

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**FLÁVIO LUIS NORONHA DOS SANTOS**

**Estados ligados e supercondutividade não convencional em  
sistemas com impurezas**

**BELO HORIZONTE**

**2021**



Flávio Luis Noronha dos Santos

Estados ligados e supercondutividade não convencional em  
sistemas com impurezas

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Maria Carolina de Oliveira Aguiar – UFMG

Coorientador: Rodrigo Gonçalves Pereira – IIP/UFRN

Belo Horizonte

2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S237e Santos, Flávio Luis Noronha dos.  
Estados ligados e supercondutividade não convencional em sistemas com impurezas / Flávio Luis Noronha dos Santos. – 2021.  
157f., enc. : il.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar.  
Coorientador: Rodrigo Gonçalves Pereira.  
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais,  
Departamento de Física.  
Bibliografia: f. 119-133.

1. Supercondutividade. 2. Férmions. 3. Espectroscopia de tunelamento.

I. Título. II. Aguiar, Maria Carolina de Oliveira. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 537 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

### FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Estados ligados e supercondutividade não convencional em sistemas com impurezas**" de autoria de **FLÁVIO LUIS NORONHA DOS SANTOS** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em trinta de março de 2021.

Belo Horizonte, 30 de Março de 2021.

Profa. Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Prof. Rodrigo Gonçalves Pereira

Orientadora do estudante

Coorientador do estudante

Departamento de Física/UFMG

International Institute of Physics/UFRN

Prof. Ado Jório de Vasconcelos

Prof. Raimundo Rocha dos Santos

Departamento de Física/UFMG

Instituto de Física/UFRJ

Prof. Ronald Dickman

Prof. José Abel Hoyos Neto

Departamento de Física/UFMG

Instituto de Física de São Carlos/USP



Documento assinado eletronicamente por **Rodrigo Gonçalves Pereira, Usuário Externo**, em 31/03/2021, às 09:06, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Maria Carolina de Oliveira Aguiar, Professora do Magistério Superior**, em 31/03/2021, às 09:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Raimundo Rocha dos Santos, Usuário Externo**, em 31/03/2021, às 09:59, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ronald Dickman, Professor do Magistério Superior**, em 31/03/2021, às 10:20, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **José Abel Hoyos Neto, Usuário Externo**, em 31/03/2021, às 10:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ado Jorio de Vasconcelos, Membro**, em 31/03/2021, às 11:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufmg.br/sej/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufmg.br/sej/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **0652293** e o código CRC **5E767684**.



# Agradecimentos

Chegar ao fim de um curso de doutorado não é uma tarefa simples. Cheguei até aqui porque contei com o apoio de diversas pessoas e instituições, às quais expresso aqui minha profunda gratidão. Agradeço o apoio financeiro recebido pelo CNPq, CAPES e INCT-IQ durante o doutorado no Brasil e pela CAPES/COFECUB durante o intercâmbio na França. Sem este apoio eu não teria condições de realizar o doutorado. Sou grato ao Departamento de Física da UFMG, ao Laboratoire de Physique des Solides da Université Paris-Saclay e aos professores que se dedicam a ensinar com qualidade. Com eles pude aprender física e me preparar para a carreira científica.

Fico muito feliz por ter tido a Carol como orientadora. Ela me ajudou a estabelecer colaborações e desenvolver projetos de acordo com o meu perfil de teórico mais analítico. Também me acompanhou efetivamente em todo o percurso do doutorado, dando suporte, orientações, bons conselhos, etc. Motivo de muita satisfação para mim foi ser coorientado pelo Rodrigo. Mesmo à distância, ele sempre esteve disponível para ouvir, tirar dúvidas, ensinar e dar suporte. Agradeço também por toda a paciência, compreensão e dedicação que Carol e Rodrigo tiveram comigo em todos estes anos. Meu progresso científico certamente seria bastante reduzido se eu não tivesse contado com excelentes colaboradores. Entre estes estão Mônica Caracanhas, Eduardo Miranda, Marcello Civelli, Marcelo Rozenberg, Pascal Simon e outros. Com estes pesquisadores eu pude aprender bastante coisa e juntos desenvolvemos excelentes trabalhos. Sou sinceramente grato a todos estes. Em particular agradeço ao Marcello, que foi meu supervisor durante o intercâmbio.

A caminhada fica mais leve quando temos bons amigos e colegas no meio acadêmico com quem contar. Agradeço a todos esses que me deram apoio. Em particular, sou muito grato ao Nathan pela amizade, suporte, etc. Valeu por tudo, meu amigo. Também agradeço à Helena por compartilhar conosco um pouco de seu conhecimento e experiência. A amizade da Claudia, Susana e outros também foi muito importante durante o intercâmbio. Tenho uma gratidão repleta de carinho pela minha família: irmãos, sobrinhos, pai (*in memoriam*) e em especial minha mãe. O suporte que tenho recebido deles é incalculável!

Meu mais profundo agradecimento é direcionado a Deus, o meu melhor amigo e pai, maior professor e senhor, aquele que criou o universo que buscamos conhecer. “Sabemos que Deus age em todas as coisas para o bem daqueles que o amam”. Até as fases difíceis durante o doutorado cooperaram grandemente para meu aperfeiçoamento, graças a Ele! Também agradeço aos muitos irmãos em Cristo no Brasil e na França que me deram apoio e oraram por mim.

Muito obrigado a todos! *Merci beaucoup à tous!*



# Resumo

Nesta tese realizamos uma investigação teórica do efeito de impurezas em sistemas de muitos corpos. Na primeira parte deste trabalho estudamos o comportamento de uma impureza móvel em um semimetal topológico 2D com toque quadrático de bandas. A impureza possui uma repulsão local e uma interação de troca anisotrópica com os férmions do banho. Usando grupo de renormalização de Wilson encontramos regimes em que a interação local se torna efetivamente atrativa a baixas energias. Calculamos a função espectral de um par férmion-impureza usando a aproximação da série de escada e verificamos a existência de estados ligados entre tais partículas nos regimes em que a interação se torna efetivamente atrativa. Tais regimes dependem da razão entre as massas efetivas das duas bandas fermiônicas. O número de estados ligados pode ser 0, 1 ou 2 e é controlado ajustando a interação de troca. Nossos resultados sugerem que este sistema pode levar à supercondutividade não convencional ao incluir uma densidade finita de impurezas móveis.

Na segunda parte deste trabalho estudamos o efeito de impurezas magnéticas clássicas diluídas em um supercondutor convencional. Usamos a *dynamical mean-field theory* para resolver este problema na rede de Bethe. Devido à interação magnética surgem estados eletrônicos localizados nas impurezas e a superposição desses estados leva à emergência de bandas de Shiba. Vemos o aparecimento de supercondutividade não convencional do tipo *odd-frequency* que, assim como as bandas de Shiba, é mais intensa em sítios magnéticos do que nos não magnéticos. Demonstramos uma forma de estimar a intensidade deste pareamento supercondutor através de medições de espectroscopia de tunelamento por varredura. Definimos parâmetros de ordem para diferentes pareamentos supercondutores: singlete *even-frequency* de onda  $s$ , tripleto *odd-frequency* de onda  $s$  e tripleto *even-frequency* de paridade espacial ímpar. Nossos resultados indicam a presença dos três pareamentos simultaneamente no sistema.

**Palavras-chave:** Impureza. Interação. Estado ligado. Supercondutividade não convencional.



# Abstract

In this thesis we carry out a theoretical investigation on the effect of impurities in many body systems. In the first part of this work we study the behavior of a mobile impurity in a 2D topological semimetal with quadratic band touching. The impurity has a local repulsion and an anisotropic exchange interaction with the fermions in the bath. Using Wilsonian renormalization group we find regimes where the local interaction becomes effectively attractive at low energies. We calculate the spectral function of a fermion-impurity pair using the ladder approximation and verify the existence of bound states between these particles in the regimes where the interaction becomes effectively attractive. These regimes depend on the ratio between the effective masses of the majority fermions in the two bands. The number of bound states may be 0, 1 or 2 and is controlled tuning the exchange interaction. Our results suggest that this system may lead to unconventional superconductivity in the presence of a finite density of mobile impurities.

In the second part of this work we study the effect of classical magnetic impurities diluted in a conventional superconductor. We use dynamical mean-field theory to solve this problem in the Bethe lattice. Electronic states localized in the impurities appear due to the magnetic interaction and their overlapping lead to the emergence of Shiba bands. We see the appearance of odd-frequency unconventional superconductivity which, similarly to the Shiba bands, is more intense in the magnetic sites than in the nonmagnetic ones. We demonstrate a way to estimate the intensity of the superconducting pairing through scanning tunneling spectroscopy measurements. We define order parameters for different superconducting pairings: even-frequency spin-singlet  $s$ -wave, odd-frequency spin-triplet  $s$ -wave and even-frequency spin-triplet odd-parity. Our results show the presence of these three pairings simultaneously in the system.

**Keywords:** Impurity. Interaction. Bound state. Unconventional superconductivity.



# Sumário

1	<b>INTRODUÇÃO</b>	15
I	<b>IMPUREZAS E TOQUE QUADRÁTICO DE BANDAS</b>	<b>23</b>
2	<b>REVISÃO DA LITERATURA</b>	25
3	<b>METODOLOGIA</b>	33
3.1	Funções de Green e diagramas de Feynman	33
3.2	Grupo de renormalização	37
4	<b>MODELO E RESULTADOS</b>	43
4.1	Modelo na rede e teoria efetiva no limite do contínuo	43
4.2	Análise de grupo de renormalização	48
4.3	Função espectral de um par férmion-impureza	52
4.4	Problema de dois corpos	58
4.5	Concentração finita de impurezas móveis	62
4.6	Discussão	65
II	<b>SUPERCONDUTOR MAGNÉTICO DILUÍDO</b>	<b>67</b>
5	<b>REVISÃO DA LITERATURA</b>	69
6	<b>METODOLOGIA</b>	77
6.1	DMFT	77
6.2	Função de Green anômala	84
7	<b>MODELO E RESULTADOS</b>	87
7.1	Modelo e equações de DMFT	87
7.2	Estado normal	90
7.3	DMS com spins em várias direções	92
7.4	DMS com spins alinhados	97
7.5	Discussão	114
8	<b>CONCLUSÃO</b>	117
	<b>REFERÊNCIAS</b>	121

	<b>APÊNDICES</b>	<b>137</b>
	<b>APÊNDICE A – EQUAÇÕES DE RG . . . . .</b>	<b>139</b>
<b>A.1</b>	<b>Cálculos de Diagramas . . . . .</b>	<b>139</b>
<b>A.2</b>	<b>Integrais na casca esférica . . . . .</b>	<b>148</b>
	<b>APÊNDICE B – DMFT E MÉTODO DA CAVIDADE . . . . .</b>	<b>151</b>
<b>B.1</b>	<b>Modelo de Hubbard . . . . .</b>	<b>151</b>
<b>B.2</b>	<b>DMS . . . . .</b>	<b>153</b>
	<b>APÊNDICE C – SOLUÇÕES DA EQ. DE DMFT . . . . .</b>	<b>157</b>
<b>C.1</b>	<b>Densidade de estados arbitrária . . . . .</b>	<b>157</b>
<b>C.2</b>	<b>Rede de Bethe . . . . .</b>	<b>158</b>

# 1 Introdução

Muitos metais comuns, nos quais há interações significativas entre os elétrons, possuem qualitativamente o mesmo comportamento de um gás de férmions não interagentes, o qual possui algumas características bem conhecidas a baixas temperaturas, como calor específico variando linearmente com a temperatura  $T$ , resistividade proporcional a  $T^2$ , dentre outras propriedades. O objetivo da teoria de líquido de Fermi de Landau é entender por que em tais casos as interações não possuem nenhum efeito qualitativo e quantificar as diferenças. Tal teoria assume que o estado fundamental e as excitações perto do nível de Fermi do sistema mudam suavemente ao variarmos a intensidade das interações desde zero até o valor real a ser analisado. Isso significa que as excitações no sistema interagente são “quase partículas” que podem ser rotuladas usando o mesmo conjunto de números quânticos que no gás ideal de Fermi: vetor de onda e spin. Isso também implica que assumimos que não há transições de fase do estado fundamental ao variarmos a intensidade das interações neste intervalo. A ideia é que, pela teoria de líquido de Fermi de Landau, as excitações em torno do nível de Fermi de um sistema correlacionado sejam mapeadas nas excitações de um sistema não interagente, e assim o problema simplifica muito [1, 2].

Para entender a teoria de líquido de Fermi e a física de muitos corpos é fundamental compreender o conceito de quase partícula, que é um tipo de excitação elementar nesses sistemas. Fisicamente ela consiste de uma partícula “vestida” (ou cercada) por uma nuvem de outras partículas (ver Fig. 1). Devido a essa nuvem as quase partículas possuem

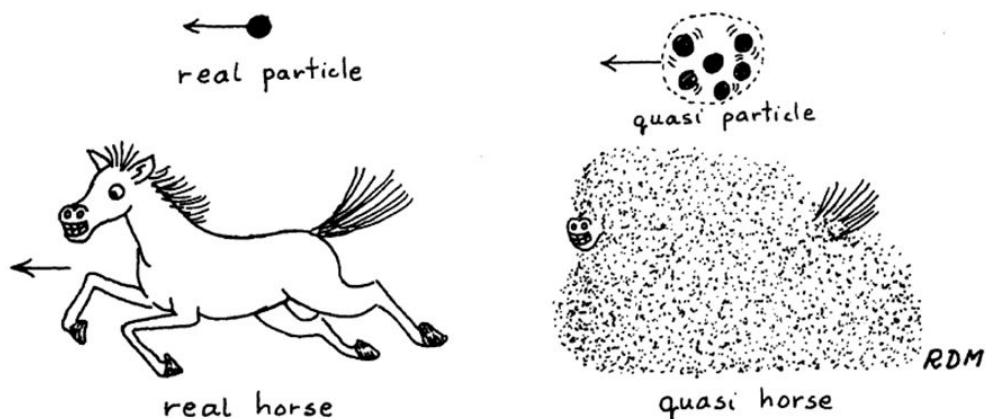


Figura 1 – Um cavalo real galopando pode ser revestido de uma nuvem de poeira, de forma que o cavalo junto a tal nuvem pode ser chamado de “quase cavalo” em analogia ao conceito de quase partícula. Uma partícula real pode interagir com outras e se vestir de uma nuvem de partículas do ambiente. Assim como a nuvem de poeira esconde o cavalo, a nuvem de partículas causa uma blindagem nas partículas reais, de forma que as quase partículas interagem fracamente. Figura extraída da Ref. [3].

propriedades diferentes de uma partícula real. Por exemplo, essa nuvem causa uma blindagem na partícula real de forma que, em geral, as quase partículas interagem mais fracamente umas com as outras. Além disso, as quase partículas possuem uma massa efetiva diferente da massa real e possuem um tempo de vida. Isso acontece porque uma quase partícula num dado estado pode, após um certo tempo, colidir com outra quase partícula do sistema e espalhar para um novo estado, de forma que o tempo de vida da quase partícula no estado inicial é finito. Assim, um sistema de partículas que interagem fortemente muitas vezes pode ser descrito como se fosse composto de quase partículas não interagentes [3]. Nesse caso a função espectral<sup>1</sup> da partícula real, que na ausência de interações seria uma delta de Dirac, passa a ter um *broadening*  $\eta$  (i.e. “alargamento”) dado pelo inverso do tempo de vida da quase partícula, sendo descrita por uma função Lorentziana perto do nível de Fermi. Além disso, o peso espectral desse pico (i.e. sua integral na frequência perto do nível de Fermi) agora é suprimido por um fator chamado peso de quase partícula  $0 < Z < 1$ . O restante do peso total está em um largo “background incoerente”, devido aos fortes efeitos de interação nos férmions em escalas de tempo curtas [4, 5].

Mas isto não é válido sempre. Se a interação for muito forte, por exemplo, dificilmente mapear o sistema interagente em um não interagente poderia ser feito. Além disso, algumas interações perturbativas em certos Hamiltonianos levam a instabilidades, dando origem a novas fases quânticas. Em casos onde a teoria de líquido de Fermi de Landau não é válida se faz necessário o uso de outras teorias para descrever o comportamento deste sistema interagente.

Os supercondutores são exemplos de materiais que não são descritos por um líquido de Fermi. A supercondutividade foi descoberta em 1911 por Kamerlingh Onnes que, ao estudar o mercúrio sólido a baixas temperaturas, verificou que em 4.2 K a sua resistência se anulava subitamente (ver Fig. 2) [6]. A partir daí foram encontrados diversos materiais que supercondzem abaixo de certa temperatura crítica. Em 1913, por exemplo, foi descoberto que o chumbo também se torna um supercondutor abaixo de 7 K. Em 1933 Meissner e Ochsenfeld descobriram que um supercondutor expõe o campo magnético aplicado nele, fenômeno este que ficou conhecido como efeito Meissner [7].

O desenvolvimento de teorias para a supercondutividade teve importantes contribuições de Fritz e Heinz London [8], Landau e Ginzburg [9], Abrikosov [10], e outros, até que uma teoria microscópica mais completa para supercondutividade foi proposta em

<sup>1</sup> A função espectral  $A(\mathbf{k}, \omega)$  dá a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula de momento  $\mathbf{k}$  em uma energia  $\omega$ . A integral desta função em todo o espectro energético resulta em 1. Se os férmions não interagentes possuem uma dispersão eletrônica  $\epsilon(\mathbf{k})$ , sua função espectral é  $A(\mathbf{k}, \omega) = \delta(\omega - \epsilon(\mathbf{k}))$ . Ao considerar férmions interagentes que sejam descritos pela teoria de líquido de Fermi, temos que a dispersão das quase partículas passa a ser  $\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})$ , seu tempo de vida passa a ser  $\eta^{-1}$  e a função espectral dos férmions perto do nível de Fermi é  $A(\mathbf{k}, \omega) = Z\eta/[(\omega - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}))^2 + \eta^2]\pi$ , onde  $Z$  é o peso de quase partícula [4]. Note que a integral desta função Lorentziana resulta em  $Z$ .

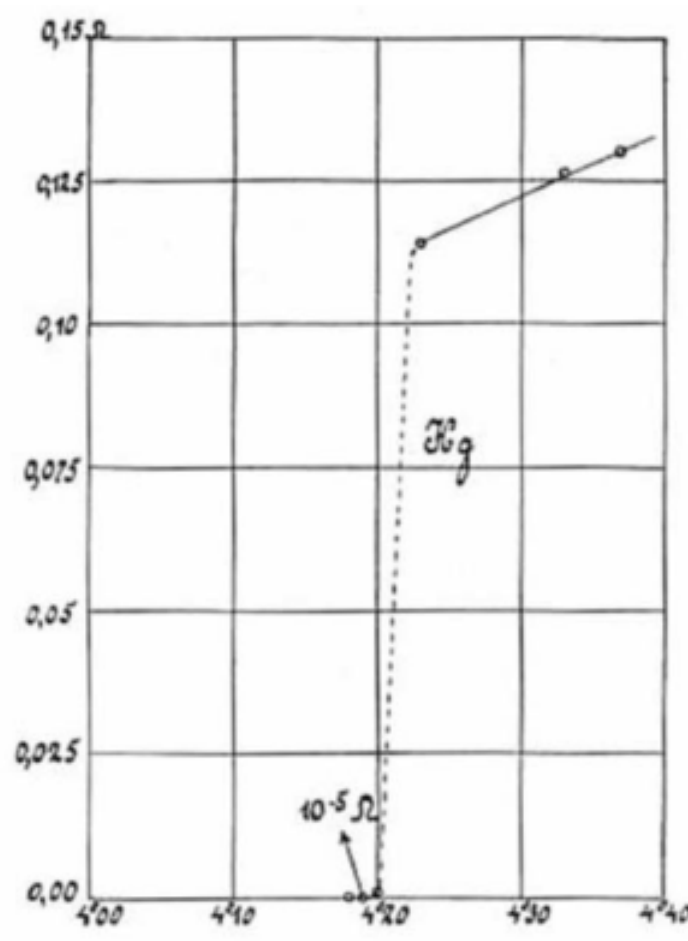


Figura 2 – Gráfico histórico de 1911 da resistência (Ohm) em função da temperatura (Kelvin) para o mercúrio. A transição supercondutora ocorre em 4.20 K. Figura extraída da Ref. [12].

1957 por Bardeen, Cooper e Schrieffer [11]. Esta teoria – conhecida por BCS – explica a supercondutividade como tendo origem nos pares de Cooper, os quais são formados por pares de elétrons próximos à superfície de Fermi que se ligam através de uma interação fracamente atrativa.

Em muitos supercondutores de baixa temperatura crítica esta interação atrativa entre os elétrons é gerada pela mediação de fônons da rede, os quais fazem surgir pares de elétrons correlacionados. Os muitos pares de elétrons do condutor se sobrepõem e formam um condensado coletivo, estando correlacionados devido ao princípio de exclusão de Pauli. Quebrar um único par de Cooper implica em alterar a energia de todo o condensado. Neste cenário, as pequenas colisões causadas pela vibração dos átomos a baixas temperaturas não são suficientes para afetar o condensado como um todo, e conseqüentemente nenhum par de Cooper do condensado. Os elétrons permanecem pareados juntos e resistem às colisões, fluindo livremente no supercondutor sem experimentar resistência alguma.

Esta situação implica na existência de um gap energético para excitações de uma partícula em um supercondutor. Este gap  $\Delta$  é máximo em temperaturas mais baixas e,

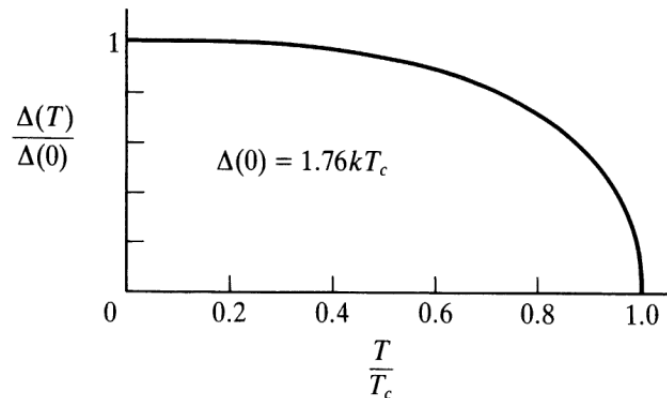


Figura 3 – Dependência do gap energético com a temperatura na teoria BCS para acoplamentos fracos. Na prática, esta curva universal se aplica à maioria dos supercondutores BCS. Figura extraída da Ref. [13].

aplicando teoria de campo médio, a teoria BCS prevê que em  $T = 0$  [13]

$$\Delta(T = 0) = 1.764k_B T_c, \quad (1.1)$$

em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T_c$  é a temperatura crítica do supercondutor. Por outro lado, o gap energético se anula na temperatura crítica, onde a supercondutividade deixa de ocorrer. Em supercondutores de acoplamento fraco, o fechamento do gap perto da temperatura crítica segue a relação assintótica [13]

$$\Delta(T \rightarrow T_c) \simeq 3.06k_B T_c \sqrt{1 - (T/T_c)}. \quad (1.2)$$

A Fig. 3 mostra como o gap fecha monotonicamente à medida em que se aumenta a temperatura. A teoria BCS prevê corretamente esta e diversas outras propriedades de muitos supercondutores, incluindo o efeito Meissner. Chamamos um material de supercondutor *convencional* quando este é corretamente descrito pela teoria BCS.

Acreditava-se que a teoria BCS proibia a existência de supercondutividade acima de 30 K até que, em 1986, Bednorz e Müller descobriram supercondutividade em um cuprato LBCO (*lanthanum barium copper oxide*, i.e. óxido de cobre lantânio bário), o qual tem uma temperatura de transição de 35 K [14]. Em seguida descobriu-se que, ao substituir o lantânio por ítrio, o novo cuprato YBCO atinge uma temperatura crítica acima de 90 K [15]. Esta temperatura pode ser atingida por resfriamento utilizando nitrogênio líquido, o qual é mais facilmente obtido do que o hélio líquido, que foi utilizado por Onnes para resfriar o mercúrio abaixo de 4.2 K.

