

"EQUAÇÃO DE TIPO LONDON-PIPPARD NA  
TEORIA DO ANTIFERROMAGNETISMO"

HO  
466

e

ECUAÇÃO DE TIPO LONDON-PIPPARD NA TEORIA

DO ANTI-FERROMAGNETISMO

INDICE

- I. INTRODUÇÃO
- II. ESTADO ODS FUNDAMENTAL DE OVERHAUSER
- III. ESTADO ODS EXCITADO DE OVERHAUSER
- IV. EQUAÇÃO MACROSCÓPICA LONDON-PIPPARD
- V. EQUAÇÃO MICROSCÓPICA DE TIPO LONDON-PIPPARD
- VI. CONCLUSÕES
- VII. AGRADECIMENTOS
- VIII. REFERÊNCIAS

EQUAÇÕES DO TIPO LONDON-PIPPARD NA TEORIA DO ANTIFERROMAGNETISMO

TESE DE MESTRADO

defendida por

ROLANDO OYARZÚN REYS

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

6.36  
78

## RESUMO

O objeto da presente tese consiste em estudar alguns aspectos da teoria das ondas estáticas de densidade de spin (ODS) num gás de elétrons com interação proposta por Overhauser.

Overhauser demonstra que numa aproximação de Hartree-Fock, o estado ODS é mais estável que o estado paramagnético normal.

De Graaf e colaboradores provaram que a teoria de Overhauser, quando aplicada a uma banda estreita de elétrons de Bloch com interação, descreve um estado antiferromagnético, passível de sofrer uma transição térmica a um estado metálico não magnético. Caracterizamos o estado metálico pela expulsão completa de um campo elétrico aplicado. Por outro lado, caracterizamos o estado isolante, à temperatura zero, pela penetração completa do campo. Definimos uma distância de penetração  $\delta$ , que exprime esse comportamento. À temperatura zero,  $\delta$  será infinita, ou pelo menos muito grande. Com a elevação da temperatura,  $\delta$  diminuirá gradualmente, anulando-se na transição do estado isolante ao metálico.

Esse efeito é muito semelhante ao efeito Meissner-

Ochsenfeld na supercondutividade, expulsão de um campo magnético dum supercondutor. O efeito Meissner-Ochsenfeld é descrito fenomenologicamente pelas equações bem conhecidas de London-Pippard, que relacionam a supercorrente num supercondutor com o potencial vetor magnético. Estabelecemos uma relação entre a densidade de carga num gás de elétrons, com uma onda de densidade de spin, e um potencial elétrico. Introduzindo a representação de Wannier e mantendo somente a correlação entre dois elétrons no mesmo íon, esta relação exprime realmente a expulsão desejada do campo elétrico. A temperatura zero absoluto o campo penetra completamente. A distância de penetração diminui com a elevação da temperatura e à temperatura de transição há indicações de um comportamento metálico.

## I INTRODUÇÃO

A primeira descrição das propriedades eletrodinâmicas dos supercondutores foi dada pela teoria fenomenológica de London(L), em 1935. Postulou uma relação local entre a supercorrente e o potencial vetor magnético, isto é, que a densidade da supercorrente em um ponto  $r$  fica determinada pelo potencial vetor magnético nesse ponto. Se define assim uma distância de penetração,  $\delta$ , constante característica do material que depende da temperatura.  $\delta$  determina a penetração de um campo magnético na amostra. Esta teoria explica o efeito Meissner-Ochsenfeld(L): a expulsão de um campo magnético do interior do corpo. Posteriormente, com base em dados experimentais, tais como a variação de  $\delta$  com o campo magnético, Pippard, em 1950, estudou a variação de  $\delta$  em função do grau de impureza da substância. Conseguiu pôr em evidência o importante fato de que a distância de penetração varia fortemente com o grau de impureza para campo magnético nulo, sem alterar sensivelmente as propriedades termodinâmicas da substância. Pippard concluiu pela existência de um parâmetro de coerência  $\xi$  com dimensões de comprimento. Propôs ainda uma

nova teoria fenomenológica na qual a relação entre a densidade da supercorrente e o potencial vetor magnético não mais é local. Postulou que a densidade da supercorrente em um ponto  $r$  fica determinada pelo potencial vetor magnético médio numa vizinhança em torno de  $r$  com dimensões lineares da ordem de  $\xi$ .

A primeira teoria microscópica da supercondutividade, bem sucedida, foi proposta, em 1957, por J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer. Esta teoria se baseia nos pares ligados de elétrons em um metal. Os resultados obtidos por B.C.S. foram reproduzidos por diversos métodos. Gor'kov (6), por exemplo, utilizou o formalismo das funções de Green, tendo demonstrado que, para  $\delta \gg \xi_0$  ( $\xi_0$  representa a distância de coerência para um metal puro) têm-se uma relação local entre a densidade da supercorrente e o potencial vetor magnético. As substâncias que apresentam tal comportamento chamou de "supercondutores tipo London". Para  $\delta \ll \xi_0$  a relação não mais é local e neste caso designou as substâncias de "supercondutores tipo Pippard". Todos os supercondutores se comportam como tipo London para temperaturas próximas à de transição para o estado supercondutor,  $T_c$ . Se comportam como tipo Pippard apenas para baixas temperaturas. Também calculou para supercondutores tipo London a distância de penetração London  $\delta_L$ , tendo afirmado que uma definição correspondente para o tipo Pippard é complexa, exigindo métodos matemáticos especiais.

Sabe-se que sais e óxidos de elementos de transição,

como o óxido de níquel, são isolantes e, em sua maioria, antiferromagnéticos. Estas substâncias se caracterizam por terem os elétrons magnéticos separados por íons diamagnéticos e seus momentos magnéticos alinhados de modo anti-paralelo. Algumas destas substâncias apresentam uma transição de um estado isolante antiferromagnético a um estado metálico não magnético, como por exemplo o sesquióxido de titânio.

A teoria do super-intercâmbio de Kramers-interação de intercâmbio entre elétrons magnéticos através de íons diamagnéticos-foi a primeira teoria do antiferromagnetismo para isolantes. Esta teoria como as posteriores, se baseia na teoria das perturbações. Contudo a série de perturbação converge muito lentamente e existem sérias dificuldades com respeito à escolha das funções de onda dos elétrons magnéticos, o que torna estas teorias insatisfatórias.

Em 1959, Anderson deu uma grande contribuição à teoria do super-intercâmbio, ao propor que, de início, se deve considerar o movimento de um elétron magnético na rede diamagnética. Fica assim eliminada a interação com os grupos diamagnéticos, o que permite tratar de um modo relativamente fácil a interação dos elétrons magnéticos renormalizados. Anderson, introduzindo a representação de Wannier, conseguiu provar que a interação dos elétrons magnéticos renormalizados é antiferromagnética. Os parâmetros fundamentais de sua teoria são a correlação  $U$ , entre dois elétrons no mesmo íon, e a integral



de transferência  $b$ , para a passagem de um elétron a um íon vizinho. Evidentemente, esta transferência conserva o spin  $e$ , portanto, a interação é antiferromagnética. Para melhor compreensão da teoria, referimo-nos a um artigo de Anderson(A2) onde também é feita uma análise crítica das teorias anteriores, bastantes contraditórias.

Para a maior parte das substâncias, as integrais de transferência  $b$  são muito menores que a correlação  $U$ , o que as torna isolantes. Entretanto, quando  $b$  alcança a ordem de grandeza de  $U$ , os elétrons magnéticos passam a mover-se livremente no cristal, o que dá origem às propriedades metálicas. Assim, a teoria de Anderson, pelo menos qualitativamente, inclui o sesquióxido de titânio.

De Graaf, López e Iuzzi(D), propuzeram uma teoria que explica simultâneamente o comportamento de:

- (i) Metais antiferromagnéticos (como o cromo)
- (ii) Isolantes antiferromagnéticos (como o óxido de níquel)
- (iii) Substâncias isolantes antiferromagnéticas que sofrem uma transição térmica ao estado metálico (como o sesquióxido de titânio)

Esta teoria se baseia nas idéias recém propostas por Overhauser(O), que introduz um potencial periódico (vetor de

‡ Agradecemos a De Graaf, et al. por nos terem facilitado o manuscrito da teoria.

de onda  $Q$ ), depende de spin, num gás de elétrons com interação. Após um tratamento auto-consistente, Overhauser demonstra que o estado com uma onda estática de densidade de spin (ODS) é mais estável que o estado não polarizado. O estado ODS dá lugar a um espectro de excitação com um "gap" de energia  $2\Delta$ . Overhauser aplicou sua teoria exaustivamente ao cromo.

De Graaf et al. aplicam o estado ODS a uma banda estreita de elétrons de Bloch com interação. Após introduzir a representação de Wannier, os parâmetros de sua teoria passam a ser  $U$ ,  $b$  e  $\Delta$ . Em particular, demonstram que para  $\Delta \gg b$  (em essência, a largura da banda) se obtém uma descrição dos casos (ii) e (iii). Isto prova, portanto, que a teoria de Overhauser é capaz de descrever uma transição térmica de estado isolante antiferromagnético a um estado metálico não magnético. Mostram ainda que o estado ODS corresponde à formação de pares ligados elétron-buraco. Os métodos matemáticos empregados são muito semelhantes aos usados na teoria da supercondutividade.

O presente trabalho é dedicado, exclusivamente, a transições magnético-metálicas. Propomo-nos a caracterizar o estado metálico pela expulsão dum campo elétrico do interior da amostra. A temperatura zero absoluto, quando o estado tem características isolantes, o campo aplicado deve penetrar totalmente. Então, surge a idéia de definir uma distância de pene-

tração dependente de temperatura, que deve ser infinita à temperatura zero e zero à temperatura crítica— a temperatura de transição ao estado metálico. Logo, deve ser possível escrever uma equação do tipo London-Pippard que exprima tal comportamento. Em lugar de usar um potencial vetor magnético e a supercorrente, como em supercondutividade, devemos pensar em um potencial elétrico,  $\phi$ , e na densidade de carga,  $\rho$ . É nosso propósito estabelecer uma relação entre  $\rho$  e  $\phi$ .

Nossos cálculos se baseiam no formalismo das funções de Green, introduzidas por Gorkov na teoria da supercondutividade. No capítulo I reformulamos a teoria de Overhauser para um gás de elétrons, por meio das funções de Green para a temperatura zero, e no capítulo II para temperaturas diferentes de zero. O capítulo III é dedicado ao cálculo da densidade de carga induzida por um potencial elétrico. No capítulo IV, em analogia às equações fenomenológicas de London-Pippard, estabelecemos uma relação entre a densidade de carga e o potencial elétrico e definimos uma distância de penetração  $\delta$ . Finalmente aplicamos o mesmo formalismo a uma banda estreita, no capítulo V. Introduzimos a transformação de Wannier e consideramos apenas a correlação  $U$  entre dois elétrons no mesmo íon e as integrais de transferências  $b$  entre vizinhos mais próximos. Demonstramos que, realmente, existe uma relação de tipo London-Pippard entre a densidade de carga e o potencial elétrico. Calculamos a distância de penetração dependente

da temperatura. Quando a razão entre a integral de transferência e o "gap" converge a zero,  $\delta$  é realmente infinita à temperatura zero absoluto; enquanto que para a temperatura crítica se insinua um comportamento metálico.

## II ESTADO QDS FUNDAMENTAL

### DE OVERHAUSER

A hamiltoniana efetiva de um gás de elétrons com interação, considerando spin, tem a forma

$$\begin{aligned} H = & \int d^3z_1 \psi^\dagger(z_1, t) \frac{p^2(z_1)}{2m} \psi(z_1, t) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3z_1 d^3z_2 \psi^\dagger(z_1, t) \psi^\dagger(z_2, t) V(x_1 - x_2) \psi(z_2, t) \psi(z_1, t) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$z$  representa as três coordenadas espaciais,  $x$ , e o spin,  $\sigma$ .  
 $V(x_1 - x_2)$  representa o potencial de interação entre dois elétrons.

