

Supercondutividade em um modelo de Hubbard atrativo tratado com uma aproximação de dois-pólos

DIOVANA DE MELLO LALIS¹
ANA CLAUDIA LAUSMANN²
CESAR DE OLIVEIRA LOBO³
ELEONIR JOÃO CALEGARI⁴

RESUMO

Neste trabalho, foi feito um estudo das propriedades supercondutoras de um modelo de Hubbard estendido usado para descrever sistemas fortemente correlacionados. Algumas propriedades do estado normal também foram investigadas porque se acredita que esses dois estados estão fortemente conectados e que o entendimento do estado normal pode ser a chave para compreender os mecanismos da supercondutividade na maioria dos sistemas fortemente correlacionados. Em particular, estudou-se os efeitos das correlações spin-spin sobre as propriedades normais e supercondutoras do modelo, devido ao fato que existem várias evidências experimentais e teóricas indicando que as correlações spin-spin desempenham um papel importante nos supercondutores fortemente correlacionados. Os resultados obtidos, sugerem que no estado normal a dependência das correlações spin-spin em relação ao vetor de onda k deve ser levada em consideração para obtermos “pockets” e “pseudogap” na superfície de Fermi.

Palavras-chave: Sistemas de elétrons fortemente correlacionados, supercondutividade, superfície de Fermi.

¹ Acadêmica do Curso de Física Licenciatura/UFSM – Bolsista FIPE/UFSM

² Acadêmica do Curso de Física Licenciatura/UFSM – Bolsista PIBIC/CNPq

³ Professor do Curso de Física/UFSM e Doutorando do PPG Física/UFSM

⁴ Professor – Orientador do Curso de Física/UFSM (eleonir@ufsm.br)

ABSTRACT

In the present work, the superconducting properties of an extended Hubbard model which can be used to describe strongly correlated electron systems, have been investigated. Some of the normal state properties have been also studied, due to, it is believed that they can be the key to understand the mechanisms of the superconductivity on these systems. Particularly, we have investigated the effects of the spin-spin correlations on the superconducting and normal properties, due to the fact that there are experimental and theoretical evidences that such correlations play an important role in superconductors with strongly correlated electrons. As an important result, it has been observed that the k -dependence of the spin-spin correlation function must be considered in order to obtain pockets and pseudogap on the Fermi surface.

Key words: *Strongly correlated electrons systems, superconductivity, Fermi surface.*

INTRODUÇÃO

As idéias que norteiam o estudo dos sistemas de elétrons fortemente correlacionados (SEFC) são importantes porque ajudam a entender melhor as propriedades elétricas e magnéticas de diversos elementos e substâncias conhecidas, permitindo também a classificá-los em metais, isolantes e semicondutores (DAGOTTO, 1994). Um sistema é considerado fortemente correlacionado, quando a interação Coulombiana entre uma partícula localizada em um orbital e uma itinerante, é maior do que a energia cinética da partícula itinerante (IMADA, 1998). Na categoria dos SEFC estão inclusos desde óxidos de metais de transição até condutores moleculares e sistemas de elétrons- f . Particularmente, os supercondutores de altas temperaturas (SAT) tem recebido muita atenção devido à grande possibilidade de aplicação tecnológica de materiais que apresentam esse tipo de supercondutividade (LEE, 2006). Embora muito esforço tem sido feito para entender as propriedades normais e supercondutoras dos SAT, esse problema da física da matéria condensada continua em aberto. Ainda na classe dos SEFC, outro assunto que atrai muito interesse é a competição entre magnetismo e supercondutividade. Compostos intermetálicos como

borocarbeto RNi_2B_2C , onde R representa um elemento terra-rara, possui altas temperaturas de transição para a fase supercondutora ($T_c \sim 17$ K), tornando-se assim um dos sistemas mais estudados (BABA et al., 2008; NAIDYUK et al., 2009). Para se estudar a complexa relação entre magnetismo e supercondutividade, é importante investigar o comportamento do parâmetro de ordem supercondutor $\Delta(T)$ em função da temperatura. O composto $ErNi_2B_2C$ possui um comportamento particular não usual para o parâmetro de ordem $\Delta(T)$. Na região de baixas temperaturas, $\Delta(T)$ aumenta com a temperatura até atingir um valor máximo e então decresce até se anular na temperatura de transição supercondutora T_c . O comportamento usual esperado para $\Delta(T)$, é ser máximo em $T=0$, e então decrescer conforme a temperatura aumenta, até se anular em T_c . A causa mais provável desse comportamento anômalo observado para $\Delta(T)$ é a presença de correlações magnéticas que atuam no sentido de suprimir a supercondutividade na região de baixas temperaturas.