Vários outros supercondutores têm sido descobertos, muitos dos quais não são corretamente descritos pela teoria BCS (ver Fig. 4). Além disso, inicialmente acreditava-se que a supercondutividade e o magnetismo eram fenômenos mutuamente excludentes, de forma que a presença de um implicaria necessariamente na ausência do outro. Mas com

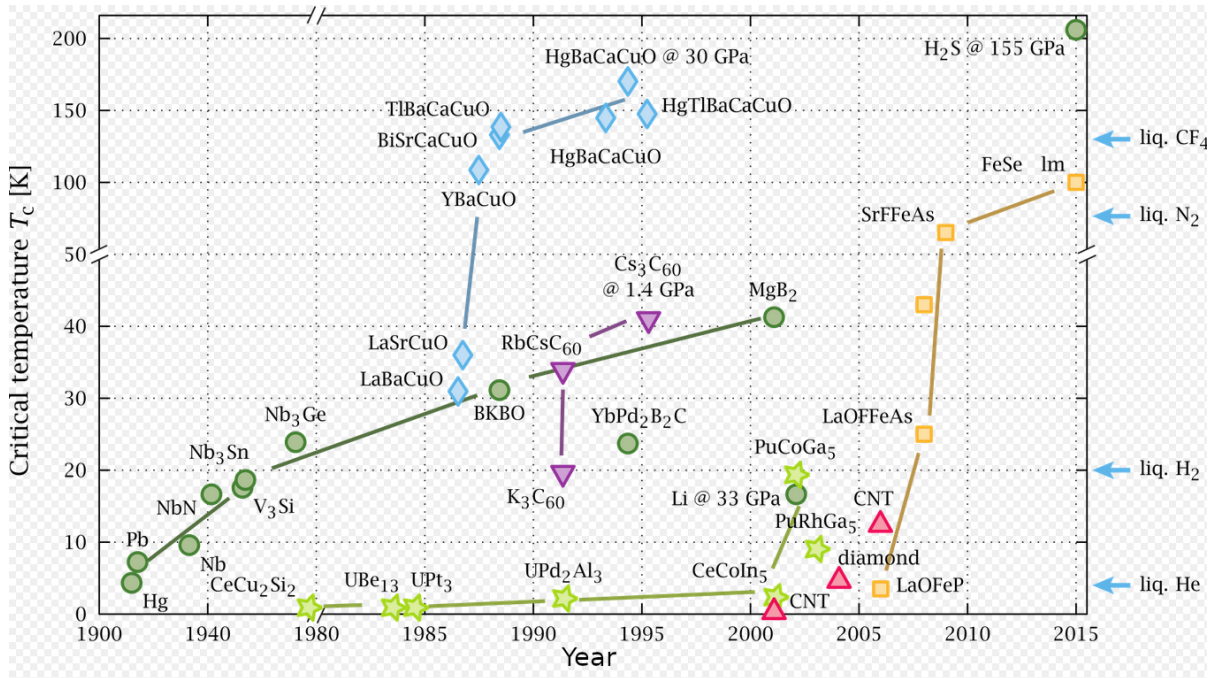


Figura 4 – Panorama da temperatura crítica de uma variedade de materiais supercondutores desde a primeira descoberta em 1911. As cores representam diferentes classes de materiais: BCS (círculo verde escuro), baseados em férmions pesados (estrela verde claro), cupratos (diamante azul), baseados em fulereno (triângulo roxo invertido), alótropos de carbono (triângulo vermelho) e pnictídeos baseados em ferro (quadrado laranja). Outros supercondutores com temperaturas críticas maiores foram encontrados após 2015 e não são mostrados aqui. Figura extraída da Ref. [16].

o passar dos anos foram encontrados vários materiais que apresentam simultaneamente ordem magnética e supercondutora, como pode ser visto na Fig. 5. Hoje sabemos que o magnetismo é um dos principais impulsionadores da supercondutividade *não convencional*, a qual não é descrita pela teoria BCS. Um grande desafio na área de física da matéria condensada é desenvolver teorias que descrevam bem os supercondutores não convencionais.

Em supercondutores a estatística de Fermi impõe que a função de pareamento supercondutor seja antissimétrica sob a troca de dois elétrons formando o par de Cooper. Portanto, deve haver uma mudança no sinal da função de pareamento ao trocar os números quânticos envolvendo os dois elétrons, como posição, tempo, índice de orbital, spin, etc. Nos supercondutores mais convencionais de uma única banda, o pareamento é antissimétrico com a troca do índice dos spins (singleto) e é simétrico em relação à parte espacial (e.g. de onda  $s$ ) e aos demais graus de liberdade. Em supercondutores do tipo tripleto, frequentemente atribuídos a supercondutores ferromagnéticos [18], como  $UGe_2$ ,  $URhGe$ , e  $UCoGe$ , a componente de spin é simétrica enquanto a componente espacial é antissimétrica (e.g. de onda  $p$ ). Nos últimos anos têm surgido sistemas supercondutores onde se especula que o pareamento seja antissimétrico nas coordenadas temporais e, conseqüentemente, na

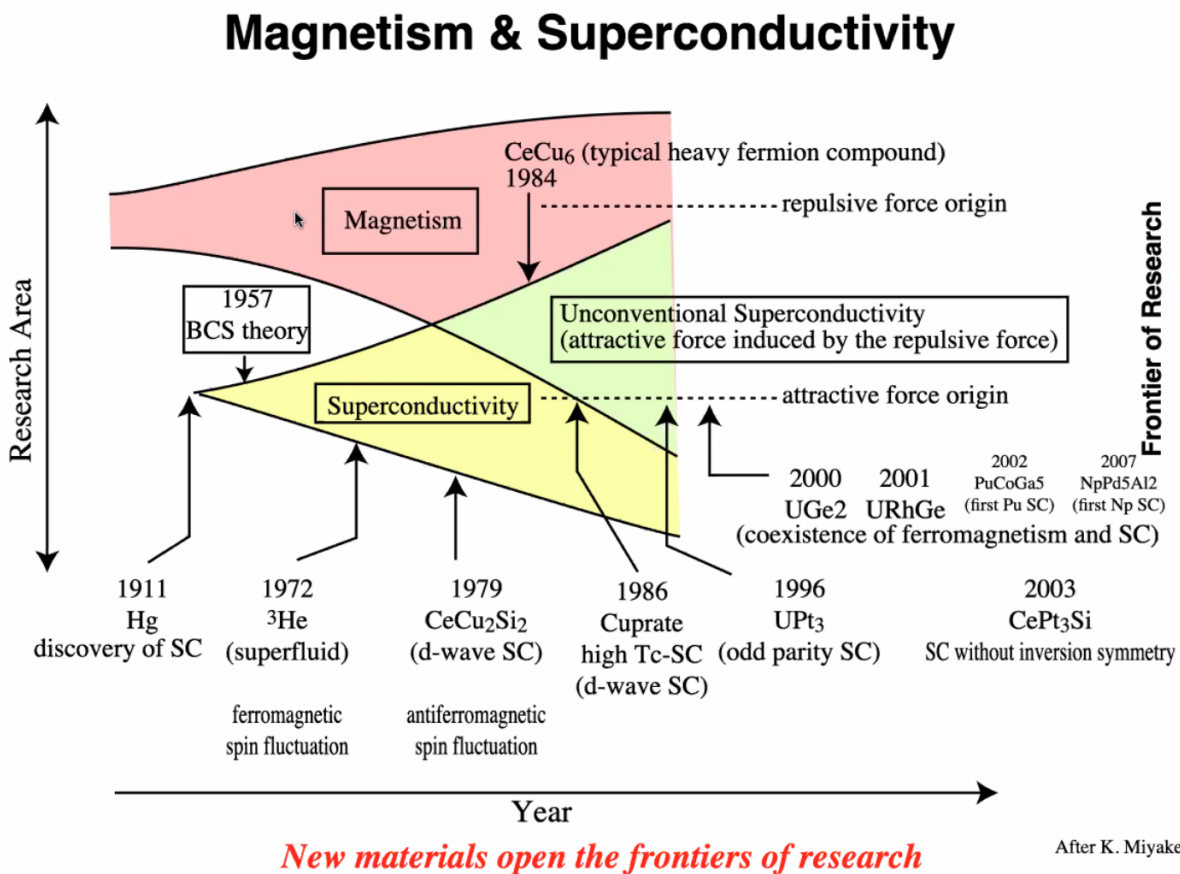


Figura 5 – Após a descoberta dos primeiros supercondutores acreditava-se que supercondutividade e magnetismo eram fenômenos que não podiam ocorrer simultaneamente. Com o passar dos anos foram sendo descobertos materiais não convencionais nos quais a supercondutividade é induzida por meio do magnetismo. Hoje são conhecidos diversos materiais nos quais ambos os ordenamentos coexistem. Figura adaptada da Ref. [17].

frequência. Tal tipo de pareamento é chamado de *odd-frequency* [19].

O teorema de Anderson afirma que a supercondutividade convencional é robusta com respeito à presença de impurezas não magnéticas [20]. Isto implica, por exemplo, que a temperatura crítica do supercondutor quase não é afetada pela presença destas impurezas. Por outro lado, a supercondutividade nos supercondutores convencionais é rapidamente suprimida à medida em que se aumenta a concentração de impurezas magnéticas [21, 22].

O comportamento de uma única impureza interagindo com o seu ambiente determina a física de baixas energias de vários sistemas de matéria condensada. Um exemplo de sistema com impureza é um elétron se movendo em uma rede cristalina e deslocando os íons ao seu redor devido à interação Coulombiana, criando uma polarização local. O elétron vestido com esta nuvem de distorções na rede, i.e. os fônons, forma um pólaron na rede [23]. Este pólaron é uma quase partícula com energia e massa diferentes do elétron “despido”. Os pólarons são importantes, por exemplo, na compreensão dos materiais com

magnetorresistência colossal [24] e eles afetam a função espectral dos cupratos [25]. Em contraste com o elétron se movendo num banho de fônons, um ambiente bosônico, quando uma impureza móvel é vestida por excitações de um mar de Fermi com o qual interage, a quase partícula que surge é chamada de pólaron de Fermi. Os pólarons de Fermi são frequentemente estudados no contexto de átomos frios e redes óticas [26]. Outro exemplo de problema de impureza é o efeito Kondo, no qual o spin de impurezas imóveis leva ao aumento da resistência em metais abaixo da temperatura Kondo [27]. O spin de uma impureza magnética imóvel também é capaz de afetar um supercondutor convencional, levando à formação de estados eletrônicos ligados ao redor das impurezas, conhecidos como estados de Yu-Shiba-Rusinov [22, 28, 29].

Frequentemente transições entre diferentes fases da matéria podem ser explicadas com argumentos de simetria. Tais transições ocorrem de uma fase mais simétrica para uma fase ordenada. Um exemplo é a transição que ocorre em um material paramagnético para uma fase ferromagnética ao reduzir a temperatura  $T$ . A fase paramagnética possui simetria de rotação dos spins. Já na fase ferromagnética, os spins estão ordenados em certa direção. Geralmente as diferentes fases da matéria podem ser caracterizadas por parâmetros de ordem locais, como a magnetização [30]. Porém, existem transições para as chamadas fases topológicas da matéria, que não necessariamente envolvem alguma quebra de simetria. Em geral as fases topológicas também não estão associadas a parâmetros de ordem locais. Topologia é um ramo da matemática onde são estudadas propriedades de objetos que são invariantes sob deformações suaves. Materiais cujas propriedades sejam invariantes sob transformações topológicas são conhecidos como materiais topológicos.

Nos últimos anos os materiais topológicos têm atraído crescente atenção dos pesquisadores em física de matéria condensada. Exemplos são os isolantes topológicos, os quais são isolantes no *bulk* e possuem estados condutores nas bordas robustos e protegidos por simetria [31, 32]. Outro exemplo são os semimetais topológicos, nos quais as bandas eletrônicas se cruzam de forma topologicamente estável perto do nível de Fermi [33, 34]. Também existem os supercondutores topológicos, nos quais a topologia do *bulk* leva à emergência de estados de Majorana dentro do gap supercondutor nas bordas do material, além da supercondutividade no interior [35, 36]. No contexto de materiais topológicos frequentemente se utiliza uma fase geométrica conhecida como fase de Berry, a qual pode ter um impacto profundo nas propriedades de materiais e é responsável por fenômenos como polarização, efeito Hall quântico, anômalo ou de spin, dentre outros fenômenos [37, 38]. Nesse mesmo contexto também é comum calcular o número de Chern, que está relacionado com o número de modos presentes na borda de materiais topológicos.

Na presente tese fazemos um estudo teórico de dois diferentes sistemas de muitos corpos contendo impurezas, as quais levam à formação de estados ligados e podem levar a supercondutividade não convencional. Na parte I da tese estudamos uma impureza

móvel em um sistema fermiônico 2D com toque quadrático de bandas. Consideramos uma rede *checkerboard* que, na ausência de interações, descreve um semimetal topológico. A impureza móvel possui uma repulsão local com os férmions majoritários, além de uma interação de troca de spin de longo alcance, especialmente anisotrópica. Mostramos que há regimes em que tal impureza não possui o comportamento de um pólaron de Fermi, mas forma estados ligados com um férmion majoritário. Discutimos perspectivas de formação de supercondutividade não convencional de onda  $d$  neste sistema se houver uma densidade pequena e finita destas impurezas móveis.

Na parte II desta tese consideramos um supercondutor convencional com impurezas magnéticas clássicas imóveis. A interação dos elétrons com as impurezas faz com que surjam estados ligados de Yu-Shiba-Rusinov, os quais se sobrepõem e levam à formação de bandas de Shiba dentro do gap supercondutor. Mostramos que nesse sistema surge supercondutividade não convencional do tipo *odd-frequency*, a qual está relacionada com a formação das bandas de Shiba. Estudos indicam que este sistema pode também apresentar supercondutividade topológica na presença de acoplamento spin-órbita [39]. Embora o sistema considerado na parte I seja um semimetal topológico e o sistema da parte II possa vir a apresentar supercondutividade topológica, propriedades topológicas não são o foco desta tese, apenas nos servem como motivação.

Cada uma das partes da tese começa com um capítulo de revisão de literatura seguido de um capítulo de metodologia utilizada e termina com um capítulo contendo o modelo que utilizamos e nossos resultados. No capítulo 8 apresentamos uma conclusão geral das duas partes da tese.

## Parte I

Impurezas móveis em um sistema fermiônico  
2D com toque quadrático de bandas



## 2 Revisão da literatura

Na primeira parte da presente tese investigamos impurezas móveis quânticas em um semimetal topológico bidimensional com toque quadrático de bandas (QBT, do inglês *quadratic band touching*). Esta pesquisa foi inspirada em um artigo de Mônica Caracanhas e Rodrigo Pereira [40], onde foi considerada uma impureza móvel com interação local repulsiva com férmions em um sistema com QBT. No trabalho apresentado aqui generalizamos o sistema considerado na Ref. [40] incluindo uma interação de troca de spin de longo alcance entre impureza e férmions do banho. Usando uma análise de grupo de renormalização encontramos regimes em que a interação entre impureza e férmion se torna efetivamente atrativa em baixas energias. Isto sugere a formação de estados ligados entre tais partículas, o que confirmamos através de cálculos da função espectral de um par férmion-impureza. Tais resultados são apresentados no presente trabalho e foram publicados na Ref. [41]<sup>1</sup>. Também apresentamos nesta tese resultados preliminares deste sistema fermiônico com QBT na presença de uma densidade pequena, porém finita, de impurezas móveis. Assim como ocorreu no caso de uma única impureza, também no caso de uma concentração finita de impurezas há indícios de que, à medida em que se reduz a energia, surge uma interação efetivamente atrativa entre as impurezas e os férmions majoritários. Estamos investigando melhor este sistema à procura de supercondutividade não convencional.

Um interessante problema de impurezas é realizado com uma pequena concentração de partículas com spin para baixo imersa em um mar de Fermi de partículas com spin para cima. Este limite de extremo desbalanço populacional tem recebido bastante atenção no contexto de experimentos com átomos ultrafrios, no qual átomos fermiônicos (ou bosônicos) móveis podem interagir com outros átomos em um sistema com temperaturas próximas do zero absoluto [42]. Neste sistema, as impurezas móveis (átomos de spin para baixo) são vestidas por excitações partícula-buraco do gás de Fermi no qual estão inseridas (átomos de spin para cima), formando pólarons de Fermi [43–48]. As propriedades de quase partícula dos pólarons de Fermi em experimentos com átomos frios podem ser medidas usando espectroscopia de radio frequência [26, 49–51]. Além de apresentar comportamento convencional de pólarons, impurezas móveis podem sondar algumas propriedades de sistemas de muitos corpos como transições de fase topológicas [52–55] e colapso de quase partícula associado com criticalidade quântica [40, 56–58].

Na Ref. [26] foram realizados experimentos com este sistema de baixa concentração de átomos com spin para baixo imersos em um mar de Fermi de átomos com spin para cima. Foi verificado que, se a interação atrativa entre as impurezas e os férmions majoritários

---

<sup>1</sup> Flávio L. N. Santos, Mônica A. Caracanhas, M. C. O. Aguiar e Rodrigo G. Pereira: *Bound states in two-dimensional Fermi systems with quadratic band touching*. Phys. Rev. B **101**, 155120 (2020).

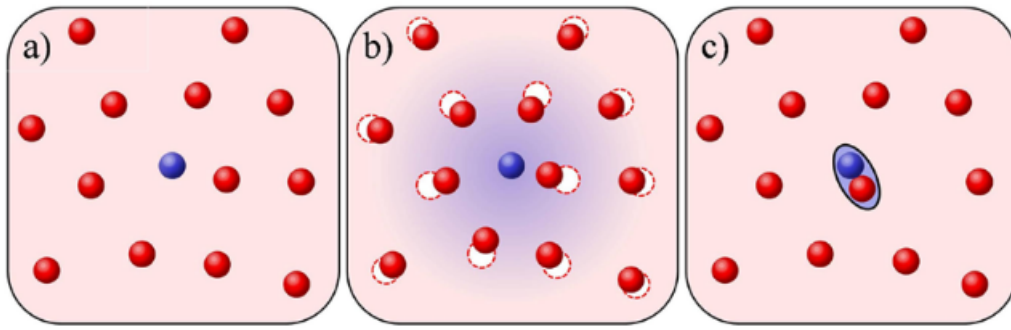


Figura 6 – Interação atrativa entre uma impureza móvel (azul) e um mar de Fermi de átomos frios (vermelho). (a) Com atração fraca, a impureza se move livremente no ambiente. (b) Com interação atrativa intermediária, a impureza se veste de uma nuvem localizada de átomos, formando um pólaron de Fermi. (c) Com atração forte, ocorre formação de molécula. Figura extraída da Ref. [26].

é baixa o suficiente, as impurezas se movem livremente no ambiente. Ao considerar uma interação atrativa mais forte, cada impureza pode experimentar colisões com mudança de momento com os átomos do ambiente, e então começa a atraí-los. Assim, a impureza vestida com a nuvem localizada de férmions espalhados constitui o pólaron de Fermi. Após um valor crítico para a atração a impureza se liga a um férmion majoritário, formando uma molécula (ver Fig. 6).

Problemas de impurezas móveis e muitos outros problemas da física de muitos corpos podem ser investigados experimentalmente utilizando gases quânticos em redes óticas. Uma rede ótica é essencialmente um cristal artificial de luz, um padrão periódico de intensidade da luz que é formado pela interferência de dois ou mais feixes de lasers. É possível formar estruturas espaciais unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais e aprisionar átomos fermiônicos e/ou bosônicos nas estruturas de interferência a temperaturas próximas do zero absoluto (ver Fig. 7). O *hopping* ou locomoção dos átomos entre sítios vizinhos pode ser controlado a partir da intensidade dos lasers. Além disso, diferentes tipos de interação entre os átomos podem ser considerados, inclusive uma repulsão local, sendo este caso uma realização experimental do modelo de Hubbard. Átomos ultrafrios em redes óticas têm o potencial de impactar diferentes áreas da física. Podem ser usados como eficientes simuladores quânticos para problemas na física da matéria condensada e outras áreas devido ao singular nível de controle disponível nestes sistemas [59, 60].

A área de redes óticas alcançou um grande progresso com a produção de moléculas polares no regime quântico [62], de forma que estes experimentos devem ajudar também na compreensão de sistemas quânticos de muitos corpos com interações de longo alcance. Nestes experimentos são produzidas moléculas que possuem um momento de dipolo elétrico de maneira que cada par de moléculas possui uma interação de longo alcance (dipolo-dipolo). As moléculas podem ser produzidas em diferentes estados rotacionais, os quais simulam estados de spin. Interações de troca de (pseudo) spin de longo alcance já foram

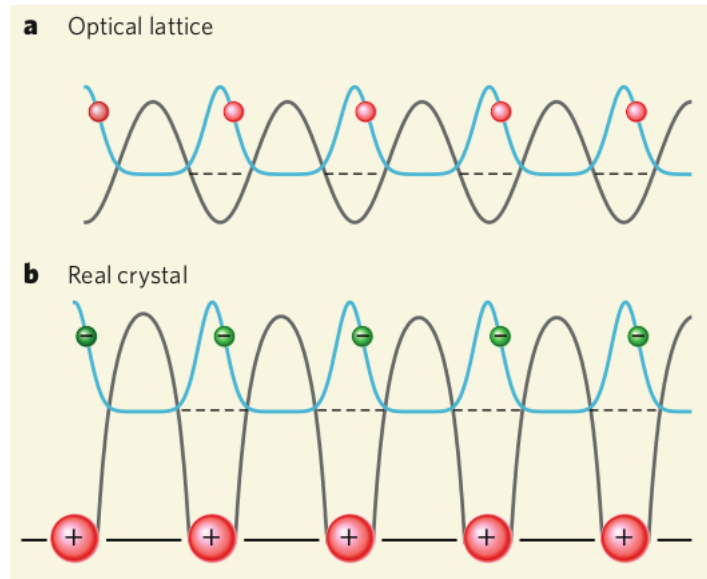


Figura 7 – Átomos ultrafrios em uma rede ótica podem simular fenômenos de matéria condensada que usualmente ocorrem somente em “gases de elétrons” em um cristal. (a) mostra um esquema de rede ótica onde os átomos são presos em poços de potencial sinusoidal (em cinza) criados por uma onda estacionária de feixes de laser. As funções de onda dos átomos (azul) correspondem a elétrons de valência em um cristal real, representado em (b). Aqui, o potencial periódico é causado pela atração eletrostática entre elétrons (-) e os íons (+) que formam o cristal. A locomoção e a interação das partículas, seja átomos ultrafrios ou elétrons, determinam a física do material. Então, por exemplo, superfluidez em um gás de átomos ultrafrios corresponde a supercondutividade em um gás de elétrons. Figura extraída da Ref. [60].

produzidas e verificadas experimentalmente nesse tipo de sistema [61, 63]. Estas interações são da forma [64]

$$H_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{2} \sum_{i>j} V_{dd}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+), \quad (2.1)$$

em que  $S_i^{\pm}$  são os operadores usuais de momento angular de spin 1/2 no sítio  $i$  e os vetores adimensionais  $\mathbf{r}_i$  são as posições das moléculas escritas em unidades do parâmetro de rede  $a$ . A energia de interação dipolar inclui um fator geométrico

$$V_{dd}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{1 - 3 \cos^2 \Theta_{ij}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}, \quad (2.2)$$

onde  $\Theta_{ij}$  é o ângulo entre o eixo de quantização (definido por um campo externo  $\mathbf{B}$ ) e o vetor  $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  conectando as moléculas  $i$  e  $j$ . O acoplamento na Eq. (2.1) é dado por  $J_{\perp} = -\langle \downarrow | d | \uparrow \rangle^2 / 4\pi\epsilon_0 a^3$ , onde  $\epsilon_0$  é a permissividade no espaço livre,  $d$  representa o operador dipolo e  $\langle \downarrow | d | \uparrow \rangle$  é o elemento de matriz do dipolo entre dois estados rotacionais  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\rangle$ . A Fig. 8(a) mostra um esquema de uma rede ótica 3D com moléculas polares que possuem uma interação de troca de spin  $J_{\perp}$ . A Fig. 8(b) ilustra os diferentes estados rotacionais, os quais podem ser alcançados por meio de microondas. A Fig. 8(c) mostra a

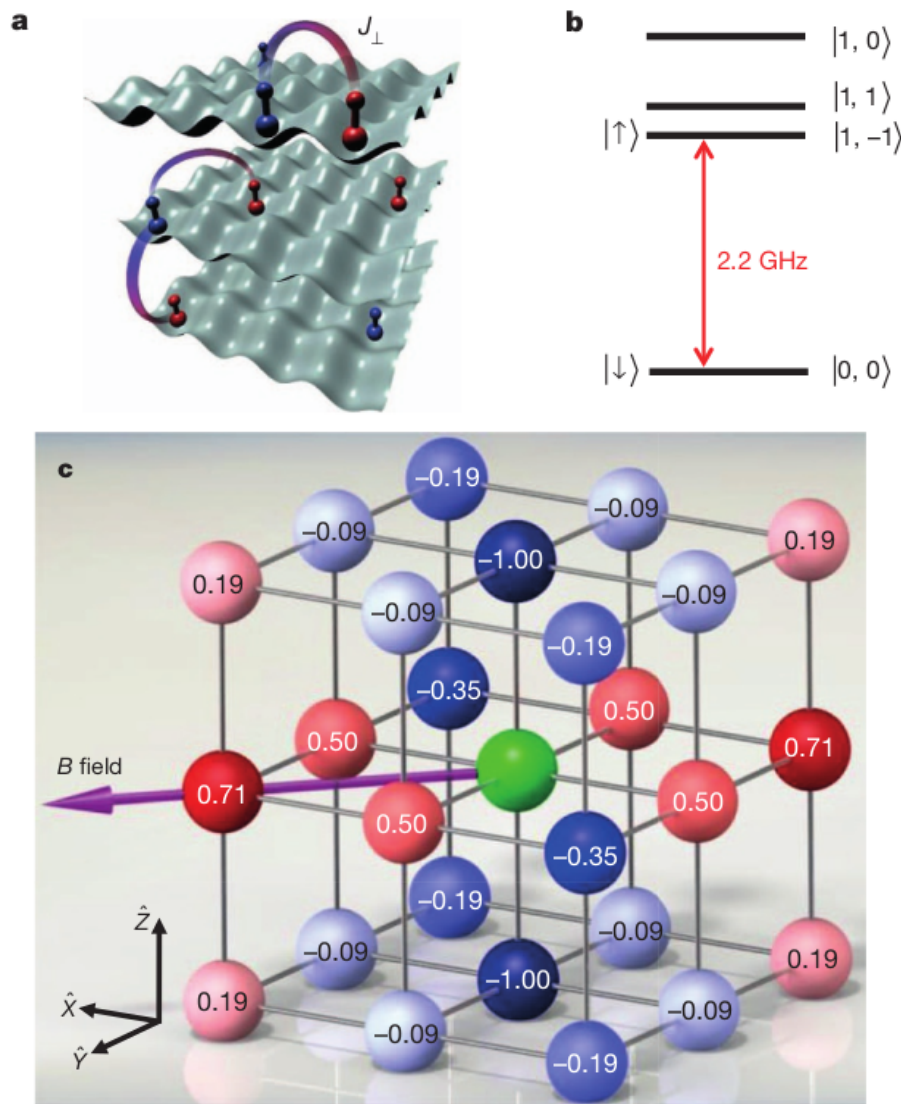


Figura 8 – Moléculas polares numa rede 3D. (a) Moléculas polares são carregadas em uma rede ótica. Microondas são usadas para induzir a transição entre dois estados rotacionais (vermelho e azul representam os dois estados). As moléculas experimentam uma interação de troca de spin de longo alcance  $J_{\perp}$ . (b) Diagrama energético esquemático para estados rotacionais de menores energias. (c) A energia da interação entre duas moléculas depende de suas posições relativas na rede. Os números mostrados fornecem o fator geométrico  $-V_{dd}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  para a interação dipolar de cada sítio com o sítio central (verde), dado um eixo de quantização na direção do campo  $\mathbf{B}$ . Valores negativos (azul) correspondem a interações atrativas e valores positivos (vermelho) correspondem a interações repulsivas. Figura extraída da Ref. [61].

variação espacial do fator geométrico  $-V_{dd}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  numa rede 3D. Note que a interação dipolar é anisotrópica uma vez que o fator geométrico depende da direção do vetor  $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ .

Ainda é um desafio compreender os efeitos das interações de longo alcance em sistemas de muitos corpos. Tais interações tendem a ser mais difíceis de abordar por métodos teóricos. Por um lado, é conhecido que repulsões eletrônicas de mais longo alcance

tendem a suprimir a supercondutividade não convencional que surge da repulsão eletrônica de curto alcance [65]. Por outro lado, estudos numéricos prevêm que a interação de troca de spin de longo alcance em moléculas polares em uma rede unidimensional aumenta a região de superfluidez em seu diagrama de fases [66]. É importante que haja mais estudos que ajudem na compreensão dos efeitos de interações de longo alcance.

Métodos diagramáticos são muito utilizados para estudos analíticos de interações fracas em sistemas de muitos corpos. Tais métodos se baseiam em considerar nas funções de Green interagentes os principais diagramas de Feynmann que devem contribuir para a física do problema [40, 67, 68]. Exemplo é o grupo de renormalização de Wilson, que pode ser utilizado inclusive para tratar interações de longo alcance. Tal grupo de renormalização permite mapear um sistema interagente original em um sistema efetivo em baixas energias, levando a expressões que descrevem a renormalização das interações efetivas, das massas efetivas e dos pesos de quase partícula à medida em que se reduz a energia do sistema. As expressões para a renormalização das interações podem ser obtidas em *tree level*, que conta com correções em primeira ordem nessas interações, ou em nível de correções de *loop*, que surgem a partir de segunda ordem nas interações. As equações de grupo de renormalização podem indicar que, em baixas energias, certa interação é: irrelevante (i.e. tende a se anular), relevante (i.e. aumenta) ou marginal (i.e. não sofre variação) [69–71]. Dizemos que uma interação é marginalmente relevante (irrelevante) se ela é marginal em *tree level* e relevante (irrelevante) em nível de correção de *loop*.

Num sistema de muitas partículas fermiônicas interagentes em que as interações sejam irrelevantes por grupo de renormalização e o peso de quase partícula não se anule, o sistema deve ser descrito pela teoria de líquido de Fermi de Landau em baixas energias. Se houver interações relevantes, o sistema pode ser levado a diferentes fases quânticas [69]. No caso de poucas impurezas móveis interagindo com um mar de Fermi, as impurezas devem ser descritas por pólarons de Fermi se as interações forem irrelevantes. Se a repulsão entre impureza e férmion for relevante, o peso de quase partícula se anula e a massa efetiva das impurezas divergir em baixas energias, a impureza deve se localizar [40]. Porém, se houver uma atração efetiva a baixas energias a impureza pode formar estados ligados com um férmion do banho [72].

Na primeira parte desta tese investigamos o comportamento de impurezas móveis em um semimetal topológico bidimensional com toque quadrático de bandas (QBT). Um sistema com QBT possui duas bandas de energia que se tocam em um ponto e suas dispersões são quadráticas em torno deste ponto, conforme ilustrado na Fig. 9. Neste tipo de sistema o nível de Fermi pode ser ajustado de forma a se encontrar exatamente no ponto de toque quadrático das bandas. Como consequência não há uma superfície de Fermi, há somente um ponto no espaço dos momentos que possui o valor de energia correspondente ao nível de Fermi. A ausência de uma superfície de Fermi faz com que

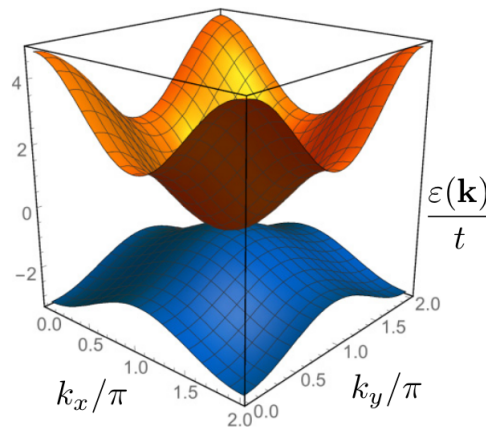


Figura 9 – Dispersão do tipo QBT, onde duas bandas energéticas se tocam em um ponto e são quadráticas em torno dele. Figura extraída da Ref. [40].

surjam novos fenômenos, não descritos por um líquido de Fermi. Isto também acontece com os cones de Dirac no grafeno e em outros materiais. Dizemos que o grafeno e os sistemas com QBT são semimetais por não possuírem superfície de Fermi e não possuírem gap no espectro. Há, porém, uma diferença importante entre esses dois sistemas bidimensionais: enquanto no grafeno a dispersão é linear em torno deste ponto de toque de bandas e conseqüentemente a densidade de estados é nula, no QBT a dispersão é quadrática e então a densidade de estados é finita. Tais fatos são importantes para determinar as propriedades dos sistemas [70].

No caso de dispersão linear em torno do ponto de toque das bandas, a física de baixas energias é descrita por férmions de Dirac. Em geral, um ponto de Dirac numa estrutura de bandas é robusto com relação a pequenas mudanças no potencial efetivo que preservam simetrias do cristal [73–76]. Além disso, interações elétron-elétron de curto alcance são perturbativamente irrelevantes para dimensões espaciais  $d > 1$ . Portanto, há uma fase estável com férmions de Dirac livres sem gap até que, além de uma interação crítica, há fases que quebram espontaneamente a simetria de espaço ou grupo de ponto e/ou invariância por reversão temporal [77–79].

Quanto à dispersão quadrática, no caso não interagente o ponto de toque de bandas é topologicamente estável se o fluxo de Berry<sup>2</sup> for  $\pm 2\pi$  e se o sistema possuir simetria de reversão temporal e simetria rotacional  $C_4$  ou  $C_6$ . Tal sistema com QBT topologicamente estável pode ser realizado na rede *checkerboard* ou na rede kagome, por exemplo [70]. Devido ao fato de a densidade de estados (DOS) no ponto de toque das bandas ser finita, as interações de curto alcance são marginais em *tree level*. Interações perturbativas neste sistema foram estudadas no caso em que o nível de Fermi está posicionado no ponto de toque

<sup>2</sup> Devido à simetria de reversão temporal, um ponto de toque de bandas possui fluxo de Berry quantizado,  $-i \oint_{\Gamma} d\mathbf{k} \cdot \langle \psi(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | \psi(\mathbf{k}) \rangle = n\pi$ , onde  $\Gamma$  é uma curva no espaço dos momentos contendo o ponto de toque das bandas,  $\psi(\mathbf{k})$  é a função de onda de Bloch em uma banda envolvida no toque e  $n$  é um inteiro. Em um QBT temos  $n = 0, \pm 2\pi$ , onde o caso com  $n = 0$  não é robusto [70].

das bandas para férmions sem spin e férmions de spin  $1/2$ . Em ambos os casos a interação repulsiva é marginalmente relevante, sendo instável até para repulsões arbitrariamente pequenas. Quatro possíveis estados ordenados aparecem: fase com efeito Hall quântico anômalo, fase com efeito Hall quântico de spin<sup>3</sup>, fase nemática e fase nemática-spin-nemática<sup>4</sup> [70]. Fases com efeito Hall quântico anômalo e fases nemáticas nesses sistemas foram estudadas também numericamente [80, 81]. Investigações experimentais de sistemas com QBT em redes óticas também têm sido discutidas [82–84]. Há também previsão analítica de ocorrência de supercondutividade em sistemas com QBT através de um ajuste fino do potencial químico do sistema [85].

Em sistemas fermiônicos com QBT as duas bandas energéticas podem apresentar curvaturas diferentes, o que implica em massas efetivas diferentes ( $m_+$  e  $m_-$  para a banda de cima e a de baixo, respectivamente). Ao considerar uma impureza com interação  $U$  de onda  $s$  local repulsiva com este sistema, verifica-se que existem dois regimes que dependem da assimetria entre as massas efetivas dos férmions. Se  $m_+ > m_-$ , a interação efetiva se renormaliza para zero ao reduzir a escala de energia. Neste caso, o peso de quase partícula  $Z$  e a massa da impureza  $M$  se renormalizam para valores finitos e a quase partícula (pólaron de Fermi) é estável. Se  $m_+ < m_-$ , a interação efetiva tende a crescer. Neste caso,  $M$  tende a infinito,  $Z$  tende a zero e a representação de pólaron deixa de ser válida [40].

Na Ref. [40] também foi calculado o coeficiente de difusão  $D$  em função da temperatura  $T$  para este problema de uma impureza móvel em sistema com QBT. Ao preparar o sistema com a impureza em certo sítio e em seguida observar a propagação de seu pacote de onda, a variância da posição da impureza deve crescer com o tempo  $t$  da forma  $\sigma^2(t) = 4D(T)t$  para tempos suficientemente longos. No regime em que  $m_+ > m_-$  e o pólaron é estável, foi calculado que  $D(T) \sim \ln^2(\Lambda_0/T)$  para baixas energias. Por outro lado, quando  $m_+ < m_-$  e a descrição polarônica deixa de ser válida, o coeficiente de difusão se anula com uma lei de potência  $D(T) \sim T^\nu$  para baixas temperaturas, onde  $\nu$  é da ordem do acoplamento renormalizado no limite de baixas energias. Um esboço do comportamento de  $D(T)$  pode ser visto na Fig. 10.

No trabalho descrito nos próximos capítulos nós consideramos um semimetal topológico bidimensional com QBT dado pela rede *checkerboard*. O sistema estudado é composto por um mar de Fermi de partículas com spin para cima (com nível de Fermi

<sup>3</sup> Um material com efeito Hall quântico anômalo é um isolante topológico e apresenta condutividade Hall quantizada nas bordas do material mesmo na ausência de uma campo magnético externo forte. Na fase com efeito Hall quântico de spin as duas componentes de spin possuem condutividades Hall opostas, i.e. férmions com spin para baixo se propagam no sentido oposto aos de spin para cima.

<sup>4</sup> Fase nemática é uma fase com quebra espontânea de simetria rotacional. Em sistemas com QBT, a fase nemática quebra a simetria rotacional  $C_4$  ou  $C_6$  em simetria  $C_2$ , dividindo o ponto de QBT em dois pontos de Dirac. Assim, a fase nemática é um semimetal anisotrópico. A fase nemática-spin-nemática, por sua vez, leva o ponto de QBT a se decompor em quatro pontos de Dirac. Este último estado possui polarização de spin invertida ao longo de dois eixos ortogonais, de forma que o setor de spin se torna invariante por rotação  $C_2$  [70].

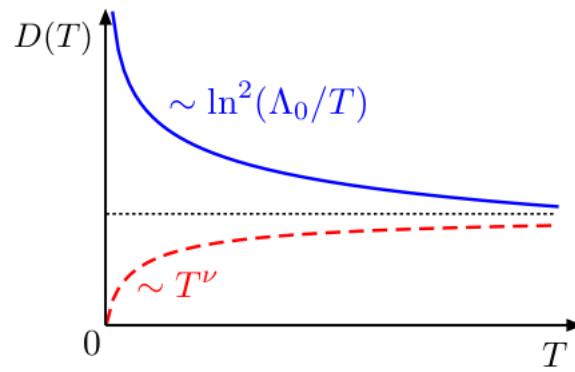


Figura 10 – Esboço do coeficiente de difusão da impureza móvel em função da temperatura em um sistema com QBT para  $m_+ > m_-$  (linha contínua azul) e  $m_+ < m_-$  (linha tracejada vermelha). Figura extraída da Ref. [40].

ajustado no ponto de toque das bandas) interagindo localmente com uma impureza móvel de spin para baixo, assim como feito em [40]. Aqui, porém, incluímos uma interação de troca de spin de longo alcance entre a impureza e os férmions majoritários, dada pelas Eqs. (2.1)-(2.2). Tal interação, por ser anisotrópica, quebra a simetria rotacional  $C_4$  localmente. Ambas as interações consideradas aqui são perturbativas. Como resultado, além de encontrar regimes em que a impureza deve se comportar como um pólaron de Fermi, encontramos situações em que deve haver formação de estados ligados entre a impureza e um férmion majoritário. Fazemos uma breve discussão sobre perspectivas da presença de supercondutividade não convencional no sistema quando houver uma concentração pequena, porém finita, de impurezas móveis neste sistema.

Os demais capítulos da primeira parte desta tese estão divididos da seguinte maneira. No capítulo 3 discutiremos um pouco sobre funções de Green, diagramas de Feynman e o grupo de renormalização de Wilson, os quais utilizamos neste trabalho para estudar interações fracas. No capítulo 4 introduzimos nosso modelo de uma impureza móvel interagindo com um mar de Fermi com QBT e apresentamos nossos resultados. Usando métodos diagramáticos encontramos regimes em que se formam estados ligados. O leitor interessado pode encontrar no Apêndice A detalhes adicionais dos cálculos dos propagadores utilizados nos nossos métodos.

## 3 Metodologia

Ao longo da primeira parte desta tese utilizamos funções de Green para compreender as propriedades de uma impureza em um sistema com toque quadrático de bandas. Tais funções podem ser calculadas considerando alguns diagramas de Feynman, os quais também são utilizados para obtenção das equações de grupo de renormalização, que nos permitem investigar as interações efetivas a baixas energias. Nas seções a seguir falamos brevemente sobre funções de Green, diagramas de Feynman e grupo de renormalização.

### 3.1 Funções de Green e diagramas de Feynman

As quase partículas de um sistema podem ser descritas por meio de propagadores, ou funções de Green. O propagador de uma *partícula única* fornece a amplitude de probabilidade de uma partícula que se encontra numa posição  $\mathbf{r}_1$  (ou com certo momento  $\mathbf{k}_1$ ) no tempo  $t_1$  ser observada no ponto  $\mathbf{r}_2$  (ou com momento  $\mathbf{k}_2$ ) no tempo  $t_2$ . Assim, entre  $t_1$  e  $t_2$  a partícula pode se “propagar” pelo sistema, interagindo com outras partículas. A função de Green de partícula única fornece diretamente a energia e tempo de vida da quase partícula, dentre outras propriedades [3]. A função de Green de *duas partículas*, por sua vez, fornece a amplitude de probabilidade de observar uma partícula em  $\mathbf{r}_1, t_1$  e outra em  $\mathbf{r}_3, t_3$  se elas foram colocadas no sistema em  $\mathbf{r}_2, t_2$  e  $\mathbf{r}_4, t_4$ . Este propagador fornece diretamente as energias e tempos de vida de excitações coletivas, susceptibilidade magnética, condutividade elétrica e outras propriedades de não equilíbrio [3].

Através da transformada de Fourier uma função de Green escrita em termos de posições  $\mathbf{r}_j$  e tempos  $t_j$  pode ser expressa em termos de momentos  $\mathbf{k}_j$  e frequências  $\omega_j$ . Em física de muitos corpos frequentemente é mais simples calcular propagadores em termos dos “tempos imaginários”  $\tau_j$ . A transformada de Fourier desses propagadores  $G(\tau) \rightarrow G(i\omega_n)$  passa a depender de  $i\omega_n$ , em que  $\omega_n$  são as frequências de Matsubara e para férmions temos  $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ , em que  $n$  é qualquer número inteiro e  $\beta = 1/(k_B T)$ . O propagador, quando definido no tempo real, pode ser uma função retardada ou avançada, dentre outras possibilidades. A função de Green retardada  $G(\omega)$  pode ser facilmente obtida a partir de uma expressão para a função de Green no eixo imaginário  $G(i\omega_n)$  ao tomar a continuação analítica  $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$  com  $\eta \rightarrow 0^+$  [5].

É possível calcular o propagador interagente de uma partícula única somando a amplitude de probabilidade da partícula não interagir com nenhuma outra no intervalo de tempo considerado (i.e. o propagador não interagente), com a amplitude de probabilidade de ela interagir uma única vez com alguma partícula nesse intervalo (i.e. função de Green de primeira ordem na interação), com a amplitude de probabilidade de interagir duas vezes

(função de Green de segunda ordem), e assim por diante. Semelhantemente, é possível calcular o propagador interagente de duas partículas somando a função de Green não interagente com os propagadores que correspondem a uma interação, duas interações, etc. A seguir mostramos com mais detalhes como esta soma pode ser obtida para funções de Green de duas partículas. O procedimento para a de partícula única é análogo.

Sabe-se que a função de Green de 4 pontos (isto é, quatro “pernas externas”, ou de duas partículas) de um sistema com interação  $H_I = \int d^d x \mathcal{H}_I(\mathbf{x})$ , onde  $d = 2$  é a dimensão do sistema no nosso caso, é dada por [5]

$$\Pi(\{x_i\}) = -\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_1(x_1) f_2^\dagger(x_2) f_3(x_3) f_4^\dagger(x_4) e^{-\int_0^\beta H_I(\tau) d\tau} \right\}_{\text{con}}, \quad (3.1)$$

em que  $H_0$  é o Hamiltoniano não interagente,  $\tau$  é o tempo imaginário,  $T_\tau$  é o operador de ordenamento temporal com tempo imaginário,  $\beta = 1/(k_B T)$  e neste trabalho estaremos interessados no resultado para temperatura  $T \rightarrow 0$ . Na expressão acima  $f_i(x_i) = f_i(\mathbf{x}_i, \tau_i)$  são os operadores relacionados com as duas partículas (i.e. duas sendo criadas antes da interação e duas saindo da interação), e o subíndice “con” significa que só devem ser levados em conta propagadores relacionados a diagramas de Feynman que sejam conectados (este ponto será melhor explicado mais adiante). Expandindo a exponencial deste propagador até segunda ordem temos

$$\Pi^{(1)}(\{x_i\}) = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_1(x_1) f_2^\dagger(x_2) f_3(x_3) f_4^\dagger(x_4) \int d^{d+1}x \mathcal{H}_I(x) \right\}_{\text{con}}, \quad (3.2)$$

$$\Pi^{(2)}(\{x_i\}) = -\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_1(x_1) f_2^\dagger(x_2) f_3(x_3) f_4^\dagger(x_4) \int d^{d+1}x \int d^{d+1}x' \mathcal{H}_I(x) \mathcal{H}_I(x') \right\}_{\text{con}}, \quad (3.3)$$

onde  $\Pi^{(1)}$  é a correção de primeira ordem do propagador, que envolve apenas  $\mathcal{H}_I(x)$ ,  $\Pi^{(2)}$  é a de segunda ordem, que envolve  $\mathcal{H}_I(x) \mathcal{H}_I(x')$ , e  $\int d^{d+1}x = \int d^d x \int_0^\beta d\tau$ .

O teorema de Wick [5, 86] pode ser utilizado para calcular as expressões acima. Ele garante que o traço do produto de todos os operadores fermiônicos nas expressões acima (com o pré-fator  $e^{-\beta H_0} T_\tau$ ) se transforma no produto de traços da multiplicação de pares de operadores (com pré-fatores  $e^{-\beta H_0} T_\tau$ ) multiplicados por  $(-1)^u$ , onde  $u$  é o número de comutações de pares de operadores para se chegar a certa combinação, somando todas as possíveis combinações. Por exemplo,

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_1(x_1) f_2^\dagger(x_2) f_3(x_3) f_4^\dagger(x_4) \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_1(x_1) f_2^\dagger(x_2) \right\} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_3(x_3) f_4^\dagger(x_4) \right\} \\ & \quad - \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_1(x_1) f_3(x_3) \right\} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_2^\dagger(x_2) f_4^\dagger(x_4) \right\} \\ & \quad (-1)^2 \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_1(x_1) f_4^\dagger(x_4) \right\} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau f_2^\dagger(x_2) f_3(x_3) \right\}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

O traço da multiplicação de dois operadores juntamente com o pré-fator  $e^{-\beta H_0} T_\tau$  fornece a função de Green não interagente  $G^{(0)}$  se esses dois operadores forem da mesma espécie

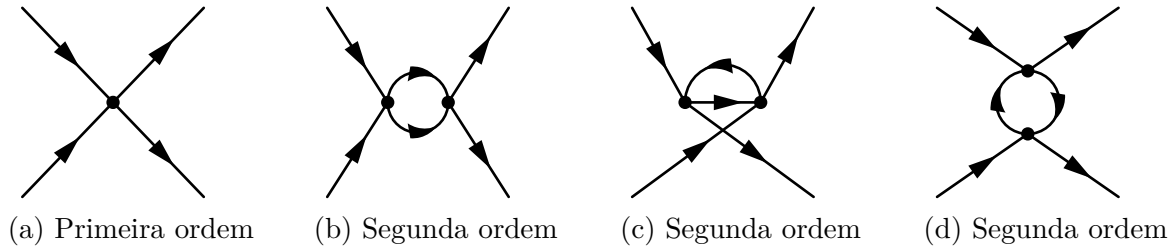


Figura 11 – Diagramas de Feynman conectados de duas partículas de primeira e segunda ordens na interação. As linhas contínuas representam férmions. Os pontos representam interações entre os férmions.

de partícula, onde um deles deve ser de criação (com  $\dagger$ ) e o outro de aniquilação (sem  $\dagger$ ). Caso contrário esse traço é zero. Assim, no exemplo da Eq. (3.4), se fizermos  $f_1, f_2 = c$  e  $f_3, f_4 = d$ , temos

$$\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau c(x_1) c^\dagger(x_2) d(x_3) d^\dagger(x_4) \right\} = G_c^{(0)}(x_1 - x_2) G_d^{(0)}(x_3 - x_4) - 0 + 0. \quad (3.5)$$

O fator  $\mathcal{H}_I(x)$  nas Eqs. (3.2)-(3.3) é escrito em termos de produtos de operadores fermiônicos  $f_i(x)$  [usualmente quatro operadores fermiônicos, levando a uma interação quártica, e.g.  $\mathcal{H}_I(x) = g f_{i_1}^\dagger(x) f_{i_2}(x) f_{i_3}^\dagger(x) f_{i_4}(x)$ ] de forma que, ao utilizar o teorema de Wick, os propagadores  $\Pi^{(1)}$  e  $\Pi^{(2)}$  podem ser desmembrados em diversos termos, que surgem das diversas combinações de pares de operadores fermiônicos. Cada termo que surge dentre todas as possíveis combinações pode ser representado em uma figura esquemática, chamada diagrama de Feynman [5, 87].

A Fig. 11 apresenta alguns diagramas de Feynman para propagadores de duas partículas de primeira e segunda ordens na interação. Cada linha em dado diagrama de Feynman representa um propagador de uma partícula não interagente, de forma que o propagador do diagrama como um todo está relacionado com o produto de todos os propagadores não interagentes do diagrama. Cada ponto no diagrama representa uma interação que acontece. As interações consideradas nesta tese são sempre entre duas partículas fermiônicas, de forma que em cada ponto representando a interação há duas linhas entrando, representando duas partículas (reais e/ou virtuais), e duas linhas saindo. Nos diagramas deste trabalho as pernas externas (i.e. as linhas exteriores) à esquerda representam partículas antes da interação, enquanto as pernas externas à direita representam as partículas após a interação. Os diagramas de Feynman são úteis porque por meio deles frequentemente podemos escrever diretamente as expressões dos propagadores relacionados a eles. Isto implica que não é necessário realizar a expansão da exponencial na Eq. (3.1) e utilizar o teorema de Wick toda vez que formos calcular algum propagador, mas podemos desenhar os diagramas de Feynman que sabemos que podem contribuir para a física do problema e somar os propagadores relacionados a eles. Alternativamente, dada a expressão de um propagador podemos desenhar o diagrama de Feynman correspondente e, por meio do diagrama, compreender melhor o processo físico envolvido.

