

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Coordenação de Física Experimental e Baixas Energias

Estudo da Supercondutividade no regime de correlações fortes: interação repulsiva com simetria s-estendida

Humberto Martín Silva Vásquez

Orientador: Prof. Dr. Amos Troper

Rio de Janeiro

Estudo da Supercondutividade no regime de correlações fortes: interação repulsiva com simetria s-estendida

Dissertação apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), como pré-requisito para a obtenção do título de **Mestre em Ciências** sob a orientação do Prof. Dr. Amos Troper.

Rio de Janeiro 2010

Agradecimentos

Primeiramente agradeço os meus pais Arminda e Humberto pela educação que eles me ofereceram, pelo amor e força que sempre me ensinaram na sua luta constante para sair adiante e pelo seu infinito e incondicional apoio.

Agradeço a meus orientadores professores Amos Troper e Mucio Continentino pela orientação nesta dissertação, pela guia no mundo da matéria condensada e pelas discussões e observações que valoro muito.

A meu irmão Kike, pelo carinho e Fé mostrado tantas vezes a sua família Laura e a angina Nathaly que pronto vou conhecer a minha irmã Marilú por cuidar de meus pais. Aos dos novos anjos no céu, Rosa Ortiz e Felicita Vásquez pelo carinho.

A Catalina por todo o amor grande bonito e toda a cumplicidade, a Martinita por tudos os jogos que curtimos.

A Francisco Dinola pela sua amizade pelas observações e sugestões no meu trabalho por aquelas tardes de papo sobre supercondutividade, a Isabel Sousa pela aquela sorriso que ela sempre tem para a gente.

A Diego Gonzales Chavez pela amizade e seu grande e desinteressado apoio, a Daniel Reyes quem me apresento à toda a galera supercondutora y por seu apoio.

A meus amigos do CBPF: Sadi Khodaee pelo apoio moral, a Eduardo Zambrano pela ajuda nos cálculos numéricos e por me mostrar como se adoça o ouvido, a Cesar Castromonte pela guia e o animo de sempre, a la Vekee, Enrique Arias, chino Jauregui , Luis Giraldo; a Picole,Pablo, Jimmy,a Vicente, a Jose Palomino por incentivar-me para vir para o Rio. A Yansel Guerrero por toda a cumplicidade no verão do 2009

Ao pessoal que me ajudou com a redação : Kim, Lucas, Leonardo, Erico pela ajuda na redação.

A minha companheira de casa Ana Maria Guerreiro, limenha de sempre, pela ajuda e por todas as estendidas conversas noturnas, a Juliana Jimenez pela comida viva, a Roberto Loli pela ajuda nos momentos difíceis.

A meus amigos de bairro: Koki, Samuel e Armando por tanta loucura boa, a David Galliquio por me fazer rir tantas vezes com suas historietas e em nossas conversações noturnas.

Ao professor Ivan de Oliveira pela sua ajuda constante, a Gil e a Monica pela ajuda de sempre, ao pessoal do resturante Vilma, Vitor, Vila pela comida sagrada diaria.

A CAPES pelo apoio econômico para a realização desta dissertação.

Resumo

Na necessidade de entender melhor o comportamento dos supercondutores no regime de acoplamento forte tem se gerado várias propostas teóricas, do mecanismo da supercondutividade para estes sistemas. Algumas como o estudo do 'Crossover BEC-BCSt' tem gerado muitas expectativas, mas outras como a proposta do estudo das interações repulsivas entre elétrons permitem uma nova abordagem deste problema. Neste trabalho, vamos a estudar a possibilidade de um estado supercondutor, num modelo do Hubbard com interação repulsiva local. O sistema será resolvido pelo método das funções de Green, introduzindo uma nova aproximação de campo médio a qual permitira levar nosso sistema até o limite de interação muito forte. Os resultados mostram um sistema com fase supercondutora, o qual, no limite de interação forte apresenta uma saturação da temperatura crítica sugerindo a possibilidade de uma condensação Bose-Einstein.

Abstract

The need to understand better superconductort's behavior in the strong coupling regime has generated several theoretical proposals for the superconductivity's mechanism for these systems. Some, like the Crossover BEC-BCS's studies has generated great expectations. But others studies, like the repulsive interaction between electrons allow a new approach to this problem. In this thesis, we use a Hubbard model with a local repulsive interaction. The system will be solved by the Green's functions method, introducing a new mean field approximation, which will bring our system to the strong interaction. The results show a system with a superconducting phase, which, in the strong interaction limit presents a saturation of the critical temperature, suggesting the possibility of Bosé-Einstein condensation.

Conteúdo

1	Introdução		5
2	Teorias de Acoplamento Forte, Crossover BCS-BEC		
3	O método das Funções de Green		
4	BCS norma	l, Hubbard com interação local atrativa	18
5	Hamiltonia	no de Hubbard com interação não local atrativa	23
6	Hubbard com interação local: uma nova aproximação do campo médio com inte-		
	ração repul	siva	30
	6.0.1	Limite $T \rightarrow 0$	38
	6.0.2	Limite $U \to \infty$	39
	6.0.3	Resultados numéricos	42
7	Conclusões		46
A	Simetrias de	o parâmetro de ordem	48

Lista de Figuras

4.1	O gráfico mostra comportamento do gap em função da temperatura no caso da			
	teoria BCS. O importante deste gráfico é que ele mostra o comportamento clás-			
	sico de um supercondutor. O parâmetro supercondutor indica a supercondutivi-			
	dade do sistema quando a temperatura cresce ele diminui até uma temperatura			
	critica (T_c), em que ele é zero e o sistema deixa de ser supercondutor. A linha			
	cheia é o resultado teórico, a linha ponteada é a curva experimental. Gráfico			
	obtido da Ref [16].	22		
6.1	Esta figura mostra o comportamento do Δ com a temperatura, para n=0.3, para			
	diferentes valores de interação U , mostrando assim um comportamento super-			
	condutor do sistema.	43		
6.2	Esta figura mostra o comportamento do Δ com a temperatura, para uma con-			
	centração major n=0.7, para diferentes valores de interação U , A figura também			
	mostra um comportamento supercondutor para o sistema	44		
6.3	Mostramos dependência da temperatura crítica T_c com a interação U para duas			
	concentrações. A curva mostra uma saturação quando U é muito grande suge-			
	rindo uma condensação Bosé Einstein para o sistema	45		
A.1	Na Figura mostram-se os três tipos de simetria. Os gráficos de acima estão			
	no espaço real e as figuras abaixo estão no espaço dos momentos. a: A onda			
	isotrópica s. b: $d_{x^2-y^2}$ onda d. c: a onda s anisotrópica ou s-estendida. Figura			
	obtida de Physics Today, Janeiro 1996	49		

Capítulo 1

Introdução

Bardeen, Cooper e Schrieffer [1], em 1957, propuseram uma teoria completa que explicava a essência do fenômeno da supercondutividade, a qual, se manteve nos trinta anos posteriores. Mas desde o descobrimento da supercondutividade de altas temperaturas em Cupratos [2], se acredita que novos mecanismos regem estes sistemas. Estabelece-se desde o início que o elemento chave do mecanismo BCS é o emparelhamento eletrônico o qual ainda é valido [3]. O plano CuO_2 é o elemento comum em todos os 'supercondutores cupratos no qual os átomos de cobre formam uma rede quadrada com um átomo de O no ponto central de cada par de primeiros vizinhos de átomos de Cu. No caso simples do $(La)_2CuO_4 = (LaO)_2CuO_2$ com a suposição de que os íons La^{+3} e O^{2-} , a carga do Cu é 2+ correspondente à configuração $3d^9$. Na ausência da interação entre elétrons o sistema não dopado La_2CuO_4 poderia ser um metal, enquanto se observa um isolante anti-ferromagnético. Isso mostra a importância de uma forte interação coulombiana repulsiva nos sitios do Cu, a qual tende a localizar os elétrons d e produzir um isolante de Mott. Anderson [4] foi o primeiro a propor que a essência da supercondutividade de alta temperatura está contida no modelo de Hubbard bi-dimensional numa rede quadrada com uma interação repulsiva U local. Outra tentativa para estudar os supercondutores a altas temperaturas nos óxidos do cobre é o entendimento do chamado crossover: BCS (Bardeen, Cooper e Schrieffer) no regime do acoplamento fraco até BEC (condensação Bosé-Einstein) regime de acoplamento forte [7] [8]. O primeiro descreve um superfluido composto de férmions com atração arbitrariamente fraca e o segundo um sistema condensado de moléculas diatômicas. P. Nozières e S. Schimtt-Rink [8], em 1985, foram os primeiros a estudarem este problema, introduzindo temperatura finita na sua análise teórica. Usando basicamente uma formulação diagramática eles mostraram que dentro de sua aproximação, a temperatura de transição *Tc* (temperatura na qual o material torna-se supercondutor) evolui suavemente como uma função do acoplamento. Posteriormente, C.A.R. Sá de Melo *et al.* [8], em 1993, reformularam o trabalho de P. Nozières e Schimtt-Rink e levantam a possibilidade que, a física do crossover (BCS-BEC) pode ser relevante para o mecanismo dos supercondutores de alta temperatura. No segundo capítulo é apresentado uma revisão dos trabalhos que estudam o chamado "crossover BCS-BEC". Vamos rever os estudos feitos por P. Nozières e S. Schimtt-Rink em 1984 e o trabalho feito por C.A.R. Sá de Melo *et.al.* em 1993. Estes dois trabalhos serviram como referência e motivação para a nossa análise da supercondutividade no regime de interações fortes.

No terceiro capítulo, vamos estudar o método das funções de Green no esquema do teorema de Zubarev [9], como ferramenta fundamental para o cálculo das grandezas que nos interessam. Principalmente estaremos concentrados na obtenção dos valores médios, que nos levam as equações características da supercondutividade, como a equação para o gap e para o número de ocupação.

No quarto capítulo, resolveremos o Hamiltoniano de Hubbard com interação atrativa local, usando o método das funções de Green descrito no capítulo 3. Nesta parte vamos obter as equações do movimento para os propagadores de interesse. Estas equações irão gerar propagadores de ordem superior, faremos então, uma aproximação tipo campo médio para conseguir resolver o sistema de equações e obter as expressões clássicas para o gap e o número de ocupação [1]. O quinto capitulo é dedicado ao estudo do trabalho de E. S. Caixeiro e A. Troper [10] que estudam um Hamiltoniano do Hubbard com interação atrativa não local. Nesta parte também como no capitulo anterior acharemos as equações do movimento para os propagadores, estas tambem geram propagadores de uma ordem superior, mas neste caso acharemos as equações de movimento desses novos propagadores e com uma aproximação adequada nesta abordagem, obteremos as expressões para o gap e para o número de ocupação.