O objetivo deste trabalho é fazer um estudo teórico sobre os efeitos das correlações spin-spin sobre as propriedades normais e supercondutoras de um modelo de Hubbard estendido e com um

potencial atrativo não local. No estado normal, investigaremos o comportamento da superfície de Fermi e das bandas de energia (renormalizadas pelo potencial atrativo) para diferentes intensidades das correlações spin-spin. Também estudaremos os efeitos dessas correlações sobre a amplitude do “gap” supercondutor $\Delta(T)$ em função da temperatura T .

MATERIAL E MÉTODOS

Um dos modelos mais utilizados para descrever sistemas fortemente correlacionados é o modelo de Hubbard de uma banda (HUBBARD, 1963). O modelo considerado neste trabalho é uma variante do modelo de Hubbard. Em termos dos operadores de criação e destruição, o modelo estudado é dado por:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + U \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} n_{i,\sigma}^d n_{j,-\sigma}^d - \mu \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \quad (1)$$

em que o primeiro termo no lado direito da igualdade representa a energia cinética, o segundo a energia potencial e o terceiro termo está associado ao potencial químico μ . Os operadores $d_{i\sigma}^+$ ($d_{i\sigma}$) são operadores de criação (destruição) de uma partícula com spin σ , localizada no sítio i . O operador $n_{i,\sigma}^d = d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}$ é o operador número de partículas e sua função é contar o número de partículas com spin $\sigma = \uparrow \downarrow$ em um dado sítio i . Os símbolos $\langle \dots \rangle$ e $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ representam uma soma sobre primeiros e segundos vizinhos do sítio i , respectivamente. A relação de dispersão (banda não interagente) para uma rede quadrada é:

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

onde t e t_2 são as amplitudes do salto da partícula para o primeiro e para o segundo vizinho, respectivamente.

Para estudar o modelo apresentado na equação (1), utilizaremos a técnica das funções de Green (ZUBAREV, 1960). Essa técnica é interessante porque permite calcular propriedades físicas importantes além de incluir explicitamente a dependência dessas propriedades em relação à temperatura. No entanto, é necessário fazer algum tipo de aproximação para tratar o conjunto acoplado de equações de movimento das funções de Green associadas ao modelo em questão. Para solucionar esse problema, utilizaremos a aproximação de dois pólos proposta por Laura Roth (ROTH, 1969; BEENEN; EDWARDS, 1995). A aproximação de dois pólos permite escrever a matriz das funções de Green em termos da matriz energia e da matriz normalização, ou seja,

$$\mathbf{G}(\omega) = \mathbf{N}(\omega \mathbf{N} - \mathbf{E})^{-1} \mathbf{N} \quad (3)$$

onde

$$E_{nm} = \left\langle \left[[A_n, H]_-, A_m^+ \right]_{(+)} \right\rangle \quad (4)$$

é a matriz energia,

$$N_{nm} = \left\langle [A_n, A_m^+] \right\rangle \quad (5)$$

é a matriz normalização e $\{A_n\}$ é um conjunto de operadores escolhido de acordo com o modelo e as propriedades físicas de interesse.

Depois de calculada a matriz das funções de Green, é possível obter as quantidades físicas do modelo através da relação

$$\langle BA \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint f(\omega) G^{AB} d\omega, \quad (6)$$

onde A e B representam dois operadores quaisquer.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Resultados analíticos

Estado normal

Utilizando a aproximação de dois pólos (ROTH,1969) discutida na seção anterior e o modelo apresentado na equação (1), a função de Green G^{dd} , a qual nos permite calcular o potencial químico μ , é dada por:

$$G_{N\sigma}^{dd}(\vec{k}, \omega) = \frac{Z_{1\vec{k}\sigma}}{\omega - \omega_{1\vec{k}\sigma}} + \frac{Z_{2\vec{k}\sigma}}{\omega - \omega_{2\vec{k}\sigma}} \quad (7)$$

em que

$$Z_{1\vec{k}\sigma} = \frac{1}{2} + \frac{\bar{U} - 2U_1 - \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k}}}{2X_{\vec{k}\sigma}} \quad (8)$$

$$Z_{2\vec{k}\sigma} = 1 - Z_{1\vec{k}\sigma} \quad (9)$$

$$\bar{U} = \frac{U_2 + n_{-\sigma}(U_1 - 2U_2)}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})}. \quad (10)$$

As bandas renormalizadas são:

$$\omega_{1\vec{k}\sigma} = \frac{\bar{U} + \varepsilon_{\vec{k}} - 2\mu + W_{\vec{k}\sigma}}{2} - \frac{X_{\vec{k}\sigma}}{2} \quad (11)$$

$$\omega_{2\vec{k}\sigma} = \omega_{1\vec{k}\sigma} + X_{\vec{k}\sigma} \quad (12)$$

onde

$$X_{\vec{k}\sigma} = \sqrt{\left(\bar{U} + \varepsilon_{\vec{k}} + W_{\vec{k}\sigma}\right)^2 + 4U_1\left(\varepsilon_{\vec{k}} - W_{\vec{k}\sigma}\right) + \tilde{U}} \quad (13)$$

e

$$\tilde{U} = \frac{4U_2(U_2 - U_1)}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})}. \quad (14)$$