Por definição:

$$\begin{aligned} \psi(z, t) &= \sum_i \phi_i(z) a_i(t) \\ \psi^\dagger(z, t) &= \sum_i \phi_i^*(z) a_i^\dagger(t) \end{aligned}$$

onde  $\phi_i(\mathbf{r})$  é a função de onda de um elétron no estado  $i$ .  $a_i(t)$  e  $a_i^\dagger(t)$  são os operadores de aniquilamento e criação de férmions, na representação de Heisenberg;  $\psi$  e  $\psi^\dagger$  representam os operadores para férmions, interpretados como operadores de aniquilamento e criação.  $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$ , quando aplicado a um estado, cria uma partícula no ponto  $\mathbf{x}$ , com spin  $\sigma$ , no instante  $t$ . Análogamente, quando  $\psi(\mathbf{r}, t)$  se aplica a um estado, absorve uma partícula no ponto  $\mathbf{x}$ , com spin  $\sigma$ , no instante  $t$ . Estes operadores satisfazem às regras de anticomutação:

$$\begin{aligned} \{\psi(\mathbf{r}, t'), \psi(\mathbf{r}, t)\} &= \{\psi^\dagger(\mathbf{r}, t'), \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\} = 0 \\ \{\psi(\mathbf{r}, t'), \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\} &= \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(t' - t) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Para obter as equações de movimento para as funções de Green, necessitamos previamente determinar a equação de movimento para o operador  $\psi(\mathbf{r}, t')$ .

Na representação de Heisenberg, a equação para qualquer operador  $A(t')$  é \*

$$i \frac{\partial}{\partial t'} A(t') = [A(t'), H]$$

Para o operador  $\psi(\mathbf{r}, t')$ , têm-se

\* Por simplicidade consideramos unitários  $\hbar$ ,  $k_B$  e o volume.

$$i\frac{\partial}{\partial t'}\psi(x',t') = \left[ \frac{p^2(x')}{2m} + \int dx_1 \psi^*(x_1,t')\psi(x_1,t')V(x'-x_1) \right] \psi(x',t')$$

onde

$$\left( i\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) \psi(x',t') - \left[ \int dx_1 \psi^*(x_1,t')\psi(x_1,t')V(x'-x_1) \right] \psi(x',t') = 0 \quad (2.3)$$

A função de Green de uma partícula, para a temperatura zero absoluto, se define como:

$$G(x',t';x,t) = i \langle T_t [\psi(x',t')\psi^*(x,t)] \rangle \quad (2.4)$$

onde  $\langle \rangle$  representa o valor médio no estado fundamental do sistema e  $T_t$  o operador de Wick que ordena os operadores de campo segundo os tempos, em ordem decrescente da esquerda para a direita. Assim:

$$G(x',t';x,t) = \begin{cases} -i \langle \psi(x',t')\psi^*(x,t) \rangle & t' > t \\ i \langle \psi^*(x,t)\psi(x',t') \rangle & t' < t \end{cases}$$

Essencialmente a função de Green é o valor médio do par de operadores de criação e aniquilamento. Num gás de elétrons

a função de Green dá lugar à formação de pares elétron-buraco. Fisicamente a função de Green, para  $t' > t$ , se interpreta como a amplitude de probabilidade de que uma partícula no ponto  $x$ , com spin  $\sigma$ , no instante  $t$ , se encontre no ponto  $x'$ , com spin  $\sigma'$  no instante  $t'$ , sendo então absorvida. Se  $t' < t$ , trata-se de um buraco.

Pondo em evidência o spin, obtém-se

$$G(x'\sigma't' | x\sigma t) = -i \langle T_{\pm} [\psi(x'\sigma't') \psi^{\dagger}(x\sigma t)] \rangle$$

Quando existe invariância rotacional a função de Green depende da diferença de tempos,  $t' - t$ . Portanto sua transformada de Fourier depende de um só  $\omega$ .

A seguinte forma da função de Green, consistente com (2.4) é a mais conveniente para estabelecer-se uma relação útil que será utilizada mais tarde:

$$\begin{aligned} G(z't' | zt) &= -i \langle T_{\pm} [\psi(z't') \psi^{\dagger}(zt)] \rangle \\ &= -i e^{(t'-t)} \langle \psi(z't') \psi^{\dagger}(zt) \rangle + i [1 - e^{(t'-t)}] \langle \psi^{\dagger}(zt) \psi(z't') \rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$



onde

$$\theta(t'-t) = \begin{cases} 1 & t' > t \\ 0 & t' < t \end{cases}, \text{ isto é, } \frac{\partial}{\partial t'} \theta(t'-t) = \delta(t'-t)$$

Derivando com respeito a  $t'$  e ordenando convenientemente, obtem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t'} G(x', t'; x, t) &= -i \delta(t'-t) \{ \langle \psi(x', t') \psi^*(x, t) + \psi^*(x, t) \psi(x', t') \rangle \} \\ &\quad - i \theta(t'-t) \langle \frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t') \psi^*(x, t) \rangle \\ &\quad + i [1 - \theta(t'-t)] \langle \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t') \rangle \end{aligned}$$

Se reconhece de imediato que a expressão entre colchetes é igual a  $\delta(x'-x) \delta(t'-t) \delta_{\sigma' \sigma}$  e que o restante nada mais é do que a expressão (2.5), para  $\frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t')$ ; assim

$$\frac{\partial}{\partial t'} G(x', t'; x, t) = -i \delta(x'-x) \delta(t'-t) \delta_{\sigma' \sigma} - i \langle \mathbb{T}_t [\frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t') \psi^*(x, t)] \rangle$$

obtem-se a relação

$$\langle \mathbb{T}_t \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) \psi(x', t') \psi^*(x, t) \right] \rangle = i \frac{\partial}{\partial t'} G(x', t'; x, t) - \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (2.6)$$

Aplicando o operador  $\psi^*(x, t)$  a (2.3) pela direita, e calculando o valor médio no estado fundamental OBS de Overhauser, têm-se

$$\langle \mathbb{T}_t \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) \psi(x', t') \psi^*(x, t) \right] \rangle - \int dx_1 V(x' - x_1) \langle \mathbb{T}_t [\psi^*(x_1, t') \psi(x_1, t') \psi(x', t') \psi^*(x, t)] \rangle = 0$$

De acordo com a definição da função de Green (2.4) e a relação (2.6) e ordenando adequadamente, resulta

$$\left( \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) G(x', t'; x, t) + i \int dx_1 V(x' - x) \langle \mathbb{T}_t [\psi^*(x_1, t') \psi(x_1, t') \psi(x', t') \psi^*(x, t)] \rangle = \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (2.7)$$

Na equação (2.7) temos o valor médio dos quatro operadores de campo, para um sistema de elétrons com interação. No estado de Overhauser a interação é predominante apenas quando as partículas formam pares ligados elétron-buraco. Desprezamos o efeito de espalhamento e por conseguinte, de acordo com o teorema de Wick(11), este valor médio pode ser decomposto nos valores médios de pares de operadores. Como só estamos interessados nos pares elétron-buraco, não consideraremos os valores médios dos pares de operadores do tipo  $\psi\psi$  e  $\psi^*\psi^*$ . Assim

$$\langle T_+ [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z_2 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle$$

$$\cong \langle \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \rangle \langle T_+ [\psi(z_2 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle$$

$$- \langle \psi^*(z_1 t') \psi(z_2 t') \rangle \langle T_+ [\psi(z_1 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle$$

Usando a definição da função de Green (2.4), obtém-se:

$$\langle T_+ [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z_2 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle \cong$$

(2.8)

$$G(z_1 t' | z_1 t' + 0) G(z_2 t' | z_2 t) - G(z_1 t' | z_2 t' + 0) G(z_1 t' | z_2 t)$$

onde introduzimos  $t' \rightarrow 0$ , que consideramos infinitesimalmente maior que  $t'$ , para indicar a ordem dos operadores na função de Green.

Substituindo a equação (2.8) na equação (2.7), resulta

$$\begin{aligned} & \left( i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) G(x', t'; x, t) \\ & + i \int dx_1 V(x' - x_1) [G(x_1, t'; x_1, t' + 0) G(x', t'; x, t) - G(x', t'; x_1, t' + 0) G(x_1, t'; x, t)] \\ & = \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma, \sigma'} \end{aligned} \quad (2.9)$$

que é a equação de movimento aproximada das funções de Green, para  $T = 0^\circ K$ .

Em geral, a transformada da função de Green no espaço de momento depende de  $k'$  e  $k$ . No caso de sistemas isolados de partículas com spins paralelos, que podem ser considerados homogêneos, a função de Green depende da diferença das coordenadas espaciais,  $x' - x$ , e, portanto, sua transformada de Fourier é função de um só  $k$ .

A transformada de Fourier da função de Green no espaço  $(k, \omega)$ , com invariância rotacional, é, em geral

onde  $\beta_i(\zeta)$  é a função de onda de um elétron no estado  $i$ .  $a_i(t)$  e  $a_i^\dagger(t)$  são os operadores de aniquilamento e criação de férmions, na representação de Heisenberg;  $\psi$  e  $\psi^\dagger$  representam os operadores para férmions, interpretados como operadores de aniquilamento e criação.  $\psi^\dagger(\zeta t)$ , quando aplicado a um estado, cria uma partícula no ponto  $x$ , com spin  $\sigma$ , no instante  $t$ . Análogamente, quando  $\psi(\zeta t)$  se aplica a um estado, absorve uma partícula no ponto  $x$ , com spin  $\sigma$ , no instante  $t$ . Estes operadores satisfazem às regras de anticomutação:

$$\begin{aligned} \{\psi(\zeta't'), \psi(\zeta t)\} &= \{\psi^\dagger(\zeta't'), \psi^\dagger(\zeta t)\} = 0 \\ \{\psi(\zeta't'), \psi^\dagger(\zeta t)\} &= \delta(\zeta' - \zeta) \delta(t' - t) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Para obter as equações de movimento para as funções de Green, necessitamos previamente determinar a equação de movimento para o operador  $\psi(\zeta't')$ .

Na representação de Heisenberg, a equação para qualquer operador  $A(t')$  é \* :

$$i \frac{\partial}{\partial t'} A(t') = [A(t'), H]$$

Para o operador  $\psi(\zeta't')$ , têm-se

\* Por simplicidade consideramos unitários  $\hbar$ ,  $k_B$  e o volume.

$$i\frac{\partial}{\partial t'}\psi(\mathbf{r},t') = \left[ \frac{p^2(\mathbf{x}')}{2m} + \int d\mathbf{r}_1 \psi^*(\mathbf{r}_1,t')\psi(\mathbf{r}_1,t')V(\mathbf{x}'-\mathbf{x}_1) \right] \psi(\mathbf{r},t')$$

onde

$$\left( i\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(\mathbf{x}')}{2m} \right) \psi(\mathbf{r},t') - \left[ \int d\mathbf{r}_1 \psi^*(\mathbf{r}_1,t')\psi(\mathbf{r}_1,t')V(\mathbf{x}'-\mathbf{x}_1) \right] \psi(\mathbf{r},t') = 0 \quad (2.3)$$

A função de Green de uma partícula, para a temperatura zero absoluto, se define como:

$$G(\mathbf{r},t';\mathbf{r}t) = i\langle T_t [\psi(\mathbf{r},t')\psi^*(\mathbf{r}t)] \rangle \quad (2.4)$$

onde  $\langle \rangle$  representa o valor médio no estado fundamental do sistema e  $T_t$  o operador de Wick que ordena os operadores de campo segundo os tempos, em ordem decrescente da esquerda para a direita. Assim:

$$G(\mathbf{r},t';\mathbf{r}t) = \begin{cases} -i\langle \psi(\mathbf{r},t')\psi^*(\mathbf{r}t) \rangle & t' > t \\ i\langle \psi^*(\mathbf{r}t)\psi(\mathbf{r},t') \rangle & t' < t \end{cases}$$

Essencialmente a função de Green é o valor médio do par de operadores de criação e aniquilamento. Num gás de elétrons

a função de Green dá lugar à formação de pares elétron-buraco. Fisicamente a função de Green, para  $t' > t$ , se interpreta como a amplitude de probabilidade de que uma partícula no ponto  $x$ , com spin  $\sigma$ , no instante  $t$ , se encontre no ponto  $x'$ , com spin  $\sigma'$  no instante  $t'$ , sendo então absorvida. Se  $t' < t$ , trata-se de um buraco.

Tomando em evidência o spin, obtém-se

$$G(x't' | xt) = G(x'\sigma't' | x\sigma t) = -i \langle T_{\pm} [\psi(x'\sigma't') \psi^{\dagger}(x\sigma t)] \rangle$$

Quando existe invariância rotacional a função de Green depende da diferença de tempos,  $t' - t$ . Portanto sua transformada de Fourier depende de um só  $\omega$ .