No sexto capítulo finalmente vamos resolver um Hamiltoniano com interação local mas com

uma nova proposta de aproximação do campo médio, inspirada no trabalho de E. S. Caixeiro e A. Troper [10], estudada no quinto capítulo, mas com uma variação proposta por nós. Neste caso o esquema é o mesmo que nos dois capítulos anteriores mas alem das aproximaçoes feitas sobre as equações do movimento, estas resultam complicadas e aí onde nos introduzimos a proposta de uma interação repulsiva entre férmions no sistema, a qual nos levará a uma simplificação e consequentemente a uma solução e as expressões do Gap e do número de ocupação. Depois mostraremos como este sistema pode ser levado para o caso do limite de interação forte, limite que não pode ser estudado nas duas abordagens anteriores. Nas conclusões descrevemos sucintamente os resultados obtidos neste trabalho, limitações e também propomos alguns problemas que podem ser abordados futuramente relacionados ao tema desta dissertação.

Capítulo 2

Teorias de Acoplamento Forte, Crossover BCS-BEC

No intuito de entender o "crossover"entre a supercondutividade nos regimes de acoplamento fraco e forte os trabalhos pioneiros de D. M. Eagles [5], A. J. Leggett[6] e P. Nozières e S. Schimtt-Rink [7] e um pouco depois o de C. A. R. Sá de Melo [8] são fundamentais. Nesta parte repassaremos os dois últimos trabalhos mencionados e discutiremos alguns resultados como referências para estudo feito neste trabalho.

Alguns anos atrás D. M. Eagles [5] e A. J. Leggett [6], independentemente perceberam que a função do estado fundamental :

$$\psi_0 = \prod_k (u_k + v_k c^{\dagger}_{k,\uparrow} c^{\dagger}_{-k,\downarrow}) |vac\rangle, \qquad (2.1)$$

mostrada na equação (2.1), onde $|vac\rangle$ é o estado vazio, teve uma maior aplicabilidade do que tinha sido apreciado no momento da sua proposta original pelo Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS). Na medida em que a interação atrativa de emparelhamento entre férmions incrementa-se (U<0) está função de onda pode descrever a evolução contínua do regime BCS à condensação Bose-Einstein. O essencial é que o potencial químico pode ser calculado autoconsistentemente, quando U varia.

Os parâmetros variacionais v_k e u_k que aparecem na Eq.(2.1) são usualmente representados por

dois parâmetros mais acessíveis: Δ , o parâmetro de ordem supercondutor e μ o potencial químico, os quais caracterizam o sistema fermiônico supercondutor. Estes parâmetros fermiônicos são determinados unicamente em termos do U e da densidade fermiônica n. As condições de auto-consistência são dadas por duas equações tipo BCS as quais se conhecem como a equação do gap supercondutor e do número de ocupação respectivamente.

$$\frac{1}{U} = -\sum_{k} \left[\frac{1}{2\omega_k} \tanh(\frac{\beta\omega_k}{2}) \right]$$
(2.2)

$$n = \sum_{k} \left[1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{\omega_k} \tanh(\frac{\beta \omega_k}{2}) \right],$$
(2.3)

onde:

$$\beta = \frac{1}{K_B T} \tag{2.4}$$

$$\omega_k = \sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}, \qquad (2.5)$$

e $\epsilon_k = \frac{k^2}{2m}$ é a energia de dispersão dos elétrons. São estas equações as que foram achadas por Bardeen *et al.* no famoso trabalho de 1957. E estas são as equações características de um sistema supercondutor que nós procuraremos achalas ao longo deste trabalho para os diferentes sistemas estudados.

Primeiramente, estudaremos o trabalho de Noziéres e Schimtt-Rink [7]. Eles estudaram um modelo contínuo baseado no modelo do Hubbard, com o seguinte Hamiltoniano,

$$H = \sum_{k,\sigma} \frac{k^2}{2m} C_{k,\sigma}^{\dagger} C_{k,\sigma} - \sum_{k,k,\sigma} V_{k,k} C_{k+q/2,\uparrow}^{\dagger} C_{-k+q/2,\downarrow}^{\dagger} C_{-k+q/2,\downarrow} C_{k+q/2,\uparrow}, \qquad (2.6)$$

onde $V_{k,k}$ é uma interação atrativa. Se V é suficientemente forte, dois férmions formam um par ligado singleto, com número quántico angular: 1=0, com uma energia $\omega_q = -\epsilon_0 + \frac{q^2}{2M}$ onde ϵ_0 é a energia de ligação, q é o vetor de onda associado as excitações coletivas da rede e M = 2ma massa total. O operador de criação correspondente é:

$$b_q^{\dagger} = \sum_k \phi_k C_{k+q/2,\uparrow}^{\dagger} C_{-k+q/2,\downarrow}^{\dagger}, \qquad (2.7)$$

onde ϕ_k é uma função de onda interna estendida sobre a distancia $a_0 \sim \epsilon_0^{-1/2}$, se $na_0^3 \ll 1$ os pares ligados podem ser tratados como um gás de pontos bosônicos. O sistema sofre uma condensação Bose-Einstein em um estado só com momento total q = 0 quando o potencial químico $\mu_p = 2\mu = -\epsilon_0$. Em ordem zero o estado base é

$$|\Phi_0\rangle = \left[e^{\sqrt{n_p}b_0^{\dagger}}\right]|vac\rangle,\tag{2.8}$$

onde n_p e o número total de pares. A ocupação do k-ésimo estado é $n_k = n_p |\phi_k|^2$ sempre que: $na_0^3 \ll 1$, $n_k \ll 1$, assim não precisamos levar em conta as limitações impostas pelo princípio da exclusão, deste modo as interações de troca entre férmions são desprezível. O quadro físico muda quando $na_0^3 \gg 1$: os pares ligados se sobrepõem, logo intercambio entre férmions torna-se dominante. Como o principio de exclusão impõe $n_k < 1$, entâo n_k satura e a função de onda interna estende-se mais no espaço k, de modo de acomodar um grande n. Neste caso, o melhor é abordar o problema no limite de plasma normal.

$$|\Phi_{0N}\rangle = \Pi_k C^{\dagger}_{k,\uparrow} C^{\dagger}_{-k,-\downarrow} |vac\rangle.$$
(2.9)

A atração fraca leva a uma supercondutividade descrita pela teoria usual BCS, a função de onda neste caso é:

$$|\Phi_{0s}\rangle = \Pi_k (u_k + v_k C^{\dagger}_{k,\uparrow} C^{\dagger}_{-k,\downarrow} |vac\rangle$$
(2.10)

onde o estado fundamental vai suavemente desde um limite ao outro. No acoplamento forte, $v_k \cong n_p^{1/2} << 1$ reflete a estrutura interna dos pares atômicos sendo sua magnitude da ordem $\sim \sqrt{n}$. No acoplamento fraco, a ligação é um efeito cooperativo na vizinhança da superfície de Fermi (o raio do par é muito maior que o espaçamento entre as partículas), mas a estrutura da função de onda é a mesma, característica da condensação Bose-Einstein. Note que o último ponto é crucial no tratamento das correlações devido a que todos os pares tem o mesmo momento q = 0, nós podemos descrever o sistema em termos de um parâmetro de campo médio $\langle C_{k,\uparrow}^{\dagger}C_{-k,\downarrow}^{\dagger} \rangle$; esta simplificação não permanece à temperatura finita. Em geral, a álgebra é mantida a qualquer densidade *n*. Seja $\tilde{\epsilon_k} = \frac{k^2}{2m} - \mu$ a energia do férmion medida a partir do potencial químico. O parâmetro do gap supercondutor é:

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \langle C^{\dagger}_{k',\uparrow} C^{\dagger}_{-k',\downarrow} \rangle, \qquad (2.11)$$

e obedece á equação de auto-consitencia

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{2\tilde{\epsilon_{k'}}} (1 - 2n_{k'}), \qquad (2.12)$$

onde n_k é o estado base da distribução de Fermi:

$$n_k = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\tilde{\epsilon_k}}{(\tilde{\epsilon_k}^2 + \Delta_k^2)^{1/2}} \right],$$
(2.13)

 $\operatorname{com}\sum_k n_k = n_p = n/2.$ Introduzindo a função:

$$\varphi_k = \frac{\Delta_k}{(\tilde{\epsilon_k}^2 + \Delta_k^2)^{1/2}},\tag{2.14}$$

podemos escrever a Eq. (2.12) como:

$$\left(\frac{k^2}{m} - 2\mu\right)\varphi_k = (1 - 2n_k)\sum_{k'} V_{k,k'}\varphi_{k'}$$
(2.15)

$$n_k = \frac{1}{2} [1 - (\tilde{\epsilon_k})(1 - |\varphi_k|^2)^{1/2}], \qquad (2.16)$$

no limite do acoplamento forte, baixa densidade ($\varphi_k << 1$). Então a Eq. (2.11) é reduzida:

$$\left(\frac{k^2}{m} - 2\mu\right)\varphi_k = \sum_{k'} V_{k,k'}\varphi_{k'},\tag{2.17}$$

o qual, não é outra coisa que a equação de Schrödinger para um par ligado. O potencial químico 2μ desempenha o papel do valor próprio da equação. Portanto, em ordem zero na interação

temos: $2\mu = -\epsilon_0$ como esperado para um gás de bósons. Na mesma ordem:

$$N_p = \frac{1}{4} \sum_{k} |\varphi_k|^2.$$
 (2.18)

Assim, resulta que : $\varphi_k = 2n_p^{\phi_k}$ de acordo com a nossa primeira premissa; a aproximação de "Campo Médio" descreve corretamente a condensação de Bose-Einstein de pares atômicos fortemente ligados.

C.A.R. Sá de Melo *et al.* estudaram o modelo de férmions com interação atrativa. Eles começam com a seguinte densidade Hamiltoniana:

$$H = \bar{\psi}_{\sigma}(x) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right] \psi_{\sigma}(x) - g \bar{\psi}_{\uparrow} \bar{\psi}_{\downarrow} \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow}.$$
(2.19)

O potencial químico μ define a densidade média n. A função de partição Z, à uma temperatura β^{-1} é escrita como uma integral funcional temporal imaginaria com uma ação:

$$S = \int_0^\beta d\tau \int dx [\bar{\psi}_\sigma \partial_\tau \psi_\sigma(x) + H], \qquad (2.20)$$

onde x = (x, t) e $\hbar = k_B = 1$. Desse modo vamos introduzir o campo Hubbard-Stratonovich $\Delta(x, \tau)$ que é acoplado à $\bar{\psi}_{\sigma}\bar{\psi}_{\sigma}$ e integrando sobre todos os férmions, nós obtemos.

$$Z = \int D\Delta D\bar{\Delta}exp(-S_{eff}[\Delta,\bar{\Delta}]).$$
(2.21)

A ação efetiva dada por:

$$S_{eff}[\Delta(x)] = \frac{1}{U} \int_0^\beta d\tau \int dx (|\Delta(x)|^2 - Tr Ln \mathbf{G}^{-1}[\Delta(x)]), \qquad (2.22)$$

é escrita em termos do inverso propagador de Nambu:

$$G^{-1}(x,x') = \begin{pmatrix} -\partial_{\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu & \Delta(x) \\ & & \\ \bar{\Delta}(x) & -\partial_{\tau} - \frac{\nabla^2}{2m} - \mu \end{pmatrix} \delta(x-x').$$

Abaixo de certa temperatura, a qual nos denotamos por T_0 ao invés de T_c , o ponto de sela trivial $\Delta \equiv 0$ torna-se instável. Isto é definido pela configuração $\Delta = 0$ na condição do ponto de sela $\delta S_{eff}/\delta \Delta = 0$ e assim obtemos a Eq. (2.2) (equação de auto consitência para o gap) só que à temperatura T_0 .