A função de Green $G_{N\sigma}^d$ permite também obter a função espectral $A_{\sigma}(\vec{k}, \omega)$ através da relação:

$$A_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{N\sigma}^{dd}(\vec{k}, \omega)]. \quad (15)$$

Impondo a condição $A_{\sigma}(\vec{k}, \omega=0)$, podemos definir a superfície de Fermi apresentada na seção dos resultados numéricos deste trabalho.

Estado supercondutor

Para o estado supercondutor, a função de Green G^{dd} é definida como:

$$G_{S\sigma}^{dd}(\vec{k}, \omega) = \frac{A'(\omega) - (\omega + E_{11})\left(1 + n_{-\sigma}^2 \frac{U}{\theta}\right)^2 \Delta_{\vec{k}}^2}{P(\omega)} \quad (16)$$

onde

$$A'(\omega) = \alpha_0 + \alpha_1\omega + \alpha_2\omega^2 + \alpha_3\omega^3 \quad (17)$$

com

$$\alpha_0 = (E_{12}^{\dagger 2} - E_{11}E_{122})(E_{122} - 2n_{1(-\sigma)}E_{112} + n_{1(-\sigma)}^{\dagger 2}E_{111}) \quad (18)$$

$$\alpha_1 = 2n_{-\sigma}\tilde{n}E_{11}E_{12} - (\tilde{n} + 2n_{-\sigma})n_{-\sigma}E_{12}^2 - n_{-\sigma}^2E_{11}^2 - E_{22}[E_{22} + 2n_{-\sigma}[(n_{-\sigma}E]_{11} - 2E_{12})], \quad (19)$$

$$\alpha_2 = n_{-\sigma}^2 (1 - n_{-\sigma})^2 E_{11} \quad (20)$$

e

$$\alpha_3 = n_{-\sigma}^2 (1 - n_{-\sigma})^2 \quad (21)$$

O denominador de $G_{S\sigma}^d$ é dado por:

$$P(\omega) = [(\omega - E_{11})(n_{-\sigma}\omega - E_{22}) - (n_{-\sigma}\omega - E_{12})^2] \\ \times [(\omega + E_{11})(n_{-\sigma}\omega + E_{22}) - (n_{-\sigma}\omega + E_{12})^2] \\ + \Delta_k^2 (A_1 - A_2 \omega) \quad (22)$$

onde

$$A_1 = a_0 + a_1 \frac{U}{\theta} + \left[a_2 + \Delta_k^2 \left(1 + n_{-\sigma}^2 \frac{U}{\theta} \right) \right] \left(\frac{U}{\theta} \right)^2, \quad (23)$$

$$A_2 = \left(1 + n_{-\sigma}^2 \frac{U}{\theta} \right)^2 + n_{-\sigma}^2 (1 - n_{-\sigma})^2 \left(\frac{U}{\theta} \right)^2, \quad (24)$$

$$a_0 = E_{11}^2, \quad (25)$$

$$a_1 = 2E_{12}(2n_{-\sigma}E_{11} - E_{12}) \quad (26)$$

e

$$a_2 = E_{22}^2 - 4n_{-\sigma}E_{12}E_{22} + 2n_{-\sigma}^2 (E_{12}^2 + E_{11}E_{22}) \quad (27)$$

A função correlação θ é definida como:

$$\theta = tn_{01\sigma} - U \left(D_{01\sigma} + 2 \langle S_1^Z S_0^Z \rangle \right) \quad (28)$$

onde $D_{0\sigma}$ e $\langle S_1^Z S_0^Z \rangle$, serão definidos mais adiante. Considerando um estado supercondutor com

simetria de onda $d_{x^2-y^2}$, o “gap” supercondutor é dado por:

$$\Delta_{\vec{k}} = 2\Delta [\cos(k_x) - \cos(k_y)]. \quad (29)$$

Seguindo o procedimento descrito na referência (BEENEN; EDWARDS, 1995), a equação auto-consistente para o “gap” supercondutor pode ser obtida da função de Green:

$$G_{\sigma}^{dd+} \left(\vec{k}, \omega \right) = - \frac{\Delta_{\vec{k}} (\beta_0 + \beta_1 \omega^2)}{P(\omega)} \quad (30)$$

onde

$$\Delta = -2\theta \Delta \frac{1}{L} \sum_{\vec{q}} [\cos(q_x) - \cos(q_y)]^2 F_{1q\sigma} \quad (31)$$

e

$$F_{1q\sigma} = \frac{1}{2\pi i} \oint f(\omega) \left[\frac{\beta_0 + \beta_1 \omega^2}{P(\omega)} \right] d\omega \quad (32)$$