A seguinte forma da função de Green, consistente com (2.4) é a mais conveniente para estabelecer-se uma relação útil que será utilizada mais tarde:

$$\begin{aligned} G(x't' | xt) &= -i \langle T_{\pm} [\psi(x't') \psi^{\dagger}(xt)] \rangle \\ &= -i \theta(t' - t) \langle \psi(x't') \psi^{\dagger}(xt) \rangle \\ &\quad + i [1 - \theta(t' - t)] \langle \psi^{\dagger}(xt) \psi(x't') \rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde

$$\theta(t'-t) = \begin{cases} 1 & t' > t \\ 0 & t' < t \end{cases}, \text{ isto é, } \frac{\partial}{\partial t'} \theta(t'-t) = \delta(t'-t)$$

Derivando com respeito a  $t'$  e ordenando convenientemente, obtem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t'} G(x', t'; x, t) &= -i \delta(t'-t) \{ \langle \psi(x', t') \psi^*(x, t) + \psi^*(x, t) \psi(x', t') \rangle \} \\ &\quad - i \theta(t'-t) \langle \frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t') \psi^*(x, t) \rangle \\ &\quad + i [1 - \theta(t'-t)] \langle \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t') \rangle \end{aligned}$$

Se reconhece de imediato que a expressão entre colchetes é igual a  $\delta(x'-x) \delta(t'-t) \delta_{\sigma\sigma'}$  e que o restante nada mais é do que a expressão (2.5), para  $\frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t')$ ; assim

$$\frac{\partial}{\partial t'} G(x', t'; x, t) = -i \delta(x'-x) \delta(t'-t) \delta_{\sigma\sigma'} - i \langle T_t [\frac{\partial}{\partial t'} \psi(x', t') \psi^*(x, t)] \rangle$$

obtem-se a relação



$$\langle \mathbb{T}_t \left[ \frac{\partial}{\partial t'} \psi(\mathbf{r}'t') \psi^*(\mathbf{r}t) \right] \rangle = i \frac{\partial}{\partial t'} c(\mathbf{r}'t', \mathbf{r}t) - \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \delta(t' - t) \delta_{\sigma' \sigma} \quad (2.6)$$

Aplicando o operador  $\psi^*(\mathbf{r}t)$  a (2.3) pela direita, e calculando o valor médio no estado fundamental ODS de Overhauser, têm-se

$$\begin{aligned} & \langle \mathbb{T}_t \left[ \left( i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{\nabla'^2(\mathbf{x}')}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}'t') \psi^*(\mathbf{r}t) \right] \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}_1 V(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_1) \langle \mathbb{T}_t [\psi^*(\mathbf{r}_1 t') \psi(\mathbf{r}_1 t') \psi(\mathbf{r}'t') \psi^*(\mathbf{r}t)] \rangle = 0 \end{aligned}$$

De acordo com a definição da função de Green (2.4) e a relação (2.6) e ordenando adequadamente, resulta

$$\begin{aligned} & \left( i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{\nabla'^2(\mathbf{x}')}{2m} \right) c(\mathbf{r}'t', \mathbf{r}t) \\ & + i \int d\mathbf{r}_1 V(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_1) \langle \mathbb{T}_t [\psi^*(\mathbf{r}_1 t') \psi(\mathbf{r}_1 t') \psi(\mathbf{r}'t') \psi^*(\mathbf{r}t)] \rangle \quad (2.7) \\ &= \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \delta(t' - t) \delta_{\sigma' \sigma} \end{aligned}$$

Na equação (2.7) temos o valor médio dos quatro operadores de campo, para um sistema de elétrons com interação. No estado de Overhauser a interação é predominante apenas quando as partículas formam pares ligados elétron-buraco. Desprezamos o efeito de espalhamento e por conseguinte, de acordo com o teorema de Wick(A1), este valor médio pode ser decomposto nos valores médios de pares de operadores. Como só estamos interessados nos pares elétron-buraco, não consideraremos os valores médios dos pares de operadores do tipo  $\psi\psi$  e  $\psi^*\psi^*$ . Assim

$$\langle T_+ [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z_2 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle$$

$$\cong \langle \psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \rangle \langle T_+ [\psi(z_2 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle$$

$$- \langle \psi^*(z_1 t') \psi(z_2 t') \rangle \langle T_+ [\psi(z_1 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle$$

Usando a definição da função de Green (2.4), obtém-se:

$$\langle T_+ [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z_2 t') \psi^*(z_2 t)] \rangle \cong$$

(2.8)

$$G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z_2 t' z_2 t) - G(z_2 t' z_1 t' + 0) G(z_1 t' z_2 t)$$

onde introduzimos  $t' \rightarrow 0$ , que consideramos infinitesimalmente maior que  $t'$ , para indicar a ordem dos operadores na função de Green.

Substituindo a equação (2.8) na equação (2.7), resulta

$$\begin{aligned}
 & \left( i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) G(z_1 t' z t) \\
 & + i \int d^3 z_1 V(x' - x_1) [G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z_1 t' z t) - G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z_1 t' z t)] \\
 & = \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma, \sigma'}
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

que é a equação de movimento aproximada das funções de Green, para  $T = 0^\circ K$ .

Em geral, a transformada da função de Green no espaço de momento depende de  $k'$  e  $k$ . No caso de sistemas isolados de partículas com spins paralelos, que podem ser considerados homogêneos, a função de Green depende da diferença das coordenadas espaciais,  $x' - x$ , e, portanto, sua transformada de Fourier é função de um só  $k$ .

A transformada de Fourier da função de Green no espaço  $(k, \omega)$ , com invariância rotacional, é, em geral

$$G(z't', zt) = G(x', t' - t, x, 0) = \sum_{k, k'} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(k', \sigma', \omega, k, \sigma) e^{i(k'x' - kx) - i\omega(t' - t)} \quad (*)$$

No caso de um gás de elétrons, vemos que o par elétron-buraco com coordenadas  $(x', x)$  no espaço real, tem, no espaço de momento, associados momentos arbitrários  $k'$  e  $k$ . Em nosso estado as funções de Green corresponde ao estado fundamental ODS de Overhauser, que dá lugar a pares ligados elétron-buraco com spins antiparalelos e uma diferença constante  $Q$  em seus momentos. O momento associado a cada partícula depende de seu spin; Overhauser estabelece que partículas com spin para cima tem associados momentos  $k$ , e as partículas com spin para baixo  $k+Q$ . Logo, os pares ligados elétron-buraco não têm associados momentos arbitrários  $k'$  e  $k$ , podendo apenas ser  $k$  e  $k+Q$ . Assim, a transformada de Fourier depende de um só  $k$ . A relação momento-spin para cada partícula pode ser indicada mediante a notação  $k_\sigma$ , onde

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

Logo, para o estado fundamental ODS de Overhauser, a

(\*) Com  $k$  designamos os três coordenadas  $k_x$ ,  $k_y$  e  $k_z$ , no espaço de momento.

transformada de Fourier da função de Green no espaço  $(k, \omega)$ , com invariância rotacional pode escrever-se

$$G(z', t', z, t) = G(z', t' - t, z) = \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(\mathbf{k}, \sigma, \omega, \mathbf{k}, \sigma) e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{x}' - \mathbf{k}, \mathbf{x}) - i\omega(t' - t)} \quad (2.10)$$

Mediante (2.10), a equação de movimento (2.9), expressa em componentes de Fourier, será:

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[ \omega - \frac{k^2}{2m} \right] G(\mathbf{k}, \sigma, \omega, \mathbf{k}, \sigma) e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{x}' - \mathbf{k}, \mathbf{x}) - i\omega(t' - t)} \\ & + i \int \frac{d\omega}{2\pi} a^3 x_1 \sum_{\sigma_1} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} V(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_1)} [G(\mathbf{k}'_{\sigma_1} - \mathbf{q}, \sigma_1, \omega, \mathbf{k}'_{\sigma_1}) G(\mathbf{k}, \sigma, \omega, \mathbf{k}, \sigma) e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{x}' - \mathbf{k}, \mathbf{x})} \\ & - G(\mathbf{k}'_{\sigma_1}, \sigma_1 - \mathbf{q}, \omega, \mathbf{k}'_{\sigma_1}) G(\mathbf{k}, \sigma, \omega, \mathbf{k}, \sigma) e^{i(\mathbf{k}'_{\sigma_1}, \mathbf{x}' - \mathbf{k}'_{\sigma_1}, \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}, \mathbf{x}_1 - \mathbf{k}, \mathbf{x})}] e^{-i\omega(t' - t)} \\ & = \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - i\omega(t' - t)} \end{aligned}$$

Integrando em  $x_1$  resulta para o primeiro termo  $q=0$  e para o segundo  $q=k-k'$ . Consequentemente, para a componente  $(k, \omega)$  de Fourier, temos

$$(\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) + iV(0) \sum_{k'} G(k'_{\sigma_1} - \omega k'_{\sigma_1}) G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) \quad (2.11)$$

$$-i \sum_{k'_{\sigma_1}} V(k-k') G(k'_{\sigma}, \sigma - \omega k'_{\sigma_1}) G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) = \delta_{\sigma, \sigma}$$

Definindo

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

$$\Delta_{k, \sigma}^{\sigma'} = -i \sum_{k'} V(k-k') G(k'_{\sigma}, \sigma' - \omega k'_{\sigma}, -\sigma') \quad (2.12)$$

a equação (2.11) toma a forma

$$\boxed{(\omega - \tilde{E}_{k, \sigma}) G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) + \Delta_{k, \sigma}^{\sigma'} G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) = \delta_{\sigma, \sigma}} \quad (2.13)$$

A partir desta equação obtém-se o sistema

$$\sigma' = \sigma \quad (\omega - \tilde{E}_{k, \sigma}) G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) + \Delta_{k, \sigma}^{\sigma} G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) = 1 \quad (2.14)$$

$$\sigma' = -\sigma \quad (\omega - \tilde{E}_{k, \sigma}) G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) + \Delta_{k, \sigma}^{-\sigma} G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) = 0$$

Do sistema (2.14), resultam

$$G(k_{\sigma} \omega k_{\sigma}) = \frac{\omega - E_{k_{-\sigma}}}{(\omega - E_{k_{\sigma}})(\omega - E_{k_{-\sigma}}) - \Delta_k^2} \quad (2.15)$$

$$G(k_{-\sigma} \omega k_{\sigma}) = \frac{-\Delta_k^{-\sigma}}{(\omega - E_{k_{\sigma}})(\omega - E_{k_{-\sigma}}) - \Delta_k^2}$$

onde,  $\Delta_k^2 = \Delta_k^{\sigma} \Delta_k^{-\sigma}$

Estas são as funções de Green aproximadas para o estado ODS de Overhauser, no espaço  $(k, \omega)$ , para  $T=0^{\circ}K$ .

Demonstra-se que os polos da transformada de Fourier da função de Green (A1) determinam o espectro de excitação. Assim, das equações (2.15) obtém-se um espectro de energia  $\omega_k$  para o estado ODS de Overhauser mediante

$$(\omega - E_{k_{\sigma}})(\omega - E_{k_{-\sigma}}) - \Delta_k^2 = 0$$

de onde resulta

$$\omega_k = \frac{1}{2}(E_{k_{\sigma}} + E_{k_{-\sigma}}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_{k_{\sigma}} - E_{k_{-\sigma}})^2 + \Delta_k^2} \quad (2.16)$$

As equações (2.12) e (2.16) reproduzem os resultados de Overhauser.

Designando

$$\omega_k^+ = \frac{1}{2}(\underline{E}_{k_0} + \underline{E}_{\underline{k}_0}) + \sqrt{\frac{1}{4}(\underline{E}_{k_0} - \underline{E}_{\underline{k}_0})^2 + \Delta_k^2}$$

$$\omega_k^- = \frac{1}{2}(\underline{E}_{k_0} + \underline{E}_{\underline{k}_0}) - \sqrt{\frac{1}{4}(\underline{E}_{k_0} - \underline{E}_{\underline{k}_0})^2 + \Delta_k^2}$$

tem-se

$$(\omega - \underline{E}_{k_0})(\omega - \underline{E}_{\underline{k}_0}) - \Delta_k^2 = (\omega - \omega_k^+)(\omega - \omega_k^-) \quad (2.17)$$

relação que apresenta a vantagem de facilitar os cálculos posteriores.



III ESTADO OBS EXCITADO  
DE OVERHAUSER

Para obter os resultados anteriores para  $T \neq 0^\circ K$ , temos de introduzir funções de Green termodinâmicas(AI). Estas funções não dependem do tempo real, mas de um tempo imaginário, fictício,  $\bar{t} = it$ . A técnica adequada para trabalhar com estas funções de Green(AI), consiste em expressar tódas as quantidades em série de Fourier, com respeito a frequência.

A função de Green termodinâmica se define como

$$G(\tau, \tau'; \tau, \tau') = - \frac{\langle T_+ [ \mathcal{Y}(\tau', \tau') \mathcal{Y}^*(\tau, \tau) S ] \rangle}{\langle S \rangle} \quad (3.1)$$

onde  $\langle \quad \rangle$  represente o valor médio no estado excitado, para um sistema com interação; e S é a matriz de interação.