Um "cutoff"não pode ser usado para acessar ao regime do acoplamento forte. Por isso usamos comprimento de espalhamento das ondas- $s a_s$ definido pelo limite de baixa energia do problema de dois corpos no vácuo, ou seja:

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{U} + \sum_k (2\epsilon_k)^{-1},$$
(2.23)

para regular a divergência $U \to \infty$, na equação do gap. Eliminando o acoplamento U entre as equações (2.2) e (2.23), nós obtemos:

$$-\frac{m}{4\pi a_s} = \sum_k \left[\frac{1}{2\omega_k} \tanh(\frac{\omega_k}{2T_0}) - \frac{1}{2\epsilon_k}\right],\tag{2.24}$$

onde a_s agora equivale a constante de acoplamento. Ao resolver a equação (2.24) para T_0 nós precisamos primeiro determinar o potencial químico como uma função do acoplamento U e da temperatura, utilizando $N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$. A aproximação do ponto de sela para o potencial termodinâmico $\Omega_0 = S_{eff}[\Delta = 0]/\beta$ nos dá a equação do número:

$$n = n_0(\mu, T) \equiv \sum_k \left[1 - \tanh(\frac{\omega_k}{2T}) \right].$$
(2.25)

Agora nós calculamos no nível do ponto de sela, T_0 e vamos obter como uma função do acoplamento U através da solução das Eqs. (2.24) e (2.25). Os dois casos limites podem ser resolvidos analiticamente. No acoplamento fraco $(U \to 0)$ nós usamos $\mu >> T_0$ para resolver (2.25) produzindo $\mu = \epsilon_f$, onde $\epsilon_f = k_f^2/2 = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3}}{2m}$ é a energia do Fermi para um gás sem interação. A solução da Eq. (2.24) quando $\frac{1}{k_f a_s} \to -\infty$ é $T_0 = 8e^{-2}\gamma \pi^{-1} \epsilon_f exp(-\pi/2k_f|a_s|)$, onde $\gamma \approx 1.871$. Isto é o resultado do BCS com ϵ_f fazendo o papel de um "cuttoff" efetivo.

No regime do acoplamento forte os papéis das equações do gap e do número são invertidos: a Eq. do gap (2.24) determina μ enquanto a Eq. do número de ocupação (2.25) determina T_0 para $U \to \infty$. Neste limite, $1/k_f a_s \to +\infty$ assim espera-se, ter pares ligados com energia de ligação $E_b = 1/ma_s^2$ e férmions com um potencial químico negativo maior: $|\mu| >> T$. Da equação do gap (2.24) obtemos $\mu = -E_b/2$, ou seja, o potencial químico para os férmions é a metade da energia do ligação do par. No acoplamento forte $(E_b/\epsilon_f \gg 1)$ a solução da Eq. (2.25) produz $T_0 \cong E_b/2ln(E_b/\epsilon_f)^{3/2}$.

Capítulo 3

O método das Funções de Green

Veremos neste capítulo como podemos calcular os valores médios de ocupação desejados, partindo de funções de Green apropriadas, que serão definidas depois. Suponhamos que se deseje calcular a média térmica de uma variável física qualquer, representada por um operador X e cuja definição é dada pela seguinte expressão:

$$\langle X \rangle = \frac{Tr(Xe^{-\beta H})}{Z},\tag{3.1}$$

sendo $Z = Tr\{e^{-\beta H}\}$ a função de partição onde $\beta = \frac{1}{KT}$ e H o Hamiltoniano do sistema. Sejam agora dois operadores na representação de Heisenberg, de modo que se tenha:

$$A(t) = e^{iHt} A(0)e^{-iHt},$$
(3.2)

$$B(t) = e^{iHt} A(0)e^{-iHt}.$$
(3.3)

Vamos ver agora como se calcula a média do produto desses dois operadores, ou seja: deseja-se obter $\langle BA \rangle$. Isto pode ser feito com o auxilio da função de Green retardada (+ ou avançada -), ambas definidas assim:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_{\pm} = \pm i\theta(t-t')\langle [A(t); B(t')_{\eta}]\rangle, \qquad (3.4)$$

onde

$$[A;B]_{\eta} = AB + \eta BA,\tag{3.5}$$

 $\operatorname{com} \eta = \pm 1$

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t > 0 \\ 0 & \text{se } t < 0 \end{cases}$$
(3.6)

que é a função de Heavside. As funções de Green (3.4) satisfazem a mesma equação do movimento que é a seguinte:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle_{\eta} = \delta(t-t)\langle[A(t);B(t')]_{\eta}\rangle + \langle\langle[A(t);H]_{-};B(t')\rangle\rangle.$$
(3.7)

Como as quantidades $\langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_{\eta}$ são funções apenas da diferença (t - t'), pode se definir:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_{\omega_{\eta}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_{\eta} e^{i\omega t} dt,$$
(3.8)

que é a transformada de Fourier da Eq. (3.4) para ω real. As funções definidas pela Eq. (3.4) têm o comportamento que se segue. Na função retardada (+) a integral definida pela equação (3.8) converge também para ω complexo desde que $Im(\omega) > 0$. Logo a função $\langle \langle A, B \rangle \rangle_{\omega(+)}$ é uma função regular para ω complexo no semi-plano superior.

A função avançada (-) tem comportamento análogo sendo regular para $Im(\omega) < 0$. Então $\langle \langle A, B \rangle \rangle_{\omega(-)}$ é regular para ω complexo no semi-plano inferior. Pode-se então tomar uma nova função $\langle \langle A, B \rangle \rangle_{\omega}$ que é regular em todo o plano complexo, exceto sobre o eixo real. Ficando assim para esta nova função a integral na Eq. (3.8), perfeitamente convergente para qualquer valor de ω complexo (exceto sobre o eixo real). Deste modo ela se escreve:

 $\langle\langle A,B\rangle\rangle_{\omega(+)}$ se Im $\omega>0$

$$\langle\langle A,B\rangle\rangle_{\omega(-)}$$
 se Im $\omega < 0$.

Para a nova função definida pelo conjunto (3.9) e a equação de movimento (3.7) torna-se:

(3.9)

$$\omega\langle\langle A;B\rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2\pi}\langle[A,B]_{\eta}\rangle + \langle\langle[A,H];B\rangle\rangle_{\omega}, \qquad (3.10)$$

pode ser mostrar que as médias em questão, podem ser calculadas após estas considerações a partir da seguinte expressão:

$$\langle B(t')A(t)\rangle = i \lim_{\epsilon \to 0^+} \int_{\infty}^{\infty} [\langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_{\omega + i\epsilon} - \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle_{\omega - i\epsilon}] \frac{e^{i\omega(t - t')}}{e^{\beta\omega} - 1} \, d\omega.$$
(3.11)

Em geral estamos interessados em calcular a média do produto $\langle B(t)A(t)\rangle$ para t = t' que é o que nos vao permitir achar as grandezas desejadas.

As equações (3.10) e (3.11) que são, respectivamente, a equação de movimento da função de Green procurada e a média calculada a partir desta, constituem a essência do método.

O calculo da função de Green $\langle \langle [A, H]_-; B \rangle \rangle$ através de (3.10) da origem à nova função $\langle \langle [[A, H]_-]; B \rangle \rangle$. Gera-se assim uma cadeia de equações, de primeira ordem, de segunda ordem etc. A fim de se obter um sistema solúvel, é necessário fazer alguma aproximação, em algum ponto desta cadeia, uma aproximação que descreva algum tipo de sistema. O método acima descrito e tambem chamado de "método de Zubarev"[9], quem foi o o primeiro em introduzirlo no estudo da materia condensada. Através deste trabalho veremos algumas propostas neste sentido, para o estudo do Hamiltoniano de Hubbard em sistemas supercondutores.

Capítulo 4

BCS normal, Hubbard com interação local atrativa

Neste capitulo estudaremos o Hamiltoniano de Hubbard com interação atrativa local usando as ferramentas das funções de Green do capítulo 3, acharemos as equações de movimento para os propagadores que nos interessam introduzindo nelas uma aproximação de campo médio tipo Hartree-Fock usada por M. Gloria *et.al.* na refêrencia [12], para logo, mediante o teorema de Zubarev [9] obter as expressões do BCS [1], para o limite do acoplamento fraco atrativo. O Hamiltoniano de Hubbard tem a seguinte expressão:

$$H = \sum_{ij\sigma} t^d_{ij} d^{\dagger}_{i\sigma} d_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \qquad (4.1)$$

onde $d_{i\sigma}^{\dagger}$ e $d_{i\sigma}$ são operadores fermiônicos de criação e destruição no sítio *i* e com spin $\sigma = \uparrow \downarrow$. t_{ij} é o chamado "hopping"que pode ser interpretado como a probabilidade de transição de um férmion saltar do sitio *i* para o sitio *j*, sendo $t_{ii} = -\mu$, $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma}$ é o chamado operador número e finalmente U (< 0) é o termo que representa a interação entre os elétrons, neste caso no mesmo sítio. Mediante o método das funções de Green descrito no capítulo anterior acharemos as equações de movimento para os propagadores que precisamos, para logo encontrar as expressões clássicas para o chamado gap superconductor Δ e para o número de ocupação $\langle n \rangle$.