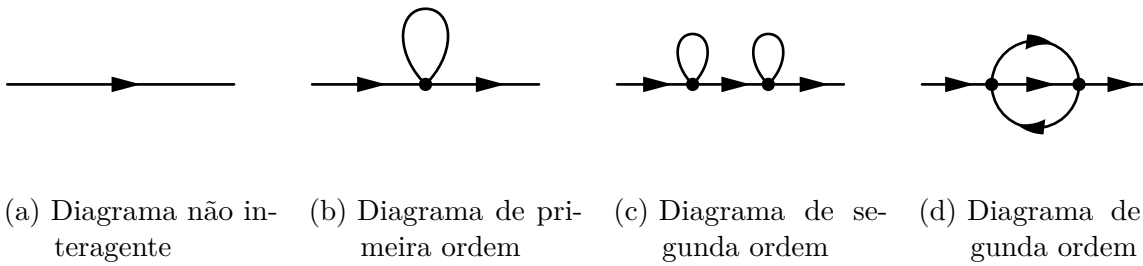


Figura 12 – Alguns diagramas de Feynman conectados para funções de Green de partícula única. As linhas contínuas representam férmions. Os pontos representam interações entre os férmions. Existem outros diagramas de segunda ordem que não estão apresentados nesta figura.

Note que na Fig. 11 apresentamos apenas diagramas em que todas as linhas estão conectadas entre si, chamados de diagramas conectados. Existem também diagramas desconectados, mas o subscrito “con” nas Eqs. (3.1)-(3.3) significa que essas expressões são válidas considerando apenas as contribuições de propagadores cujos diagramas são conectados [5]. As Figs. 11(b)-(d) mostram todos os diagramas em um *loop*, i.e. as linhas internas dão uma volta, e estes propagadores se caracterizam pela presença de uma única integral no momento interno  $\mathbf{p}$  (quando estes propagadores estão escritos em termos dos momentos). No diagrama 11(b) as linhas internas que compõem o *loop* estão orientadas da esquerda para a direita, representando duas partículas. Dizemos que este diagrama é do tipo partícula-partícula. No diagrama 11(c) uma das linhas internas está orientada da direita para a esquerda, representando um buraco. Dizemos que este diagrama é do tipo partícula-buraco. O diagrama 11(d) é conhecido como *zero sound*. Somando os propagadores de todos os diagramas em todas as ordens nas interações obteríamos a função de Green para um sistema interagente. Se as interações forem fracas o suficiente, a soma dos diagramas em até segunda ordem nas interações pode ser uma boa aproximação.

O procedimento anterior para calcular a função de Green interagente de duas partículas pode ser aplicado também para o cálculo da função de Green de uma única partícula. Neste caso, na Eq. (3.1) teríamos o produto de apenas dois operadores fermiônicos correspondentes às duas pernas externas, em vez do produto  $f_1(x_1) \cdots f_4^\dagger(x_4)$ . Tomando a expansão de  $e^{-\int_0^\beta H_I(\tau) d\tau}$  e utilizando o teorema de Wick, teríamos as contribuições de diversos propagadores associados a vários diagramas de Feynman conectados, como os que são apresentados na Fig. 12. Os propagadores de primeira ordem nas constantes de acoplamento (i.e. nas interações) que possuem uma “bolha”, como o diagrama da Fig. 12(b), são chamados *tadpoles*. Já diagramas como o da Fig. 12(d), chamado de *sunrise*, possuem dois *loops*, i.e. as linhas internas dão duas voltas, e estes propagadores se caracterizam pela presença de duas integrais em momentos internos  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{p}'$ .

Observando as figuras 12(b) e 12(c) percebemos que no cálculo de  $G$  é necessário somar vários termos que possuem fatores que se repetem. Assim, quando se trata de



Figura 13 – O diagrama (a) representa uma função de Green interagente de uma única partícula e sua área hachurada representa a autoenergia  $\Sigma$  desta partícula. O diagrama (b) representa uma função de Green interagente de duas partículas e a área hachurada representa o vértice efetivo  $\Gamma$  da interação. A autoenergia  $\Sigma$  e o vértice efetivo  $\Gamma$  são obtidos a partir da soma de propagadores com suas pernas externas amputadas, i.e. desconsideradas.

funções de Green de uma única partícula, um resultado bastante útil é a equação de Dyson, que relaciona o propagador interagente  $G(\mathbf{k}, E)$  com o propagador não interagente  $G^{(0)}(\mathbf{k}, E)$  [5],

$$G(\mathbf{k}, E) = \frac{G^{(0)}(\mathbf{k}, E)}{1 - G^{(0)}(\mathbf{k}, E)\Sigma(\mathbf{k}, E)}, \quad (3.6)$$

em que  $\Sigma(\mathbf{k}, E)$  é a chamada autoenergia, a qual é a soma de um número infinito de diagramas distintos (sem fatores que se repetem) sem as contribuições de suas pernas externas. Esta expressão é bastante útil se pudermos aproximar a autoenergia por uma soma dos termos de ordens mais baixas da série. Em cada um destes diagramas a contribuição para a autoenergia pode ser obtida tomando o produto dos propagadores livres, representados pelas linhas do diagrama, e integrando os graus de liberdade internos do sistema. Então, “amputando” as pernas externas, isto é, desconsiderando as contribuições delas, temos a contribuição do diagrama para a autoenergia.

Quando se trata de funções de Green de duas partículas, em vez de autoenergia temos o conceito de vértice efetivo. Para calcular a contribuição de um dado diagrama para o vértice efetivo basta calcular o propagador deste diagrama e então “amputar” as quatro pernas externas. A Fig. 13(a) ilustra o conceito de autoenergia  $\Sigma$  enquanto a Fig. 13(b) ilustra o conceito de vértice efetivo  $\Gamma$ , os quais são calculados somando as contribuições de seus respectivos propagadores sem a contribuição das pernas externas.

Na próxima seção veremos como podemos utilizar o formalismo de propagadores, diagramas de Feynman, autoenergia e vértice efetivo para calcular equações de grupo de renormalização para um sistema fermiônico.

## 3.2 Grupo de renormalização de Wilson

A abordagem de grupo de renormalização (RG) de Wilson, que tem tido bastante êxito no estudo de fenômenos críticos [88], se baseia em sistematicamente integrar graus

de liberdade de comprimentos de onda pequenos, renormalizando então as constantes de acoplamento na ação efetiva para os graus de liberdade de comprimentos de onda longos. No caso de férmions, as excitações de baixas energias se localizam próximo ao nível de Fermi, o qual é o ponto final para o fluxo do grupo de renormalização [89]. Assim, o RG mapeia o sistema original em um sistema com constantes renormalizadas que nos permite compreender melhor a física do sistema em baixas energias.

A ideia central do grupo de renormalização de Wilson é integrar subsequentemente graus de liberdade em cascas esféricas de altos valores do momento  $K$  com largura infinitesimal  $dK$  e absorver o resultado da integração em várias constantes de acoplamento, as quais dizemos que fluem. Para isso, calculamos os diagramas de Feynman que renormalizam as constantes de acoplamento que interessam, realizando a integração dos momentos internos ao longo das cascas esféricas de altos momentos. Apenas diagramas de um *loop* contribuem para o fluxo das constantes de acoplamento porque a espessura da casca esférica no espaço dos momentos é infinitesimal e cada *loop* introduz um fator  $dK$  [89]. A fim de se obter um resultado exato para a função de partição seria necessário considerar um número infinito de constantes de acoplamento. Embora na prática isso seja impossível, o RG é capaz de discernir quais das constantes de acoplamento são mais relevantes, de forma que um conjunto de constantes de acoplamento apropriadamente escolhido já leva a resultados altamente precisos [69, 89].

As interações quárticas que nos interessam para as investigações da presente tese são do tipo  $H_I = g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) f_1^\dagger(\mathbf{k}_1) f_2(\mathbf{k}_2) f_3^\dagger(\mathbf{k}_3) f_4(\mathbf{k}_4) \delta(\sum_i \mathbf{k}_i)$ . A fim de realizar uma expansão de  $g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)$  em série de Taylor, definimos o vetor  $\boldsymbol{\kappa} = (\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)$ , onde  $\mathbf{k}_i$  possui  $d$  coordenadas e  $\boldsymbol{\kappa}$  possui  $4d$  coordenadas. Assim,  $g(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} (\sum_i^{4d} \frac{\partial g}{\partial \kappa_i}(\mathbf{0}) \kappa_i)^n$ , onde  $(\frac{\partial g}{\partial \kappa_i}(\mathbf{0}))^n$  denota  $\frac{\partial^n g}{\partial \kappa_i^n}(\mathbf{0})$ . Os fatores de ordem  $n$  nas derivadas são do tipo

$$g_{n_1, \dots, n_{4d}}^{(n)} = \frac{1}{n!} \frac{\partial^{n_1} \dots \partial^{n_{4d}} g}{\partial \kappa_1^{n_1} \dots \partial \kappa_{4d}^{n_{4d}}}(\mathbf{0}), \quad (3.7)$$

onde  $\sum_{i=1}^{4d} n_i = n$ . É possível verificar que, em sistemas bidimensionais, o termo constante  $g^{(0)}$  é marginal em *tree level* (ver significado a seguir) enquanto os acoplamentos  $g^{(n)}$  de ordens superiores nos momentos ( $n \geq 1$ ) são irrelevantes em *tree level*. Isso é verificado da seguinte forma (detalhes podem ser encontrados na Ref. [69]): ao tomar a ação efetiva do sistema interagente e eliminar os modos fermiônicos em uma casca esférica  $K' = K e^{-dl/2} < |\mathbf{p}| < K$ , com  $dl \ll 1$ , e em seguida realizar transformações apropriadas (i.e. multiplicações por escalares) nas variáveis de momento e energia, nos intervalos de integração e nos campos fermiônicos  $f_i$ , de forma que o termo não interagente da ação  $S_0$  seja invariante, temos que as constantes de acoplamento  $g^{(0)}$  e  $g^{(n)}$  obedecem

$$\frac{dg^{(0)}}{dl} = 0, \quad (3.8)$$

$$\frac{dg_{n_1, \dots, n_{4d}}^{(n)}}{dl} = -\alpha(n) g_{n_1, \dots, n_{4d}}^{(n)}, \quad (3.9)$$

onde  $n \geq 1$  e  $\alpha(n) > 0$ . Dizemos que esta é a análise de grupo de renormalização em *tree level*, a qual realiza mudanças nas variáveis da ação a fim de deixar  $S_0$  invariante. Assim, todas as constantes de acoplamento que forem de ordens superiores nos momentos são irrelevantes em *tree level*, uma vez que o módulo de seus valores efetivos diminuem ao reduzir a escala de energia  $l$ . Já o acoplamento  $g^{(0)}$  é marginal em *tree level*, uma vez que seu valor não varia com o fluxo.

Note nas expressões para  $dg/dl$  que a correção em *tree level* é capaz de trazer termos lineares nos acoplamentos  $g$ . A fim de obter em  $dg/dl$  as correções quadráticas nos acoplamentos  $g$  podemos utilizar diagramas de Feynman. Para este fim, calculamos o propagador de primeira ordem no acoplamento [representado na Fig. 11(a)] e em seguida calculamos as contribuições dos diagramas de Feynman de segunda ordem nesses acoplamentos utilizando todos os diagramas em um *loop* [i.e., os das Figs. 11(b)-(d)]. Integrando o momento interno dos diagramas em um *loop* na casca esférica  $K' = Ke^{-dl/2} < |\mathbf{p}| < K$  obtemos que a constante de acoplamento renormalizada  $g'$  é dada pela soma

$$g' = g + \beta g^2 dl, \quad (3.10)$$

em que o termo  $g$  veio do propagador linear no acoplamento tendo as pernas externas amputadas, e o último termo veio da soma dos diagramas em um *loop* tendo as pernas externas amputadas. Na prática, isso está relacionado com a correção em um *loop* para o vértice efetivo. Assim, a contribuição de um *loop* na equação de RG para a constante de acoplamento é

$$\frac{dg}{dl} = \frac{g' - g}{dl} = \beta g^2. \quad (3.11)$$

Somando a contribuição em *tree level* com a contribuição em um *loop*, temos as equações de RG para as constantes de acoplamento.

O procedimento para calcular as equações de RG para a massa efetiva  $M$  e o peso de quase partícula  $Z$  envolve o cálculo do propagador de uma única partícula em dois *loops*. Tal propagador corresponde ao diagrama *sunrise* da Fig. 12(d), o qual traz correção para a autoenergia. Note que aqui não consideramos o cálculo do diagrama do tipo *tadpole* da Fig. 12(b) pois sua contribuição pode ser diretamente absorvida no potencial químico  $\mu$ , não trazendo correção para  $M$  e  $Z$ .

Realizando as integrais do diagrama *sunrise* nos momentos internos  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{p}'$  ao longo de uma casca de espessura infinitesimal e expandindo essa correção para a autoenergia em série de Taylor, encontramos  $a$ ,  $b$  e  $c$  tais que  $\Sigma^{(2)}(\mathbf{p}, \omega) \simeq (ai\omega + b\frac{p^2}{2M} + c)g^2 dl$ . Depois, utilizamos que o propagador de uma partícula livre é da forma

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - \frac{p^2}{2M}}. \quad (3.12)$$

Ao utilizar a Eq. de Dyson (3.6) com a autoenergia  $\Sigma^{(2)}$  calculada acima, vemos que tal contribuição da autoenergia pode ser absorvida por  $M$  e  $\mu$ , trazendo também um fator

que corresponde a uma correção para o peso de quase partícula  $Z$ . A fim de verificar qual a variação de  $Z$  ao longo do fluxo, multiplicamos o lado direito da Eq. de Dyson (3.6) por  $Z$ , onde  $Z = 1$  no início do fluxo, i.e. quando  $l = 0$ . Assim, temos

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, \omega) &= \frac{Z}{G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega)^{-1} - \Sigma(\mathbf{p}, \omega)} \\ &= \frac{Z}{\left(i\omega + \mu - \frac{p^2}{2M}\right) - \left(ai\omega + b\frac{p^2}{2M} + c\right)g^2 dl} \\ &= \frac{Z'}{i\omega + \mu' - \frac{p^2}{2M'}}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde

$$Z' = Z(1 + ag^2 dl), \quad (3.14)$$

$$M' = M(1 - ag^2 dl - bg^2 dl), \quad (3.15)$$

$$\mu' = \mu(1 + ag^2 dl) - cg^2 dl. \quad (3.16)$$

Finalmente, temos as equações de RG,

$$\frac{dZ}{dl} = \frac{Z' - Z}{dl} = Zag^2, \quad (3.17)$$

$$\frac{dM}{dl} = \frac{M' - M}{dl} = -M(a + b)g^2, \quad (3.18)$$

$$\frac{d\mu}{dl} = \frac{\mu' - \mu}{dl} = (a\mu - c)g^2. \quad (3.19)$$

O diagrama *tadpole* também renormaliza  $\mu$  e sua contribuição deve ser levada em conta juntamente à Eq. (3.19). Uma vez que  $Z$  não é unitário ao longo de todo o fluxo  $l$ , sua renormalização deve ser levada em conta no cálculo da Eq. de RG para o acoplamento  $g$ , para que esta se torne mais precisa. O lado direito da Eq. (3.11) veio da integral dos propagadores em um *loop* tendo as pernas externas amputadas. Cada *loop* é composto de uma integral do produto de dois propagadores não interagentes  $G^{(0)}$ . Cada um desses propagadores agora passa a conter um fator  $Z$  no numerador, de forma que o *loop* como um todo contribui com um fator  $Z^2$  no lado direito da Eq. (3.11). Note que isto é válido quando os dois propagadores dentro do *loop* correspondem ao mesmo tipo de férmion. Se o *loop* for dado pelo produto de dois propagadores  $G_c^{(0)}$  e  $G_d^{(0)}$ , em que  $c$  e  $d$  são espécies fermiônicas diferentes, o *loop* contribuirá com um fator  $Z_c Z_d$  no lado direito da Eq. (3.11), em que  $Z_c$  e  $Z_d$  são os pesos de quase partícula de  $c$  e  $d$ , respectivamente. Nesse caso mais complexo de duas espécies fermiônicas, o peso de quase partícula do férmion  $c$  ( $d$ ) e sua massa efetiva são renormalizados pelo diagrama *sunrise* cujas pernas externas são propagadores  $G_c^{(0)}$  ( $G_d^{(0)}$ ).

Podemos atribuir valores despídos (i.e. valores em  $l = 0$ , não renormalizados) para os parâmetros  $g$ ,  $M$ ,  $Z$  e  $\mu$ , e integrar as Eqs. de RG até  $l_0 > 0$  a fim de encontrar os

---

parâmetros renormalizados. A fim de estudar o sistema no limite de baixas energias (i.e.  $T \rightarrow 0$  e momento  $\mathbf{p}$  próximo da superfície de Fermi), basta tomar  $l \rightarrow \infty$ .

No próximo capítulo apresentamos nosso modelo para estudo de uma impureza interagindo com um sistema fermiônico. Usamos propagadores e diagramas de Feynman para obter equações de RG para as constantes de acoplamento, para a massa efetiva da impureza e seu peso de quase partícula.



## 4 Modelo e resultados

Ao longo deste capítulo mostramos propriedades de uma impureza móvel em um semimetal topológico com toque quadrático de bandas. Na seção 4.1 introduzimos um modelo para este sistema numa rede *checkerboard* e tomamos o limite do contínuo a fim de estudar as propriedades de baixas energias. Na seção 4.2 apresentamos uma análise de grupo de renormalização para a impureza. Calculamos a função espectral de um par férmion-impureza na seção 4.3, mostrando a presença de estados ligados. A seção 4.5 mostra resultados preliminares de grupo de renormalização para o caso de uma densidade pequena e finita de impurezas móveis.

### 4.1 Modelo na rede e teoria efetiva no limite do contínuo

Nesta seção introduzimos um Hamiltoniano para estudar uma impureza móvel interagindo com férmions majoritários com QBT na rede *checkerboard*. Em seguida, apresentamos o modelo efetivo no limite do contínuo.

Uma vez que nossa motivação é compreender efeitos de interações envolvendo moléculas polares em redes óticas no limite de alto desbalanço populacional, consideremos um mar de Fermi de partículas com spin para cima e uma impureza fermiônica com spin para baixo numa rede *checkerboard*. As partículas possuem um *hopping* ou deslocamento entre sítios primeiros vizinhos e segundos vizinhos (ver Fig. 14). A impureza tem uma interação local  $U$  com os férmions majoritários, além de uma interação de troca de spin  $J_{\perp}$  anisotrópica de longo alcance [64, 66]. Nos experimentos, moléculas com momento dipolar na direção do eixo de quantização  $\mathbf{d}$  são preparadas em diferentes estados rotacionais [61], os quais simulam os dois estados de spin considerados aqui, para cima ou para baixo (conforme discutido no capítulo 2).

O Hamiltoniano que descreve este sistema pode ser escrito na forma

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} (c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{J_{\perp}}{4} \sum_{i \neq j} V_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+), \quad (4.1)$$

onde  $c_{j\alpha}^{\dagger}$  cria um férmion no sítio  $j$  em um dos dois estados internos,  $\alpha = \uparrow, \downarrow$ , e  $n_{j\alpha} = c_{j\alpha}^{\dagger} c_{j\alpha}$ . Além da repulsão local de Hubbard  $U > 0$ , consideramos uma interação dipolar de troca escrita em termos dos operadores de spin  $S_j^+ = c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}$  e  $S_j^- = c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j\uparrow}$ . O fator geométrico

$$V_{ij} = \frac{1 - 3(\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})^2}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} \quad (4.2)$$

depende da posição relativa  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  entre os sítios e do vetor unitário  $\hat{\mathbf{d}}$  paralelo ao eixo de quantização. Podemos escrever  $\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij} = \sin \theta \cos(\phi - \varphi_{ij})$ , onde  $\theta$  e  $\phi$  são os

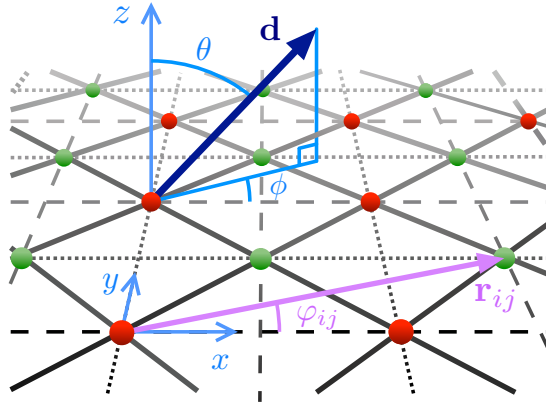


Figura 14 – Rede *checkerboard*. Linhas contínuas representam o *hopping*  $t$  entre sítios primeiros vizinhos nas subredes  $A$  (vermelho) e  $B$  (verde). Linhas tracejadas e pontilhadas representam *hoppings* entre segundos vizinhos  $t'$  e  $t''$ , respectivamente. A interação de troca de spin depende da direção do momento dipolar  $\mathbf{d}$ , parametrizado pelo ângulo polar  $\theta$  (em relação ao eixo  $z$ , que é perpendicular ao plano da rede) e pelo ângulo azimutal  $\phi$  (medido pelo eixo  $x$ ). Um vetor  $\mathbf{r}_{ij}$  conectando dois sítios da rede forma um ângulo  $\varphi_{ij}$  com o eixo  $x$ .

ângulos do vetor  $\mathbf{d}$  e  $\varphi_{ij}$  é o ângulo entre  $\mathbf{r}_{ij}$  e o eixo  $x$  (ver Fig. 14). Note que a interação dipolar só ocorre entre um férmion de spin para cima e um de spin para baixo. O resultado de tal operador aplicado em dois férmions de spin para cima é nulo.

Analisemos as contribuições dos *hoppings*  $t_{ij}$  entre primeiros e segundos vizinhos na rede *checkerboard*. No caso não interagente  $U = J_{\perp} = 0$ , podemos diagonalizar o Hamiltoniano usando

$$c_{j\alpha} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j}, & j \in A \\ \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j+\boldsymbol{\delta})}, & j \in B \end{cases}, \quad (4.3)$$

onde  $\mathbf{R}_j$  são posições na rede quadrada com parâmetro de rede unitário,  $N_s$  é o número de células unitárias da rede *checkerboard* e  $\boldsymbol{\delta} = (\hat{x} + \hat{y})/2$  conecta dois sítios na mesma célula unitária. O Hamiltoniano não interagente adquire a forma  $H_0 = \sum_{\mathbf{k},\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \mathcal{H}_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\alpha}$ , em que  $c_{\mathbf{k}\alpha} = (a_{\mathbf{k}\alpha}, b_{\mathbf{k}\alpha})$  é um spinor de duas componentes, correspondentes às subredes  $A$  e  $B$ , respectivamente, e  $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$  é uma matriz  $2 \times 2$ . O Hamiltoniano considerado pode ser generalizado para considerar o caso em que a massa despida da impureza seja diferente da massa dos férmions majoritários. Em experimentos com moléculas polares isso corresponde à situação em que a impureza é feita a partir de elementos químicos de massas diferentes das moléculas majoritárias. Para considerar isto no Hamiltoniano, basta multiplicar os *hoppings* correspondentes à impureza pela razão entre as massas despidas. Para simplificar nossa notação consideraremos que as massas das duas espécies fermiônicas são iguais.

Ao diagonalizar  $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$  é possível mostrar que o sistema não interagente possui duas bandas que se tocam em um ponto e possuem dispersão quadrática em torno deste ponto escolhendo: *hopping* uniforme  $t$  entre sítios primeiros vizinhos, *hopping*  $t'$  entre segundos vizinhos na subrede  $A$  ( $B$ ) ao longo da direção  $x$  ( $y$ ) e  $t''$  ao longo da direção  $y$  ( $x$ ) (ver

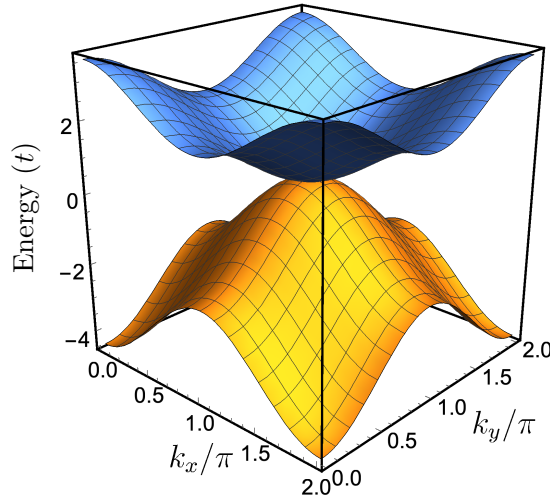


Figura 15 – Estrutura de bandas para o modelo não interagente na rede *checkerboard*, mostrando o toque quadrático de bandas em  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Aqui escolhemos  $t' = 0.6t$  e  $t'' = -0.4t$ .

Fig. 14). Note que é fundamental usarmos duas subredes diferentes a fim de encontrar um ponto de toque quadrático de bandas porque, se tivéssemos apenas uma subrede ou rede quadrada fazendo  $t' = t''$ , o Hamiltoniano não interagente levaria a uma única banda energética. Também é necessário fixar  $|t' + t''| < |t|$  e  $|t' - t''| < |t' - t''|$ . Assim, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0(\mathbf{k}) = & -(t' + t'')(\cos k_x + \cos k_y)\mathbb{1} - (t' - t'')(\cos k_x - \cos k_y)\sigma^z \\ & - 4t \cos(k_x/2) \cos(k_y/2)\sigma^x, \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde  $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$  são matrizes de Pauli agindo no espaço das subredes. A estrutura de bandas possui um ponto de QBT no canto da zona de Brillouin,  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , conforme mostrado na Fig. 15. Este ponto de QBT não requer ajuste fino dos *hoppings* uma vez que possui fase de Berry  $\pm 2\pi$  e é protegido por simetrias de rotação  $C_4$  e de reversão temporal [70], conforme discutido no capítulo 2.