Na equação de movimento para o operador  $\mathcal{Y}(\tau, \tau')$ , (2.3), introduz-se adequadamente o tempo imaginário, substituindo a dependência em t dos operadores de campo pela de it. Designaremos esta simplesmente por t, não esquecendo que expressa agora um tempo imaginário. Logo temos:

$$\left(-\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m}\right) \tilde{\psi}(z_1 t') - \int dz_1 \tilde{\psi}^*(z_1 t') \tilde{\psi}(z_1 t') V(x' - x_1) \tilde{\psi}(z_1 t') = 0 \quad (3.2)$$

Como no caso de  $T=0^{\circ}K$  temos, análogamente, a relação

$$\frac{\langle T_t \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} - \frac{p^2(x)}{2m} \right) \psi(z_1 t) \psi^*(z_1 t) S \right] \rangle}{\langle S \rangle} = -\frac{\partial}{\partial t} G(z_1 t', z_1 t) - \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma', \sigma} \quad (3.3)$$

Aplicando o operador  $\tilde{\psi}^*(z_1 t)$  à equação (3.2) e determinando o valor médio no estado ODS excitado, tem-se:

$$\frac{\langle T_t \left[ \left( -\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) \psi(z_1 t') \psi^*(z_1 t') S \right] \rangle}{\langle S \rangle} - \int dz_1 V(x' - x_1) \frac{\langle T_t [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi^*(z_1 t') S] \rangle}{\langle S \rangle} = 0$$

De acôrdo com a definição da função de Green termodinâmica (3.1) e a relação (3.3), resulta

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{p^2(x)}{2m} \right) G(z_1 t', z_1 t) + \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma', \sigma} - \int dz_1 V(x' - x_1) \frac{\langle T_t [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi^*(z_1 t') S] \rangle}{\langle S \rangle} = 0 \quad (3.4)$$

Com base nos mesmos argumentos utilizados para  $T = 0^\circ K$ , e usando a definição (3.1), pode escrever-se

$$\frac{\langle T_t [\psi^*(z_1 t') \psi(z_1 t') \psi(z' t') \psi^*(z t) S] \rangle}{\langle S \rangle} \quad (3.5)$$

$$= -G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z' t' z t) + G(z' t' z_1 t' + 0) G(z_1 t' z t)$$

que, substituída na equação (3.4), permite escrever

$$\left( -\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right) G(z' t' z t) \quad (3.6)$$

$$= \int dx_1 V(x' - x_1) [G(z_1 t' z_1 t' + 0) G(z' t' z t) - G(z' t' z_1 t' + 0) G(z_1 t' z t)] \\ = \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma' \sigma}$$

que é a equação de movimento aproximada das funções de Green termodinâmicas.

Expressando a equação (3.6) em componentes de Fourier, de acordo com a relação (2.10) e considerando que

$$G(z) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} G(\omega_n) e^{-i\omega_n z} \quad (3.7)$$

onde

$$\omega_n = (2n+1)\pi T \quad \text{para fermions (A1)}$$

tem-se, no espaço  $(k, \omega)$ :

$$\begin{aligned} & T \sum_{kn} \left( i\omega_n - \frac{k^2}{2m} \right) G(k_{\sigma}, \omega_n, k_{\sigma}) e^{i(k_{\sigma} x' - k_{\sigma} x) - i\omega_n (t' - t)} \\ & - \int d^3 x_1 T \sum_{\sigma_1 n} \sum_{qk k'} V(q) e^{iq(x' - x_1)} [G(k'_{\sigma_1}, -0, k'_{\sigma_1}) G(k_{\sigma}, \omega_n, k_{\sigma}) e^{i(k_{\sigma} x' - k_{\sigma} x)} \\ & - G(k'_{\sigma_1}, -0, k'_{\sigma_1}) G(k_{\sigma_1}, \omega_n, k_{\sigma_1}) e^{i(k'_{\sigma_1} x' - k'_{\sigma_1} x_1 + k_{\sigma_1} x_1 - k_{\sigma} x)} ] e^{-i\omega_n (t' - t)} \\ & = \delta_{\sigma\sigma'} T \sum_{kn} e^{i(k_{\sigma} x' - k_{\sigma} x) - i\omega_n (t' - t)} \end{aligned}$$

Integrando em  $x_1$ , obtemos para o primeiro termo  $q=0$  e para o segundo  $q=k-k'$ . Igualando, convenientemente, os respectivos coeficientes, podemos eliminar  $T \sum_{kn}$ , restando

$$(i\omega_n - \frac{k^2}{2m})G(k, \sigma; \omega_n, k, \sigma) - V(0) \sum_{\sigma_1 k'} G(k', \sigma_1; \omega_n, k', \sigma_1) G(k, \sigma; \omega_n, k, \sigma) \quad (3.8)$$

$$+ \sum_{\sigma_1 k'} V(k-k') G(k', \sigma_1; \omega_n, k', \sigma_1) G(k, \sigma; \omega_n, k, \sigma) = \delta_{\sigma, \sigma}$$

Definindo

$$\tilde{\epsilon}_{k, \sigma} = \frac{k^2}{2m} + V(0) \sum_{\sigma_1 k'} G(k', \sigma_1; \omega_n, k', \sigma_1) - \sum_{k'} V(k-k') G(k', \sigma'; \omega_n, k', \sigma') \quad (3.9)$$

$$\Delta_k^{\sigma'} = \sum_{k'} V(k-k') G(k', \sigma'; \omega_n, k', \sigma')$$

e substituindo-as na equação (3.8), esta se reduz a:

$$(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{k, \sigma}) G(k, \sigma; \omega_n, k, \sigma) + \Delta_k^{\sigma'} G(k, \sigma'; \omega_n, k, \sigma') = \delta_{\sigma, \sigma} \quad (3.10)$$

de onde se deduz

$$\sigma' = \sigma \quad (i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{k, \sigma}) G(k, \sigma; \omega_n, k, \sigma) + \Delta_k^{\sigma} G(k, \sigma; \omega_n, k, \sigma) = 1 \quad (3.11)$$

$$\sigma' = -\sigma \quad (i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{k, -\sigma}) G(k, -\sigma; \omega_n, k, -\sigma) + \Delta_k^{-\sigma} G(k, -\sigma; \omega_n, k, -\sigma) = 0$$

cujas soluções

$$G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) = \frac{i\omega_n - \bar{E}_{k, \sigma}}{(i\omega_n - \bar{E}_{k, \sigma})(i\omega_n - \bar{E}_{k, \sigma}) - \Delta_k^2} \quad (3.12)$$

$$G(k, \sigma, \omega, k, \sigma) = \frac{-\Delta_k^{\sigma\sigma'}}{(i\omega_n - \bar{E}_{k, \sigma})(i\omega_n - \bar{E}_{k, \sigma'}) - \Delta_k^2}$$

são funções de Green termodinâmicas aproximadas para o estado ODS excitado de Overhauser, no espaço  $(k, \omega)$ . Nota-se que, formalmente, obtivemos os mesmos resultados que para  $T=0^\circ\text{K}$ , passando de  $\omega$  para  $i\omega$ ; evidentemente, agora  $\bar{E}_k$  e  $\Delta_k$  dependem da temperatura.

Vamos agora estabelecer a equação do "gap" de energia, equação da maior importância na teoria de Overhauser.

Das definições (3.9), de acordo com a relação (3.7), tem-se

$$\Delta_k^{\sigma\sigma'} = T \sum_{nk'} V(k-k') G(k', \sigma', \omega, k, \sigma, \sigma')$$

que, mediante as equações (3.12), podemos escrever

$$\Delta_k^{\sigma\sigma'} = T \sum_{nk'} V(k-k') \frac{-\Delta_k^{\sigma\sigma'}}{(i\omega_n - \bar{E}_{k', \sigma})(i\omega_n - \bar{E}_{k', \sigma'}) - \Delta_k^2}$$

e, usando a referência(2.17), resulta

$$\Delta_k^{\sigma'} = -\sum_{k'} V(k-k') \Delta_{k'}^{\sigma'} T \sum_n \frac{1}{(i\omega_n - \omega_k^+)(i\omega_n - \omega_k^-)} \quad (3.12)$$

O somatório em  $n$  se calcula de acordo com a fórmula dada em Titchmarsh(T), aplicável para este caso. Assim, substituindo  $\omega_n = (2n+1)\pi T$ , tem-se

$$\begin{aligned} & T \sum_n \frac{1}{(i\omega_n - \omega_k^+)(i\omega_n - \omega_k^-)} \\ &= \frac{T}{(2\pi iT)^2} \sum_n \frac{1}{\left[n + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{i\omega_k^+}{\pi T}\right)\right] \left[n + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{i\omega_k^-}{\pi T}\right)\right]} \\ &= \frac{-\pi T}{(2\pi iT)^2} \left\{ \frac{\cot\left[-\frac{1}{2}\left(1 + \frac{i\omega_k^+}{\pi T}\right)\right]\pi}{i \frac{\omega_k^- - \omega_k^+}{2\pi T}} + \frac{\cot\left[-\frac{1}{2}\left(1 + \frac{i\omega_k^-}{\pi T}\right)\right]\pi}{i \frac{\omega_k^+ - \omega_k^-}{2\pi T}} \right\} \end{aligned}$$

e portanto

$$T \sum_n \frac{1}{(i\omega_n - \omega_k^+)(i\omega_n - \omega_k^-)} = \frac{1}{2} \frac{\operatorname{tgh} \frac{\omega_k^-}{2T} - \operatorname{tgh} \frac{\omega_k^+}{2T}}{\omega_k^+ - \omega_k^-} \quad (3.13)$$

que, substituindo em (3.12), nos dá

$$\Delta_k^0 = \frac{1}{2} \sum_{k'} V(k-k') \Delta_{k'}^0 \frac{\tanh \frac{\omega_{k'}^+}{2T} - \tanh \frac{\omega_{k'}^-}{2T}}{\omega_{k'}^+ - \omega_{k'}^-} \quad (3.14)$$

que é a equação do "gap" de energia para  $T \neq 0^\circ \text{K}$ . No caso de  $T=0^\circ \text{K}$  demonstra-se que a equação reduz-se

$$\Delta_k^0 = \frac{1}{2} \sum_{k'} V(k-k') \frac{\Delta_{k'}^0}{\sqrt{\frac{1}{4}(\omega_{k'}^+ - \omega_{k'}^-)^2 + \Delta_{k'}^2}} \quad (3.15)$$

resultado obtido por Overhauser.



#### IV SITUAÇÕES MICROSCÓPICAS LONDON-HEPPARD

Kamerlingh Onnes descobriu a supercondutividade, em 1911, medindo a condutividade elétrica do mercúrio à temperaturas muito baixas. Suprendentemente constatou que a resistividade diminuía rapidamente ao se aproximar dos  $4.2^{\circ}\text{K}$ , e se anulava abaixo desta temperatura. O comportamento voltava ao normal quando a temperatura era novamente elevada. Ficou assim evidenciada uma temperatura crítica que assinalava a transição do estado normal ao estado que ele denominou de supercondutor.

Já em 1913, também Kamerlingh Onnes foi o primeiro a descobrir que o estado supercondutor pode ser destruído pela aplicação de um campo magnético suficientemente forte. Este campo, que é função da temperatura, recebe o nome de campo crítico; à temperatura crítica ele é nulo.

Estas primeiras observações sobre supercondutividade sugerem que se trata de um fenômeno de condutividade infinita. Uma consequência imediata desta interpretação, é que o campo de indução magnética deve ser constante, no tempo, dentro do supercondutor. Assim, se um condutor ideal for submetido a um campo magnético externo que possa variar, deverão ser induzidas

correntes superficiais. Isto assegura que o campo dentro do supercondutor será mantido constante para qualquer variação externa. Estas correntes superficiais distorcem o campo externo, de modo que as linhas de fluxo não entram, atuam como uma blindagem. Como a resistividade é zero, estas correntes circulam por tempo indefinido. Este comportamento implica que o estado supercondutor depende de sua pré-história.

Meissner e Ochsenfeld, em 1933, descobriram que colocando um cilindro supercondutor em um campo magnético paralelo ao seu eixo e baixando a temperatura, as linhas de campo são expulsas quando alcançada a temperatura crítica. Elevando de novo a temperatura, o campo volta a penetrar. Verificaram que se obtinha o mesmo estado quer se primeiro se baixava a temperatura e depois se aplicava o campo ou vice-versa. Ficou então insinuado que a supercondutividade é um fenômeno reversível. Assim, o efeito Meissner-Ochsenfeld mostra que dentro dum supercondutor o campo de indução é nulo, fato contrário do que se deveria esperar de um condutor ideal.