As equações de movimento para os propagadores $\langle \langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$ e $\langle \langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$, que são os propagadores que nós permitem achar as expressões para o gap Δ e para o número $\langle n \rangle$ respectivamente, são:

$$\omega\langle\langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle + U\langle\langle n_{i-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(4.2)

$$\omega\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = -\sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle - U\langle\langle n_{i\sigma}d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle.$$
(4.3)

Como podemos observar as equações acima geram novos propagadores de uma ordem superior a qual não permitem fechar o sistema de equações. Então devido a isto, faremos aproximações convenientes do tipo Hartree-Fock para podermos resolver este sistema de equações.

$$\langle \langle n_{-i\sigma} d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \langle n_{-i\sigma} \rangle \langle \langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle - \langle d_{i-\sigma} d_{i\sigma} \rangle \langle \langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle, \tag{4.4}$$

$$\langle \langle n_{i\sigma}d^{\dagger}_{i-\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma} \rangle \rangle = \langle n_{i\sigma} \rangle \langle \langle d^{\dagger}_{i-\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma} \rangle \rangle - \langle d^{\dagger}_{i\sigma}d^{\dagger}_{i-\sigma} \rangle \langle \langle d_{i\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma} \rangle \rangle.$$

$$(4.5)$$

Utilizando estes desacoplamentos obtemos o seguinte sistema de equações:

$$(\omega - U\langle n \rangle) \langle \langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{l} t_{il} \langle \langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle - \langle d_{i-\sigma} d_{i\sigma} \rangle \langle \langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle,$$

$$(\omega + U\langle n \rangle) \langle \langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = -\sum_{l} t_{il} \langle \langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle - \langle d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i-\sigma}^{\dagger} \rangle \langle \langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle.$$
(4.6)

No caso das soluções não serem magnéticas, as concentrações de portadores serão homogêneas, assim:

$$\langle n_{i-\sigma} \rangle = \langle n_{i\sigma} \rangle = \langle n \rangle.$$
 (4.7)

Como podemos observar, o sistema de equações acima descrito, ainda não está linearizado, mas é já um sistema fechado. Para linearizar o sistema fazemos uma transformação de Fourier conveniente sobre ele, feito isto, os propagadores ficaram no chamado espaço de Bloch [17] e obtemos o seguinte sistema de equações.

$$(\omega - \tilde{\epsilon_k}) \langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} - U \Delta^* \langle \langle d_{-k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle, \qquad (4.8)$$

$$(\omega + \tilde{\epsilon}_k) \langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle = -U\Delta \langle \langle d_{i\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma} \rangle \rangle, \qquad (4.9)$$

onde consideramos:

$$\Delta = \langle d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i-\sigma}^{\dagger} \rangle, \tag{4.10}$$

$$\epsilon_{k} = \sum_{\delta} e^{i\delta \cdot k} t_{\delta} - \mu,$$

$$\tilde{\epsilon_{k}} = \epsilon_{k} + U \langle n \rangle.$$
(4.11)

Agora observando o sistema de equações anterior, podemos perceber que é um sistema linearizado e fechado, conseqüentemente pode ser resolvido de uma maneira algébrica. As expressões obtidas, para os propagadores são:

$$\langle\langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{-(\omega + \tilde{\epsilon}_k)}{2\pi(\omega^2 - \omega_{0k}^2)},\tag{4.12}$$

$$\langle\langle d_{k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{-U\Delta}{2\pi(\omega^2 - \omega_{0k}^2}),\tag{4.13}$$

onde:

$$\omega_{0k}^2 = \tilde{\epsilon_k}^2 + U^2 \Delta^2, \tag{4.14}$$

Então, obtivemos as expressões para os propagadores que nos interessam e os pólos dos mesmos $\omega_{0k} = \pm \sqrt{\tilde{\epsilon_k}^2 + U^2 \Delta^2}$ são as chamadas energias próprias do Hamiltoniano ou também modos do sistema. A expressão (4.14) é a energia cinética livre ϵ_k mais o termo $U\Delta$ que seria a energia para a formação do par do Cooper [1]. Uma vez obtido os propagadores, procuramos agora as expressões do gap e do número. Para isto, usaremos a técnica de Zubarev descrito no capitulo 3 para obter, a partir dos propagadores, os valores médios correspondentes. Usando a técnica de Zubarev, equação (3.11), sobre as expressões dos propagadores (4.12) e (4.13) respectivamente, obtemos:

$$\langle n \rangle = \sum_{k} \langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{k\sigma} \rangle = \sum_{k} \frac{1}{2} (1 - \frac{\tilde{\epsilon_k}}{\omega_{0k}}), \qquad (4.16)$$

$$\Delta = -\sum_{k} \langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{-k-\sigma}^{\dagger} \rangle = \sum_{k} \frac{U\Delta}{2\omega_{0k}} \tanh \frac{\beta\omega_{0k}}{2}.$$
(4.17)

logo desta última equação obtemos:

$$\frac{1}{U} = \sum_{k} \frac{1}{2\omega_{0k}} \tanh \frac{\beta \omega_{0k}}{2}.$$
(4.18)

Estas são as expressões clássicas para a supercondutividade no regime de acoplamento fraco atrativo, obtidas por Bardeen, Cooper e Schriffer no famoso trabalho de 1957 [1]. O comportamento do gap com a temperatura é mostrado na Fig. 4.1.

As expressões acima descritas para o gap e o numero de ocupação, também podem ser obtidas por outros métodos, como a transformação canônica de Bogoliubov [15] ou através do método variacional [16]. No seguinte mostramos o gráfico para o parâmetro supercondutor Δ vs T, ele mostra o comportamento de um supercondutor clássico. A qual corresponderia a resolver a equação (4.18)

Figura 4.1: O gráfico mostra comportamento do gap em função da temperatura no caso da teoria BCS. O importante deste gráfico é que ele mostra o comportamento clássico de um supercondutor. O parâmetro supercondutor indica a supercondutividade do sistema quando a temperatura cresce ele diminui até uma temperatura critica (T_c), em que ele é zero e o sistema deixa de ser supercondutor. A linha cheia é o resultado teórico, a linha ponteada é a curva experimental. Gráfico obtido da Ref [16].

Capítulo 5

Hamiltoniano de Hubbard com interação não local atrativa

Neste capitulo estudaremos o Hamiltoniano de Hubbard com interação atrativa não local, ou seja, neste caso, se inclui a interação entre vizinhos na rede. O Hamiltoniano tem a seguinte forma:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^d d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + U \sum_{ij\sigma} n_{i\sigma} n_{j-\sigma}.$$
(5.1)

onde consideramos $t_{ii} = -\mu$. Analogamente, como no capítulo anterior, acharemos as equações de movimento para os propagadores de interesse. Usando a equação do movimento (3.10) para os propagadores temos,

$$\omega \langle \langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{l} t_{il} \langle \langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + U \sum_{l} \langle \langle n_{l-\sigma} d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$$
(5.2)

$$\omega\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = -\sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle - U\sum_{l}\langle\langle n_{l\sigma}d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle.$$
(5.3)

Então, nas equações de movimento acima descritas, obtemos novos propagadores de uma ordem superior: $\langle \langle n_{l-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$, $\langle \langle n_{l\sigma}d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$. Neste caso, iremos um pouco mais longe, acharemos as equações do movimento destes novos propagadores de ordem superior o que corres-

ponde a ir alem da aproximação Hartree-Fock. Aplicando novamente a equação de movimento (3.10) nestes novos propagadores, temos:

$$\omega\langle\langle n_{l-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{\langle n_{l-\sigma}\rangle\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{m} t_{im}\langle\langle n_{l-\sigma}d_{m\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle + U\sum_{m}\langle\langle n_{j-\sigma}n_{m-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle \quad (5.4)$$

$$\omega \langle \langle n_{l\sigma} d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{\Delta_{jl} \delta_{li}}{2\pi} - \sum_{m} t_{im} \langle \langle n_{l-\sigma} d_{m-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle - U \sum_{m} \langle \langle n_{l\sigma} n_{m\sigma} d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle.$$
(5.5)

Então neste conjunto de equações podemos perceber que nas equações achadas obtemos outros propagadores de ordem maior ainda. Consequentemente, se voltarmos a achar equações de movimento destes novos propagadores estes irão gerar, outros de uma ordem ainda superior. Então é aqui aonde nós vamos a fazer as aproximações, para poder cortar a "cadeia", linearizar e logo resolver o sistema de equações. Neste caso as aproximações usadas são:

$$\langle\langle n_{l-\sigma}d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle \approx \langle n_{l\sigma}\rangle\langle\langle d_{i-\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(5.6)

a aproximação Hubbard-I [13]:

$$\sum_{m} t_{lm} \langle \langle [d_{l-\sigma}^{\dagger} d_{m\sigma} - d_{m\sigma}^{\dagger} d_{l\sigma}] d_{i-\sigma}; d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle \approx 0,$$
(5.7)

e consideraremos o seguinte desacoplamento nos propagadores de ordem superior obtidos das equações (5.4) e (5.5),

$$\sum_{lm} \langle \langle n_{l-\sigma} n_{m-\sigma} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle \approx \langle n \rangle \sum_{l} \langle \langle n_{l\sigma} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + \langle n \rangle \sum_{l} \langle d_{i-\sigma} d_{l\sigma} \rangle \langle \langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$$
(5.8)
$$\sum_{lm} \langle \langle n_{l\sigma} n_{m\sigma} d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle \approx \langle n \rangle \sum_{l} \langle \langle n_{l-\sigma} d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + \langle n \rangle \sum_{l} \langle d_{l-\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma}^{\dagger} \rangle \langle \langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle,$$
(5.9)

onde consideraremos $\langle n_{m\sigma} \rangle = \langle n_{\sigma} \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle = \langle n \rangle$, pois interessados em soluções paramagnéticas. Vamos levar estas aproximações à nossas equações de movimento (5.4) e (5.5). Obtemos,

$$(\omega - 2U\langle n \rangle) \sum_{l} \langle \langle n_{l-\sigma} d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{\langle n \rangle \delta_{ij}}{2\pi} + \langle n \rangle \sum_{l} t_{il} \langle \langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + \sum_{l} \Delta_{li}^{*} \langle \langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$$
(5.10)

$$(\omega + 2U\langle n \rangle) \sum_{l} \langle \langle n_{l\sigma} d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{\Delta_{ij}}{2\pi} - \langle n \rangle \sum_{l} t_{il} \langle \langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + \sum_{l} \Delta_{il} \langle \langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle, \qquad (5.11)$$

onde $\Delta_{mn} = \langle d_{m\sigma}^{\dagger} d_{n-\sigma}^{\dagger} \rangle$ é o parâmetro de ordem supercondutor neste caso. Uma observação importante, é que o parâmetro supercondutor neste caso depende de dois índices, fatos que mostra a não localidade deste sistema (m e n são primeiros vizinhos).