Agora, a fim de estudar o problema de um mar de Fermi com QBT e uma impureza, consideramos  $N_\uparrow = N_s$  e  $N_\downarrow = 1$  no limite termodinâmico  $N_s \rightarrow \infty$ . Neste caso o nível de Fermi das partículas majoritárias está ajustado no ponto de QBT. Note que o Hamiltoniano (4.1) conserva o número de férmions de spin para cima  $N_\uparrow$  e de spin para baixo  $N_\downarrow$  (i.e.  $[H, N_\uparrow] = [H, N_\downarrow] = 0$ ). Assim, não é necessário aplicar um campo magnético externo com o objetivo de manter o nível de Fermi dos férmions majoritários no ponto de QBT e manter o sistema com um único férmion de spin para baixo. A fim de explorar as excitações de baixas energias, realizamos uma expansão dos momentos dos férmions majoritários em torno de  $\mathbf{Q}$  e da impureza em torno de  $\mathbf{k} = 0$ . No caso dos férmions majoritários as duas bandas energéticas precisam ser levadas em consideração, enquanto no caso da impureza apenas a banda de menor energia precisa ser considerada, uma vez que esta partícula não tem acesso à banda de cima no regime de baixas energias. Para

simplificar nossa abordagem consideramos o caso particular em que a dispersão em torno do ponto de QBT é isotrópica, de forma que a massa efetiva na direção  $x$  é igual à massa efetiva na direção  $y$ . Isto é realizado escolhendo  $t'' < 0$  e  $t = t' - t'' > 0$  [40, 70].

A expansão de  $\mathcal{H}_0$  para os férmions majoritários em torno do ponto de QBT, i.e. para momento  $\mathbf{k} = \mathbf{Q} + \mathbf{p}$  em que  $|\mathbf{p}| \ll 1$ , é dada por

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{k} = \mathbf{Q} + \mathbf{p}) \simeq \frac{t' + t''}{2}(p_x^2 + p_y^2 - 4)\mathbb{1} + \frac{t' - t''}{2}(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z + t p_x p_y \sigma_x. \quad (4.5)$$

A matriz acima é diagonalizada por uma matriz  $U(\mathbf{p})$ , a qual transforma da base das subredes  $A$  e  $B$  para a base das duas bandas de energia,

$$U(\mathbf{p}) = \frac{1}{p} \begin{pmatrix} p_y & p_x \\ -p_x & p_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \varphi_{\mathbf{p}} & \cos \varphi_{\mathbf{p}} \\ -\cos \varphi_{\mathbf{p}} & \sin \varphi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

em que  $\varphi_{\mathbf{p}} = \arctan(p_y/p_x)$  é o ângulo polar do vetor  $\mathbf{p}$ . Assim, a dispersão dos férmions do banho na região do ponto de toque quadrático é dada pelas autoenergias da Eq. (4.5),

$$\epsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \pm \frac{p^2}{2m_{\pm}}, \quad (4.7)$$

em que  $m_+ = [2(t - t'')]^{-1}$  e  $m_- = (2t')^{-1}$ , de forma que os sinais  $+$  e  $-$  se referem às bandas de cima e de baixo, respectivamente. Semelhantemente podemos expandir  $\mathcal{H}_0$  para a impureza em torno de  $\mathbf{k} = 0$ . Após diagonalizar a expressão correspondente, encontramos que a dispersão da impureza na banda de menor energia é dada por

$$E(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2M}, \quad (4.8)$$

em que  $M = (2t')^{-1}$ .

Com as expressões acima podemos encontrar o Hamiltoniano não interagente no limite do contínuo que, a menos de uma constante, é dado por

$$H_0 = \int d^2r \left[ \Psi^\dagger(\mathbf{r}) h_0(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) - d^\dagger(\mathbf{r}) \frac{\nabla^2}{2M} d(\mathbf{r}) \right], \quad (4.9)$$

onde  $\Psi(\mathbf{r}) = (\psi_A(\mathbf{r}), \psi_B(\mathbf{r}))^t$  é o spinor de duas componentes associado aos férmions majoritários,  $d(\mathbf{r})$  é o campo associado à impureza e

$$h_0(\mathbf{r}) = \frac{m_+ - m_-}{4m_+m_-} \mathbb{1} \nabla^2 + \frac{m_+ + m_-}{4m_+m_-} \left[ \sigma^z (\partial_x^2 - \partial_y^2) + 2\sigma^x \partial_x \partial_y \right]. \quad (4.10)$$

A seguir mostramos como tomar o limite do contínuo da parte interagente do Hamiltoniano. A interação de troca  $J_\perp$  da Eq. (4.1) pode ser reescrita no espaço dos momentos e os operadores da impureza nesta interação podem ser projetados na banda de menor energia. Assim, encontramos

$$H_{J_\perp} = \frac{J_\perp}{4\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger [-V_A(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \mathbb{1} + V_B(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \sigma^x] c_{\mathbf{p}\uparrow} d_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger d_{\mathbf{k}}, \quad (4.11)$$

em que  $\mathbf{p} = \mathbf{Q} + \mathbf{p}'$ , com  $|\mathbf{p}'|, |\mathbf{q}|, |\mathbf{k}| \ll 1$ ,  $c_{\mathbf{k}\uparrow}$  é o spinor nas duas subredes para os férmions majoritários, conforme definido anteriormente, e  $d_{\mathbf{k}}$  destrói um férmion de impureza na banda de menor energia. As funções  $V_A$  e  $V_B$  acima são definidas a partir do fator geométrico  $V(\mathbf{r}_{ij}) = V_{ij}$ ,

$$V_A(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{R}_l \in \{A-\mathbf{0}\}} V(\mathbf{R}_l) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}, \quad (4.12)$$

$$V_B(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{R}_l \in A} V(\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\delta}) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l + \boldsymbol{\delta})}, \quad (4.13)$$

em que o somatório na Eq. (4.12) é feito sobre todos os sítios na subrede  $A$  exceto a origem, e o somatório na Eq. (4.13) percorre todos os sítios na mesma subrede  $A$ .

Agora note que podemos expandir  $V_{A,B}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) = V_{A,B}(\mathbf{Q}) + \mathcal{O}(\mathbf{p}' + \mathbf{q} - \mathbf{k})$ , onde os termos do Hamiltoniano (4.11) com ordens superiores nos momentos  $\mathcal{O}(\mathbf{p}' + \mathbf{q} - \mathbf{k})$  são irrelevantes por grupo de renormalização no regime que estamos considerando de baixas energias, conforme discutido na seção 3.2. Assim, retemos apenas os termos com  $V_{A,B}(\mathbf{Q})$ , os quais são marginais em *tree level*. Temos

$$V_A(\mathbf{Q}) = -\frac{2 - 3 \sin^2 \theta}{\sqrt{N_s}} \kappa, \quad (4.14)$$

$$V_B(\mathbf{Q}) = \frac{12 \sin^2 \theta \sin(2\phi)}{\sqrt{N_s}} \kappa_{\perp}, \quad (4.15)$$

em que

$$\kappa = \frac{3}{2} \zeta(3) - 2 \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n}}{(m^2 + n^2)^{3/2}} \approx 1.322, \quad (4.16)$$

$$\kappa_{\perp} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} \left(m + \frac{1}{2}\right) \left(n + \frac{1}{2}\right)}{\left[\left(m + \frac{1}{2}\right)^2 + \left(n + \frac{1}{2}\right)^2\right]^{5/2}} \approx 1.312, \quad (4.17)$$

onde  $\zeta(s)$  é a função zeta de Riemann. Os somatórios acima estão relacionados com o somatório da interação dipolar entre todos os possíveis pares de sítios na rede original. Portanto, embora ao realizar a expansão  $V_{A,B}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) = V_{A,B}(\mathbf{Q}) + \mathcal{O}(\mathbf{p}' + \mathbf{q} - \mathbf{k})$  desprezemos os termos de  $H_{J_{\perp}}$  que são irrelevantes, a anisotropia da interação dipolar continua tendo uma contribuição em  $H_{J_{\perp}}$ , a qual pode ser percebida pelos fatores  $\kappa$  e  $\kappa_{\perp}$ . Se tivéssemos considerado uma interação de troca *isotrópica*, teríamos  $V_A(\mathbf{Q}) = V_B(\mathbf{Q}) = 0$ .

Seguindo um caminho semelhante para a interação de Hubbard local da Eq. (4.1) e somando o resultado às contribuições do termo de troca, obtemos

$$\begin{aligned} H_{int} &= H_U + H_{J_{\perp}} \\ &= \frac{4\pi}{m_+ N_s} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} [g_{\parallel} \mathbb{1} + g_{\perp} \sigma^x] c_{\mathbf{p}\uparrow} d_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

onde definimos constantes adimensionais

$$\begin{aligned} g &= \frac{m_+}{8\pi} \left[ U - \kappa J_\perp \left( \frac{3}{2} \sin^2 \theta - 1 \right) \right], \\ g_\perp &= -\frac{3m_+}{4\pi} \kappa_\perp J_\perp \sin^2 \theta \sin(2\phi). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Finalmente, no limite do contínuo o Hamiltoniano interagente possui a forma  $H = H_0 + H_{int}$ , com  $H_0$  dado na Eq. (4.9) e as interações entre a impureza e os férmions dadas por

$$H_{int} = \frac{4\pi}{m_+} \int d^2r \Psi^\dagger(\mathbf{r})(g\mathbf{1} + g_\perp \sigma^x) \Psi(\mathbf{r}) d^\dagger(\mathbf{r}) d(\mathbf{r}). \quad (4.20)$$

As interações estão no regime de acoplamentos fracos  $U, |J_\perp| \ll t$ , que equivale a  $g, g_\perp \ll 1$ . Interpretamos  $g$  na Eq. (4.20) como a amplitude do espalhamento usual de onda  $s$  entre impureza e férmions majoritários, e a interação  $g_\perp$  espalha férmions entre estados das diferentes subredes [pois aparece multiplicado por  $\sigma^x$  na Eq. (4.20)]. Note que  $g_\perp$  depende da anisotropia espacial da interação de troca, e se anula quando o momento dipolar está direcionado ao longo do eixo  $z$  ( $\theta = 0$ ). Além disso, a interação  $g_\perp$  quebra a simetria  $C_4$ . Observe também que não há interações entre férmions majoritários no *bulk* e, embora no modelo na rede a interação dipolar era não local, ao tomar o limite do contínuo e descartar os termos irrelevantes por RG temos que  $g$  e  $g_\perp$  são interações locais na posição da impureza móvel. Então, nosso modelo de uma única impureza nos permite explorar efeitos de quebra local de simetria sem desestabilizar o ponto de QBT.

Na seção 4.2 utilizaremos o Hamiltoniano no limite do contínuo para verificar como as interações  $g$  e  $g_\perp$  fluem em baixas energias. Já na seção 4.3 estudaremos o efeito destas interações na função espectral de um par férmion-impureza.

## 4.2 Análise de grupo de renormalização

A fim de tratar as interações por meio de teoria de perturbação, introduzimos a função de Green da impureza

$$G_d(\mathbf{r}, \tau) = -\langle T_\tau d(\mathbf{r}, \tau) d^\dagger(\mathbf{0}, 0) \rangle, \quad (4.21)$$

em que  $d(\mathbf{r}, \tau) = e^{H\tau} d(\mathbf{r}) e^{-H\tau}$  é o campo da impureza evoluído no tempo imaginário,  $T_\tau$  é o operador de ordenamento temporal relacionado a  $\tau$  e o valor esperado é calculado no estado fundamental com  $N_\downarrow = 0$ . Em ordem zero nas interações, temos a função de Green não interagente em função do momento e frequência

$$G_d^{(0)}(\mathbf{k}, i\nu) = \frac{1}{i\nu - k^2/(2M)}. \quad (4.22)$$

Para os férmions majoritários, definimos a função de Green matricial

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{AA} & \mathcal{G}_{AB} \\ \mathcal{G}_{BA} & \mathcal{G}_{BB} \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned}
\Gamma^{(1)} &= \begin{array}{c} \text{---} \swarrow \text{---} \\ \text{---} \searrow \text{---} \\ \bullet \\ \text{---} \swarrow \text{---} \\ \text{---} \searrow \text{---} \end{array} = g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x \\
\Gamma^{(2)} &= \begin{array}{c} \text{---} \swarrow \text{---} \\ \text{---} \searrow \text{---} \\ \bullet \\ \text{---} \swarrow \text{---} \\ \text{---} \searrow \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \swarrow \text{---} \\ \text{---} \searrow \text{---} \\ \bullet \\ \text{---} \swarrow \text{---} \\ \text{---} \searrow \text{---} \end{array}
\end{aligned}$$

Figura 16 – Vértice efetivo de interação com as pernas externas em *tree level* ( $\Gamma^{(1)}$ ) e no nível de um *loop* ( $\Gamma^{(2)}$ ). Linhas sólidas representam o propagador despido para os férmions majoritários, enquanto linhas tracejadas representam o propagador da impureza. As matrizes no vértice de interação atuam no grau de liberdade das subredes.

com componentes

$$\mathcal{G}_{ll'}(\mathbf{r}, \tau) = -\langle T_{\tau}\psi_l(\mathbf{r}, \tau)\psi_{l'}^{\dagger}(\mathbf{0}, 0)\rangle, \quad (4.24)$$

onde  $l = A, B$  é o índice da subrede. A função de Green não interagente no espaço dos momentos e frequências é

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{ll'}^{(0)}(\mathbf{p}, i\nu) &= \left\{ [i\nu\mathbb{1} - \mathcal{H}_0(\mathbf{Q} + \mathbf{p})]^{-1} \right\}_{ll'} \\
&= \sum_{\lambda=\pm} \frac{U_{l\lambda}(\mathbf{p})U_{l'\lambda}(\mathbf{p})}{i\nu - \lambda p^2/(2m_{\lambda})}.
\end{aligned} \quad (4.25)$$

Aqui  $U_{l\lambda}(\mathbf{p})$ , com  $\lambda = \pm$  sendo o índice da banda, são elementos da matriz  $U(\mathbf{p})$  dada na Eq. (4.6).

Analisamos os efeitos das interações usando grupo de renormalização (RG) de Wilson [69, 90]. Derivamos as equações de RG para as constantes de acoplamento  $g$  e  $g_{\perp}$  no nível de um *loop* e as equações para a massa efetiva  $M$  e o peso de quase partícula da impureza  $Z_d$  no nível de dois *loops* pois, conforme discutimos na seção 3.2, esses são os propagadores que trazem contribuições relevantes para tais parâmetros. O diagrama do tipo *tadpole* [ver Fig. 12(b)] pode contribuir para renormalizar o potencial químico da impureza mas não estamos interessados em estudar essa renormalização aqui. Isso porque estamos trabalhando no *ensemble* canônico fixando o número de impurezas igual a 1, de forma que a renormalização do potencial químico da impureza não tem nenhum efeito físico. As equações de RG para os parâmetros de nosso interesse são encontradas através da integração de estados fermiônicos de altas energias no anel  $\Lambda(1 - d\ell) < p^2/(2m_{+}) < \Lambda$ , onde  $\Lambda$  é um *cutoff* de ultravioleta e  $d\ell \ll 1$  é um parâmetro infinitesimal no passo de RG. Os diagramas que contribuem para a renormalização do vértice de interação são mostrados na Fig. 16 e são dos tipos partícula-partícula e partícula-buraco. Diagramas *zero sound* [ver Fig. 11(d)] não contribuem para o vértice de interação uma vez que no nosso sistema não temos interação entre dois férmions majoritários e há apenas uma impureza. O diagrama

que contribui para as renormalizações de  $M$  e  $Z_d$  é o do tipo *sunrise* e é um propagador de partícula única [ver Fig. 12(d) do capítulo anterior].

As equações de RG que encontramos são

$$\begin{aligned}\frac{dg}{d\ell} &= \frac{(\mu_- - \mu_+) Z_d}{m_+} (g^2 + g_\perp^2), \\ \frac{dg_\perp}{d\ell} &= \frac{2(\mu_- - \mu_+) Z_d}{m_+} g g_\perp, \\ \frac{dZ_d}{d\ell} &= -\frac{2\mu_- \mu_+ Z_d}{m_+^2} \left[ g^2 F_1(r_+, r_-) + g_\perp^2 F_2(r_+, r_-) \right], \\ \frac{dM}{d\ell} &= \frac{2(\mu_- \mu_+)^{3/2}}{m_+^2} \left[ g^2 F_3(r_+, r_-) + g_\perp^2 F_4(r_+, r_-) \right].\end{aligned}\tag{4.26}$$

Detalhes das contas podem ser encontrados no Apêndice A. Na expressão acima  $\mu_\pm = m_\pm M / (M + m_\pm)$  são massas reduzidas e  $r_\pm = m_\pm / M$  são razões das massas. As funções  $F_i(r_+, r_-)$ , com  $i = 1, \dots, 4$ , são escritas em termos de integrais no Apêndice A e retornam valores positivos da ordem de 1. Observe que propriedades de *bulk*, como massas efetivas  $m_+$  e  $m_-$  para os férmions majoritários, não são renormalizadas no problema de uma única impureza. Dessa forma o *bulk* continua sendo um semimetal topológico com toque quadrático de bandas. Na situação com uma densidade finita de impurezas móveis, porém, novas fases quânticas poderão surgir, conforme discutiremos na seção 4.5.

O caso com  $g > 0$  e  $g_\perp = 0$  foi estudado na Ref. [40]. Nesta situação  $g$  pode renormalizar para zero ou pode crescer ao reduzir a energia do sistema, dependendo do sinal de  $\mu_- - \mu_+$  (ou equivalentemente do sinal de  $m_- - m_+$ ). A razão é que os dois diagramas de um *loop* na renormalização do vértice (ver Fig. 16) possuem sinais opostos, sendo o diagrama do tipo partícula-partícula (o da esquerda) proporcional a  $\mu_+$  e o do tipo partícula-buraco (o da direita) proporcional a  $\mu_-$ . Assim, quando  $m_- < m_+$  (ou seja,  $\mu_- < \mu_+$ ) o diagrama do tipo partícula-partícula domina e a interação  $g$  é marginalmente irrelevante. Porém, quando  $m_- > m_+$  (ou seja,  $\mu_- > \mu_+$ ) o diagrama partícula-buraco domina e  $g$  é marginalmente relevante. Neste último caso, o peso de quase partícula  $Z_d$  se anula e a massa efetiva  $M$  diverge no limite de baixas energias. No regime com  $m_- = m_+$  os dois diagramas em um *loop* se cancelam. Foi verificado que este cancelamento se estende a ordens superiores em teoria de perturbação. Neste caso o acoplamento  $g$  é marginal e novamente  $Z_d$  se anula e  $M$  diverge no limite de baixas energias, de forma que a impureza se localiza [40].

Nesta tese estamos interessados no caso com  $g_\perp$  arbitrário e  $m_- < m_+$ , onde o diagrama do tipo partícula-partícula domina a renormalização do vértice. Neste caso o fator  $(\mu_- - \mu_+)$  é negativo e então  $dg/d\ell \leq 0$  [ver Eq. (4.26)]. O diagrama de fluxo de RG para as constantes de acoplamentos  $g$  e  $g_\perp$  é mostrado na Fig. 17 e revela três regiões com comportamentos qualitativamente diferentes. Para  $|g_\perp| < g$  (região azul na Fig. 17), as interações são marginalmente irrelevantes (i.e.  $g, g_\perp \rightarrow 0$  quando  $l \rightarrow \infty$ ) e, uma vez

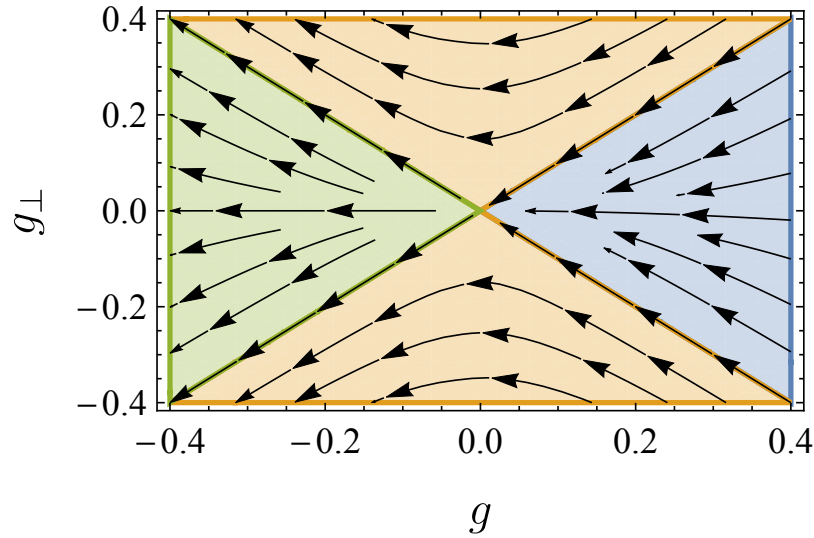


Figura 17 – Fluxo de RG para as constantes de acoplamento no modelo com uma única impureza no regime com  $m_- < m_+$ . Na região de *crossover*  $|g| < |g_\perp|$  (laranja), uma interação inicialmente repulsiva  $g > 0$  pode mudar de sinal e se tornar atrativa.

que  $dZ_d/dl, dM/dl \rightarrow 0$ , temos que o peso de quase partícula  $Z_d$  e a massa efetiva  $M$  permanecem finitos. Como resultado, no limite de baixas energias a impureza desacopla do banho fermiônico e se recupera o comportamento de pólaron de Fermi com correções logarítmicas [40]. Ao se iniciar com uma interação  $g$  atrativa no regime com  $g < -|g_\perp|$  (região verde na Fig. 17), o sistema exibe um fluxo monotônico na direção de acoplamento forte. Neste caso, uma vez que  $g^2$  é sempre finito (e crescente), temos  $dZ_d/dl$  sempre negativo e  $dM/dl$  sempre positivo de forma que no limite de baixas energias  $Z_d \rightarrow 0$  e  $M \rightarrow \infty$ . Por fim, para  $|g| < |g_\perp|$  (região laranja na Fig. 17), observamos um *crossover* de uma interação  $g$  fracamente repulsiva para interação fortemente atrativa  $g < 0$ . Nesta situação, em baixas energias também temos  $Z_d \rightarrow 0$  e  $M \rightarrow \infty$  uma vez que  $g_\perp^2$  é sempre finito. Nossa intenção na próxima seção é analisar o comportamento da impureza nas duas últimas regiões, onde a descrição polarônica deixa de ser válida.

A análise anterior foi feita considerando o caso com  $m_- < m_+$ . Ao considerar o caso oposto,  $m_- > m_+$ , o que muda no diagrama de fluxo da Fig. 17 é a direção das setas. Isso significa que, ao iniciar com  $g < -|g_\perp|$  (região verde na Fig. 17), os acoplamentos renormalizam para zero. Se iniciarmos com acoplamentos na região laranja ou azul, os acoplamentos são marginalmente relevantes, de forma que  $g$  tende a se tornar cada vez mais repulsivo ao reduzir a energia. Uma vez que tais regimes não levam a uma atração efetiva a baixas energias, não devem dar origem a estados ligados entre um férmion e impureza e, portanto, não serão considerados na próxima seção, quando procuraremos estados ligados na função espectral de um par férmion-impureza. Por fim, note que se  $m_- = m_+$  os acoplamentos são marginais em um *loop* e temos  $Z_d \rightarrow 0$  e  $M \rightarrow +\infty$  no limite de baixas energias.

### 4.3 Função espectral de um par férmion-impureza

O fluxo dos acoplamentos efetivos para atração forte sinaliza a formação de estados ligados entre a impureza e um férmion majoritário. Em duas dimensões, ao menos um estado ligado existe no problema de dois corpos para uma interação atrativa arbitrariamente fraca [45–48]. A fim de investigar a presença de estados ligados no nosso problema, composto não por dois corpos, mas por muitos corpos, nesta seção calcularemos a função espectral de um par férmion-impureza.