Podemos então dizer que os supercondutores apresentam duas propriedades essenciais e independentes: se comportam como condutores ideais e dão lugar à expulsão do campo de indução magnética. Esta última é sua propriedade mais fundamental.

Para expressar estas duas propriedades, London, em 1935, propôs duas equações. Essas equações, no sistema gaussiano, são:

$$\operatorname{rot} \Lambda j_s(\mathbf{x}) = -\frac{H(\mathbf{x})}{c} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\Lambda j_s(\mathbf{x})] = E(\mathbf{x}) \quad (4.2)$$

onde  $\Lambda$  é uma constante característica, depende da temperatura e do material;  $j_s$  representa a densidade da supercorrente;  $E$  e  $H$  são, respectivamente, a intensidade do campo elétrico e magnético.

Analisemos rapidamente estas equações. Para o estado supercondutor estacionário, de acordo com as leis da Maxwell, temos

$$\operatorname{rot} H(\mathbf{x}) = \frac{4\pi}{c} j(\mathbf{x})$$

em que  $j = j_s + j_n$ , é a densidade de supercorrente total, onde  $j_n$  é a densidade de corrente normal.

Aplicando o rotor

$$\operatorname{rot} (\operatorname{rot} H) = \frac{4\pi}{c} \operatorname{rot} j$$

$$\operatorname{grad} (\operatorname{div} H) - \nabla^2 H = \frac{4\pi}{c} \operatorname{rot} j_s$$

e substituindo na equação(4.1), tem-se

$$\nabla^2 H(x) = \frac{4\pi}{\Delta c^2} H(x) \quad (4.3)$$

Se consideramos um supercondutor semi-infinito, com uma superfície plana, submetido a um campo magnético  $H_0$  paralelo a essa superfície, tem-se como solução para(4.3)

$$H(x) = H_0 e^{-\frac{x}{\delta_L}} \quad (4.4)$$

$$\delta_L = \sqrt{\frac{\Delta c^2}{4\pi}}$$

Fica assim definido um novo parâmetro, denominado distância de penetração London  $\delta_L$ , que determina a penetração do campo dentro do supercondutor. A ordem de grandeza de  $\delta_L$  varia de  $10^{-5}$  a  $10^{-6}$  cm. Assim, para supercondutores suficientemente extensos, vemos que o campo não se anula de forma abrupta mas penetra umas poucas distâncias atômicas do material. Pode ser considerado como um pequeno efeito superficial. Com estas pequenas restrições, o efeito Meissner fica perfeitamente explicado.

A equação de movimento para um elétron de condução, sub-

metido a um campo elétrico  $E$  constante, é

$$n\dot{v} = eE - n\frac{v}{\tau}$$

onde  $\tau$  pode ser interpretado como o tempo médio entre colisões consecutivas.

No caso em que a condutividade é infinita, os elétrons podem ser acelerados indefinidamente, isto é,  $\tau \rightarrow \infty$  e a equação se reduz a

$$n\dot{v} = eE$$

mas

$$j_s = n_s e v$$

logo

$$\frac{n}{n_s e^2} \frac{d}{dt} j_s = E$$

que é justamente a equação de London, com

$$\Lambda = \frac{n}{n_s e^2} \quad (4.5)$$

onde  $m$  é a massa do elétron e  $n_s$  o número de superelétrons por unidade de volume.

Usualmente chama-se equação de London àquela que expressa uma relação local entre a densidade da supercorrente e o potencial vetor magnético, se deduz de imediato de suas equações originais:

$$j(x) = -\frac{1}{\Lambda} A(x) \quad (4.6)$$

Recordemos que Pippard postulou que a densidade de supercorrente em um ponto  $x$  está relacionada com o valor médio do potencial vetor magnético numa vizinhança em torno de  $x$ . Esta vizinhança tem dimensões lineares da ordem de grandeza da distância de coerência.

Para o caso de um supercondutor semi-infinito, homogêneo, com uma superfície plana, submetido a um campo magnético paralelo à dita superfície, podemos exprimir os postulados de London e Pippard por uma única equação:

$$j(x) = - \int \alpha(x-y) A(y) d^3y \quad (4.7)$$

Esta equação pode ser chamada "Equação de London-Pippard". A integral se estende por uma região em torno de  $x$ , sendo o valor máximo linear de " $y$ " da ordem de  $\xi$ .

Verifica-se de imediato a equação de London. Seu postulado implica

$$\rho(x-y) = \rho_0 \delta(x-y)$$

Assim

$$j_s(x) = -c_0 \Lambda(x)$$

com

$$\Lambda = \frac{1}{c_0}$$

Partindo destas observações preliminares, é-nos fácil estabelecer equações análogas para o caso de substâncias que sofram transições dum estado isolante antiferromagnético a um estado metálico não magnético. O estado metálico será caracterizado pela expulsão de um campo elétrico. A temperatura zero absoluto, quando se tem o caso isolante, o campo deve penetrar perfeitamente. Supondo que este efeito é reversível no sentido termodinâmico, temos um efeito análogo ao efeito de Meissner-Ochsefeld. Em lugar de uma relação entre o potencial vetor magnético e a supercorrente, devemos pensar numa relação entre a densidade de carga e um potencial elétrico. Propomos

formular esta relação da seguinte maneira:

$$\rho_B(x) = -e^2 \int_{\mathbb{R}^3} Q(x-y) \phi(y) d^3y \quad (4.8)$$

que chamaremos de "Equação de tipo London-Pippard". A região de integração tem as mesmas restrições que em supercondutividade.

$\rho_B$  é a distribuição de carga devida ao potencial elétrico;  $\phi$  representa o potencial elétrico total, igual ao potencial aplicado mais o potencial de blindagem.

Agora, se

$$Q(x-y) = \epsilon_0 \delta(x-y)$$

obtemos

$$\rho_B(x) = -e^2 \epsilon_0 \phi(x) \quad (4.9)$$

que é a equação de tipo London. Usando a equação de Poisson, podemos escrever

$$\nabla^2 \phi(x) = \frac{e^2 \epsilon_0}{\epsilon_0} \phi(x)$$

Uma solução simples dessa equação obtém-se, imediatamente,



$$\frac{\phi(x)}{\phi_0} = e^{-\frac{x}{\delta_L}} \quad (4.10)$$

onde

$$\delta_L = \frac{1}{\sqrt{\frac{\sigma^2}{\epsilon_0} \rho_0}} \quad (4.11)$$

Assim, ficou determinada uma distância de penetração tipo London, que determina a penetração do potencial elétrico dentro do material.

## V EQUAÇÕES MICROSCÓPICAS DE TIPO LONDON-PIPPARD

Vamos tentar agora fazer uma dedução microscópica da equação de tipo London-Pippard para substâncias que sofrem uma transição magnético-metálica, mediante o formalismo das funções de Green. Nesse estudo será feito no espaço de momento e frequência. Já determinamos as funções de Green para o estado ODS de Overhauser, neste espaço.

A transformada de Fourier da equação de tipo London-Pippard (4.8) é

$$\rho_{\sigma}(q) = -e^2 q(q) \phi(q) \quad (5.1)$$

Quando  $Q(q)$  for independente de  $q$ , teremos a equação de tipo London.

Se a substância é submetida a um campo elétrico constante no tempo, a densidade de partículas—considerando o seu spin—é, segundo a teoria das funções de Green, dada por

$$n(x) = \sum_{\sigma} G(x \sigma t' x \sigma t' + 0) \quad (5.2)$$

Sem campo, temos

$$n_0(x) = \sum_{\sigma} G_0(x\sigma t' | x\sigma t' + 0) \quad (5.3)$$

onde,  $G(x\sigma t' | x\sigma t' + 0)$  e  $G_0(x\sigma t' | x\sigma t' + 0)$  são as funções de Green com e sem campo, respectivamente.

Logo, a densidade de partículas devida exclusivamente ao campo

é

$$N(x) = n(x) - n_0(x) = \sum_{\sigma} [G(x\sigma t' | x\sigma t' + 0) - G_0(x\sigma t' | x\sigma t' + 0)] \quad (5.4)$$

Vamos admitir que para campos fracos a função de Green com campo possa ser expressa por

$$G(x\sigma t' | x\sigma t' + 0) \approx G_0(x\sigma t' | x\sigma t' + 0) + G^1(x\sigma t' | x\sigma t' + 0) \quad (5.5)$$

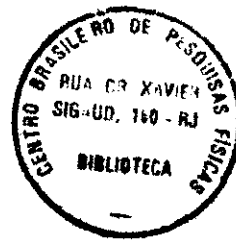
onde  $G^1$  é a função de Green perturbada. A seguir consideraremos apenas a perturbação linear no campo.

Mediante (5.5) obtemos para a densidade de partículas (5.4), devida ao campo

$$N(x) = \sum_{\sigma} G^1(x\sigma t' | x\sigma t' + 0) \quad (5.6)$$

Devemos agora notar que devido ao fato do campo depender das coordenadas espaciais, as funções de Green são funções de  $x'$  e  $x$ , e não mais de sua diferença. Por isso dependem também de dois momentos diferentes  $k'$  e  $k$ , associados às respectivas coordenadas.

Expressando (5.6) em componentes de Fourier, temos



$$\sum_{\mathbf{q}} N(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G^1(\mathbf{k}'_{\sigma} - \mathbf{0}, \mathbf{k}_{\sigma}) e^{i(\mathbf{k}'_{\sigma} - \mathbf{k}_{\sigma})\cdot\mathbf{x}}$$

e, tomando a componente  $q$

$$N(q) = \sum_{\sigma, \mathbf{k}'} G^1(\mathbf{k}'_{\sigma} - \mathbf{0}, \mathbf{k}'_{\sigma} - q_{\sigma})$$

que no espaço  $\omega$  assume a forma

$$N(q) = \tau \sum_{\sigma, \mathbf{n}} \sum_{\mathbf{k}'} G^1(\mathbf{k}'_{\sigma} \omega_{\mathbf{n}}, \mathbf{k}'_{\sigma} - q_{\sigma}) \quad (5.7)$$

Assim, a densidade de carga devida ao campo elétrico aplicado

é

$$\rho_{\mathbf{B}}(q) = e N(q)$$

ou seja

$$\rho_{\mathbf{B}}(q) = e \tau \sum_{\sigma, \mathbf{n}} \sum_{\mathbf{k}'} G^1(\mathbf{k}'_{\sigma} \omega_{\mathbf{n}}, \mathbf{k}'_{\sigma} - q_{\sigma}) \quad (5.8)$$

O campo elétrico pode ser introduzido, no cálculo das funções de Green, passando de

$$\frac{p^2}{2m} \quad \text{a} \quad \frac{p^2}{2m} + \beta(x')$$

onde  $\beta(x')$  é a energia potencial elétrica de um elétron.

$\tilde{\phi}(x') = e\phi_a(x')$ , sendo  $\phi_a(x')$  o potencial aplicado.

A equação de movimento para as funções de Green com campo será

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} - \phi(x') \right] G(x't'; x_1 t_1) \quad (5.9)$$

$$- \int dx_1 V(x' - x_1) [G(x_1 t'; x_1 t' + 0) G(x't'; x_1 t) - G(x't'; x_1 t' + 0) G(x_1 t'; x_1 t)] \\ = \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma\sigma}$$

Na ausência de campo ela se reduz a

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{p^2(x')}{2m} \right] G_0(x't'; x_1 t_1) \quad (5.10)$$

$$- \int dx_1 V(x' - x_1) [G_0(x_1 t'; x_1 t' + 0) G_0(x't'; x_1 t) - G_0(x't'; x_1 t' + 0) G_0(x_1 t'; x_1 t)] \\ = \delta(x' - x) \delta(t' - t) \delta_{\sigma\sigma}$$

De acordo com (5.5)

$$G \approx G_0 + G^1$$

que substituída em (5.9) e levando em conta (5.10) permite escrever

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\nabla^2(\mathbf{x}')}{2m} \right] G^1(z_1 t', z_t) = \rho(\mathbf{x}') [G_0(z_1 t', z_t) + G^1(z_1 t', z_t)] \\ & - \int d^3x_1 V(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_1) [G_0(z_1 t', z_1 t' + 0) G^1(z_1 t', z_t) + G^1(z_1 t', z_1 t' + 0) G_0(z_1 t', z_t) \\ & - G_0(z_1 t', z_1 t' + 0) G^1(z_1 t', z_t) - G^1(z_1 t', z_1 t' + 0) G_0(z_1 t', z_t)] = 0 \end{aligned} \quad (5.11)$$

No segundo termo podemos desprezar a contribuição de  $G^1$  face à de  $G_0$ .