Depois de introduzir as aproximações, podemos perceber que as equações de movimento de ordem superior (segunda ordem) só estão em função de propagadores de primeira ordem. Reescrevendo as expressões dos propagadores de segunda ordem nas equações de movimento (5.4) e (5.5) temos:

$$\omega\langle\langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle = \left[1 + \frac{2U\langle n \rangle}{\omega - 2U\langle n \rangle}\right] \frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \left[1 + \frac{2U\langle n \rangle}{\omega - 2U\langle n \rangle}\right] \sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle + \left[\frac{4U^2\langle n \rangle}{\omega - 2U\langle n \rangle}\right] \sum_{m} \Delta_{mi}\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}, \rangle\rangle$$
(5.12)

$$\omega\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = -\frac{U\Delta_{ij}}{\pi(\omega+2U\langle n\rangle)} - \left[1 - \frac{2U\langle n\rangle}{\omega+2U\langle n\rangle}\right]\sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle - \left[\frac{4U^{2}\langle n\rangle}{\omega+2U\langle n\rangle}\right]\sum_{m}\Delta_{im}\langle\langle d_{i-\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle.$$
(5.13)

Agora para podermos linearizar o sistema de equações, levamos estas para o espaço de momentos. Fazendo uso da simetria de translação do sitema obtemos:

$$\left[\omega - \epsilon_k' \left(1 + \frac{2U\langle n \rangle}{\omega - 2U\langle n \rangle}\right)\right] \langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \left[1 + \frac{2U\langle n \rangle}{\omega - 2U\langle n \rangle}\right] + \left[\frac{4U^2\langle n \rangle}{\omega - 2U\langle n \rangle}\right] \Delta_k \langle \langle d_{-k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger}, \rangle \rangle \quad (5.1)$$

1

$$\left[\omega + \epsilon'_{k}\left(1 - \frac{2U\langle n \rangle}{\omega + 2U\langle n \rangle}\right)\right] \langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle = \frac{2U\Delta_{k}}{\pi(\omega + 2U\langle n \rangle)} - \left[\frac{4U^{2}\langle n \rangle}{\omega + 2U\langle n \rangle}\right] \Delta_{k} \langle \langle d_{k\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle, \tag{5.1}$$

onde $\epsilon'_k = \epsilon_k + 2U\langle n \rangle$. No caso da simetria d (Apendice 1) temos as seguintes considerações.

$$\Delta_k = \sum_{ij} e^{i(r_i - r_j) \cdot k} \Delta_{ij} = 2\Delta_0 |\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|,$$
(5.16)

 Δ_0 é a chamada amplitude do gap e a o parâmetro de rede. Também temos para a energia cinética:

$$\epsilon_k = t \left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) \right) - \mu, \tag{5.17}$$

onde t é a amplitude do hopping.

Simplificando o sistema de equações anterior podemos perceber que temos um sistema linear e fechado:

$$\omega(\omega - \epsilon'_k) \langle \langle d_{k\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle = \frac{\omega}{2\pi} + 2U \langle n \rangle \Delta_k \langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle$$
(5.18)

$$\omega(\omega + \epsilon'_k) \langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle = \frac{2U\Delta_k}{\pi} - 2U\langle n \rangle \Delta_k \langle \langle d_{k\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle.$$
(5.19)

Então usando métodos algébricos obtemos os propagadores de interesse:

$$\langle\langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \Big(\frac{\omega^2(\omega + \epsilon_k') + 4U\langle n \rangle \Delta_k^2}{Q(\omega)}\Big),\tag{5.20}$$

$$\langle\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle = \frac{\Delta_k}{\pi} \Big(\frac{\omega(\omega - (\epsilon'_k + 2U\langle n\rangle))}{Q(\omega)}\Big),\tag{5.21}$$

onde:

$$Q(\omega) = \omega^2 (\omega^2 - \epsilon_k^2) + 4U^4 \langle n \rangle^2 \Delta_k^2.$$
(5.22)

Na abordagem utilizada no presente capítulo, temos um polinômio $P(\omega)$ de quarto grau, em vez de segundo grau (capitulo 4). Por tanto nós obtemos quatro raízes que são as energias próprias do Hamiltoniano.

$$\omega_{1,2k} = \pm \sqrt{\frac{\epsilon_k'^2}{2}} \pm \frac{\sqrt{\epsilon_k'^4 - 16U^4 \langle n \rangle^2 \Delta_k^2}}{2}.$$
(5.23)

Depois de obter os propagadores continuaremos com o método adotado neste trabalho e acharemos os valores médios das funções de correlação de interesse. Aplicando a técnica de Zubarev, calculamos a equação para o $\langle n \rangle$ e a equação da auto-consistência para o gap Δ . As grandezas obtidas são:

$$\langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \Big[1 - \frac{1}{\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2} \Big(\epsilon_k' F(\omega_{1k}, \omega_{2k}) + 4U \langle n \rangle \Delta_k^2 G(\omega_{1k}, \omega_{2k}) \Big) \Big]$$
(5.24)

$$\langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{-k-\sigma}^{\dagger} \rangle = \frac{1}{2} \Big[\frac{-\Delta_k U}{(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} F(\omega_{1k}, \omega_{2k}) \Big],$$
(5.25)

onde:

$$F(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) = \omega_{1_k} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1_k}}{2}\right) - \omega_{2_k} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2_k}}{2}\right)$$
(5.26)

$$G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) = \frac{1}{\omega_{1_k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1_k}}{2}\right) - \frac{1}{\omega_{2_k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2_k}}{2}\right).$$
(5.27)

Tendo em conta que $\langle n \rangle = 2 \sum_k \langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{k\sigma} \rangle$ e $\Delta = \sum_k \langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{-k-\sigma}^{\dagger} \rangle$, achamos as equações para o número ou população e para o gap. Nesta parte consideramos que a simetria do gap é da onda *d* descrita no Apendice A. Então, somamos sobre todos os estados *k*, obtemos as equações

caracteristicas da supercondutividade para este sistema:

$$\langle n \rangle = \sum_{k} \left[1 - \frac{1}{\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2} \left(\epsilon'_k F(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) + 4U \langle n \rangle \Delta_k^2 G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) \right) \right]$$
(5.28)

$$\Delta = -\frac{U}{2} \sum_{k} \frac{\Delta \gamma_k}{(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} F(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}).$$
(5.29)

Esta última equação, pode ser escrita na forma:

$$1 = -\frac{U}{2} \sum_{k} \frac{\gamma_k}{(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} \left[\omega_{1k} \tanh(\frac{\beta\omega_{1k}}{2}) - \omega_{2k} \tanh(\frac{\beta\omega_{2k}}{2}) \right]$$
(5.30)

Onde:

$$\gamma_k = \left| \cos(k_x a) - \cos(k_y a) \right|. \tag{5.31}$$

A equação (5.22) foi obtida por E.S. Caixeiro e A. Troper [10]. Embora no trabalho original, eles tenham estudado a influência da interação dos primeros vizinhos na supercondutividade no regime de acoplamento forte, nosso interesse está na aproximação usada por eles, ou seja o uso das equações do movimento para os propagadores da segunda ordem, para o cálculo das equações de movimento dos propagadores de primeira ordem. Esta abordagem será uma inspiração para este trabalho.

Para finalizar, este capítulo analisaremos as equações obtidas, no limite de baixas temperaturas, ou seja, $T \rightarrow 0$, o qual é uma boa referência para comparar com as equações convencionais do BCS. Então, as equações (5.24) y (5.26) no limite baixas temperatura são:

$$\langle n \rangle = \sum_{k} \left[1 - \frac{1}{\omega_{1k} + \omega_{2k}} (\epsilon'_k - 4 \frac{U^3 \langle n \rangle \Delta_k^2}{\omega_{1k} \omega_{2k}}) \right]$$
(5.32)

$$\frac{1}{U} = \sum_{k} \langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{-k-\sigma}^{\dagger} \rangle = -\sum_{k} \frac{\gamma_{k}}{2(\omega_{1k} - \omega_{2k})}$$
(5.33)

Nestas últimas equações, podemos notar, uma semelhança com as equações do BCS convencional (equações (4.16) e (4.18)) mas as duas energias características do sistema se mantêm. A primeira, a equação do número, se afasta mais das expressões do BCS convencionais. A equação do gap mantém a estrutura semelhante com o BCS, mas mantém as duas energias características (ω_{1k}, ω_{2k}). Mas é importante dizer que no caso que $\Delta = 0$, $\omega_{1k} = \epsilon_k e \omega_{2k} = 0$, isto levado na equação (5.30) coincide com a equação do BCS normal para a temperatura crítica. Outra observação importante é que, o sistema de equações (5.28) e (5.29) resulta absurdo, ela vira um sistema de equações trivial, quando elas são levadas para ao limite de interação forte (U infinito). Isso não permite analisar o sistema sob estas condições.

Uma outra característica muito relevante das equações de auto-consitência, para o gap obtidas no quarto e quinto capítulo é o sinal de U. Nos dois casos mencionados temos considerado U < 0. Este sinal permite o comportamento clássico do BCS para o gap nestes casos, no seguinte capítulo veremos que a dependência deste sinal é perdida, mas o comportamento é consistente com um comportamento supercondutor.

O trabalho feito por Caixeiro e Troper descrito neste capítulo é importante para nós pelo uso de equações de movimento de segunda ordem, no seguinte capítulo usaremos esta técnica mas para um caso de interação local. As equações que obteremos serão similares as equações obtidas neste capítulo, mas serão resolvidas para o caso repulsivo (U>0) e para a simetria *s*-estendida.

Capítulo 6

Hubbard com interação local: uma nova aproximação do campo médio com interação repulsiva

Neste capítulo, vamos considerar o mesmo Hamiltoniano do capítulo 4, Hubbard com interação local, mas desta vez aplicaremos nele, outra aproximação inspirada no trabalho de E.S. Caixeiro e A. Troper [10] do capítulo 5 (interação não local). Nesta parte também acharemos as equações de movimento para os propagadores numa ordem superior, como no caso do capítulo 5 e nestas equações vamos introduzir a nova aproximação proposta por nós, para resolver as equações de movimento. O Hamiltoniano de Hubbard com interação local tem a seguinte forma:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^d d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma},$$
(6.1)

assim novamente obtemos equações de movimento para os propagadores já conhecidos.

$$\omega\langle\langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle + U\langle\langle n_{i-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle, \tag{6.2}$$

$$\omega\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = -\sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle - U\langle\langle n_{i\sigma}d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle.$$
(6.3)

Agora achamos as equações de movimento para os geradores de ordem superior seguindo o feito por Caixeiro e Troper e estudado no capitulo anterior. Introduzindo os operadores $\langle \langle n_{i-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$ e $\langle \langle n_{i\sigma}d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$ na equação do movimento (3.10) obtemos:

$$(\omega - U)\langle\langle n_{i-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{\langle n_{i-\sigma}\rangle\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{l} t_{il}\langle\langle n_{i-\sigma}d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle, \tag{6.4}$$

$$(\omega+U)\langle\langle n_{i\sigma}d^{\dagger}_{i-\sigma},d^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle = \frac{\Delta\delta_{ij}}{2\pi} - \sum_{l} t_{il}\langle\langle n_{i-\sigma}d^{\dagger}_{l-\sigma},d^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle$$
(6.5)

então, nós obtemos as equações de movimento para os propagadores de segunda ordem, analogamente com o feito no capítulo anterior mas neste caso as equações de movimento para os propagadores da segunda ordem, não geram propagadores de uma ordem superior como na aproximação de interação não-local feita por Caixeiro e Troper (Eqs. (5.4) e (5.5)) pois neste caso $n_{i\sigma}^2 = n_{i\sigma}$. Em vez disso geram propagadores da mesma ordem, mas com uma característica fundamental estes são não locais, ou seja, estes novos propagadores contem índices diferentes tipo *i* e *j* que indicam a correlação entre elétrons de sitios diferentes.