Primeiro, nós consideramos o operador criação de um par de partículas na rede original

$$P^\dagger(\mathbf{r}_j) = c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger. \quad (4.27)$$

Em seguida, definimos o propagador de duas partículas como uma matriz no espaço das subredes, com componentes

$$\Pi_{ll'}(\mathbf{R}, \tau) = -(-1)^{s_l+s_{l'}} 2 \langle T_\tau P(\mathbf{R} + s_l \boldsymbol{\delta}, \tau) P^\dagger(s_{l'} \boldsymbol{\delta}, 0) \rangle, \quad (4.28)$$

em que  $\mathbf{R}$  é o vetor da posição na subrede  $A$  e  $s_A = 0$ ,  $s_B = 1$ . Em baixas energias, o propagador de duas partículas no limite do contínuo se torna

$$\Pi_{ll'}(\mathbf{r}, \tau) = -\langle T_\tau \psi_l(\mathbf{r}, \tau) d(\mathbf{r}, \tau) d^\dagger(\mathbf{0}, 0) \psi_{l'}^\dagger(\mathbf{0}, 0) \rangle, \quad (4.29)$$

onde o fator  $(-1)^{s_l+s_{l'}} 2$  na Eq. (4.28) se cancela ao projetar  $c_{j\downarrow}$  no campo da impureza na banda de mais baixa energia. Tomando a transformada de Fourier, temos

$$\Pi_{ll'}(\mathbf{q}, i\omega) = \int d^2r d\tau e^{i\omega\tau} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \Pi_{ll'}(\mathbf{r}, \tau). \quad (4.30)$$

Antes de entrarmos no cálculo do propagador de duas partículas  $\Pi(\mathbf{q}, i\omega)$  pela aproximação da série da escada, observe que a função espectral de um par férmion-impureza pode ser calculada a partir dos elementos diagonais do propagador ao tomar a continuação analítica  $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$ ,  $0 < \eta \ll 1$ ,

$$\mathcal{A}_{\text{par}}^l(\mathbf{q}, \omega) = -2\text{Im}\{\Pi_{ll}(\mathbf{q}, \omega + i\eta)\}, \quad l = A, B, \quad (4.31)$$

$$\mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega) = -2\text{Im}\{\text{Tr}[\Pi(\mathbf{q}, \omega + i\eta)]\} = \mathcal{A}_{\text{par}}^A(\mathbf{q}, \omega) + \mathcal{A}_{\text{par}}^B(\mathbf{q}, \omega), \quad (4.32)$$

em que  $\mathcal{A}_{\text{par}}^l(\mathbf{q}, \omega)$  é a componente na subrede  $l$  da função espectral e  $\mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)$  é a função espectral total. Uma função espectral  $\mathcal{A}_{\text{par}}^l(\mathbf{q}, \omega)$  nula (não nula) para um dado valor de  $\mathbf{q}$  e  $\omega$  significa que é impossível (possível) que o par férmion-impureza possua momento total  $\mathbf{q}$  e energia total  $\omega$  na subrede  $l$ . Ao interpretar os resultados de  $\mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)$  no limite do contínuo em termos do modelo original na rede, devemos nos lembrar que energia zero corresponde à impureza no fundo da banda de menor energia e os férmions majoritários no ponto de QBT. Note também que, uma vez que  $\mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)$  é uma função espectral de

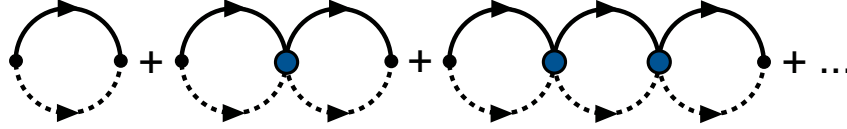


Figura 18 – Diagramas de Feynman considerados na aproximação de escada para o propagador de duas partículas. A convenção para a interação e para os propagadores é a mesma que a utilizada na Fig. 16.

um par de partículas, em vez de uma função espectral convencional de partícula única, não temos a propriedade  $\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega) = 1$ .

Note na Eq. (4.29) que o propagador  $\Pi(\mathbf{r}, \tau)$  cria um férmion majoritário e uma impureza na mesma posição  $\mathbf{r}_0 = 0$  e tempo  $\tau_0 = 0$ , vindo a destruí-los também simultaneamente em  $\mathbf{r}$  e  $\tau$ . Isto implica que um diagrama de Feynman que represente este propagador interagente deve ter as duas linhas externas antes da interação (i.e. à esquerda) partindo do mesmo ponto, enquanto as linhas externas à direita também devem convergir a um único ponto. A série de escada, cujos diagramas de Feynman estão representados na Fig. 18, é a aproximação que utilizaremos para o cálculo do propagador de duas partículas  $\Pi(\mathbf{q}, i\omega)$ . Nesta aproximação são somados todos os propagadores conectados de ordem  $n$  nos acoplamentos,  $n \geq 0$ , com a restrição de que todos os *loops* devem ser do tipo partícula-partícula. Esta série é considerada como a aproximação mínima capaz de descrever estados ligados entre duas partículas e foi utilizada por diferentes autores [5, 43]. No nosso problema esta série deve ser uma boa aproximação no regime com  $m_- < m_+$ , uma vez que neste caso a expansão perturbativa é dominada por diagramas com propagadores do tipo partícula-partícula nos *loops*, conforme vimos na seção 4.2.

Ao escrever a expressão de cada propagador da série de escada, vemos que a expressão para o diagrama em ordem  $n$  nos acoplamentos,  $\Pi_n(\mathbf{q}, i\omega)$ , envolve integrais de produtos de propagadores em graus de liberdade internos  $p_1, p_2, \dots, p_n, p_{n+1}$ , em que  $p_i = (\mathbf{p}_i, i\nu_i)$ . Contudo, é possível simplificar tais expressões e obter

$$\Pi_n(\mathbf{q}, i\omega) = \Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)[(g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x)\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)]^n \quad (4.33)$$

onde cada *loop* nos diagramas da série de escada pode ser escrito em termos do propagador de duas partículas despido

$$\begin{aligned} \Pi_0(\mathbf{q}, i\omega) &= - \int \frac{d^2p d\nu}{(2\pi)^3} \hat{G}^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega + i\nu) G_d^{(0)}(-\mathbf{p}, -i\nu) \\ &= -\frac{\mu_+}{4\pi} \left\{ \text{Log} \left( \frac{W - i\omega}{\Omega(q) - i\omega} \right) \mathbb{1} - \left[ 1 + \frac{Mq^2 - 2iM^2\omega}{\mu_+q^2} \text{Log} \left( \frac{i\omega - \Omega(q)}{i\omega - \frac{q^2}{2M}} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. \times [\cos(2\varphi_q)\sigma^z + \sin(2\varphi_q)\sigma^x] \right\}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

em que  $W$  é um *cutoff* de altas energias e  $\Omega(q) = \frac{q^2}{2(M+m_+)}$  é a borda do contínuo de duas partículas na ausência de interações, que corresponde à energia mínima para um férmion e

uma impureza possuindo momento total  $\mathbf{q}$ . Note que  $\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)$  contém termos de “onda  $d$ ” com dependência não trivial no ângulo  $\varphi_{\mathbf{q}}$ .

A aproximação de escada leva a uma série geométrica de matrizes onde a razão é  $(g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x)\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)$ . Ao considerar que

$$\sum_{n=0}^{\infty} [(g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x)\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)]^n = [\mathbb{1} - (g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x)\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)]^{-1}, \quad (4.35)$$

temos que o propagador dado pela aproximação de escada obtém a forma<sup>1</sup>

$$\Pi(\mathbf{q}, i\omega) = \Pi_0(\mathbf{q}, i\omega) \left\{ \mathbb{1} + [\mathbb{1} - (g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x)\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)]^{-1} (g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x)\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega) \right\}. \quad (4.36)$$

Este propagador pode ser reescrito na forma

$$\Pi(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{1}{\xi(\mathbf{q}, i\omega)} \left\{ \Pi_0(\mathbf{q}, i\omega) + \det[\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)](-g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x) \right\}, \quad (4.37)$$

onde

$$\det[\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)] = \Pi_{0,AA}(\mathbf{q}, i\omega)\Pi_{0,BB}(\mathbf{q}, i\omega) - \Pi_{0,AB}(\mathbf{q}, i\omega)\Pi_{0,BA}(\mathbf{q}, i\omega), \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} \xi(\mathbf{q}, i\omega) &= 1 - g[\Pi_{0,AA}(\mathbf{q}, i\omega) + \Pi_{0,BB}(\mathbf{q}, i\omega)] - g_{\perp}[\Pi_{0,AB}(\mathbf{q}, i\omega) + \Pi_{0,BA}(\mathbf{q}, i\omega)] \\ &\quad + (g^2 - g_{\perp}^2)\det[\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)]. \end{aligned} \quad (4.39)$$

É possível mostrar que o propagador  $\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)$  fica invariante quando as subredes são invertidas e o momento  $\mathbf{q} = (q, \varphi_{\mathbf{q}})$  é espelhado em torno de um ângulo  $\alpha\pi/4$ , onde  $\alpha \in \{-1, +1\}$ . Tal simetria é escrita na forma

$$\Pi_0\left(q, \varphi_{\mathbf{q}} + \alpha\frac{\pi}{4}, i\omega\right) = \sigma^x \Pi_0\left(q, -\varphi_{\mathbf{q}} + \alpha\frac{\pi}{4}, i\omega\right) \sigma^x. \quad (4.40)$$

Usando as Eqs. (4.35)-(4.36) é possível ver que o propagador interagente  $\Pi(\mathbf{q}, i\omega)$  também satisfaz a simetria apresentada na Eq. (4.40) para  $\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)$ , a qual automaticamente se aplica às funções espectrais.

Uma vez que temos uma expressão para o propagador  $\Pi(\mathbf{q}, i\omega)$ , i.e. Eq. (4.37), podemos obter informações sobre a função espectral [ver Eqs. (4.31)-(4.32)]. Os estados ligados entre um férmion e a impureza são caracterizados por polos na função espectral abaixo do contínuo de duas partículas. A fim de encontrar estes polos, tomamos a continuação analítica  $i\omega \rightarrow \omega + i0^+$  na Eq. (4.37) e procuramos pelos zeros de seu denominador  $\xi(\mathbf{q}, \omega + i0^+)$ . É útil notar que  $\Pi_0(\mathbf{q}, \omega + i0^+)$  é real abaixo do contínuo, onde procuramos os

<sup>1</sup> A equação de Bethe-Salpeter [91], que descreve estados ligados entre duas partículas em um sistema quântico de campos, pode ser aplicada ao nosso sistema e escrita na aproximação de escada na forma  $\Pi(\mathbf{q}, i\omega) = \Pi_0(\mathbf{q}, i\omega) [\mathbb{1} + (g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x)\Pi(\mathbf{q}, i\omega)]$ . Resolver esta equação é equivalente a somar a série geométrica ilustrada na Fig. 18. É possível mostrar que esta equação de Bethe-Salpeter é satisfeita pela Eq. (4.36).

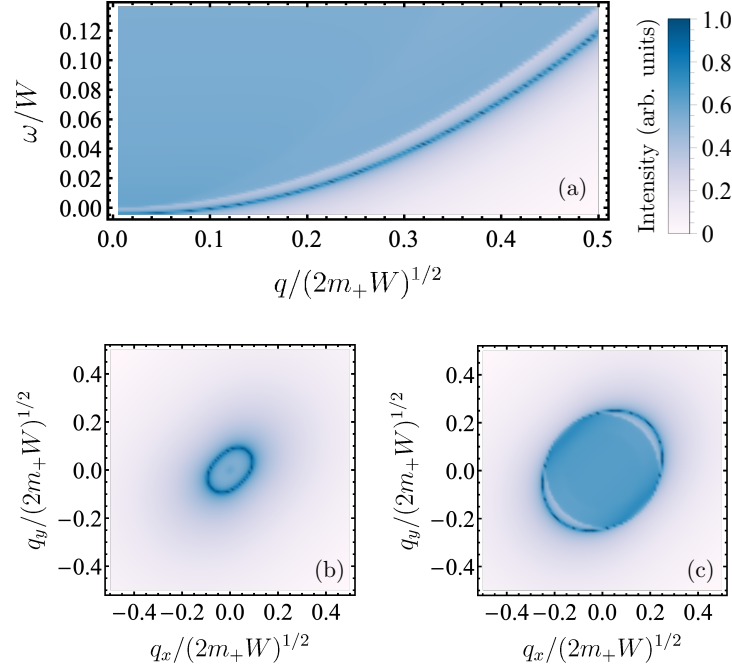


Figura 19 – Função espectral de um par férmion-impureza em escala logarítmica proporcional a  $\ln[1 + \mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)/(\eta m_+)]$  para  $g = 0.1$ ,  $g_{\perp} = -0.5$ , e  $r_+ = 1.2$ , em que  $\eta \sim 10^{-4}$  é um *broadening* utilizado na continuação analítica  $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$ . Neste caso,  $|g| < |g_{\perp}|$  e somente um estado ligado aparece abaixo do contínuo de duas partículas. O painel (a) mostra  $\mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)$  em função de  $q$  e  $\omega$  para um ângulo fixo  $\varphi_q = \pi/4$ . Os painéis (b) e (c) mostram  $\mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)$  em função do momento com energias fixas em  $\omega = 0$  e  $\omega = 0.03W$ , respectivamente.

polos. Ao fazer  $\xi(\mathbf{q}, E_{bs} + i0^+) = 0$ , encontramos relações de dispersão para dois possíveis estados ligados,  $E_{bs}^{\pm}(\mathbf{q})$ , dadas pelas soluções de

$$E_{bs}^{\pm} = \frac{\Omega(q)}{1 - e^{X_{\pm}(\mathbf{q}, E_{bs}^{\pm})}} + \frac{W}{1 - e^{-X_{\pm}(\mathbf{q}, E_{bs}^{\pm})}}, \quad (4.41)$$

onde

$$X_{\pm}(\mathbf{q}, E_{bs}^{\pm}) = \frac{(1+r_+)g}{g^2 - g_{\perp}^2} \pm \frac{1+r_+}{g^2 - g_{\perp}^2} \left\{ \left[ |g_{\perp}| - \frac{(g^2 - g_{\perp}^2)}{1+r_+} C\left(\frac{q^2/(2M)}{-E_{bs}^{\pm}}\right) \right]^2 + \frac{2|g_{\perp}|(g^2 - g_{\perp}^2)}{1+r_+} C\left(\frac{q^2/(2M)}{-E_{bs}^{\pm}}\right) [1 - \text{sgn}(g_{\perp}) \sin(2\varphi_q)] \right\}^{1/2}. \quad (4.42)$$

A função  $C(x)$  que aparece na expressão anterior é dada por

$$C(x) = -1 + \frac{(1+r_+)(1+x)}{r_+x} \ln\left(\frac{1+x}{1+\frac{x}{1+r_+}}\right). \quad (4.43)$$

Em  $q \rightarrow 0$  temos  $C(x) \sim x \rightarrow 0$  e a Eq. (4.42) se simplifica. Neste caso,  $X_{\pm}(\mathbf{q} = 0, E_{bs}^{\pm}) = (1+r_+)/g_{\mp}|g_{\perp}|$  se torna constante. Verificamos que há estados ligados em  $\mathbf{q} = 0$  com energia

$$E_{bs}^{\pm}(\mathbf{q} = 0) = \frac{W}{1 - \exp\left(-\frac{1+r_+}{g_{\mp}|g_{\perp}|}\right)} < 0 \quad (4.44)$$

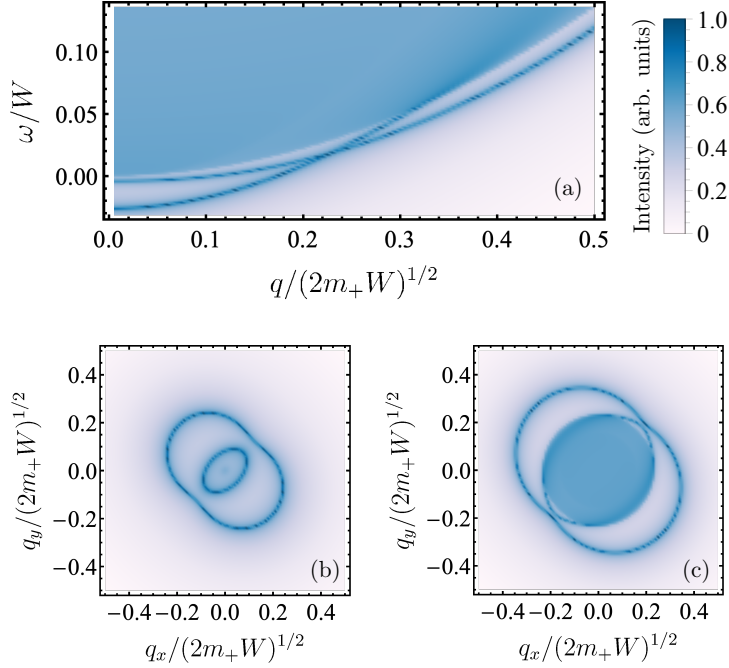


Figura 20 – Função espectral de um par de partículas em escala logarítmica proporcional a  $\ln[1 + \mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)/(\eta m_+)]$ , como feito na Fig. 19, para  $g = -0.5$ ,  $g_{\perp} = 0.1$ , e  $r_+ = 1.2$ . Neste caso,  $g < -|g_{\perp}|$  e há dois estados ligados abaixo do contínuo em  $\mathbf{q} = 0$ . Note que o toque das duas curvas no painel (a) ocorre devido à degenerescência dos estados ligados com momento  $\mathbf{q}_0 \neq 0$  ao longo da direção  $\varphi_{\mathbf{q}_0} = \pi/4$ .

desde que  $g \mp |g_{\perp}| < 0$ . Assim, o critério para o número de estados ligados em  $\mathbf{q} = 0$  leva às mesmas três regiões mostradas na Fig. 17. Para  $g > |g_{\perp}|$  (região azul na Fig. 17), regime em que os acoplamentos são marginalmente irrelevantes, não há nenhum estado ligado. Há um único estado ligado com energia  $E_{bs}^+$  no regime de *crossover*  $|g| < |g_{\perp}|$  (região laranja) e dois estados ligados no regime dominado pela atração  $g < -|g_{\perp}|$  (região verde). Observe que no caso de acoplamentos fracos,  $|g|, |g_{\perp}| \ll 1$ , as energias de ligação  $E_{bs}^{\pm}(0) \approx -W \exp\left(\frac{1+r_+}{g \mp |g_{\perp}|}\right)$  são exponencialmente pequenas, conforme esperado para interações marginais.

Note que no regime com  $g < -|g_{\perp}|$  e  $g_{\perp} = 0$  os dois estados ligados são degenerados em  $\mathbf{q} = 0$ . Por outro lado, quando  $g < -|g_{\perp}|$  e  $g_{\perp} \neq 0$  os dois estados ligados podem estar degenerados em algum momento  $\mathbf{q}_0$  não nulo tal que  $X_+(\mathbf{q}_0, E_{bs}) = X_-(\mathbf{q}_0, E_{bs})$ . Pelas Eqs. (4.41) e (4.42), vemos que a degenerescência ocorre em um ponto ao longo das direções com  $\sin(2\varphi_{\mathbf{q}_0}) = \text{sgn}(g_{\perp})$ , i.e., em ângulos  $\varphi_{\mathbf{q}_0} = \frac{\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}$  quando  $g_{\perp} > 0$  e  $\varphi_{\mathbf{q}_0} = \frac{3\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}$  quando  $g_{\perp} < 0$ . O valor de  $q_0$  é dado pelas condições

$$E_{bs}(q_0) = \frac{\Omega(q_0)}{1 - e^{\frac{(1+r_+)g}{g^2 - g_{\perp}^2}}} + \frac{W}{1 - e^{-\frac{(1+r_+)g}{g^2 - g_{\perp}^2}}}, \quad (4.45)$$

$$C\left(\frac{q_0^2/(2M)}{-E_{bs}(q_0)}\right) = \frac{(1+r_+)|g_{\perp}|}{g^2 - g_{\perp}^2}. \quad (4.46)$$

As Figs. 19 e 20 mostram resultados para a função espectral de duas partículas

obtida pela aproximação de escada. A intensidade das figuras está em escala logarítmica e unidade arbitrária, proporcional a  $\ln[1 + \mathcal{A}_{\text{par}}(\mathbf{q}, \omega)/(\eta m_+)]$ , com um pequeno *broadening*  $\eta \sim 10^{-4}$  utilizado na continuação analítica  $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$ . A Fig. 19, obtida com  $g = 0.1$  e  $g_{\perp} = -0.5$ , representa a região de *crossover* com  $|g| < |g_{\perp}|$ . Apesar da presença de uma interação repulsiva  $g > 0$  neste exemplo, podemos verificar a presença de um estado ligado abaixo do contínuo de duas partículas. Este estado ligado se origina dos efeitos da interação de troca anisotrópica codificada em  $g_{\perp}$ .

Na Fig. 20 mostramos a função espectral para  $g = -0.5$  e  $g_{\perp} = 0.1$ , representando o regime dominado pela atração  $g < -|g_{\perp}|$ , situação essa em que há dois estados ligados em  $\mathbf{q} = 0$ . Os dois estados ligados são degenerados em um valor finito do momento  $q_0$  nas direções  $\varphi_{q_0} = \pi/4, 5\pi/4$ . Note que os estados ligados não chegam a se cruzar, mas apenas ficam degenerados em dois pontos, chamados pontos de *anticrossing*.

A invariância rotacional da borda do contínuo de duas partículas [ver Figs. 19(c) e 20(c)] tem origem no fato de que as dispersões de partícula única da impureza e dos férmions majoritários são isotrópicas. Já a dependência das energias dos estados ligados com o ângulo  $\varphi_{\mathbf{q}}$  é uma consequência da transformação unitária  $U(\mathbf{q})$  da Eq. (4.6), a qual é também responsável pela fase de Berry não trivial no ponto de QBT. Observe que as dispersões dos estados ligados exibem apenas uma simetria de rotação  $C_2$ , que equivale à simetria da interação de troca dipolar anisotrópica no modelo na rede.

Ainda no regime dominado pela atração, considere o caso particular com  $g < 0$  e  $g_{\perp} = 0$ , que se aplica ao modelo de Fermi Hubbard atrativo convencional sem a interação de troca dipolar. Neste caso temos apenas a interação  $g$ , que é invariante por rotação. Mesmo assim os estados ligados podem mostrar assinaturas do caráter de onda  $d$  do ponto de QBT. A Fig. 21, obtida com  $g = -0.5$  e  $g_{\perp} = 0$ , mostra a componente da subrede  $A$  da função espectral de duas partículas, em escala logarítmica proporcional a  $\ln[1 + \mathcal{A}_{\text{par}}^A(\mathbf{q}, \omega)/(\eta m_+)]$ . Pela Fig. 21(a) podemos notar que os dois estados ligados são degenerados em  $\mathbf{q} = 0$ . Porém, ao aumentar  $q$  a degenerescência é levantada e o primeiro estado ligado entra no contínuo de duas partículas. Também é possível notar nas Figs. 21(b) e 21(c) que, na subrede  $A$ , o peso do primeiro (segundo) estado ligado se anula em  $\varphi_{\mathbf{q}} = 0, \pi$  ( $\varphi_{\mathbf{q}} = \pi/2, 3\pi/2$ ). A posição destes pontos em que a função espectral se anula é invertida na subrede  $B$  de forma que, ao somar as componentes  $A$  e  $B$  da função espectral de duas partículas, encontramos uma função espectral total simétrica sob rotações  $C_4$ . Como consequência da Eq. (4.40), temos que as funções espectrais satisfazem as simetrias  $\mathcal{A}_{\text{par}}^A(q, \varphi_{\mathbf{q}} + \alpha\pi/4, \omega) = \mathcal{A}_{\text{par}}^B(q, -\varphi_{\mathbf{q}} + \alpha\pi/4, \omega)$ , onde  $\alpha = \pm 1$ .

Na próxima seção verificamos o problema de uma impureza interagindo com um único férmion perto do ponto de QBT. Tal problema novamente evidencia a presença de zero, um ou dois estados ligados, dependendo dos valores dos acoplamentos. Tal estudo também nos ajuda a compreender a diferença nas simetrias dos dois estados ligados.

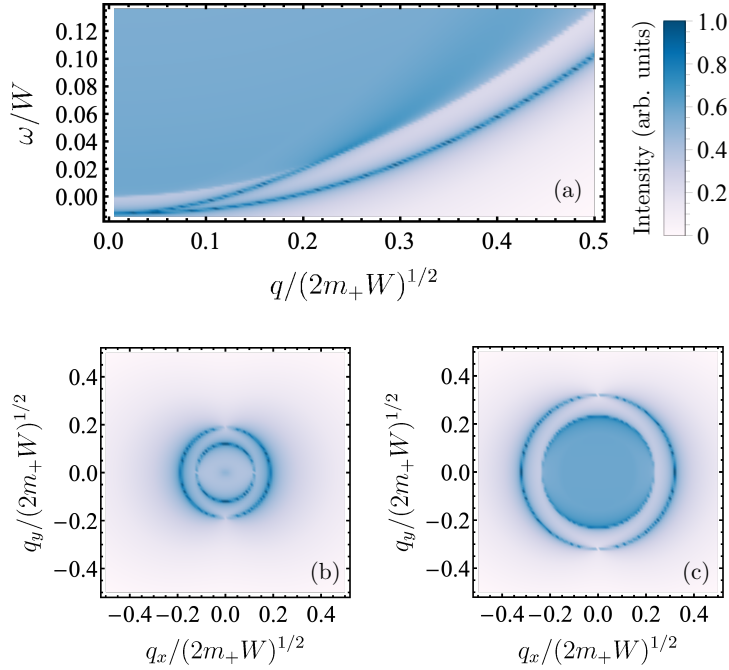


Figura 21 – Componente da subrede  $A$  da função espectral em escala logarítmica proporcional a  $\ln[1 + \mathcal{A}_{\text{par}}^A(\mathbf{q}, \omega)/(\eta m_+)]$  para  $g = -0.5$ ,  $g_{\perp} = 0$ , e  $r_+ = 1.2$ . O painel (a) mostra o resultado em função de  $q$  e  $\omega$  para  $\varphi_q = \pi/4$ . Os dois estados ligados se tornam degenerados em  $q \rightarrow 0$ . Os painéis (b) e (c), feitos com  $\omega = 0$  e  $\omega = 0.02W$ , respectivamente, mostram que o primeiro (segundo) estado ligado possui peso nulo na subrede  $A$  para  $\varphi_q = 0, \pi$  ( $\varphi_q = \pi/2, 3\pi/2$ ). A dependência angular da componente da subrede  $B$  pode ser obtida a partir de uma rotação  $C_4$  dos gráficos (b) e (c).