Os parâmetros β_0 e β_1 são

$$\beta_0 = n_{-\sigma}^2 (1 - n_{-\sigma})^2 \frac{U}{\theta} \quad (33)$$

e

$$\beta_1 = E_1^2 - \left[E_2^2 - 2E_1E_2 + \Delta_q^2 \left(1 + n_{-\sigma}^2 \frac{U}{\theta} \right)^2 \right] \frac{U}{\theta} \quad (34)$$

com $E_1 = E_2 - n_{-\sigma}E_1$ e $E_2 = E_2 - n_{-\sigma}E_2$.

As quantidades E_{ij} são elementos da matriz energia:

$$E = \begin{bmatrix} \varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U_1 & \varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U_2 \\ \varepsilon_{\vec{k}} - \mu + U_2 & \varepsilon_{\vec{k}} n_{\sigma}^2 - \mu + U_2 + \tilde{n} W_{\vec{k}\sigma} \end{bmatrix} \quad (35)$$

em que

$$U_1 = 2U \sum_l \langle n_{l,-\sigma} \rangle, \quad U_2 = 2U \sum_l \langle n_{l,-\sigma} n_{l,-\sigma} \rangle \quad (36)$$

e

$$\vec{n} W_{\vec{k}\sigma}^d = - \sum_{\langle\langle j \neq 0 \rangle\rangle} t_{0j} (n_{0j\sigma} - 2m_{0j\sigma}) + \sum_{\langle\langle j \neq 0 \rangle\rangle} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} h_{j\sigma} \quad (37)$$

A quantidade $W_{\vec{k}\sigma}^d$ é chamada de deslocamento de banda e desempenha um papel importante porque além de deslocar a banda para diferentes energias, pode também estreitar ou alargar a banda.

A função correlação $n_{j\sigma}$ é dada por:

$$n_{ij\sigma} = \frac{1}{2\pi i L} \sum_{\vec{k}} \oint e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} f(\omega) G_{S\sigma}^{dd}(\vec{k}, \omega) d\omega \quad (38)$$

Considerando um modelo onde t_{ij} é o mesmo para todos os vizinhos j (ROTH, 1969), temos

$$n_{0i\sigma} = \frac{1}{2\pi i L} \sum_{\vec{k}} \oint \frac{G_{S\sigma}^{dd}(\vec{k}, \omega) \varepsilon_{\vec{k}}}{(t + t_2)z} f(\omega) d\omega \quad (39)$$

onde considerou-se $i=0$, $j=1$ e z representa o número de primeiros vizinhos. Considerando o esquema original de Roth (1969), a função correlação

$D_{j\sigma} = \langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle$ pode ser escrita como:

$$D_{ij\sigma} = n_{i\sigma}^2 - \frac{\alpha_{ij\sigma} n_{ij\sigma} + \beta_{ij\sigma} m_{ij\sigma}}{1 - \beta_{ii,\sigma} \beta_{ii,-\sigma}} \quad (40)$$

com $m_{j\sigma} = \langle d_{i\sigma}^+ n_{j-\sigma} d_{j\sigma} \rangle$ dada por:

$$m_{ij\sigma} = \frac{1}{2\pi i L} \sum_{\vec{k}} \oint \varepsilon_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} f(\omega) G_{S\sigma}^{n_2d}(\vec{k}, \omega) d\omega \quad (41)$$

onde

$$\alpha_{ij\sigma} = \frac{n_{ij\sigma} - m_{ij\sigma}}{1 - n_{-\sigma}} \quad (42)$$

e

$$\beta_{ij\sigma} = \frac{m_{ij\sigma} / n_{-\sigma} - n_{ij\sigma}}{1 - n_{-\sigma}} \quad (43)$$

A função de Green $G_{S\sigma}^{n_2d}$ é

$$G_{S\sigma}^{n_2d}(\vec{k}, \omega) = \frac{n_{-\sigma} \left[A''(\omega) - A'''(\omega) \left(1 + n_{-\sigma}^2 \frac{U}{\theta} \right) \Delta_{\vec{k}}^2 \right]}{P(\omega)} \quad (44)$$

onde

$$A''(\omega) = \gamma_0 + \gamma_1 \omega + \gamma_2 \omega^2 + \gamma_3 \omega^3 \quad (45)$$

$$\gamma_0 = (E_{12}^2 - E_{11} E_{22}) [E_3 + n_{-\sigma} (E_{12} - E_{11})], \quad (46)$$

$$\gamma_1 = n_{-\sigma} E_{11} [E_{12} (1 + 3n_{-\sigma}) - n_{-\sigma} (E_{11} + \tilde{n} E_{22})] + E_{22} E_3 + n_{-\sigma} E_{12} (3E_3 - n_{-\sigma} E_{12}) \quad (47)$$

$$\gamma_2 = n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma})^2 E_{12}, \quad (48)$$

$$\gamma_3 = n_{-\sigma}^2 (1 - n_{-\sigma})^2 \quad (49)$$

e

$$E_3 = E_{22} - E_{12} \quad \text{e} \quad \tilde{n} = 1 + n_{-\sigma} \quad (50)$$

