \omega x' \sigma) + \\
& + \tilde{G}_0(x' \omega y \sigma) \tilde{G}_0(y \omega z \sigma) \tilde{G}_0(z \omega u \sigma) \tilde{G}_0(u \omega x' \sigma)] e^{iQ(u-z)} \phi_T(y)
\end{aligned}$$

definindo

$$\alpha'(x'y) = -T \sum_{\omega} \tilde{G}_0(x' \omega y \sigma) \tilde{G}_0(y \omega x' \sigma)$$

$$\begin{aligned}
\gamma'^{\sigma}(x'yzu) = T \sum_{\omega} [& \tilde{G}_0(x' \omega y \sigma) \tilde{G}_0(y \omega z \sigma) \tilde{G}_0(z \omega u \sigma) \tilde{G}_0(u \omega x' \sigma) + \\
& + \tilde{G}_0(x' \omega z \sigma) \tilde{G}_0(z \omega y \sigma) \tilde{G}_0(y \omega u \sigma) \tilde{G}_0(u \omega x' \sigma) + \\
& + \tilde{G}_0(x' \omega z \sigma) \tilde{G}_0(z \omega u \sigma) \tilde{G}_0(u \omega y \sigma) \tilde{G}_0(y \omega x' \sigma)] e^{iQ(u-z)}
\end{aligned}$$

resulta

$$\rho(x') = \int d^3y [-\alpha'(x'y) + \int d^3z d^3u \sum_{\sigma} \gamma'^{\sigma}(x'yzu) \Delta^{\sigma}(z) \Delta^{-\sigma}(y)] \phi_T(y)$$

e somando em seguida σ , tendo presente que $\Delta^{\dagger} = \Delta$ e $\Delta^{\dagger} = \Delta^*$ resulta

$$\begin{aligned}
\rho(x') = - \int d^3y [& \alpha'(x'y) - \\
& - \int d^3z d^3u \{ \gamma'(x'yz) + \gamma'(x'yzu) \} \Delta^*(z) \Delta(u)] \phi_T(y)
\end{aligned}$$

Após definir uma nova função

$$\gamma'(x'yzu) = \gamma'^{\wedge}(x'yz) + \gamma'^{\vee}(x'yzu)$$

a densidade de carga devida ao campo elétrico é finalmente

$$\rho(x') = - \int d^3y [\alpha'(x'y) - \int d^3z d^3u \gamma'(x'yzu) \Delta^*(z) \Delta(u)] \beta_T(y)$$

Esta é a segunda equação de tipo Ginzburg-Landau.

4.4.- Equações de Tipo Ginzburg-Landau

Resumindo, as equações de tipo Ginzburg-Landau no antiferromagnetismo são

$$\int d^3y \left[\int d^3z \rho'(x'yz) \beta_T(z) + \{ \alpha'(x'y) - \delta(x'-y) \} - \right. \\ \left. \int d^3z d^3u \gamma'(x'yzu) \Delta^*(z) \Delta(u) \right] \Delta(y) = 0 \quad (\text{I})$$

$$\rho(x') + \int d^3y [\alpha'(x'y) - \\ \int d^3z d^3u \gamma'(x'yzu) \Delta^*(z) \Delta(u)] \beta_T(y) = 0 \quad (\text{II})$$

Aqui escolheu-se na primeira equação de tipo GL o spin para cima. A equação correspondente com spin para baixo é sua complexa conjugada.

4.5.- Soluções Limite

Quando o campo é muito fraco, podemos desprezar a dependência espacial do gap. Omitindo pois na primeira equação de tipo GL o termo que depende explicitamente do campo, resta a equação do gap na ausência de campo. Nestas condições, a segunda equação de tipo GL transforma-se numa equação de tipo London-Pippard, que deverá descrever a penetração de um campo elétrico aplicado, numa amostra. Dada a complexidade destas equações, torna-se difícil obter soluções mais gerais.

Recordamos que, em nossos cálculos, vimos usando a representação de ondas planas. Conforme foi explicada na introdução, apenas utilizando a representação de Wannier se obtém uma descrição da transição magneto-metálica. Assim, o potencial V deveria ser interpretado como a correlação entre dois elétrons no mesmo íon. Por estas considerações vê-se que nossos cálculos são inconsistentes. Contudo, num cálculo correto, usando a representação de Bloch, embora modificadas, as equações de tipo GL ainda prevalecem.

5 CONCLUSÕES

Certas substâncias sofrem uma transição térmica de um estado isolante antiferromagnético a um estado metálico não magnético. Na presente tese tenta-se estabelecer equações de tipo Ginzburg-Landau para a descrição deste comportamento. De fato, obtêm-se tais equações com base na teoria de Overhauser de onda estática de densidade de spin. Das aproximações feitas a mais grosseira consistiu no uso da representação de ondas planas em lugar da representação de Wannier para elétrons de Bloch. Entretanto, tendo em vista que o modelo apenas considera a correlação entre dois elétrons no mesmo íon, os resultados obtidos apenas serão modificados por fatores que contenham amplitudes de Bloch. Portanto, qualitativamente, provelem nossos resultados. Falta porém, estabelecer um formalismo que utilize a representação de Wannier adequada. Enquanto isso, aplicar nossas equações, como por exemplo ao problema de camadas finas, não teria muito sentido físico. Os trabalhos posteriores serão dedicados a estes tópicos.

6 A G R A D E C I M E N T O S

Ao Dr. A. H. de Graaf, pela sugestão da presente tese e sua constante orientação e alento, meu mais sincero agradecimento.

Desejo também agradecer aos colegas R. Oyarzún por suas amplas e valiosas discussões, E. López e R. Luzzi por seus úteis comentários, e a H. Lima por sua colaboração na preparação do manuscrito.

A UNESCO e ao Centro Latino Americano de Física agradeço a bolsa que permitiu a elaboração do presente trabalho e ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas a grata acolhida.

A "Universidad Técnica del Estado - Chile", nomeando-me em comissão de serviço, e à "Escuela de Ingenieros Industriales" permitiram-me o usufruto da bolsa. Meu reconhecimento.

7 REFERÊNCIAS

- A1 ABRIKOSOV, A. A., Soviet Phys - JETP 5, 1174 (1957)
- A2 ABRIKOSOV, A. A., L. P. GORKOV e I. E. DZIALOSHINSKI, "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics", Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.
- A3 ANDERSON, P. W., "Solid State Physics", Vol 14, Academic Press, New York, 1963.
- D1 DE GRAAF, A. M., E. LOPEZ e R. LUZZI, "On the Theory of Antiferromagnetism" (a ser publicado).
- D2 DOUGLASS, D. H., Jr., Phys. Rev. 124, 735 (1961).
- G CORTER, C. J. e H. B. G. CASIMIR, Physik. Z. 35, 963 (1934)
- L LONDON, F., "Superfluids", Vol 1, J. Wiley.
- O1 OVERHAUSER, A. W., Phys. Rev. 128, 1937 (1962).
- O2 OYARZUN, R., Equação de Tipo London-Pippard na teoria do antiferromagnetismo, Tese C.E.P.F., 1965, (não publicada).
- T TITCHMARSH, E. C., "Theory of Functions", 114, Oxford University, 1950.