#### 4.4 Problema de dois corpos

Estudamos nesta seção o problema de dois corpos que consiste de uma impureza de spin para baixo (no fundo da banda de menor energia) interagindo com um único férmion de spin para cima perto do ponto de QBT, sem a restrição de uma banda de menor energia completamente preenchida. Tal estudo nos possibilita a verificação da existência de estados ligados em certas regiões no espaço de parâmetros  $g$  e  $g_{\perp}$ . Além disso, aqui podemos encontrar a função de onda dos estados ligados e, ao observar as simetrias nela presentes, ter uma intuição a respeito das propriedades de simetria nos estados ligados que surgem no problema de muitos corpos. O sistema de dois corpos é descrito pela equação de Schrödinger

$$E\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[ h_0(\mathbf{r}_1) - \frac{\mathbb{1}}{2M} \nabla_{\mathbf{r}_2}^2 \right] \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \frac{4\pi}{m_+} (g\mathbb{1} + g_{\perp}\sigma^x) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (4.47)$$

onde  $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  é a função de onda com  $\mathbf{r}_1$  referente à primeira partícula próxima ao ponto de QBT e  $\mathbf{r}_2$  referente à impureza. Além de depender das coordenadas  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$ , a função de onda possui um *spinor* no espaço das subredes para a primeira partícula. Ao tomar a

transformada de Fourier da equação de Schrödinger, obtemos

$$E\tilde{\Phi}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \left[ h_0(\mathbf{p}_1) + \mathbb{1} \frac{p_2^2}{2M} \right] \tilde{\Phi}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) + \frac{4\pi}{m_+} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (g\mathbb{1} + g_\perp \sigma^x) \tilde{\Phi}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}), \quad (4.48)$$

em que  $\tilde{\Phi}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$  é a transformada de Fourier de  $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ .

Devido à dificuldade em resolver a equação anterior para casos gerais, consideraremos o caso particular em que o momento total do centro de massa do sistema é nulo,  $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = 0$ . Neste caso definimos

$$\Delta(\mathbf{p}) = \left[ \left( E - \frac{p^2}{2M} \right) \mathbb{1} - h_0(\mathbf{p}) \right] \tilde{\Phi}(\mathbf{p}, -\mathbf{p}), \quad (4.49)$$

e, manipulando a Eq. (4.48), obtemos

$$\Delta(\mathbf{p}) = \frac{4\pi}{m_+} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (g\mathbb{1} + g_\perp \sigma^x) \left[ \left( E - \frac{q^2}{2M} \right) \mathbb{1} - h_0(\mathbf{q}) \right]^{-1} \Delta(\mathbf{q}). \quad (4.50)$$

Uma vez que o lado direito da Eq. (4.50) não depende de  $\mathbf{p}$ , temos que  $\Delta(\mathbf{p}) = \Delta_0$  é um *spinor* constante. Portanto, a Eq. (4.50) nos leva a uma equação de autovalor

$$\mathcal{R}\Delta_0 = \Delta_0, \quad (4.51)$$

onde

$$\mathcal{R} = \frac{4\pi}{m_+} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (g\mathbb{1} + g_\perp \sigma^x) \left[ \left( E - \frac{q^2}{2M} \right) \mathbb{1} - h_0(\mathbf{q}) \right]^{-1}. \quad (4.52)$$

A fim de resolver a Eq. (4.52), utilizamos a transformação unitária  $U(\mathbf{q})$  que diagonaliza  $h_0(\mathbf{q})$  e realizamos a integral no disco  $0 < q < (2m_+W)^{1/2}$ , em que  $W$  é um *cutoff* de altas energias. Observamos que se  $m_- < M$  a integral acima diverge e não encontramos soluções de estados ligados para nosso problema. Por outro lado, se  $m_- > M$  há soluções de estados ligados com energia  $E = \mathcal{E}_{bs} < 0$ . Note que esta condição não é satisfeita para o modelo da rede que utilizamos na seção 4.1 (onde consideramos  $m_- = M$ ), porém é possível considerar a impureza feita de outras espécies atômicas com massas diferentes. Neste regime com  $m_- > M$  obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \left( \frac{4\pi}{m_+} \right) \frac{-\pi}{(2\pi)^2} (g\mathbb{1} + g_\perp \sigma^x) m_+ \sum_{\alpha=\pm} \frac{\bar{\mu}_\alpha}{m_+} \ln \left( \frac{E - Wm_+/\bar{\mu}_\alpha}{E} \right) \\ &= -(g\mathbb{1} + g_\perp \sigma^x) \ln \left[ \left( \frac{E - Wm_+/\bar{\mu}_+}{E} \right)^{\bar{\mu}_+/m_+} \left( \frac{E - Wm_+/\bar{\mu}_-}{E} \right)^{\bar{\mu}_-/m_+} \right], \end{aligned} \quad (4.53)$$

onde  $\bar{\mu}_+ = \mu_+$  e  $\bar{\mu}_- = m_-M/(m_- - M)$ . Observe que a definição de  $\bar{\mu}_-$  difere de  $\mu_- = m_-M/(m_- + M)$ .

Note que o *spinor*  $\Delta_0^\pm = 1/\sqrt{2}(1, \pm 1)^t$  é autovetor de  $g\mathbb{1} + g_\perp\sigma^x$  com autovalores  $g \pm g_\perp$  e, portanto, é também solução da equação de autovalor (4.51) com  $\mathcal{R}$  dado pela Eq. (4.53). Para acoplamentos fracos podemos aproximar  $(E - Wm_+/\bar{\mu}_\alpha)/E \simeq (-Wm_+/\bar{\mu}_\alpha)/E$ , onde  $\alpha = \pm$ , e resolver a equação de autovalor para  $E$ , encontrando que as energias dos estados ligados escalam com

$$\mathcal{E}_{bs}^\pm \sim -W \exp \left[ \frac{m_+}{(\bar{\mu}_+ + \bar{\mu}_-)(g \pm g_\perp)} \right]. \quad (4.54)$$

Só há formação de estados ligados se  $g \pm g_\perp < 0$ . Assim, não há nenhum estado ligado se  $g > |g_\perp|$ , existe um único estado ligado se  $|g| < |g_\perp|$  e há dois estados ligados se  $g < -|g_\perp|$ . No último caso, os estados são degenerados se  $g_\perp = 0$ . Este resultado equivale ao critério para número de estados ligados no problema de muitos corpos.

Em seguida, obtemos as funções de onda para  $\mathbf{P} = 0$  ao substituir os autovetores  $\Delta_0^\pm$  da Eq. (4.51) na Eq. (4.49). Nos regimes onde estados ligados existem, temos

$$\tilde{\Phi}_\pm(\mathbf{p}, -\mathbf{p}) = \mathcal{N} \left\{ f_s(p, \mathcal{E}_{bs}^\pm) \mathbb{1} + f_d(p, \mathcal{E}_{bs}^\pm) [\cos(2\varphi_p)\sigma^z + \sin(2\varphi_p)\sigma^x] \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad (4.55)$$

onde  $\mathcal{N}$  é um fator de normalização. As funções

$$\begin{aligned} f_s(p, \mathcal{E}) &= \left( \frac{p^2}{2\bar{\mu}_+} - \mathcal{E} \right)^{-1} + \left( \frac{p^2}{2\bar{\mu}_-} - \mathcal{E} \right)^{-1}, \\ f_d(p, \mathcal{E}) &= \left( \frac{p^2}{2\bar{\mu}_+} - \mathcal{E} \right)^{-1} - \left( \frac{p^2}{2\bar{\mu}_-} - \mathcal{E} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

representam as amplitudes das componentes de onda  $s$  e onda  $d$  da função de onda do estado ligado, respectivamente.

É importante manter em mente que consideramos aqui um momento total do par de partículas  $\mathbf{P} = 0$  e a função de onda  $\tilde{\Phi}_\pm(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$  está escrita em termos do momento da coordenada relativa das mesmas. Em contraste, a função de Green e a função espectral do par férmion-impureza, que calculamos na seção anterior, são escritas em termos do momento total do par, e não nos dão informações diretas sobre o momento da coordenada relativa. Curiosamente podemos verificar semelhanças nas propriedades apresentadas nos dois casos. O propagador não interagente  $\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)$  da Eq. (4.34) possui um termo de onda  $s$  proporcional à matriz  $\mathbb{1}$  e um termo de onda  $d$  proporcional a  $[\cos(2\varphi_p)\sigma^z + \sin(2\varphi_p)\sigma^x]$ , os quais consequentemente estão presentes no propagador interagente  $\Pi(\mathbf{q}, i\omega)$  da Eq. (4.37). Tais termos também estão presentes na expressão da função de onda  $\tilde{\Phi}_\pm(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$ , Eq. (4.55). Isto indica que os estados ligados possuem superposição de simetrias de onda  $s$  e onda  $d$  tanto no momento total do par quanto no momento relativo.

A Eq. (4.55) nos permite extrair mais informações sobre os estados ligados. É possível ver que a parte de onda  $s$  do estado ligado  $\tilde{\Phi}_+$  possui o mesmo valor nas duas

componentes de seu *spinor* (i.e. nas duas subredes). Por outro lado, a parte de onda  $s$  de  $\tilde{\Phi}_-$  adquire um fator  $-1$  ao comparar uma subrede com a outra. Observe que  $f_d(p, \mathcal{E})$  se anula quando  $p \rightarrow 0$ . Quando  $p \neq 0$ , podemos escrever  $\tilde{\Phi}_\pm(\mathbf{p}, -\mathbf{p}) = \chi_\pm(p, \varphi_p)$ , com as propriedades de simetria em torno dos ângulos  $\varphi_p = -\pi/4, +\pi/4$ ,

$$\begin{aligned}\chi_\pm\left(p, \varphi_p + \frac{\pi}{4}\right) &= \pm\sigma^x \chi_\pm\left(p, -\varphi_p + \frac{\pi}{4}\right), \\ \chi_\pm\left(p, \varphi_p - \frac{\pi}{4}\right) &= \pm\sigma^x \chi_\pm\left(p, -\varphi_p - \frac{\pi}{4}\right).\end{aligned}\quad (4.57)$$

Tais expressões mostram que a função de onda do estado ligado  $\chi_+(p, \varphi_p)$  é invariante ao ser espelhada em torno do ângulo  $+\pi/4$  (ou  $-\pi/4$ ) e ao inverter as subredes (i.e. multiplicar por  $\sigma^x$ ). Por outro lado, ao realizar as mesmas operações sobre a função de onda  $\chi_-(p, \varphi_p)$ , a mesma adquire um fator  $-1$ . É interessante notar que algo semelhante ocorre com a função de Green e a função espectral da seção anterior, as quais são invariantes ao serem espelhadas em torno do ângulo  $+\pi/4$  (ou  $-\pi/4$ ) e ao inverter as subredes<sup>2</sup> [ver Eq. (4.40) e painéis (b)-(c) das Figs. 19-21].

Se  $g_\perp = 0$ , os estados ligados são degenerados,  $\mathcal{E}_{bs}^+ = \mathcal{E}_{bs}^-$ , e temos

$$i\sigma^y \chi_\pm\left(p, \varphi_p + \frac{\pi}{2}\right) = \pm\chi_\mp(p, \varphi_p). \quad (4.58)$$

Neste caso é possível tomar combinações lineares de  $\chi_+(p, \varphi_p)$  e  $\chi_-(p, \varphi_p)$  para construir autoestados da rotação  $C_4$ . Ambas as componentes de onda  $s$  e onda  $d$  na Eq. (4.56) possuem uma dependência Lorentziana em  $p$ . Isto implica na existência de um decaimento exponencial em função da distância relativa  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  no espaço real, com escalas de distância  $\sim (\bar{\mu}_\pm |\mathcal{E}_{bs}|)^{-1/2}$ .

Lembre-se de que a discussão anterior sobre a existência dos estados ligados é válida no regime com  $m_- > M$ . Se tomarmos o limite em que a diferença entre essas duas massas tende a zero, teremos  $\bar{\mu}_- \rightarrow +\infty$ . Consequentemente, a energia dos estados ligados, dada pela Eq. (4.54), deixará de ter uma dependência exponencial com os acoplamentos. Uma expressão para  $\mathcal{E}_{bs}$  nesse caso com  $m_- = M$  pode ser encontrada ao considerar  $1/\bar{\mu}_- = 0$  na Eq. (4.52). Resolvendo a integral da Eq. (4.52) neste regime temos

$$\begin{aligned}\mathcal{R} &= \left(\frac{4\pi}{m_+}\right) \frac{-\pi}{(2\pi)^2} (g\mathbb{1} + g_\perp \sigma^x) m_+ \left[ \frac{\bar{\mu}_+}{m_+} \ln\left(\frac{E - W m_+ / \bar{\mu}_+}{E}\right) - \frac{W}{E} \right] \\ &\simeq (g\mathbb{1} + g_\perp \sigma^x) \frac{W}{E}.\end{aligned}\quad (4.59)$$

Usando novamente o *spinor*  $\Delta_0^\pm = 1/\sqrt{2}(1, \pm 1)^t$  como autovetor de  $\mathcal{R}$ , temos que

$$\mathcal{E}_{bs}^\pm \simeq (g \pm g_\perp)W. \quad (4.60)$$

<sup>2</sup> De fato, só derivamos a Eq. (4.40) depois que percebemos a simetria da função de onda apresentada na Eq. (4.57). Isto ilustra a importância do estudo do problema de dois corpos na compreensão das simetrias dos estados ligados discutidos na seção 4.3.

Assim, vemos que no caso particular em que  $m_- = M$  a energia dos estados ligados varia linearmente com os acoplamentos no problema de dois corpos, diferentemente do resultado encontrado na seção 4.3 para o problema de muitos corpos, onde a banda de menor energia é completamente preenchida pelos férmions de spin para cima. Todas essas análises, porém, levam ao mesmo critério para o número de estados ligados: nenhum estado ligado quando  $g > |g_\perp|$ , um estado ligado quando  $|g| < |g_\perp|$  e dois estados ligados quando  $g < -|g_\perp|$ .

Uma vez que temos evidência de formação de estados ligados no problema de dois corpos e as simetrias das funções de onda desses estados ajudaram a compreender as simetrias no problema de uma impureza com muitos corpos, podemos nos perguntar o que acontece quando temos, no sistema com QBT, a banda de baixo completamente preenchida de férmions majoritários e uma densidade pequena, porém finita de impurezas. Iniciamos uma abordagem deste problema na seção que segue.

## 4.5 Concentração finita de impurezas móveis

Nas seções anteriores consideramos férmions com spin para cima interagindo com apenas uma impureza com spin para baixo. Na presente seção consideramos a situação mais geral de uma densidade pequena, porém finita, de impurezas móveis. Tais impurezas são caracterizadas aqui por um potencial químico  $\mu$ , onde  $\mu = 0$  equivale à situação onde o nível de Fermi das mesmas está no fundo da banda de menor energia e, conseqüentemente, corresponde ao caso com apenas uma impureza. Também generalizaremos nosso Hamiltoniano, incluindo termos de repulsão entre primeiros vizinhos, além dos termos  $H_U$  e  $H_{J_\perp}$  já considerados no Hamiltoniano (4.1). Assim, temos

$$\begin{aligned}
H = & - \sum_{ij} t_{ij} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{J_\perp}{4} \sum_{i \neq j} V_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \\
& + V_U \sum_{\langle ij \rangle} (n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} + n_{i\downarrow} n_{j\uparrow}) + V_U \sum_{\langle ij \rangle} n_{i\uparrow} n_{j\uparrow} + V_U \sum_{\langle ij \rangle} n_{i\downarrow} n_{j\downarrow},
\end{aligned} \tag{4.61}$$

onde os três últimos termos representam: repulsão entre um férmion majoritário e uma impureza, repulsão entre dois férmions majoritários e repulsão entre duas impurezas, respectivamente, em sítios primeiros vizinhos. O objetivo da inclusão dos termos de repulsão entre primeiros vizinhos é verificar se eles são capazes de levar o sistema a novas fases quânticas.

No limite do contínuo, no qual consideramos que apenas a banda de menor energia é acessível para as impurezas, as interações acima levam à seguinte interação marginal em

*tree level*,

$$H_{int} = \frac{4\pi}{m_+} \int d^2r \left[ \Psi^\dagger(\mathbf{r})(g\mathbf{1} + g_\perp \sigma^x) \Psi(\mathbf{r}) d^\dagger(\mathbf{r}) d(\mathbf{r}) + g_\uparrow c_A^\dagger(\mathbf{r}) c_A(\mathbf{r}) c_B^\dagger(\mathbf{r}) c_B(\mathbf{r}) \right], \quad (4.62)$$

onde os acoplamentos adimensionais são dados por

$$\begin{aligned} g &= \frac{m_+}{8\pi} \left[ U + 4V_U - \kappa J_\perp \left( \frac{3}{2} \sin^2 \theta - 1 \right) \right], \\ g_\perp &= -\frac{3m_+}{4\pi} \kappa_\perp J_\perp \sin^2 \theta \sin(2\phi), \\ g_\uparrow &= \frac{m_+ V_U}{\pi}, \end{aligned} \quad (4.63)$$

em que  $\kappa$  e  $\kappa_\perp$  são calculados pela Eq. (4.16) e  $\theta$  e  $\phi$  são ângulos polares do vetor de quantização, i.e. do momento dipolar das moléculas. Ao tomar o limite do contínuo outros termos surgem além daqueles mostrados na Eq. (4.62), os quais são omitidos por serem de ordens superiores nos momentos e, conseqüentemente, serem irrelevantes em *tree level* (conforme discutido na seção 3.2). Observe que o termo de interação entre férmions majoritários em ordem zero nos momentos ( $g_\uparrow$ ) é não nulo porque duas dessas partículas podem interagir uma com a outra estando na mesma posição  $\mathbf{r}$  e em diferentes subredes. As impurezas, por sua vez, só podem ocupar a banda de menor energia. Assim, não podemos ter duas impurezas na mesma posição  $\mathbf{r}$  em diferentes subredes. Por esse motivo a interação entre elas em ordem zero nos momentos é nula.

Estamos interessados em estudar a física de baixas energias deste sistema com várias impurezas e, portanto, usaremos grupo de renormalização, assim como feito anteriormente para o problema de uma única impureza. Porém o problema da atual seção é mais complexo e precisa ser estudado em duas etapas. Primeiro, é necessário eliminar os modos fermiônicos com momentos relacionados a altas energias, longe da superfície de Fermi das impurezas,  $\mu \ll K^2/2M$ . Essa eliminação de modos em cascas esféricas de espessura infinitesimal leva a um conjunto de equações de RG nesse regime de altas energias ( $\mu \ll K^2/2M$ ), mostrado adiante. Em seguida, é necessário eliminar os modos fermiônicos perto da superfície de Fermi das impurezas, que fornecem equações de RG para energias mais baixas. Ao escolher valores para os acoplamentos despidos e integrar o primeiro conjunto de equações, temos acoplamentos renormalizados até uma escala de energia maior do que  $\mu$ . Ao integrar o segundo conjunto de equações considerando o resultado da integração do primeiro conjunto, temos acoplamentos renormalizados em energias tão pequenas quanto se queira.

Calculamos as contribuições para os acoplamentos  $g$ ,  $g_\perp$  e  $g_\uparrow$  vindas dos diagramas de Feynman (Fig. 41 do Apêndice A) que ilustram todos os processos possíveis em um *loop* para a correção do vértice efetivo no regime de altas energias ( $\mu \ll K^2/2M$ ). Assim,

encontramos as equações de RG para altas energias,

$$\begin{aligned}\frac{dg}{dl} &= \frac{(g^2 + g_{\perp}^2)}{m_+} \left( \frac{\mu_-}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_-}{K^2} \right)} - \frac{\mu_+}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_+}{K^2} \right)} \right), \\ \frac{dg_{\perp}}{dl} &= \frac{2g g_{\perp}}{m_+} \left( \frac{\mu_-}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_-}{K^2} \right)} - \frac{\mu_+}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_+}{K^2} \right)} \right) + \frac{2\mu_0 g_{\perp} g_{\uparrow}}{m_+}, \\ \frac{dg_{\uparrow}}{dl} &= \frac{2\mu_0 g_{\uparrow}^2}{m_+},\end{aligned}\tag{4.64}$$

onde usamos as massas reduzidas

$$\begin{aligned}\mu_{\alpha}^{-1} &= \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m_{\alpha}} \right), \quad \alpha = +, -, \\ \mu_0^{-1} &= \left( \frac{1}{m_+} + \frac{1}{m_-} \right).\end{aligned}\tag{4.65}$$

Maiores detalhes sobre a obtenção das equações de RG (4.64) podem ser encontrados no Apêndice A.

Conforme vemos pelas equações de RG, o acoplamento entre férmions majoritários  $g_{\uparrow}$  é relevante se  $g_{\uparrow} > 0$ . Isto está de acordo com o que foi encontrado por Kai Sun *et al.* [70]. Tal situação de repulsão efetivamente forte entre os férmions majoritários leva a uma abertura do gap energético de tais partículas, destruindo o ponto de QBT e levando a outras fases quânticas [70]. Note, portanto, que a inclusão de repulsão entre primeiros vizinhos no Hamiltoniano (4.61) não é capaz de simultaneamente preservar o ponto de QBT e levar o sistema a ter um comportamento diferente. Uma vez que a situação com  $g_{\uparrow} > 0$  destrói o ponto de QBT e isso não é do nosso interesse, consideraremos  $g_{\uparrow} = 0$ . Neste caso, as equações de RG para os acoplamentos se reduzem a

$$\begin{aligned}\frac{dg}{dl} &= \frac{(g^2 + g_{\perp}^2)}{m_+} \left( \frac{\mu_-}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_-}{K^2} \right)} - \frac{\mu_+}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_+}{K^2} \right)} \right), \\ \frac{dg_{\perp}}{dl} &= \frac{2g g_{\perp}}{m_+} \left( \frac{\mu_-}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_-}{K^2} \right)} - \frac{\mu_+}{1 - \mu \left( \frac{2\mu_+}{K^2} \right)} \right).\end{aligned}\tag{4.66}$$

Note nas equações (4.66) que se tomarmos  $\mu \rightarrow 0$  e considerarmos a renormalização do peso de quase partícula da impureza  $Z_d$  recuperamos as equações de RG para os acoplamentos no problema de apenas uma impureza, Eq. (4.26).

Na situação que estamos considerando aqui de energias mais altas ( $\mu \ll K^2/2\mu_{\pm}$ ) e muitas impurezas ( $\mu > 0$ ), as equações de RG acima levam ao mesmo comportamento qualitativo das equações do problema de uma única impureza. Assim, se tivermos  $m_- < m_+$

o diagrama de fluxo dos acoplamentos é dado pela Fig. 17. Neste caso temos novamente os três regimes: se  $g > |g_{\perp}|$  os acoplamentos são marginalmente irrelevantes,  $g < |g_{\perp}|$  mostra uma região de *crossover* onde é possível ter uma interação despida repulsiva que tende a se tornar atrativa e se  $g < -|g_{\perp}|$  a atração tende a se tornar mais forte.

Devido à complexidade dos cálculos quando se considera  $\mu > 0$ , não realizamos o cálculo dos diagramas de Feynman do tipo *sunrise* a fim de calcular as equações de RG para os pesos de quase partícula e as massas efetivas das duas espécies fermiônicas. Uma vez que estamos interessados na situação com uma baixa densidade de impurezas  $\mu \ll |t|$ , esperamos que as massas efetivas e os pesos de quase partícula não devem diferir muito da situação apresentada quando  $\mu = 0$ , desde que estejamos no regime de mais altas energias  $\mu \ll K^2/2\mu_{\pm}$ . Isto é, os pesos de quase partícula dos férmions majoritários e suas massas efetivas devem ser fracamente afetados, enquanto os pesos de quase partícula das impurezas tendem a se anular e suas massas efetivas tendem a aumentar quando os acoplamentos são marginalmente relevantes. Até o presente momento ainda não realizamos cálculos para verificar as equações de RG no regime de mais baixas energias. Isto poderá ser feito em um futuro breve.

Os dados apresentados na presente seção nos dão informações preliminares de que, em certos regimes, a interação  $g$  entre férmions majoritários e impurezas pode se tornar efetivamente atrativa. Isso pode ser indício de que, em certos regimes de energia, impurezas e férmions majoritários formam pares e levam o sistema a uma instabilidade supercondutora. Atualmente estamos investigando por meio de teoria de campo médio se este sistema possui fases supercondutoras de onda  $s$  e onda  $d$ .

## 4.6 Discussão

A seguir fazemos uma breve discussão sobre os resultados que apresentamos na primeira parte desta tese, onde investigamos uma impureza fermiônica móvel (de spin para baixo) em um sistema fermiônico 2D (de spin para cima) com toque quadrático de bandas. Consideramos uma interação de troca de spin anisotrópica de longo alcance, além de uma repulsão local da impureza com os férmions majoritários.