Além disso,

$$A'''(\omega) = \omega \left(1 + n_{-\sigma}^2 \frac{U}{\theta} \right) + E_{11} + \frac{U}{\theta} [n_{-\sigma} (E_{12} + E_{11}) - E_{12}] \quad (51)$$

O termo $h_{j\sigma}$ presente na equação (37) é dado por:

$$h_{j\sigma} = B_{j\sigma} + \left\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_0 \right\rangle \quad (52)$$

com

$$B_{j\sigma} = -\langle S_j^z S_0^z \rangle - \frac{\alpha_{j\sigma} n_{0j\sigma}^d + \beta_{j\sigma} m_{j\sigma}}{1 - \beta_\sigma} - \frac{\alpha_{j\sigma} n_{0j-\sigma}^d + \beta_{j\sigma} (n_{0j-\sigma}^d - m_{j-\sigma})}{1 - \beta_\sigma} \quad (53)$$

Para o estado paramagnético, temos:

$$\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_0 \rangle = \langle S_j^+ S_0^- \rangle + \langle S_j^- S_0^+ \rangle \quad (54)$$

$$\langle S_j^+ S_0^- \rangle = \langle d_{j\sigma}^\dagger d_{j-\sigma} d_{0-\sigma}^\dagger d_{0\sigma} \rangle = -\frac{\alpha_{j\sigma} n_{0j-\sigma}^d + \beta_{j\sigma} m_{j-\sigma}}{1 + \beta_\sigma} \quad (55)$$

e

$$\langle S_j^- S_0^+ \rangle = \frac{(1 - \beta_\sigma)}{2} \left[(n_\sigma^d)^2 - \frac{\alpha_{j\sigma} n_{0j\sigma} + \beta_{j\sigma} m_{j\sigma}}{1 - \beta_\sigma} \right]. \quad (56)$$

RESULTADOS NUMÉRICOS

Os resultados numéricos apresentados neste trabalho foram obtidos através de um programa computacional desenvolvido em linguagem fortran 77, no laboratório de teoria da matéria condensada da UFSM. Primeiramente apresentaremos os resultados para o estado normal onde foi investigado o efeito da dopagem e das correlações spin-spin nas relações de dispersão renormalizadas (ver a equação (11)) e na função espectral $A(\omega, \mathbf{k})$. Finalmente, apresentaremos os resultados para o estado supercondutor.

Estado normal

Conforme discutido na introdução, o objetivo deste trabalho é investigar os efeitos das correlações

spin-spin associadas à função correlação $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$, presente no deslocamento de banda introduzido na equação (37). O cálculo da função correlação é bastante complexo. Portanto, com o objetivo de simplificar o cálculo numérico, a função correlação será aproximada por um parâmetro c_1 , ou seja, $c_1 =$

$\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle$, onde c_1 é um parâmetro externo que pode ser controlado.

A Figura 1 mostra as bandas renormalizadas para $c_1 = -0.2$ e três valores diferentes de ocupação n_T . Podemos observar que o efeito da dopagem é máximo na região do ponto (π, π) .

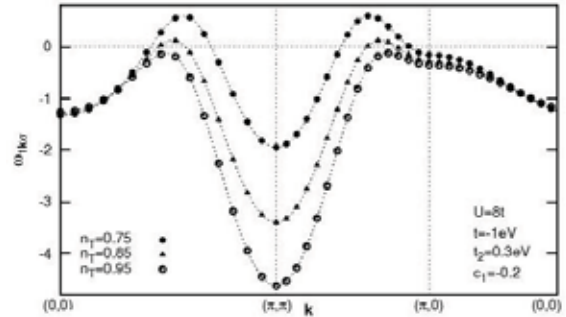


Figura 1. Bandas (renormalizadas pela interação U) para diferentes números de ocupação n_T .

A Figura 2 mostra as bandas para $n_T = 0.85$ e três valores diferentes de c_1 . Novamente está claro que o efeito de c_1 também é mais pronunciado em (π, π) . Além disso, percebe-se que o efeito de c_1 sobre as bandas é o contrario daquele produzido pela dopagem $\delta = 1 - n_T$, mostrado na figura 1. Ou seja, enquanto c_1 atua na banda deslocando para energias mais baixas a região em torno de (π, π) , a dopagem δ , desloca essa mesma região em direção a energias mais altas.