Como o potencial elétrico aplicado depende apenas das coordenadas espaciais, conserva-se a invariância rotacional, isto é, as funções  $G_0$  e  $G^1$  dependem da diferença dos tempos, tendo associada uma única frequência  $\omega$ .

Passando ao espaço  $\omega$ , tem-se para (5.11)

$$\begin{aligned}
& \left[ i\omega_n - \frac{p^2(x')}{2m} \right] G^1(z', \omega_n z) - \delta(x') G_0(z', \omega_n z) \\
& - \int d^3x_1 V(x' - x_1) \left[ G_0(z_1 - 0 z_1) G^1(z', \omega_n z) + G^1(z_1 - 0 z_1) G_0(z', \omega_n z) \right. \\
& \quad \left. - G_0(z_1 - 0 z_1) G^1(z_1, \omega_n z) - G^1(z_1 - 0 z_1) G_0(z_1, \omega_n z) \right] = 0
\end{aligned}
\tag{5.12}$$

que, expressa em componentes de Fourier, é (\*)

$$\begin{aligned}
& \sum_{\underline{k}\sigma} \left[ i\omega_n - \frac{k_\sigma^2}{2m} \right] G^1(k_\sigma, \sigma, \omega_n k_\sigma) e^{i(k_\sigma x' - k_\sigma x)} \\
& - \sum_{\underline{q}\sigma} \delta(q) G_0(k_\sigma, \sigma, \omega_n k_\sigma) e^{i(k_\sigma x' - k_\sigma x) + iqx'} \\
& - \int d^3x_1 \sum_{\underline{q}\sigma} \sum_{\underline{k}\sigma'} V(q) e^{iq(x' - x_1)} \left[ G_0(k_{\sigma_1}, \sigma_1, \omega_n k_{\sigma_1}) G^1(k_\sigma, \sigma, \omega_n k_\sigma) e^{i(k_\sigma x' - k_\sigma x)} \right. \\
& \quad \left. - G^1(k_{\sigma_1}, \sigma_1, \omega_n k_{\sigma_1}) G_0(k_\sigma, \sigma, \omega_n k_\sigma) e^{i(k_{\sigma_1} x_1 - k_\sigma x) + i(k_\sigma x' - k_\sigma x)} \right]
\end{aligned}$$

(\*) Como  $G_0$  é a função de Green sem campo, depende da diferença de coordenadas espaciais e, portanto, tem associado um só  $k$ .  $G^1$  dependerá de dois momentos diferentes.

$$\begin{aligned}
& - G_0(K_\sigma, \sigma' - 0K_{\sigma_1}) G^1(K'_{\sigma_1} \omega_n k_\sigma) e^{i(K_\sigma x' - K_{\sigma_1} x_1) + i(K'_{\sigma_1} x_1 - k_\sigma x)} \\
& - G^1(K_\sigma, \sigma' - 0K'_{\sigma_1}) G_0(k_{\sigma_1} \omega_n k_\sigma) e^{i(K_\sigma x' - K'_{\sigma_1} x_1) + i(k_{\sigma_1} x_1 - k_\sigma x)} \quad ] = 0
\end{aligned}
\tag{5.13}$$

Integrando em  $x_1$  e igualando as exponenciais com  $x'$ , obtemos

para o 1º termo:	$q = 0$	,	$K' = k'$
" " 2º "	$q = k' - k$	,	$K' = K + k - k'$
" " 3º "	$q = k' - K$	,	$K' = k$
" " 4º "	$q = k' - K$	,	$K' = K + k - k'$

Conseqüentemente, para a componente  $(k, k')$  de Fourier, temos

$$\begin{aligned}
& i\omega_n - \frac{k'^2}{2m} \Big] G^1(k'_\sigma, \sigma' \omega_n k_\sigma) - \beta(k' - k) G_0(k_\sigma, \sigma' \omega_n k_\sigma) \\
& - V(0) \sum_{\sigma_1 K} G_0(K_{\sigma_1}, \sigma' - 0K_{\sigma_1}) G^1(k'_\sigma, \sigma' \omega_n k_\sigma) \\
& - \sum_{\sigma_1 K} V(k' - k) G^1(K_{\sigma_1}, \sigma' - 0K_{\sigma_1} + k - k'_{\sigma_1}) G_0(k_\sigma, \sigma' \omega_n k_\sigma) \\
& + \sum_{\sigma_1 K} V(k' - K) G_0(K_\sigma, \sigma' - 0K_{\sigma_1}) G^1(k'_{\sigma_1} \omega_n k_\sigma) \\
& + \sum_{\sigma_1 K} V(k - K) G^1(K_\sigma, \sigma' - 0K_{\sigma_1} + k - k'_{\sigma_1}) G_0(k_{\sigma_1} \omega_n k_\sigma) = 0
\end{aligned}
\tag{5.14}$$



Definindo

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{k\sigma} &= \frac{k_\sigma^2}{2m} + V(0) \sum_{\mathbf{K}} G_0(\mathbf{K}\sigma_1 - 0\mathbf{K}\sigma_1) - \frac{1}{K} V(\mathbf{k}' - \mathbf{K}) G_0(\mathbf{K}\sigma, \sigma' - 0\mathbf{K}\sigma, \sigma') \\ \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{\sigma'} &= \sum_{\mathbf{K}} V(\mathbf{k}' - \mathbf{K}) G_0(\mathbf{K}\sigma, \sigma' - 0\mathbf{K}\sigma, -\sigma') \\ \Delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma'} &= \sum_{\mathbf{K}} V(\mathbf{k}' - \mathbf{K}) G^1(\mathbf{K}\sigma, \sigma' - 0\mathbf{K}\sigma, +\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \sigma') \\ \mathcal{S}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma'} &= - \sum_{\mathbf{K}} V(\mathbf{k}' - \mathbf{K}) G^1(\mathbf{K}\sigma, \sigma' - 0\mathbf{K}\sigma, +\mathbf{k} - \mathbf{k}'\sigma') \\ &\quad + V(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \sum_{\mathbf{K}} G^1(\mathbf{K}\sigma_1 - 0\mathbf{K}\sigma_1 + \mathbf{k} - \mathbf{k}'\sigma_1) \end{aligned} \quad (5.15)$$

e substituindo-as em (5.14), após uma ordenação conveniente, obtemos

$$\begin{aligned} (i\omega_n - \tilde{E}_{k\sigma}) G^1(k\sigma, \sigma' \omega_n k\sigma) + \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{\sigma'} G^1(\mathbf{k}' - \sigma' \omega_n k\sigma) \\ = [\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \mathcal{S}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma'}] G_0(k\sigma, \sigma' \omega_n k\sigma) - \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{\sigma'} G_0(\mathbf{k}\sigma, -\sigma' \omega_n k\sigma) \end{aligned} \quad (5.16)$$

Esta equação permite-nos determinar a função  $G^1$  que procuramos, partindo do sistema

$$\begin{aligned} \sigma' = \sigma \quad (i\omega_n - \bar{\Pi}_{k'_\sigma}) G^1(k'_\sigma \omega_n k_\sigma) + \Delta_{k'}^{\sigma} G^1(k'_\sigma - \sigma \omega_n k_\sigma) \\ = [\delta(k' - k) + \mathcal{S}_{kk'}^{\sigma}] G_0(k_\sigma \omega_n k_\sigma) - \Delta_{kk'}^{\sigma} G_0(k'_\sigma - \sigma \omega_n k_\sigma) \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} \sigma' = -\sigma \quad (i\omega_n - \bar{\Pi}_{k'_\sigma}) G^1(k'_\sigma - \sigma \omega_n k_\sigma) + \Delta_{k'}^{-\sigma} G^1(k'_\sigma \omega_n k_\sigma) \\ = [\delta(k' - k) + \mathcal{S}_{kk'}^{-\sigma}] G_0(k'_\sigma - \sigma \omega_n k_\sigma) - \Delta_{kk'}^{-\sigma} G_0(k_\sigma \omega_n k_\sigma) \end{aligned}$$

que é

$$G^1(k'_\sigma \omega_n k_\sigma) = \frac{1}{(i\omega_n - \bar{\Pi}_{k'_\sigma})(i\omega_n - \bar{\Pi}_{k'_\sigma}) - \Delta_{k'}^2} x$$

$$\begin{aligned} \left\{ (i\omega_n - \bar{\Pi}_{k'_\sigma}) \left\{ [\delta(k' - k) + \mathcal{S}_{kk'}^{\sigma}] G_0(k_\sigma \omega_n k_\sigma) - \Delta_{kk'}^{\sigma} G_0(k'_\sigma - \sigma \omega_n k_\sigma) \right\} \right. \\ \left. - \Delta_{k'}^{+\sigma} \left\{ [\delta(k' - k) + \mathcal{S}_{kk'}^{\bar{\sigma}}] G_0(k'_\sigma \omega_n k_\sigma) - \Delta_{kk'}^{\bar{\sigma}} G_0(k'_\sigma + \sigma \omega_n k_\sigma) \right\} \right\} \end{aligned} \quad (5.18)$$

Na expressão da densidade de carga (5.6) precisamos conhecer  $\Gamma(k'_\sigma \omega_n k'_\sigma - q \sigma)$ , que podemos determinar imediatamente de (5.18). Por conveniência de cálculo, vamos determinar  $\Gamma \sum_{\sigma n} G^1$ . Substituindo em (5.18)  $k$  por  $k' - q$  e  $\sigma$  por  $-\sigma$ , onde convier, admitindo ainda que  $\beta(-q) = \beta(q)$  e  $V(-q) = V(q)$ ; e mediante as funções de Green termo-dinâmicas  $G_0$ , se reduz a

$$\Gamma \sum_{\sigma n} G^1(k'_\sigma \omega_n k'_\sigma - q \sigma) = \Gamma \sum_{\sigma n} \left\{ [G_0(k'_\sigma \omega_n k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q \sigma \omega_n k'_\sigma - q \sigma) + G_0(k'_\sigma - \sigma \omega_n k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q \sigma \omega_n k'_\sigma - q - \sigma)] [\beta(q) + \xi_{k'-q, k'}^{1\sigma}] \right\} \quad (5.19)$$

$$- [G_0(k'_\sigma - \sigma \omega_n k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q - \sigma \omega_n k'_\sigma - q - \sigma) + G_0(k'_\sigma \omega_n k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q - \sigma \omega_n k'_\sigma - q \sigma)] \Delta_{k'-q, k'}^{1\sigma}$$

Calculando os somatórios acima indicados, pelo método já usado,

obtem-se

$$\Gamma \sum_n G_0(k'_\sigma \omega_n k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q \sigma \omega_n k'_\sigma - q \sigma) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A (\mathbb{E}_{k'_\sigma} - \omega_i) (\mathbb{E}_{k'_\sigma - q} - \omega_i) \frac{\text{tgh} \frac{\omega_i}{2}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

$$\Gamma \sum_n G_0(k'_\sigma - \sigma \omega_n k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q \sigma \omega_n k'_\sigma - q - \sigma) = \frac{1}{2} \Delta_{k'}^{-\sigma} \Delta_{k'-q}^{\sigma} \sum_{i=1}^A \frac{\text{tgh} \frac{\omega_i}{2}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

$$\prod_{\mathbb{N}} G_0(k'_\sigma - \sigma \omega_{\mathbb{N}} k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q - \sigma \omega_{\mathbb{N}} k'_\sigma - q - \sigma) = \frac{1}{2} \Delta_{k'_\sigma}^{-\sigma} \sum_{i=1}^A (\mathbb{N}_{k'_\sigma} - \omega_i) \frac{\operatorname{tgh} \frac{\omega_i}{2\sigma}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

$$\prod_{\mathbb{N}} G_0(k'_\sigma \omega_{\mathbb{N}} k'_\sigma) G_0(k'_\sigma - q - \sigma \omega_{\mathbb{N}} k'_\sigma - q - \sigma) = \frac{1}{2} \Delta_{k'_\sigma - q}^{-\sigma} \sum_{i=1}^A (\mathbb{N}_{k'_\sigma} - \omega_i) \frac{\operatorname{tgh} \frac{\omega_i}{2\sigma}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

(5.20)

onde,  $\{\omega_j\} = \{\omega_{k'_\sigma}^+, \omega_{k'_\sigma}^-, \omega_{k'_\sigma - q}^+, \omega_{k'_\sigma - q}^-\}$