,

Agora neste conjunto de equações de movimento, vamos a introduzir uma aproximação de campo médio, análoga a Hartree-Fock [12], feita no capítulo 4, equações (4.4) e (4.5). Outra característica importante além da não localidade dos propagadores é que estes mesmos aparecem acoplados com um termo do hopping, característica que vai nos levar a um tipo de simetria do parâmetro de ordem, caracterizando assim este sistema.

Então a aproximação que nos propomos neste trabalho será sobre este conjunto de equações as quais se obtem através do desacoplamento dos propagadores "não locais". Este desacoplamento tem a seguinte forma:

$$\langle\langle n_{i-\sigma}d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \langle n_{i-\sigma}\rangle\langle\langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle - \langle d_{i-\sigma}d_{l\sigma}\rangle\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(6.6)

$$\langle \langle n_{i\sigma}d^{\dagger}_{l-\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma} \rangle \rangle = \langle n_{i-\sigma} \rangle \langle \langle d^{\dagger}_{l-\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma} \rangle \rangle - \langle d^{\dagger}_{i\sigma}d^{\dagger}_{l-\sigma} \rangle \langle \langle d_{i\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma} \rangle \rangle.$$
(6.7)

Esta aproximação é similar a do feito no capitulo 4, equações (4.4) e (4.5), mas neste caso aparecem termos com índices diferentes fato que mostra a sua não localidade. Introduzindo estes desacoplamentos nas equações de movimento (6.4) e (6.5) obtemos:

$$(\omega - U)\langle\langle n_{i-\sigma}d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{\langle n_{i-\sigma}\rangle\delta_{ij}}{2\pi} + \langle n_{i-\sigma}\rangle\sum_{l}t_{il}\langle\langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle + \sum_{l}t_{il}\Delta_{il}^{*}\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(6.8)

$$(\omega + U)\langle\langle n_{i\sigma}d^{\dagger}_{i-\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle = \frac{\Delta\delta_{ij}}{2\pi} - \langle n_{i-\sigma}\rangle \sum_{l} t_{il}\langle\langle d^{\dagger}_{l-\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle + \sum_{l} t_{il}\Delta_{il}\langle\langle d_{i\sigma}, d^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle,$$
(6.9)

onde: $\langle d_{i\sigma}^{\dagger} d_{l-\sigma}^{\dagger} \rangle^* = -\langle d_{i\sigma} d_{l-\sigma} \rangle$. Uma vez obtida as equações de movimento para os propagadores de ordem superior e feitas as aproximações correspondentes, substituímos nas equações do movimento dos propagadores.

$$\omega\langle\langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \left[1 + \frac{\langle n\rangle U}{2(\omega - U)}\right]\frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \left[1 + \frac{\langle n\rangle U}{2(\omega - U)}\right]\sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle + \left[\frac{U}{2(\omega - U)}\right]\sum_{l} t_{il}\Delta_{il}^{*}\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(6.10)

$$\omega\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \left[\frac{\Delta U}{2(\omega+U)}\right]\frac{\delta_{ij}}{2\pi} - \left[1 - \frac{\langle n\rangle U}{2(\omega+U)}\right]\sum_{l}t_{il}\langle\langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle - \left[\frac{U}{2(\omega+U)}\right]\sum_{l}t_{il}\Delta_{li}\langle\langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(6.11)

onde

Neste caso, como nos capítulos anteriores, consideraremos soluções não magnéticas ou seja: $\langle n_{i\sigma} \rangle = \langle n_{i-\sigma} \rangle = \langle n \rangle$. As equações acima descritas, são as equações para os propagadores que nós procuramos. Uma característica importante destas é a presença de dois gaps. O primeiro, Δ local associado a onda *s*, que indica a correlação entre elétrons do mesmo sitio e o segundo Δ_{il} que indica a correlação entre sítios diferentes. Esta característica será fundamental para as abordagens que queremos fazer neste trabalho.

Para poder resolver o sistema, levaremos as equações (6.10) e (6.11) para o espaço dos momentos, representando os operadores no espaço do Bloch [17]. Para isto como nos casos anteriores, fazemos a transformada de Fourier adequada sobre nosso sistema.

$$\omega \langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \left[1 + \frac{\langle n \rangle U}{2(\omega - U)} \right] \frac{1}{2\pi} + \left[1 + \frac{\langle n \rangle U}{2(\omega - U)} \right] \xi_k \langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle \\
+ \left[\frac{U}{2(\omega - U)} \right] \bar{\Delta}^* \langle \langle d_{-k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle,$$
(6.13)

$$\omega \langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle = \left[\frac{\Delta U}{2(\omega+U)} \right] \frac{1}{2\pi} - \left[1 - \frac{\langle n \rangle U}{2(\omega+U)} \right] \xi_k \langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle - \left[\frac{U}{2(\omega+U)} \right] \bar{\Delta} \langle \langle d_{k\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle,$$
(6.14)

onde introduzimos:

$$\xi_k = \epsilon_k - \mu \tag{6.15}$$

$$\bar{\Delta} = \sum_{k} \epsilon_k \Delta_k, \tag{6.16}$$

onde ϵ_k é energia cinética livre associadas aos elétrons e μ o potencial químico. Nas equações do movimento acima descritas evidentemente também contém dois gaps, mas agora estes são expressos no espaço dos momentos, alem de que o primeiro não sofre modificação na sua expressão pela sua localidade, o segundo aparece de uma forma interessante. Ele está ligado agora com o termo da energia cinética formando assim uma quantidade só chamamos de $\overline{\Delta}$, esta característica não permite o estudo da simetria *d*. Depois veremos qual é a simetria acertada para este caso. Simplificando o conjunto de equações temos:

$$(\omega - U)\omega\langle\langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \left[\omega - U(1 - \langle n \rangle/2)\right] + \left[\omega - U(1 - \langle n \rangle/2)\right] \xi_k \langle\langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle + \frac{U\bar{\Delta}^*}{2} \langle\langle d_{-k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(6.17)

$$(\omega+U)\omega\langle\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle = \frac{1}{4\pi}U\Delta - \left[\omega+U(1-\langle n\rangle/2)\right]\xi_k\langle\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle - \frac{U\bar{\Delta}}{2}\langle\langle d_{k\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle,$$
(6.18)

daqui obtemos:

$$\left[\omega^{2} - \omega(U + \xi_{k}) + U\xi_{k}\bar{n}\right]\langle\langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \frac{1}{2\pi}\left[\omega - U\bar{n}\right] + \frac{U\bar{\Delta}^{*}}{2}\langle\langle d_{-k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle,$$
(6.19)

$$\left[\omega^{2} + \omega(U + \xi_{k}) + U\xi_{k}\bar{n}\right]\langle\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle = \frac{1}{4\pi}U\Delta - \frac{U\bar{\Delta}}{2}\langle\langle d_{k\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle,$$
(6.20)

onde para simplificar a notação definimos: $\bar{n} = 1 - \langle n \rangle / 2$ fator que aparece em muitas de nossas equações. Logo o sistema de equações acima mostrado finalmente é fechado e linear e pode ser resolvido de um jeito algébrico simples. Vamos achar as expressões para os propagadores nos quais estamos interessados, tendo em conta que os pólos destes propagadores nos dão os modos de energias do sistema, como já foi visto nos dois capítulos anteriores.

$$\langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{[\omega + \bar{n}U][\omega^2 - \omega(U + \xi_k) + U\xi_k\bar{n})] - U^2\bar{\Delta}^*\Delta/4}{P(\omega)},$$
(6.21)

$$\langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle = \frac{U/2[\Delta(\omega^2 + \omega(U + \xi_k) + U\xi_k\bar{n}) + \bar{\Delta}(\omega + U\bar{n})]}{P(\omega)},$$
(6.22)

onde:

$$P(\omega) = \omega^4 - [\bar{\xi}_k^2 - U^2(1-\bar{n})^2]\omega^2 + (\bar{\xi}_k - U\langle n \rangle)^2 U^2 \bar{n}^2 + \frac{U^2 \bar{\Delta}^2}{4},$$
(6.23)

sendo:

$$\bar{\xi_k} = \xi_k + U\langle n \rangle / 2. \tag{6.24}$$

Como nós podemos observar $P(\omega)$ é um polinômio de 40 grau, como o correspondente do capítulo 5 (Eq. 5.20), mas ele não tem uma forma tão simplificada como aquele, mas mantém algumas similaridades. As raízes ou pólos do sistema são:

$$\omega_{1,2_k} = \pm \sqrt{\zeta \pm \sqrt{\zeta^2 - 4\eta - U^2 \bar{\Delta}^2}},\tag{6.25}$$

onde:

$$\zeta = \bar{\xi}_k^2 - U^2 (1 - \bar{n})^2 \tag{6.26}$$

$$\eta = (\bar{\xi}_k - 2U(1-\bar{n}))^2 U^2 \bar{n}^2.$$
(6.27)

Como conseqüência da não simplicidade de $P(\omega)$ os pólos também resultam bem mais complicados. Uma característica importante destes pólos é que eles não contém o gap Δ relacionado com a onda s, só o gap $\overline{\Delta}$ o qual sugere que é este mesmo quem vai dirigir a supercondutividade. Agora por aplicação do mecanismo de Zubarev obtemos os valores médios:

$$\langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \Big[1 - \frac{1}{\omega_{1_k}^2 - \omega_{2_k}^2} \Big(\bar{\xi}_k F(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) + U^2 \tilde{n}^2 (\xi_k - \bar{\Delta}^* \Delta) G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) \Big) \Big], \quad (6.28)$$

$$\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle = \frac{1}{2}\frac{U}{\omega_{1_k}^2 - \omega_{2_k}^2} \Big[\Delta \big(F(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) + U\tilde{n}\xi_k G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k})\big) + U\tilde{n}\bar{\Delta}G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k})\Big], \quad (6.29)$$

onde:

$$F(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) = \omega_{1_k} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1_k}}{2}\right) - \omega_{2_k} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2_k}}{2}\right),\tag{6.30}$$

$$G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) = \frac{1}{\omega_{1_k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1_k}}{2}\right) - \frac{1}{\omega_{2_k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2_k}}{2}\right).$$
(6.31)

Finalmente achamos os propagadores, mas eles não têm uma forma simples, como podemos observar. Então achar as expressões para gap e o número pode resultar complicado, neste caso. É agora que nós consideramos a interação entre elétrons repulsiva U > 0. Esta condição faz que a formação do par no sitio não seja favorecida ou seja que o gap local associado a onda s é nulo ($\Delta = 0$) e o outro gap $\overline{\Delta}$ seja associado a uma simetria *s-estendida* (descrita no Apêndice

A). No quarto capítulo a simetria adequada foi a s, no quinto capítulo a simetria foi a d e neste caso como já temos visto é a onda s – *estendida* vamos usar, já que as outras não é possível estudá-las, pelo tipo de abordagem feito.