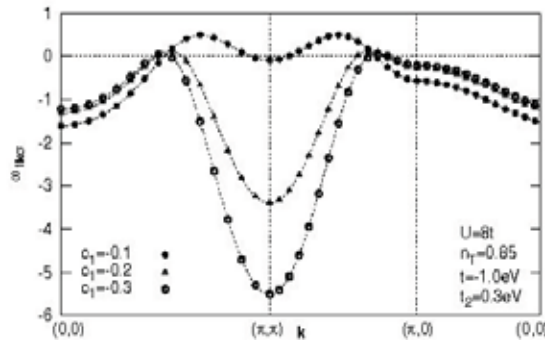


Figura 2. Bandas (renormalizadas pela interação U) para diferentes valores do parâmetro c_1 .

Foi verificado também que é necessário um valor mínimo de $|c_1|$ para que a região do ponto (π, π) se desloque para energias abaixo do potencial químico μ . Caso contrário, a banda permanece acima de μ em toda região próxima a (π, π) . O fato de c_1 deslocar a região (π, π) da banda para energias abaixo de μ possui uma importância fundamental porque é um dos ingredientes necessários para obtermos os “pocketes” e o “pseudogap” na superfície de Fermi. Os “pocketes” são círculos que aparecem no lugar da superfície de Fermi na primeira zona de Brillouin. A presença dos “pocketes” produz os “pseudogaps”, caracterizados por uma baixa intensidade de $A(\omega, k)$ nas regiões próximas a $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$ (CALEGARI et al., 2011).

As Figuras 3, 4 e 5 mostram a função espectral para $\omega=0$. Essa condição define a superfície de Fermi, já que $A(0, k)$ é diferente de zero apenas quando $\omega 1k\sigma = \mu$, onde μ representa o potencial químico. A distorção na banda (em (π, π)) produzida por c_1 , faz com que apareça uma segunda superfície em torno do ponto (π, π) , de intensidade bem menor que a da superfície de Fermi indicada pela linha mais escura nas Figuras 3, 4 e 5.

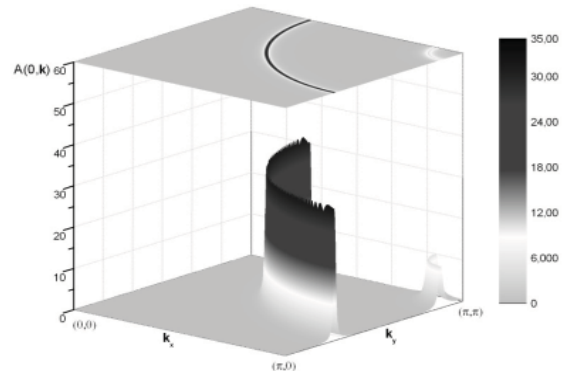


Figura 3. Função espectral para $c_1 = -0.1$, $t = -1.0$ eV, $t_2 = 0.3|t|$, $U = 8t$, $n_T = 0.85$ e $k_B T = 0.30$ eV.

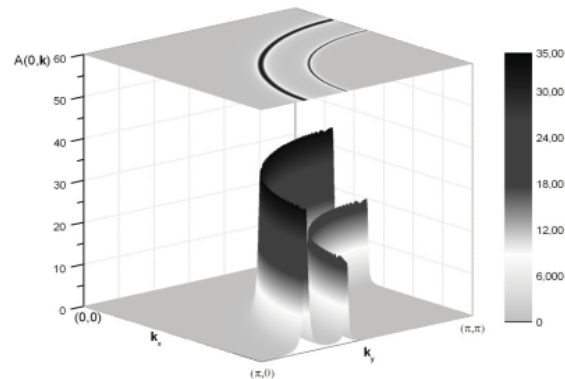


Figura 4. Função espectral para $c_1 = -0.2$. Os outros parâmetros são os mesmos da figura 3.

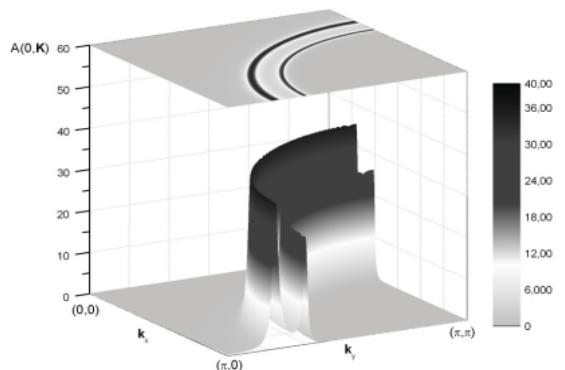


Figura 5. Função espectral para $c_1 = -0.3$. Os outros parâmetros são os mesmos da figura 3.