Substituindo (5.20) em (5.19), tem-se

$$\prod_{\sigma \mathbb{N}} G^2(k'_\sigma \omega_{\mathbb{N}} k'_\sigma - q - \sigma) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^A \left\{ [(\mathbb{N}_{k'_\sigma} - \omega_i)(\mathbb{N}_{k'_\sigma - q} - \omega_i) \right.$$

$$\left. + \Delta_{k'_\sigma}^{-\sigma} \Delta_{k'_\sigma - q}^{\sigma} \right] [\delta(q) + \xi_{k'_\sigma - q, k}^{\sigma}] \left. \right\} \frac{\operatorname{tgh} \frac{\omega_i}{2\sigma}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^A \left\{ [\Delta_{k'_\sigma}^{-\sigma} (\mathbb{N}_{k'_\sigma - q} - \omega_i) + \Delta_{k'_\sigma - q}^{-\sigma} (\mathbb{N}_{k'_\sigma} - \omega_i)] \Delta_{k'_\sigma - q, k}^{\sigma} \right\} \frac{\operatorname{tgh} \frac{\omega_i}{2\sigma}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

(5.21)

Aproximando  $\xi_{k'-q, k'}^{1\sigma}$  (5.15), para

$$\xi_{k, k+q}^{1\sigma} = V(q) \sum_{\sigma_1 K} G^1(K_{\sigma_1} - 0 K_{\sigma_1} - q \sigma_1) \quad (5.22)$$

onde substituímos  $k'-q$  por  $k$ , pode-se definir

$$\phi_{\Gamma}(q) = \phi(q) + V(q) \sum_{\sigma_1 K} G^1(K_{\sigma_1} - 0 K_{\sigma_1} - q \sigma_1) \quad (5.23)$$

Substituindo  $k'-q$  por  $k$  em (5.21) e introduzindo a definição (5.23), podemos finalmente escrever

$$\begin{aligned} \pi \sum_{\sigma_1} G^1(k'_\sigma \omega_{\Gamma} k'_\sigma - q \sigma) &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^4 \left\{ [(K_{k+q} - \omega_i)(K_{k-\sigma} - \omega_i) \right. \\ &\quad \left. + \Delta_{k+q}^{-\sigma} \Delta_{k-\sigma}^{\sigma}] \phi_{\Gamma}(q) \right\} \frac{\tanh \frac{\omega_i}{2T}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)} + o(\Delta_{k, k+q}^{1\sigma}) \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\text{onde, } \{\omega_i\} = \{\omega_k^+, \omega_k^-, \omega_{k+q}^+, \omega_{k-q}^-\}$$

Substituindo (5.24) na expressão da densidade de carga (5.8) e desprezando  $o(\Delta_{k, k+q}^{1\sigma})$ , tem-se

$$P_B(q) = \left\{ \frac{e}{2} \sum_{k \in \sigma} \sum_{i=1}^A [ (\tilde{E}_{k+\sigma} - \omega_i)(\tilde{E}_{k-\sigma} - \omega_i) + \Delta_{k+\sigma}^{-\sigma} \Delta_k^{\sigma} ] \frac{\tanh \frac{\omega_i}{2T}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)} \right\} \beta(T) \quad (5.25)$$

Recordando que  $\beta(T)$  representa a energia elétrica total, que expressada em função de um potencial elétrico total, é

$$\beta(T) = e \phi(T)$$

resulta

$$P_B(q) = e^2 \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k \in \sigma} \sum_{i=1}^A [ (\tilde{E}_{k+\sigma} - \omega_i)(\tilde{E}_{k-\sigma} - \omega_i) + \Delta_{k+\sigma}^{-\sigma} \Delta_k^{\sigma} ] \frac{\tanh \frac{\omega_i}{2T}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)} \right\} \beta(T)$$

que podemos escrever como

$$P_B(q) = -e^2 c(q) \phi(T)$$

(5.26)

onde

$$c(q) = - \frac{1}{2} \sum_{k \in \sigma} \sum_{i=1}^A [ (\tilde{E}_{k+\sigma} - \omega_i)(\tilde{E}_{k-\sigma} - \omega_i) + \Delta_{k+\sigma}^{-\sigma} \Delta_k^{\sigma} ] \frac{\tanh \frac{\omega_i}{2T}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

Deduzimos assim, microscopicamente, a equação de tipo London-Pippard

Vamos agora aplicar estas fórmulas a uma banda estreita de Bloch com interação. Introduzimos a transformação de Wannier e consideramos somente a correlação  $U$  entre dois elétrons no mesmo íon. Isto significa que  $\tilde{E}_{\mathbf{k}}$  deve interpretar-se como as energias de Bloch; nestas condições  $\Delta_{\mathbf{k}}$  é independente de  $\mathbf{k}$ .

### CÁLCULO DE $Q(q)$ PARA $T \sim 0^\circ K$

Por definição, para  $\Delta_{\mathbf{k}}$  independente de  $\mathbf{k}$ , temos

$$Q(q) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{i=1}^4 \left\{ (\tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma+q} - \omega_i)(\tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma} - \omega_i) + \Delta^2 \right\} \frac{\tanh \frac{\omega_i}{2T}}{\prod_{j \neq i} (\omega_j - \omega_i)}$$

Lembrando que

$$\omega_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{2}(\tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma} + \tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma'}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma} - \tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma'})^2 + \Delta^2}$$

e designando

$$y_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma} + \tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma'})$$

$$x_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma} - \tilde{E}_{\mathbf{k}\sigma'})$$

resultando

$$\omega_k^{\pm} = \gamma_k \pm \sqrt{\gamma_k^2 + \Delta^2}$$

Para  $\Gamma \rightarrow 0$  na aproximação de banda estreita, tem-se:  $\frac{\Delta}{\Gamma} \gg 1$ .

Assim, pode aproximar-se

$$\omega_k^{\pm} = \gamma_k \pm \Delta \pm \frac{\gamma_k^2}{2\Delta}$$

e, análogamente

$$\tanh \frac{\omega_k^{\pm}}{2\Gamma} = \pm (1 - 2e^{-\frac{\Delta}{\Gamma}})$$

Os termos dos somatórios em "1" têm a forma

$$i=1 : \omega_{\underline{k}} = \omega_{\underline{k}}^{\pm}$$

$$\frac{(\omega_{\underline{k}_0+q}^{\pm} - \omega_{\underline{k}}^{\pm})(\omega_{\underline{k}_0}^{\pm} - \omega_{\underline{k}}^{\pm}) + \Delta^2}{(\omega_{\underline{k}}^{\pm} - \omega_{\underline{k}}^{\pm})(\omega_{\underline{k}+q}^{\pm} - \omega_{\underline{k}}^{\pm})(\omega_{\underline{k}+q}^{\pm} - \omega_{\underline{k}}^{\pm})} \tanh \frac{\omega_{\underline{k}}^{\pm}}{2\Gamma}$$

$$= \frac{(\gamma_{\underline{k}_0+q} - \gamma_{\underline{k}} - \Delta - \frac{\gamma_{\underline{k}}^2}{2\Delta})(\gamma_{\underline{k}_0} - \gamma_{\underline{k}} - \Delta - \frac{\gamma_{\underline{k}}^2}{2\Delta}) + \Delta^2}{2(\Delta + \frac{\gamma_{\underline{k}}^2}{2\Delta})(\gamma_{\underline{k}+q} - \gamma_{\underline{k}} + \frac{\gamma_{\underline{k}+q}^2 - \gamma_{\underline{k}}^2}{2\Delta}) [2\Delta + \frac{\gamma_{\underline{k}+q}^2 + \gamma_{\underline{k}}^2}{2\Delta} - (\gamma_{\underline{k}+q} - \gamma_{\underline{k}})]} \left\{ 1 - 2e^{-\frac{\Delta}{\Gamma}} \right\}$$



$$\underline{i=2 : \omega_2 = \omega_k^-}$$

$$\frac{(\tilde{E}_{k_0+q} - \omega_k^-)(\tilde{E}_{k_0} - \omega_k^-) + \Delta^2}{(\omega_k^+ - \omega_k^-)(\omega_{k+q}^+ - \omega_k^-)(\omega_{k+q}^- - \omega_k^-)} \cdot \text{tch} \frac{\omega_k^-}{2\tilde{E}_k}$$

$$\frac{(\tilde{E}_{k_0+q} - \gamma_k + \Delta + \frac{\tilde{E}_k^2}{2\Delta})(\tilde{E}_{k_0} - \gamma_k + \Delta + \frac{\tilde{E}_k^2}{2\Delta}) + \Delta^2}{2(\Delta + \frac{\tilde{E}_k^2}{2\Delta})(\gamma_{k+q} - \gamma_k - \frac{\tilde{E}_{k+q}^2 - \tilde{E}_k^2}{2\Delta}) [2\Delta + \frac{\tilde{E}_{k+q}^2 + \tilde{E}_k^2}{2\Delta} + \gamma_{k+q} - \gamma_k]} \left\{ 1 - 2e^{-\frac{\Delta}{T}} \right.$$

$$\underline{i=3 : \omega_3 = \omega_{k+q}^+}$$

$$\frac{(\tilde{E}_{k_0+q} - \omega_{k+q}^+)(\tilde{E}_{k_0} - \omega_{k+q}^+) + \Delta^2}{(\omega_k^+ - \omega_{k+q}^+)(\omega_k^- - \omega_{k+q}^+)(\omega_{k+q}^- - \omega_{k+q}^+)} \cdot \text{tch} \frac{\omega_{k+q}^+}{2\tilde{E}_{k+q}}$$

$$\frac{(\tilde{E}_{k_0+q} - \omega_{k+q}^+)(\tilde{E}_{k_0} - \omega_{k+q}^+) + \Delta^2}{2(\Delta + \frac{\tilde{E}_{k+q}^2}{2\Delta})(\gamma_{k+q} - \gamma_k + \frac{\tilde{E}_{k+q}^2 - \tilde{E}_k^2}{2\Delta}) [2\Delta + \frac{\tilde{E}_{k+q}^2 + \tilde{E}_k^2}{2\Delta} + \gamma_{k+q} - \gamma_k]} \left\{ 1 - 2e^{-\frac{\Delta}{T}} \right.$$

$$i=4 : \omega_4 = \omega_{k+q}^-$$

$$\frac{(\tilde{E}_{k+q}^- - \omega_{k+q}^-)(\tilde{E}_k^- - \omega_{k+q}^-) + \Delta^2}{(\omega_k^+ - \omega_{k+q}^-)(\omega_k^- - \omega_{k+q}^-)(\omega_{k+q}^+ - \omega_{k+q}^-)} \operatorname{tgh} \frac{\omega_{k+q}^-}{2\Gamma}$$

$$= \frac{(\tilde{E}_{k+q}^- - \gamma_{k+q} + \Delta + \frac{x_{k+q}^2}{2\Delta})(\tilde{E}_k^- - \gamma_{k+q} + \Delta + \frac{x_{k+1}^2}{2\Delta}) + \Delta^2}{2(\Delta + \frac{x_{k+q}^2}{2\Delta})(\gamma_{k+q} - \gamma_k - \frac{x_{k+q}^2 - x_k^2}{2\Delta}) [2\Delta + \frac{x_{k+q}^2 + x_k^2}{2\Delta} - (\gamma_{k+q} - \gamma_k)]} \left\{ 1 - 2\alpha \frac{\Delta}{\Gamma} \right\}$$

Após um cálculo direto e cuidadoso, considerando contribuições apenas até à terceira ordem no gap de energia, encontra-se

$$Q(q) = \frac{1 - 2\alpha \frac{\Delta}{\Gamma}}{4\Delta^3} \sum_{\mathbf{k}} (x_{\mathbf{k}+q} - x_{\mathbf{k}})^2 \quad (5.27)$$

Calcularemos  $\sum_{\mathbf{k}} (x_{\mathbf{k}+q} - x_{\mathbf{k}})^2$  mediante o desenvolvimento de Wannier. Assim,

$$\tilde{E}_{\mathbf{k}} = \tilde{E}_0 + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{a}} b_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}$$

Logo

$$x_k = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N b_s e^{i k s} e^{\frac{1}{2} Q s} \sin \frac{1}{2} Q s$$