Então vamos colocar estas condições nas expressões para os propagadores:

$$\langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{[\omega + (\bar{n})U][\omega^2 - \omega(U + \xi_k) + U\xi_k\bar{n})]}{P(\omega)},$$

$$\langle \langle d_{-k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{U[\bar{\Delta}(\omega + U\bar{n})]}{P(\omega)},$$
(6.32)

$$(6.33)$$

onde $P(\omega)$ não muda, já que ele não depende do Δ , fato que da mais validade a nossa aproximação. Coerente com isso, os pólos mantêm-se inalterados. Então agora com os propagadores simplificados, aplicaremos novamente o Teorema do Salto (mecanismo de Zubarev), para achar os valores meios.

$$\langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \Big[1 - \frac{1}{\omega_{1_k}^2 - \omega_{2_k}^2} \Big((\epsilon_k + U \langle n \rangle) F(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) + \bar{n}^2 U^2 \epsilon_k G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}) \Big) \Big],$$
(6.34)

$$\langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{-k-\sigma}^{\dagger} \rangle = -\frac{1}{2} \frac{U \bar{n} \bar{\Delta}}{\omega_{1_k}^2 - \omega_{2_k}^2} G(\omega_{1_k}, \omega_{2_k}).$$

$$(6.35)$$

Uma vez que temos os valores médios das funções de correlação, vamos fazer, como já foi feito anteriormente, uma soma sobre todos os estados k e obter as equações características para um sistema supercondutor. Para o caso da equação do gap, alem de somar sobre todos o estados k

temos que multiplicar por ϵ_k para poder obter o parâmetro de ordem $\overline{\Delta}$

$$\langle n \rangle = \sum_{k} \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\omega_{1_{k}}^{2} - \omega_{2_{k}}^{2}} \left[\tilde{\xi}_{k} \left(\omega_{1_{k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1_{k}}}{2}\right) - \omega_{2_{k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2_{k}}}{2}\right) \right) + \bar{n}^{2} U^{2} \xi_{k} \left(\frac{1}{\omega_{1_{k}}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1_{k}}}{2}\right) - \frac{1}{\omega_{2_{k}}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2_{k}}}{2}\right) \right) \right],$$

$$(6.36)$$

$$1 = -\frac{U^2 \bar{n}}{2} \sum_{k} \left[\frac{\epsilon_k}{\omega_{1_k}^2 - \omega_{2_k}^2} \left(\frac{1}{\omega_{1_k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1_k}}{2}\right) - \frac{1}{\omega_{2_k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2_k}}{2}\right) \right) \right].$$
(6.37)

Estas são as equações para o $\langle n \rangle$ e a equação de auto-consistência para o gap $\overline{\Delta}$. Estas equações nos permitem estudar o comportamento supercondutor de nosso sistema; elas serão resolvidas por métodos numéricos e os gráficos mostrados no sétimo capítulo.

6.0.1 Limite $\mathbf{T} \rightarrow 0$

É interessante analisar o limite da temperatura zero, a fim de entender nosso sistema neste limite e comparar com os casos do BCS normal e do interação não local do capitulo 5. Aplicando o limite nas equações (6.34) e (6.35) temos:

$$\langle n \rangle = \sum_{k} \frac{1}{2} \Big[1 - \frac{1}{\omega_{1_{k}} + \omega_{2_{k}}} \Big(\bar{\xi} + \frac{\bar{n}^{2} U^{2} \xi_{k}}{\omega_{1_{k}} \omega_{2_{k}}} \Big) \Big],$$
(6.38)

$$1 = \frac{U^2 \bar{n}}{2} \sum_{k} \left[\frac{\epsilon_k}{\omega_{1_k} \omega_{2_k} (\omega_{1_k} + \omega_{2_k})} \right].$$
(6.39)

Como nós podemos observar, essas equações diferem de suas contrapartes do BCS do quarto capítulo, equações (4.16) e (4.17). As equações (6.38) e (6.39), tem dependência quadrática de U e elas mantêm as duas bandas ω_1 e ω_2 estas estão mais perto das suas contrapartes do capitulo 5, equações (5.32) e (5.35) mostrando assim a similitude com o aspecto não local, da aproximação feita neste capitulo.

Esta ultima equação e a equação de auto-consitência para o gap a temperatura zero, é muito parecida com a equação para o gap obtida por J. Beenen *et al.* na refer encia [12] para o caso da supercondutividade com interação repulsiva com simetria *d* utilizando o Método de Roth [14]. Embora que no caso deles o método utilizado é um pouco mais elaborado e as energias do sistema tenham alguns termos onde são consideradas outras correlações, não contempladas neste trabalho, a semelhança pode corresponder a precisamente considerar correlações entre elétrons afastados, mas que tenham spins opostos, tudo isto além da interação considerada, ou seja, além de ter somente termos de interação local as correlações entre elétrons afastados são as que podem gerar a supercondutividade no caso de interação repulsiva.

6.0.2 Limite $U \to \infty$

Outro limite interessante de analisar é o caso da interação forte: $U \rightarrow \infty$. Nesta parte, vamos encontrar uma grande vantagem na nossa abordagem. As equações do movimento podem ser obtidas nesse limite, dando resultados interessantes que mostram certo comportamento independente da interação. Fazendo o limite correspondente, nas equações (6.13) e (6.14) temos:

$$\omega\langle\langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \bar{n}\frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \bar{n}\sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle - \sum_{l} t_{il}\Delta_{il}^{*}\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle, \tag{6.40}$$

$$\omega\langle\langle d_{i-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle = \Delta \frac{\delta_{ij}}{2\pi} - \bar{n}\sum_{l} t_{il}\langle\langle d_{l-\sigma}^{\dagger}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle + \sum_{l} t_{il}\Delta_{li}\langle\langle d_{i\sigma}, d_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle.$$
(6.41)

Continuando com o método usado anteriormente, fazemos novamente uma transformada de Fourier adequada nas últimas equações.

$$\omega \langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{\bar{n}}{2\pi} + \bar{n}\xi_k \langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle - \bar{\Delta}^* \langle \langle d_{-k-\sigma}^{\dagger}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle, \tag{6.42}$$

$$\omega\langle\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle = \Delta \frac{1}{2\pi} - \bar{n}\xi_k \langle\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle - \bar{\Delta}\langle\langle d_{k\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle.$$
(6.43)

Novamente obtemos um sistema de equações linear e fechado e resolvendo achamos os propagadores para este caso,

$$\langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{\bar{n}(\omega + \bar{n}\xi_k) - \bar{\Delta}^* \Delta}{P(\omega)}$$
(6.44)

$$\langle \langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{(\omega - \bar{n}\xi_k)\Delta + \tilde{n}\bar{\Delta}}{P(\omega)}, \qquad (6.45)$$

onde:

$$P(\omega) = \omega^2 - \tilde{n}^2 \xi_k^2 - \frac{\bar{\Delta}^2}{2}.$$
(6.46)

Um fato interessante é que o polinômio $P(\omega)$, tem grau dois não quatro. As raízes deste são:

$$\omega_k^0 = \pm \sqrt{\tilde{n}^2 \xi_k^2 + \frac{\bar{\Delta}^2}{4}}.$$
(6.47)

Aplicando o teorema de Zubarev para este caso, temos

$$\langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \Big[\bar{n} - \frac{\left(\bar{n}^2 \xi_k - \bar{\Delta}^* \Delta / 4 \right)}{\omega_k^0} \tanh \frac{\beta \omega_k^0}{2} \Big], \tag{6.48}$$

$$\langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{-k-\sigma}^{\dagger} \rangle = \frac{1}{2} \Big[\frac{\Delta}{2} \Big(1 + \frac{\bar{n}\xi_k}{\omega_k^0} \tanh(\frac{\beta\omega_k^0}{2}) \Big) + \frac{\bar{\Delta}}{2} \Big(\frac{\bar{n}}{\omega_k^0} \tanh(\frac{\beta\omega_k^0}{2}) \Big) \Big].$$
(6.49)

Os novos resultados obtidos são os valores médios que nos levam para as equações características da supercondutividade, mas lembrando o fato, de que nós estamos interessados no caso da interação repulsiva com simetria s - estendida logo, a formação do par local não é favorecida. Novamente introduzimos a aproximação $\Delta = 0$. As equações acima ficam:

$$\langle \langle d_{k\sigma}, d_{k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{\bar{n}(\omega + \bar{n}\xi_k)}{P(\omega)}, \qquad (6.50)$$

$$\langle\langle d^{\dagger}_{-k-\sigma}, d^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle = \frac{1}{4\pi} \frac{\bar{n}\bar{\Delta}}{P(\omega)}.$$
 (6.51)

Neste caso, como no U finito, tampouco o polinômio $P(\omega)$ é atingido pela aproximação usada e por tanto os pólos $\pm \omega_k^0$ se mantêm. Aplicando novamente o teorema do salto sobre os novos propagadores temos:

$$\langle n \rangle = \sum_{k} \langle d_{k\sigma}^{\dagger} d_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k} [\bar{n} - \frac{\bar{n}^{2} \xi_{k}}{\omega_{k}^{0}} \tanh(\frac{\beta \omega_{k}^{0}}{2})], \qquad (6.52)$$

e usando $\bar{\Delta} = \sum_k \epsilon_k \langle d_{k\sigma}^{\dagger}, d_{-k-\sigma}^{\dagger} \rangle$ encontrámos:

$$1 = \frac{\bar{n}}{2} \left[\sum_{k} \frac{\epsilon_k}{2\omega_k^0} \tanh(\frac{\beta\omega_k^0}{2}) \right]$$
(6.53)

que é a equação para o gap. Finalmente achamos as equações características de nosso sistema para o limite *U* infinito. Uma característica muito interessante desta equação é que ela tem uma forma semelhante a equação correspondente para o caso do BCS normal, mas neste caso a equação não contem o termo da interação (U), o qual, indicaria, que a dinâmica de nosso sistema, neste limite, não depende mais da interação entre elétrons. Estes resultados resultam importantes pela possibilidade da aplicação do limite de interação forte, neste caso não precisamos introduzir aquelas correções feitas por Nozière e Schimtt-Rink e depois por Sá de Melo *et al.* estudadas no segundo capítulo, nem tampouco a utilização do método de Roth [14] estudado por J. Beenen D. M. Edwards [11]. Esta abordagem mesmo tendo uma simplicidade permite o estudo da supercondutividade no regime de interação forte. Esta é uma característica importante desta dissertação.