Comparando as Figuras 3, 4 e 5, podemos ver que quando $|c_1|$ cresce, a segunda superfície que se origina em torno do ponto (π, π) devido aos efeitos de c_1 , aumenta sua intensidade e se aproxima da superfície de Fermi ordinária, representada pela curva mais intensa. Com a aproximação dessas duas curvas, as extremidades das mesmas deveriam se unir para formar um “pocket” como aquele mostrado na Figura 6 copiada da referência (CALEGARI et al., 2011).

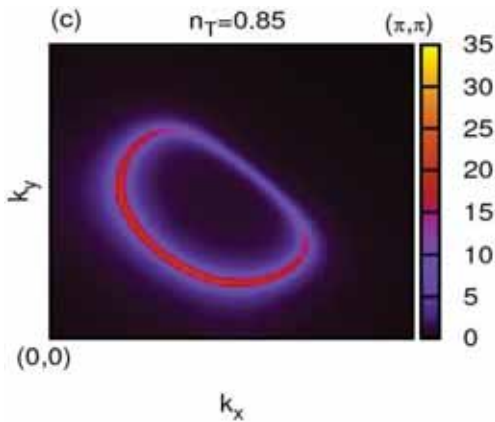


Figura 6. “Pocket” formado devido a presença de fortes correlações spin-spin. Figura copiada da referência (CALEGARI et al., 2011).

O motivo mais provável de não estarmos obtendo “pockets” nas Figuras 3, 4 e 5, é o fato de estarmos desprezando a dependência em \mathbf{k} , de c_1 .

Quando consideramos $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle = c_1 = \text{constante}$, estamos eliminando essa dependência. Portanto, os resultados mostrados nas figuras 1 e 2 sugerem que a presença de c_1 nas funções de Green é um ingrediente necessário, mas não suficiente para obtermos “pockets” e “pseudogaps” na superfície de Fermi. Precisamos também considerar a sua dependência em \mathbf{k} , para alcançar o resultado esperado.

Estado supercondutor

Estudar os efeitos de c_1 sobre as propriedades supercondutoras do modelo, também é importante porque pode nos ajudar a entender comportamentos não usuais de certos materiais como é o caso dos borocarbeto RNi2B2C, nos quais a amplitude do “gap” aumenta com a temperatura, na região de baixas temperaturas, e então decresce na região de altas temperaturas (BABA et al., 2008; NAIDYUK, 2009)

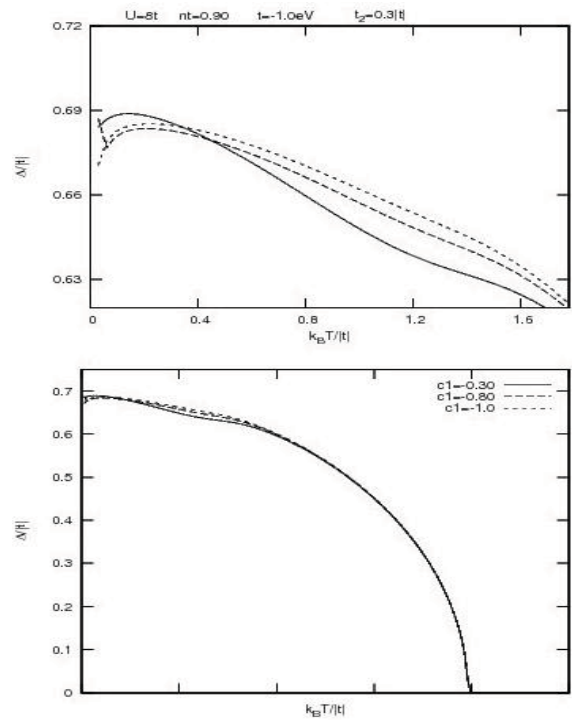


Figura 7. Amplitude do “gap” supercondutor em função da temperatura para três valores diferentes de c_1 .

A Figura 7 inferior, mostra o comportamento da amplitude do “gap” supercondutor $\Delta(T)$ em função

da temperatura para $nT=0.90$ e valores diferentes de $c1$. Podemos ver que na região de baixas temperaturas, $\Delta(T)$ aumenta com T até atingir um máximo e então começa a decrescer anulando-se na região de altas temperaturas. A Figura 7 superior, mostra em detalhes a região de baixas temperaturas. Podemos observar que o efeito de $c1$ sobre $\Delta(T)$ é mais intenso para valores maiores de $|c1|$, indicando que as correlações spin-spin associadas a $c1$ desempenham um papel importante no comportamento não usual desses sistemas supercondutores.