Portanto

$$\sum_{k=1}^N (x_{k+1} - x_k)^2 = \frac{2}{N} \sum_{s=1}^N b_s^2 (1 - \cos q s) \sin^2 \frac{1}{2} Q s \quad (5.28)$$

usamos:  $b_{-s} = b_s$

Entretanto

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \sum_{s=1}^N b_s^2 (1 - \cos q s) \sin^2 \frac{1}{2} Q s &= \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N b_{1j}^2 [1 - \cos q(R_1 - R_j)] \sin^2 \frac{1}{2} Q(R_1 - R_j) \\ &= \frac{2}{N} \sum_{i,j} \left\{ \sum_{\text{viz}} b^2 [1 - \cos q(R_0 - R_j)] \sin^2 \frac{1}{2} Q(R_0 - R_j) \right\} \\ &= 2 \sum_{j \text{ viz.}} b^2 (1 - \cos q R_{0j}) \sin^2 \frac{1}{2} Q R_{0j} \end{aligned} \quad (5.29)$$

onde,  $b_{ij} \equiv b$ ;  $R_{0j} = R_0 - R_j$

Substituindo (5.29) na expressão  $Q(q)$  (5.27) conduz a

$$Q(q) = \frac{1-2q}{2\Delta^3} e^{-\frac{\Delta}{q}} \sum_{j \text{ viz.}} b^2 (1 - \cos qR_{0j}) \operatorname{sen} \frac{2q}{2} QR_{0j} \quad (5.30)$$

Para uma melhor análise passaremos ao espaço real. Temos portanto

$$Q(x) = \left\{ \frac{1-2q}{2\Delta^3} e^{-\frac{\Delta}{q}} \sum_{j \text{ viz.}} b^2 \operatorname{sen} \frac{2q}{2} QR_{0j} \right\} \delta(x)$$

$$\frac{1-2q}{2\Delta^3} e^{-\frac{\Delta}{q}} \sum_{j \text{ viz.}} b^2 \operatorname{sen} \frac{2q}{2} QR_{0j} \equiv [\delta(R_{0j} + \pi) + \delta(R_{0j} - \pi)]$$

Vê-se que apenas se tem contribuições locais. Vamos considerar como primeira aproximação somente o primeiro termo de  $Q(x)$ , temos

$$Q(x) = \left\{ \frac{1-2q}{2\Delta^3} e^{-\frac{\Delta}{q}} \sum_{j \text{ viz.}} b^2 \operatorname{sen} \frac{2q}{2} QR_{0j} \right\} \delta(x) \quad (5.32)$$

Logo, para o espaço de momento, teremos aproximadamente:

$$Q(q) = Q_0 = \frac{1-2\epsilon}{2\Delta^3} \sum_{j \text{ viz.}} b^2 \sin^2 \frac{21}{2} QR_{oj} \quad (5.33)$$

o que mostra que  $Q(q)$  independe de  $q$ . Substituindo  $Q(q)$  na equação da densidade de carga (5.1), temos

$$\rho_E(q) = -e^2 Q_0 \frac{\phi(q)}{T} \quad (5.34)$$

que é a equação de tipo London; expressa uma relação local entre a densidade de carga e o potencial elétrico total. Neste caso, podemos determinar uma distância de penetração tipo London

$$\delta_L = \frac{1}{\sqrt{\frac{e^2}{\epsilon_0} Q_0}}$$

Vamos fazer uma estimativa do valor numérico de  $\delta_L$ .

Aproximando

$$\sum_{j \text{ viz.}} b^2 \sin^2 \frac{21}{2} QR_{oj} \approx \alpha Z b^2 \quad (5.35)$$

onde  $Z$  corresponde ao número de vizinhos mais próximos, e substituindo em  $Q_0$  (5.33), resulta

$$Q_0 \approx \frac{1}{2\Delta} \left( \frac{\alpha \pi b^2}{\Delta^2} \right) \quad (5.36)$$

Estimando:

$$\Delta = 1 \text{ (eV)}$$

$$\frac{\alpha \pi b^2}{\Delta^2} = 10^{-2}$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ (C)}$$

$$\epsilon_0 = 8.8 \times 10^{-12} \left( \frac{\text{C}^2}{\text{J} \cdot \text{m}} \right)$$

encontramos

$$\delta_L = 10^5 \text{ (m)} \quad (5.37)$$

o que significa que o campo elétrico aplicado penetra totalmente dentro do material, para  $T = 0^\circ \text{K}$ . Pode demonstrar-se que é nula a contribuição de  $O(\Delta^{1\sigma}_{k+q,k})$  na presente aproximação. Ao mesmo tempo temos agora uma justificação de ter aproximado  $\rho(x)$ . De (4.10) vimos que  $\rho(x)$  é uma função lentamente decrescente, de modo que as contribuições de  $\delta(R_{0j} + x)$  e  $\delta(R_{0j} - x)$  se compensam aproximadamente. Isto significa que (5.32) é uma aproximação consistente.

CÁLCULO DE  $Q(q)$  PARA  $T \sim T_c$

Por definição, na aproximação de  $\Delta_k$  independente do  $k$ , temos

$$Q(q) = -\frac{1}{2} \sum_{k=0}^4 \sum_{i=1}^4 \frac{(\omega_{k+0}^+ - \omega_i)(\omega_{k+0}^- - \omega_i) + \Delta^2}{\prod_{j=1}^4 (\omega_j - \omega_i)} \operatorname{tgh} \frac{\omega_i}{2T}$$

Tendo presente que para  $T \sim T_c$  se tem  $\Delta \rightarrow 0$ , podemos fazer as aproximações

$$\omega_{k+0}^+ = \omega_{k+0} + \frac{\Delta^2}{2\omega_k}$$

$$\omega_{k+0}^- = \omega_k - \frac{\Delta^2}{2\omega_k}$$

Por cálculo direto e considerando contribuições até  $\Delta^2$ , tem-se:

l=1

$$\sum_{\sigma} \frac{(\tilde{E}_{k\sigma+1} - \omega_k^+)(\tilde{E}_{k\sigma} - \omega_k^+) + \Delta^2}{(\omega_k^- - \omega_k^+)(\omega_{k+1}^+ - \omega_k^+)(\omega_{k+1}^- - \omega_k^+)} \operatorname{tch} \frac{\omega_k^+}{2T}$$

$$= \frac{1}{\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k} \left\{ 1 + \Delta^2 \frac{(x_{k+1} - x_k) [(\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k) - 2x_k]}{2x_k^2 (\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k)(\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k)} \right\} \operatorname{tch} \frac{\omega_k^+}{2T}$$

l=2

$$\sum_{\sigma} \frac{(\tilde{E}_{k\sigma+1} - \omega_k^-)(\tilde{E}_{k\sigma} - \omega_k^-) + \Delta^2}{(\omega_k^+ - \omega_k^-)(\omega_{k+1}^+ - \omega_k^-)(\omega_{k+1}^- - \omega_k^-)} \operatorname{tch} \frac{\omega_k^-}{2T}$$

$$= \frac{1}{\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k} \left\{ 1 - \Delta^2 \frac{(x_{k+1} - x_k) [(\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k) + 2x_k]}{2x_k^2 (\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k)(\tilde{E}_{k+1} - \tilde{E}_k)} \right\} \operatorname{tch} \frac{\omega_k^-}{2T}$$



i=3

$$\frac{(\tilde{E}_{k+q} - \omega_{k+q}^+)(\tilde{E}_k - \omega_{k+q}^+) + \Delta^2}{(\omega_k^+ - \omega_{k+q}^+)(\omega_k^- - \omega_{k+q}^+)(\omega_{k+q}^- - \omega_{k+q}^+)} \operatorname{tgh} \frac{\omega_{k+q}^+}{2T}$$

$$= \frac{1}{\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k} \left\{ 1 + \Delta^2 \frac{(z_{k+q} - z_k) [(\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k) + 2z_{k+q}]}{2z_{k+q}^2 (\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k)(\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k)} \right\} \operatorname{tgh} \frac{\omega_{k+q}^+}{2T}$$

i=4

$$\frac{(\tilde{E}_{k+q} - \omega_{k+q}^-)(\tilde{E}_k - \omega_{k+q}^-) + \Delta^2}{(\omega_k^+ - \omega_{k+q}^-)(\omega_k^- - \omega_{k+q}^-)(\omega_{k+q}^+ - \omega_{k+q}^-)} \operatorname{tgh} \frac{\omega_{k+q}^-}{2T}$$

$$= \frac{1}{\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k} \left\{ 1 + \Delta^2 \frac{(z_{k+q} - z_k) [(\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k) - 2z_{k+q}]}{2z_{k+q}^2 (\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k)(\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k)} \right\} \operatorname{tgh} \frac{\omega_{k+q}^-}{2T}$$

Após alguns cálculos e fazendo o desenvolvimento aproximado das funções hiperbólicas das contribuições  $\Delta^2$  e ainda aproximações grosseiras tais como considerar  $q \rightarrow 0$  e  $\tilde{E}_k = \tilde{E}_k^2$ , encontra-se

$$Q(q) \approx \frac{1}{2} \sum_k \sum_{|s|=1}^2 \frac{\operatorname{tgh} \frac{\tilde{E}_k^2}{2T} - \operatorname{tgh} \frac{\tilde{E}_k^2}{2T}}{\tilde{E}_k^2 - \tilde{E}_k} = \frac{\Delta^2}{24T^3} \quad (5.38)$$

onde

$$\tilde{E}_1 = \tilde{E}_{k+q}; \quad \tilde{E}_1^2 = \tilde{E}_{k+q+q}; \quad \tilde{E}_2 = \tilde{E}_k; \quad \tilde{E}_2 = \tilde{E}_{k+q}$$

Se  $T = T_c$ , tem-se

$$Q_c(q) \approx \frac{1}{2} \sum_k \frac{\operatorname{tgh} \frac{\tilde{E}_{k+q}}{2T_c} - \operatorname{tgh} \frac{\tilde{E}_k}{2T_c}}{\tilde{E}_{k+q} - \tilde{E}_k} \quad (5.39)$$

As equações (5.38) e (5.39) mostram que  $Q$  depende fortemente de "q" para  $T \neq 0^\circ K$ , ou seja, expressam um comportamento tipo Pippard.

O nosso cálculo na verdade representa nada mais que uma determinação da constante dielétrica estática. Vê-se de (5.39)

que para  $T = T_c$  obtém-se um comportamento característico de um metal(N).

Chamamos atenção que nosso cálculos foram feitos usando a representação de ondas planas. Entretanto deveríamos ter usado a representação de Bloch na aproximação de acoplamento forte. Embora as fórmulas apresentadas se modifiquem, a estrutura geral conserva-se.

## VI CONCLUSÕES

A equação de tipo London-Pippard deduzida, permite descrever o comportamento de substâncias que sofrem uma transição térmica de um estado isolante antiferromagnético a um estado metálico não magnético. Mostra-se que isto é de fato possível aplicando a teoria de Overhauser de onda estática de densidade de spin a uma banda estreita de elétrons com interação. Das aproximações feitas a mais grosseira consistiu na aplicação da representação de ondas planas em lugar da representação de Bloch. Assim, qualitativamente, prevalecem nossos resultados. Torna-se porém necessário encontrar um formalismo que utilize a representação de Wannier para elétrons de Bloch. Até então, aplicações numéricas de nossas fórmulas, como na previsão da dependência da distância de penetração com a temperatura, não terão muito sentido físico.

AGRADECIMENTOS

Desejo expressar meu sincero agradecimento ao Dr. A. H. de Graaf pela sugestão da presente tese e pela sua orientação e estímulo.

Agradeço igualmente aos colegas R. Hernández por suas valiosas discussões, R. López e R. Iuzzi por seus úteis comentários e H. Lima por sua colaboração no preparo do manuscrito.

Quero também manifestar meu reconhecimento à UNESCO e ao Centro Latino Americano de Física pela concessão da bolsa e ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas pela grata acolhida.

A "Universidad Técnica del Estado-Chile" e a sua "Escuela de Ingenieros Industriales", por me terem permitido o usufruto da bolsa, nomeando-me em comissão de serviço, meu reconhecimento.

## VIII REFERENCIAS

- A1 ABRIKOSOV, A. A., L. P. GORKOV e I. E. DZYALOSHINSKI,  
"Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics",  
Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.
- A2 ANDERSON, P. W., "Solid State Physics", Vol. 14, 99 ,  
Academic Press, New York, 1963.
- D DE GRAAF, A. M., E. LÓPEZ e R. LUZZI, "On the Theory of  
Antiferromagnetism"(A ser publicada).
- G GORKOV, L. P., Soviet Physics JETP, 7, 505-506 (1958).
- L LONDON, F., "Superfluids", Vol. I, J. Wiley.
- O OVERHAUSER, A. W., Phys. Rev., 128, 1437 (1962).
- N NOZIÉRES, P. e D. PINES, IL Nuovo Cimento, (X) 9, 470-489 (1958).
- P PIPPARD, A. B., Proc. Roy. Soc. London, Ser. A, 216, 547(1953).
- T TITCHMARSH, E. C., "The Theory of Functions", 114, Oxford  
University (1950).