Poderíamos dizer que nesta parte teríamos a formação de um sistema análogo ao conden-

sado tipo condensação Bose-Einstein onde a dinâmica é dirigida por outras grandezas. As duas últimas equações seriam análogas as equações (2.24) e (2.25) obtidas por C.A.R. Sá de Melo *et al.* na referência [9] das quais se obtêm a temperatura crítica e o potencial químico respectivamente, estudadas no capítulo 2.

6.0.3 Resultados numéricos

Nesta parte do trabalho mostramos os resultados numéricos da equação (6.37), que é a equação de auto-consistência para o gap, no caso de interação repulsiva com simetria s-estendida, para duas concentrações diferentes. Estas figuras mostram claramente o comportamento supercondutor do sistema, do qual se pode obter a temperatura crítica (T_c) para o sistema e a amplitude do gap (Δ_0). Logo, mostramos um gráfico da temperatura crítica obtido da solução numérica da equação do gap, esta última resulta interessante pela saturação que apresenta, esta característica poderia sugerir uma condensação Bose-Einstein no sistema a qual corresponderia a o estudo do acoplamento forte ($U \rightarrow \infty$) feito no presente capítulo. Um comportamento análogo é obtido por E. S. Caixeiro e A. Troper na Ref[24] mas no estudo deles, a saturação é mostrada através da amplitude do gap. Todos os gráficos foram feitos escalando as grandezas com a energia de Fermi (E_f)



Figura 6.1: Esta figura mostra o comportamento do Δ com a temperatura, para n=0.3, para diferentes valores de interação U, mostrando assim um comportamento supercondutor do sistema.



Figura 6.2: Esta figura mostra o comportamento do Δ com a temperatura, para uma concentração major n=0.7, para diferentes valores de interação U, A figura também mostra um comportamento supercondutor para o sistema.



onda s-estendida

Figura 6.3: Mostramos dependência da temperatura crítica T_c com a interação U para duas concentrações. A curva mostra uma saturação quando U é muito grande sugerindo uma condensação Bosé Einstein para o sistema.

Capítulo 7

Conclusões

No segundo capítulo fazemos uma revista dos trabalhos mais importantes sobre teorias de acoplamento forte, como os trabalhos de Nozière e Schimtt-Rinke e do Sá de Melo, que inspiraram esta dissertação mostrando os resultados mais relevantes obtidos nestes. No terceiro capítulo revisamos as ferramentas matemáticas usadas nesta dissertação como as funções de Green e o mecanismo de Zubarev que são as ferramentas fundamentais deste trabalho. No quarto capítulo estudamos o Hamiltoniano de Hubbard com interação local como mostra do uso das ferramentas estudadas no terceiro capítulo. Neste capitulo também mostramos o método de aproximação chamado de campo médio o qual e usado para a solução das equações achadas. O quinto capítulo é dedicado ao estudo um Hamiltoniano de Hubbard com interação não local, introduzindo uma aproximação de campo médio melhorada, mostrando assim um método de estudo das equações do movimento para as funções de correlação de segundo ordem. Assim obtivemos as equações para um sistema supercondutor, com simetria *d*.

No capítulo central desta dissertação, o sexto capítulo, estudamos o Hamiltoniano de Hubbard com interação local, agora, usando uma nova aproximação de campo médio análoga ao Hartree Fock, estudada no quarto capítulo, mas aplicando o método de desenvolvimento de equações de segunda ordem estudada no quinto capítulo. Para resolver o sistema de equações obtido, introduzimos a condição de interação repulsiva sobre o sistema, mostrando como na abordagem feita a impossibilidade do estudo da onda *s* mas sim da onda s-estendida.

Logo se puderam obter as equações características de um sistema supercondutor mostrando

uma forma muito semelhante com o obtido por J. Beenen *et al.* na ref[11], para o mesmo caso repulsivo, mas com simetria *d*.

É importante realçar o fato de que além de ter só interação local nos dois casos, o nosso e do Beenen , podemos achar relevância nas correlações deslocadas através das aproximações feitas e obter sistemas supercondutores em casos de interação repulsiva forte. A similaridade com os resultados do J. Beenen *et al.* mostram a efetividade de nosso método. As equações achadas no sexto capítulo na parte de limite $U \rightarrow \infty$ permitem o estudo do limite de interação muito forte, dando a possibilidade do estudo com uma aproximação mais simples que as usadas por P. Nozière e S. Schimtt, A. R. Sá de Melo e o mesmo J. Beenen.

Nos resultados numéricos, os dois primeiros gráficos, pode se mostrar o comportamento supercondutor, para duas concentrações diferentes. Em elas se pode observar como a medida que o U cresce, um comportamento limite é atingido para as amplitudes do parâmetro supercondutor. 0 terceiro gráfico mostra o comportamento da temperatura critica com o acoplamento U, tambem este mostra um comportamento de saturação, é decir para U muitos grandes a temperatura crítica atinge un valor limite muito semelhante ao comportamento do chamado: crossover BCS-BEC.

Apêndice A

Simetrias do parâmetro de ordem

A função de onda que descreve o emparelhamento do par eletrônico é também conhecida como o parâmetro de ordem, que neste trabalho chamamos de Δ . A dependência das posições relativas dos elétrons do par é mostrada esquematicamente na Fig (A.1). Ali temos três tipos de emparelhamento: função *s* pura , a particular $d_{x^2-y^2}$ e onda s-estendida.

A supercondutividade na maioria de materiais é conhecida, como sendo o resultado do emparelhamento dos elétrons via uma interação elétron-elétron através de um fônon, que pode dominar a repulsão coulombiana à baixas temperaturas, O estado fundamental é um estado de spin-singleto no qual os elétrons de spin e momento opostos estão efetivamente emparelhados [1].

No espaço dos momentos, o parâmetro de ordem está relacionado ao gap de energia na superfície de Fermi vista pelos pares de elétrons, onde a magnitude é essencialmente a energia necessária para quebrar o par.

O fenômeno da supercondutividade envolve o emparelhamento em pares de Cooper [1]. A função de onda interna destes pares obedece a certas simetrias as quais estão por traz do mecanismo de emparelhamento. É conhecido que os supercondutores convencionais têm uma simetria tipo onda-s, que mostra o emparelhamento via fônon [1]. Por outro lado a simetria do gap dos supercondutores cupratos de alta temperatura tem sido um tópico de intenso debate. Três tipos de simetria são apresentados, onda-s, onda-d, e onda s-estendida como se mostra na (Fig. A.1.) As duas ondas tipo d e tipo s estendido tem linhas nodais e mudam de sinal quando um nó é cruzado. A maioria de experimentos mostram a existência de linhas nodais na função do gap. ([19],[20],[21]). Alem do que são mais os experimentos que favorecem a simetria tipo onda-s estendido ([22],[23]) a onda s-estendido é menos bem conhecida e tem sido desvalorizada.

A questão do mecanismo da simetria do par nos HTSC e uma questão muito discutida desde o descobrimento in 1986. À uma alista de muitos calculos e experimentos, na literatura [2] [3]. A simetria *d*, emparelhamento en um estado com um número quântico orbital 1=2, do emparelhamento é diferente da convencional s-wave par de Cooper onda *s* isotropico, proposta na teoria BCS que se acredita descrever quase todos os supercondutores de baixa temperatura.

O gap de energia (parâmetro de ordem) do estado s-extendida tem a forma funcional no espãço dos momentos

$$[s - estendida]: \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$
(A.1)

e para a simetria d tem a seguinte forma funcional:

$$[d_{x^2-u^2}]:\Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta_0[\cos(k_x a) - \cos(k_u a)] \tag{A.2}$$



Figura A.1: Na Figura mostram-se os três tipos de simetria. Os gráficos de acima estão no espaço real e as figuras abaixo estão no espaço dos momentos. **a**: A onda isotrópica *s*. **b**: $d_{x^2-y^2}$ onda *d*. **c**: a onda *s* anisotrópica ou *s*-estendida. Figura obtida de Physics Today, Janeiro 1996.

Bibliografia

- [1] J. Bardeem, L.N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 106, 162 (1957)
- [2] J.G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B 64, 189 (1986)
- [3] C.E. Gough et al., Nature 326, 855 (1985)
- [4] P.W. Anderson, Science235, 1996(1987)
- [5] Eagles, D. M., 1969, Phys. Rev. 186(2), 456.
- [6] A.J. Leggett, Phys. B. 199 200, 291(1994)
- [7] P. Noziéres, S. Schimtt-Rink, J. Low Temp. 59, 3/4 1985
- [8] A.R. Sa de Melo, M. Randeira and J.R. Engelbrecht, Phys. Rev. Lett. 71, 3202(1993)
- [9] D. N. Zubarev, Usp. Fiz. Nauk, 71, 71-116 (1960)
- [10] E.S. Caixeiro, A. Troper, *Physica B* 404 3102-3105 (2009)
- [11] J. Beenen and D. M. Edwards, *Phys. Rev. B* 52, 13636Ű13651 (1995)
- [12] Gloria. M. Japiassú, Mucio. A. Continentino, Amos Troper, Phys. Rev. B 45, 2986(1992)
- [13] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A 276, 238 (1963)
- [14] L.M. Roth, Phys. Rev. 184,451(1969)
- [15] O. Madelung, Introduction to Solid State, Springer (1996)
- [16] M. Tinkham, Introduction to Superconductivity, McGraw-Hill(1996)

- [17] N.W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders Collegue Publishing (1976)
- [18] Bose- Einstein Condesation, ed. A.Griffin , D.W. Snoke e S. Stringari, Cambridge University Press.(1995)
- [19] Hardy, W. N., Bonn, D. A., Morgan, D. C., Liang, R. X., and Zhang, K., 1993, Phys. Rev. Lett., 70, 3999.
- [20] Jacobs, T., Sridhar, S., Li, Q., Gu, G. D., and Koshizuka, N., 1995, Phys. Rev. Lett., 75, 4516.
- [21] Lee, S.F., Morgan, D. C., Ormeno, R. J., Broun, D., Doyle, R. A., Waldram, J. R., and Kadowaki, K., 1996, Phys. Rev. Lett., 77, 735.
- [22] Zhao, G. M., 2001, Phys. Rev. B. 64, 024503; (2003)
- [23] Brandow, B. H., 2002, Phys. Rev. B, 65, 054503.
- [24] E.S. Caixeiro, A. Troper, Phys. Rev. B 82, 014502 (2010)