A Figura 8 mostra $\Delta(T)$ com diferentes valores de $c1$ positivo. Observa-se que nessa situação o efeito de $c1$ sobre $\Delta(T)$ é mais intenso do que no caso de $c1$ negativo. Esses resultados concordam bem com aqueles apresentados nas referências (BABA et al., 2008; NAIDYUK et al., 2009).

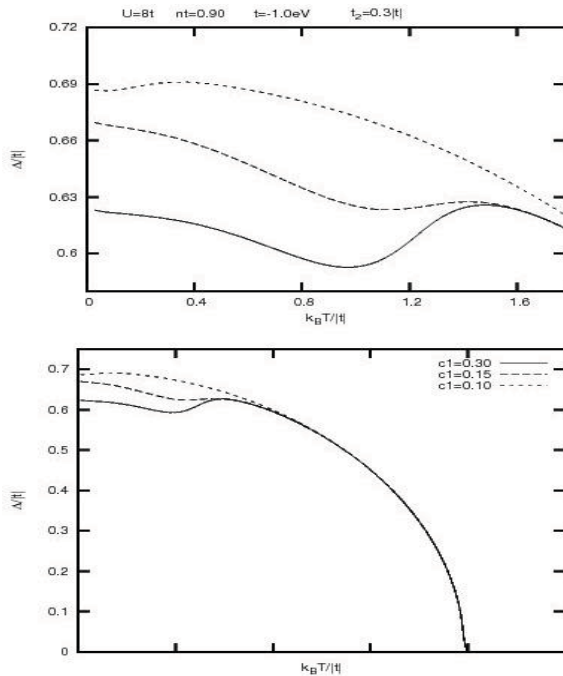


Figura 8. Amplitude do “gap” supercondutor para diferentes valores de $c1$ positivo.

CONCLUSÃO

Neste trabalho, estudamos os efeitos das correlações spin-spin sobre as propriedades normais e supercondutoras de um modelo de Hubbard estendido e com um potencial atrativo. Para o estado normal observou-se que a presença de correlações spin-spin é um ingrediente necessário mas não suficiente para gerar “pockets” e “pseudogap” na superfície de Fermi. Concluímos que a dependência em k da função correlação spin-spin é necessária para produzir os “pockets” na superfície de Fermi. A dependência em k deve distribuir de forma não uniforme a intensidade das correlações spin-spin dentro da primeira zona de Brillouin favorecendo assim o surgimento dos “pockets”. No estado supercondutor do presente modelo, concluímos que, as correlações spin-spin estão diretamente ligadas ao comportamento anômalo do “gap” supercondutor em função da temperatura. Observou-se também que $c1$ positivo produz um efeito mais intenso sobre $\Delta(T)$ do que o $c1$ negativo. Para entender a origem dessa diferença, dentro da presente aproximação de dois pólos, será necessário um estudo mais detalhado do papel de $c1$ nas funções correlação envolvidas no cálculo de $\Delta(T)$. De forma geral, mostramos nesse trabalho que as correlações spin-spin desempenham um papel fundamental na descrição dos supercondutores fortemente correlacionados.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho teve apoio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa do Rio Grande do Sul (FAPERGS) e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

REFERÊNCIAS

- BABA, T. et al. Bulk electronic structure of the antiferromagnetic superconducting phase in ErNi₂B₂C. **Physical Review Letters**, v. 100, p. 017003-1-017003-4, 2008.
- BEENEN, J.; EDWARDS, D. M. Superconductivity in the two-dimensional Hubbard model. **Physical Review B**, v. 52, p. 13636–13651, 1995.
- CALEGARI, E. J. et al. Superconductivity in an extended Hubbard model with attractive interaction. **Superconductor Science and Technology**, v. 24, p. 035004-1–035004-7, 2011.
- DAGOTTO, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. **Reviews of Modern Physics**, v. 66, p. 763–840, 1994.
- HUBBARD, J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. **Proceedings of the Royal Society A**, v. 273, p. 238-257, 1963.
- IMADA, M. et al. Metal-insulator transitions. **Reviews of Modern Physics**, v. 70, p. 1039–1263, 1998.
- LEE, P. A. et al. Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity. **Reviews of Modern Physics**, v. 78, p.17–85, 2006.
- NAIDYUK, Yu G. et al. The Superconducting gap behavior in the antiferromagnetic Nickel-Borocarbide compounds RNi₂B₂C (R=Dy, Ho, Er, Tm) studied by point-contacts spectroscopy. **Journal of Physics: Conference Series**, v. 150, p. 052178-1-052178-4, 2009.
- ROTH, L. M. Electron Correlation in Narrow Energy Bands. I. The Two-Pole Approximation in a Narrow S Band. **Physical Review**, v. 184, p. 451–459, 1969.
- ZUBAREV, D. N. Double-Time Green Functions In Statistical Physics. **Soviet Physics Uspekhi**, v. 3, p. 320-344, 1960.