Uma vez que nosso interesse é estudar a física de baixas energias deste sistema, tomamos o limite do contínuo no nosso modelo e fizemos uma análise de grupo de renormalização. Verificamos que o comportamento deste sistema depende da assimetria das massas efetivas  $m_+$  e  $m_-$ . Quando  $m_+ > m_-$  verificamos que há três regimes, os quais dependem da relação entre a interação local e a interação de troca de spin. Em um dos regimes as interações são irrelevantes e o pólaron deve ser estável. Em outros dois regimes as interações são relevantes e levam a uma atração local efetiva finita entre impureza e férmions majoritários. Tal atração local efetiva em baixas energias sugere a formação

de estados ligados entre impureza e um férmion do banho. Utilizando a aproximação diagramática da “série de escada” calculamos a função espectral associada à função de Green de um par férmion-impureza. Tal função espectral evidenciou a formação de estados ligados em alguns regimes. No regime em que as interações são irrelevantes não há estados ligados. Em um dos regimes efetivamente atrativos há formação de um estado ligado. No outro regime efetivamente atrativo há formação de dois estados ligados. A função de Green do par férmion-impureza possui características de onda  $s$  e onda  $d$ .

Verificamos ainda que no caso de uma interação local atrativa (de onda  $s$ ) e na ausência da interação de troca anisotrópica (a qual quebra simetrias localmente), as dispersões dos estados ligados possuem uma assinatura do caráter de onda  $d$  do ponto de QBT, o qual é responsável também pelo fluxo de Berry não trivial igual a  $2\pi$  neste sistema. A fim de ter uma intuição melhor a respeito das propriedades de simetria dos estados ligados, estudamos o problema de uma impureza (com spin para baixo) interagindo com um único férmion (com spin para cima) perto do ponto de QBT, sem a restrição de que a banda de baixo esteja completamente preenchida de férmions com spin para cima. Resolvendo a equação de Schrödinger de duas partículas, novamente encontramos a formação de zero, um ou dois estados ligados, correspondentes aos três regimes encontrados anteriormente. Isso confirma os resultados que obtivemos com grupo de renormalização e cálculo da função espectral, nos quais utilizamos aproximações diagramáticas. As funções de onda destes estados também possuem características de ondas  $s$  e  $d$ .

Atualmente estamos pesquisando uma generalização deste sistema de uma impureza com interação local e interação de troca de spin com um mar de Fermi através da inclusão de uma densidade pequena, porém finita, de impurezas móveis. Resultados preliminares de uma análise de grupo de renormalização para energias altas indicam a presença dos mesmos três regimes descritos acima quando  $m_+ > m_-$ , de forma que pode existir uma atração efetiva entre as impurezas e os férmions majoritários em dois dos regimes. Estamos utilizando teoria de campo médio para mapear o diagrama de fases deste sistema em parceria com Edgar Marcelino. A expectativa é que deve haver regimes com formação de supercondutividade não convencional com características semelhantes ao que foi apresentado no problema de uma única impureza (singlete de onda  $d$  e/ou de onda  $s$ ), onde cada par de Cooper seria formado por uma impureza (férmion de spin para baixo) e um férmion majoritário (de spin para cima).

No capítulo 8 apresentamos conclusões e perspectivas futuras sobre a pesquisa que discutimos na parte I desta tese, bem como apresentamos conclusões da parte II, a qual começamos a discutir a seguir.

## Parte II

Supercondutividade *odd-frequency* em um  
supercondutor magnético diluído



## 5 Revisão da literatura

Nesta parte da tese falamos sobre um supercondutor magnético diluído (DMS, do inglês *dilute magnetic superconductor*), que é um supercondutor convencional singleto de onda  $s$  contendo impurezas magnéticas diluídas. Iniciamos a pesquisa neste assunto durante um intercâmbio de dez meses que realizei na França sob supervisão de Marcello Civelli e colaboração de Pascal Simon e Marcelo Rozenberg, professores da Université Paris-Saclay. Nesta pesquisa demos continuidade a um trabalho iniciado por François Jamet, o qual também foi orientado pelos mesmos professores. François Jamet utilizou a *dynamical mean-field theory* (DMFT) para estudar um sistema de impurezas magnéticas clássicas imersas num supercondutor convencional, considerando o caso particular em que os spins das impurezas magnéticas estavam distribuídos em várias direções. Nesse trabalho François Jamet observou o comportamento das bandas de Shiba dentro do gap supercondutor e o comportamento do pareamento supercondutor à medida em que se variavam parâmetros do sistema. Seus resultados foram disponibilizados em um relatório de mestrado [92].

No início da presente pesquisa sobre um sistema DMS, também realizada utilizando a DMFT, reproduzimos alguns resultados de François Jamet. Em seguida, focamos a pesquisa no caso particular em que os spins das impurezas magnéticas estão todos alinhados na mesma direção e sentido. Como consequência observamos o aparecimento da chamada supercondutividade do tipo *odd-frequency* espalhada por todo o sistema, i.e. presente em sítios magnéticos e não magnéticos. Nossos resultados numéricos do problema de uma concentração finita de impurezas magnéticas em um supercondutor nos ajudaram a prever que o pareamento *odd-frequency* também deveria estar presente no problema de uma única impureza magnética em um supercondutor convencional. Tal problema de uma única impureza magnética foi estudado analiticamente e dados experimentais foram analisados, confirmando a presença de pareamento *odd-frequency*. Publicamos este estudo na Ref. [93]<sup>1</sup>. Os resultados analíticos do problema de uma única impureza, por sua vez, auxiliaram na obtenção de expressões analíticas para o problema de uma concentração finita de impurezas. Nossos resultados numéricos e analíticos para tal problema foram publicados na Ref. [94]<sup>2</sup>. Assim, na segunda parte desta tese focamos na discussão sobre a supercondutividade do tipo *odd-frequency* em um supercondutor magnético diluído.

---

<sup>1</sup> Vivien Perrin, Flávio L. N. Santos, Gerbold C. Ménard, Christophe Brun, Tristan Cren, Marcello Civelli e Pascal Simon: *Unveiling Odd-Frequency Pairing around a Magnetic Impurity in a Superconductor*. Phys. Rev. Lett. **125**, 117003 (2020).

<sup>2</sup> Flávio L. N. Santos, Vivien Perrin, François Jamet, Marcello Civelli, Pascal Simon, Maria C. O. Aguiar, Eduardo Miranda e Marcelo J. Rozenberg: *Odd-frequency superconductivity in dilute magnetic superconductors*. Phys. Rev. Research **2**, 033229 (2020).

A fim de estudar uma impureza magnética em metais ou supercondutores é possível considerar o modelo de uma impureza de Anderson. O Hamiltoniano deste modelo, quando considerada uma situação de ocupação simples, pode ser reescrito em uma interação magnética do tipo Kondo,

$$J \sum_{\theta, \alpha, \beta} S^\theta c_{0\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^\theta c_{0\beta}, \quad (5.1)$$

em que  $\sigma^\theta$  são matrizes de Pauli,  $\theta = x, y, z$ , e o operador  $c_{0\alpha}^\dagger$  cria um elétron com spin  $\alpha = \uparrow, \downarrow$  no sítio 0, o qual contém uma impureza magnética com spin quântico  $\mathbf{S}$  [95]. Neste caso, é possível utilizar grupo de renormalização (RG) e verificar que o acoplamento magnético efetivo  $J_{eff}$  depende da escala de energia/temperatura do sistema. No caso de um metal ou supercondutor contendo impurezas magnéticas com acoplamento ferromagnético, o módulo do acoplamento efetivo tende a diminuir à medida em que se reduz a energia do sistema. O resultado é que em baixas energias a interação magnética é fraca. Por outro lado, no caso de uma interação antiferromagnética, o módulo do acoplamento efetivo tende a crescer ao reduzir a energia do sistema [95, 96].

No caso dos metais, nos quais não existe gap energético no nível de Fermi, o fluxo do grupo de renormalização poderia, a princípio, seguir renormalizando o acoplamento  $J_{eff}$  para energias tão baixas quanto se queira. O resultado disto é que uma impureza com interação antiferromagnética possui uma temperatura Kondo  $T_K$  na qual a interação efetiva é muito grande. Abaixo de  $T_K$  a interação  $J_{eff}$  faz com que um elétron de condução se ligue à impureza, formando um estado singlete com esta. Ocorre, nesta situação, uma blindagem do spin da impureza. Muito acima de  $T_K$  a interação efetiva não é tão grande. Como consequência, nenhum elétron fica fortemente ligado à impureza e a blindagem de seu spin não ocorre [95].

Quando impurezas magnéticas quânticas estão em contato com supercondutores, fenômenos parecidos podem ocorrer. Note, porém, que o fluxo do grupo de renormalização pode ter um comportamento diferente para energias menores que o gap supercondutor, onde a densidade de estados é diferente (em particular ela se anula num supercondutor convencional de onda  $s$ ). Isto pode fazer, por exemplo, com que a redução do módulo de  $J_{eff}$  ferromagnético seja interrompida, de forma que no limite de energias baixas  $J_{eff}$  seja finito. No caso antiferromagnético com  $T_K > \Delta$ ,  $J_{eff}$  deve ser grande em baixas energias e um elétron supercondutor se liga à impureza, causando uma blindagem nesta. Contudo, se  $T_K < \Delta$ , o acoplamento antiferromagnético  $J_{eff}$  pode não ser tão grande em baixas temperaturas, de forma que o spin da impureza não seja blindado [96].

A fim de simplificar o estudo de uma impureza magnética em um supercondutor, é possível considerar a aproximação em que o spin  $\mathbf{S}$  da impureza magnética é clássico. Esta aproximação é válida se o spin é grande  $S \gg 1$  ou se a temperatura Kondo é baixa e os experimentos são feitos em  $T \gg T_K$ . Tal modelo de uma impureza magnética clássica



Figura 22 – Dois estados são mostrados esquematicamente para um supercondutor convencional com uma impureza magnética clássica.  $|\psi_0\rangle$  é uma função de onda que possui apenas partículas pareadas e um spin não blindado  $S$ .  $|\psi_1\rangle$  é uma função de onda que descreve a formação de um estado ligado entre um elétron e o spin da impureza. Neste estado o número quântico de spin eletrônico difere de  $|\psi_0\rangle$  por um spin não pareado. Em algum valor do acoplamento  $J_{crit}$  há um cruzamento dos níveis de energia correspondentes a estes dois estados com diferentes simetrias. Aqui ocorre uma transição de fase quântica de primeira ordem. Figura adaptada da Ref. [96].

em um supercondutor convencional possui uma transição de fase quântica em  $T = 0$ . Se o módulo do acoplamento  $J$  estiver abaixo de um valor crítico  $|J| < J_{crit}$ , a função de onda do estado fundamental do sistema possui apenas elétrons pareados e o spin  $S$  da impureza não é blindado. Quando  $|J| > J_{crit}$ , o estado fundamental possui um elétron não pareado, o qual está ligado à impureza magnética (ver Fig. 22) [96].

É sabido que uma única impureza magnética interagindo com os elétrons em um supercondutor convencional pode dar origem a estados ligados no sítio magnético conhecidos como estados de Yu-Shiba-Rusinov (YSR) [22, 28, 29]. Estes estados aparecem como intensas ressonâncias dentro do gap supercondutor na densidade de estados e podem ser revelados experimentalmente através de medições de espectroscopia de tunelamento por varredura (STS). Na Fig. 23 mostramos medições da condutância diferencial<sup>3</sup> por meio de STS realizadas em um material supercondutor com uma impureza magnética<sup>4</sup>. Através dos pontos pretos, que mostram a medição longe da impureza magnética, podemos ver claramente o gap supercondutor do material no gráfico da condutância. Pelos pontos azuis, obtidos exatamente em cima do sítio magnético, vemos a presença de dois estados de YSR dentro do gap supercondutor.

Estados ligados parecidos com os estados de YSR também ocorrem no gap de semicondutores com uma impureza magnética. Ao colocar uma concentração finita de

<sup>3</sup> O espectro de condutância diferencial  $dI/dV$  medido localmente corresponde à convolução da densidade de estados local  $\rho(\omega)$  com a derivada da distribuição de Fermi-Dirac na temperatura do experimento [93].

<sup>4</sup> Essas medições de STS foram realizadas por nossos colaboradores para o trabalho publicado [93].

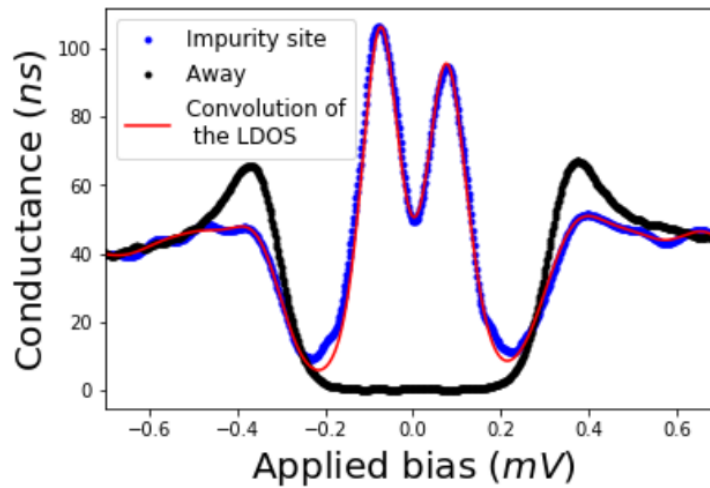


Figura 23 – Condutância medida através de espectroscopia de tunelamento por varredura sobre uma monocamada de Pb/Si(111) supercondutora com uma impureza magnética. Medição realizada a  $T = 320$  mK. Os pontos pretos mostram a condutância longe da impureza enquanto os pontos azuis mostram a condutância em cima da impureza magnética, evidenciando a presença de estados de YSR dentro do gap.

impurezas magnéticas nos semicondutores, esses estados ligados dão lugar a pequenas bandas eletrônicas, as quais estão relacionadas com as impurezas magnéticas [97]. O mesmo ocorre nos supercondutores convencionais: ao considerar uma concentração finita e pequena de impurezas magnéticas diluídas neste material, os estados ligados de YSR dão lugar a pequenas bandas eletrônicas. Esta formação de bandas dentro do gap ocorre porque os elétrons localizados nas impurezas podem se comunicar através dos elétrons do banho. Estas bandas de impurezas formadas no gap supercondutor são conhecidas como bandas de Shiba. Ao aumentar a concentração de impurezas, a largura das bandas de Shiba aumenta e a supercondutividade pode sobreviver na ausência de um gap. Aumentando esta desordem além de um valor crítico, a supercondutividade deixa de existir [22].

Em qualquer tipo de material supercondutor, seja ele convencional ou não, a função de pareamento entre dois elétrons deve ser antissimétrica ao trocar os números quânticos relacionados a eles. Em 1974 Berezinskii propôs que a contribuição antissimétrica nesse pareamento pode vir a partir da troca das coordenadas temporais dos dois elétrons [98]. Ele propôs que tal situação ocorre no  $^3\text{He}$ , onde haveria uma contribuição simétrica da parte espacial (de onda  $s$ ) e do spin (triplete). Portanto, a função supercondutora seria antissimétrica com relação ao tempo e, conseqüentemente, ao espaço recíproco ao tempo, a frequência (daí vem o termo supercondutividade *odd-frequency*, ou *odd- $\omega$* ) [19,99]. Embora mais tarde se tenha concluído que a superfluidez no  $^3\text{He}$  ocorre devido a um pareamento de onda  $p$  *even- $\omega$*  (i.e. pareamento simétrico em relação às coordenadas temporais), e não *odd- $\omega$* , este último pareamento passou a ser visto como um fenômeno bem geral em sistemas

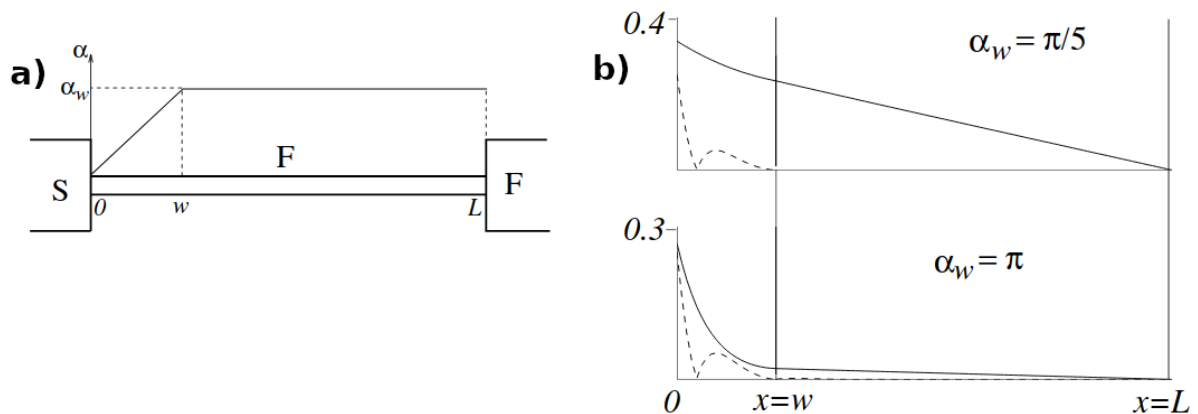


Figura 24 – (a) Esquema de uma junção supercondutor-ferromagneto. Um fio magnético de comprimento  $L$ , cuja direção de magnetização depende da posição horizontal  $x$ , conecta um supercondutor S a um reservatório magnético F. A direção da orientação magnética no fio faz um ângulo  $\alpha$  com o eixo  $z$ . Tal ângulo varia linearmente entre  $x = 0$  (com  $\alpha = 0$ ) e  $x = w$  (com  $\alpha = \alpha_w$ ), e então permanece constante até  $x = L$ . (b) Variação espacial dos pareamentos singlete *even- $\omega$*  (linha tracejada) e tripleto *odd- $\omega$*  (linha contínua) no fio magnético para diferentes valores de  $\alpha_w$ . Figura adaptada da Ref. [105].

supercondutores [100, 101], incluindo por exemplo supercondutores desordenados [102] e férmions pesados<sup>5</sup> supercondutores [104].

Mais recentemente se verificou por meio de estudos teóricos que o pareamento *odd- $\omega$*  pode aparecer quando supercondutividade é induzida em sistemas ferromagnéticos (F) por efeito de proximidade com um supercondutor convencional (S) [105–107]. Bergeret *et al.* [105] consideraram o caso de uma variação linear da direção da polarização magnética do ferromagneto perto da junção S-F. O pareamento singlete *even- $\omega$*  de onda  $s$  decai rapidamente ao penetrar no ferromagneto. Por outro lado, a anisotropia magnética permite o aparecimento de um pareamento tripleto *odd- $\omega$*  espacialmente par. Tal pareamento *odd- $\omega$*  tem a mesma ordem de magnitude do pareamento *even- $\omega$*  na interface, porém decai lentamente dentro do ferromagneto (ver Fig. 24). Os autores prevêem ainda um aumento da condutividade do ferromagneto abaixo da temperatura crítica  $T_c$  do supercondutor devido a este efeito [105].

Nos sistemas híbridos S-F a quebra da simetria de reversão temporal induzida por um campo magnético efetivo dos átomos magnéticos pode mudar a componente de spin da função de pareamento, de forma que ela deixa de ser antissimétrica passando a ser simétrica, favorecendo o aparecimento de uma componente antissimétrica com relação ao tempo. Tais sistemas oferecem a vantagem de serem construídos e controlados artificialmente, abrindo

<sup>5</sup> Em alguns materiais, tipicamente aqueles que possuem átomos com orbitais  $4f$  ou  $5f$  semipreenchidos, os elétrons interagem fortemente e possuem massas efetivas que podem chegar a ser até 1000 vezes a massa da partícula livre. Daí vem o nome férmions pesados. Alguns férmions pesados são descritos corretamente pela teoria de líquido de Fermi de Landau. Outros são descritos por outras teorias [103].

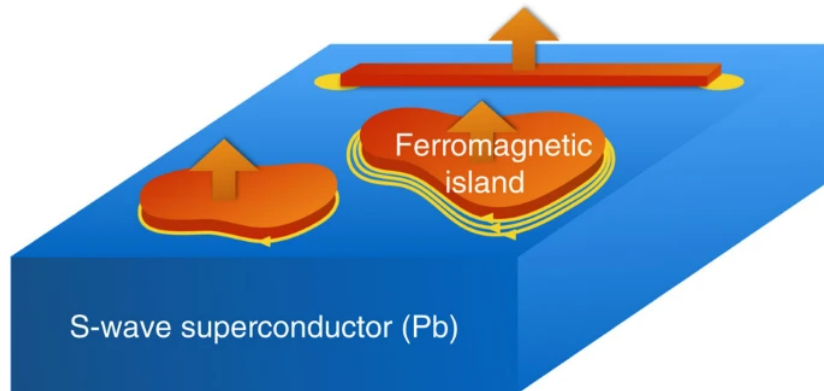


Figura 25 – Uma camada fina de átomos magnéticos, como Fe ou Co, é depositada na superfície de um supercondutor convencional de onda  $s$  com forte acoplamento spin-órbita, como Pb, e forma uma cadeia unidimensional ou uma ilha bidimensional que possui uma ordem magnética (representada pelas setas para cima). A rede resultante de estados ligados induzidos pelas impurezas magnéticas, ou rede de Shiba, carrega supercondutividade topológica quiral de onda  $p$  e os modos quirais de Majorana associados (representados por pontos amarelos ou linhas com setas unidirecionais). No caso da ilha magnética, um ou mais modos de Majorana podem aparecer dependendo da densidade de átomos magnéticos. Tais modos de Majorana devem aparecer no regime de impurezas concentradas, diluídas ou no regime intermediário. Figura extraída da Ref. [39].

caminho em direção a aplicações no campo de dispositivos em spintrônica [108, 109]. Foi mostrado que de forma mais geral a componente de  $odd-\omega$  pode surgir onde quer que ocorra quebra de simetria, como por exemplo quebra de simetria na parte espacial em junções não magnéticas [110, 111].

Estes fenômenos ganharam ainda mais interesse com o advento dos materiais topológicos, onde a competição entre supercondutividade e ordens magnéticas é frequentemente um ingrediente fundamental. Um exemplo é o caso de átomos magnéticos depositados na superfície de um supercondutor convencional com forte acoplamento spin-órbita, seja esta deposição no formato de uma cadeia magnética unidimensional ou uma ilha magnética bidimensional, a qual pode ser composta por átomos magnéticos diluídos ou densos. Nesses sistemas surgem estados de Shiba na vizinhança dos átomos magnéticos e a hibridização desses estados leva ao surgimento de supercondutividade quiral de onda  $p$  [39]. A supercondutividade quiral é um estado topologicamente não trivial, e como tal exhibe modos topológicos nas bordas, além da supercondutividade no interior. Assinaturas importantes de supercondutividade quiral incluem modos quirais de Majorana e correntes na superfície [112]. No caso de uma cadeia magnética sobre a superfície do supercondutor, os estados de borda de Majorana são localizados nas extremidades da cadeia [113–117]. Tais estados ligados de Majorana têm a possibilidade de ser fundamentais no desenvolvimento da computação quântica [118, 119]. No caso de ilhas magnéticas, os modos de Majorana são

localizados ao redor delas [120, 121]. O número de Chern, que é calculado para informar o número de modos de Majorana nessas ilhas, deve depender da concentração de impurezas magnéticas [39]. A Fig. 25 ilustra esses exemplos de supercondutores topológicos. Uma vez que o pareamento  $odd-\omega$  também deve estar presente em sistemas híbridos S-F, compreender o papel da supercondutividade  $odd-\omega$  em tais sistemas com estados ligados de Majorana e encontrar quais são suas assinaturas experimentais são questões fundamentais [122].

Tem havido um esforço considerável de parte da comunidade científica em matéria condensada em verificar experimentalmente o pareamento  $odd-\omega$ . Propostas para isto incluem medidas de termoeletricidade em sistemas híbridos de supercondutor–ponto quântico–ferromagneto [123] e efeito Josephson em junções supercondutor–ferromagneto [19]. Apesar disso, a detecção de pareamento  $odd-\omega$  só foi aparentemente confirmada bem recentemente. Um estudo relatou supercondutividade  $odd-\omega$  na interface de um isolante topológico com um supercondutor convencional [124].

Em uma pesquisa sobre uma impureza magnética em contato com um supercondutor convencional, que se apoia em trabalhos anteriores [125, 126], relatamos a presença desse pareamento  $odd-\omega$  através de medições de STS [93]. Neste trabalho relacionamos a presença de estados localizados dentro do gap supercondutor com a existência de pareamento  $odd-\omega$ . Demonstramos que a componente par (ou simétrica) da densidade de estados local na impureza magnética  $\rho_{even}(\omega)$  é proporcional à parte imaginária do pareamento supercondutor do tipo  $odd-\omega$  tripleto,  $\text{Im}[F_{odd}(\omega)]$  [no capítulo 6 damos mais informações sobre o pareamento supercondutor, ou função de Green anômala  $F(\omega)$ ]. A constante de proporcionalidade nesta relação é determinada a partir de parâmetros dos estados de YSR. Este procedimento para encontrar o pareamento  $odd-\omega$  foi aplicado no sistema supercondutor com uma impureza magnética cuja medição de STS é mostrada na Fig. 23. A função  $\text{Im}[F_{odd}(\omega)]$  obtida é mostrada na Fig. 26.

O alvo desta parte da tese é ir além do sistema com uma única impureza, investigando um supercondutor convencional com uma concentração finita e pequena de impurezas magnéticas diluídas. Consideramos  $T = 0$  e que os spins destas impurezas são clássicos e possuem direção e sentido fixos. Aqui, mostramos o surgimento de bandas de Shiba e vemos que o pareamento  $odd-\omega$  pode ser induzido em todos os sítios desse sistema, i.e. em sítios magnéticos e sítios não magnéticos. Conforme já foi discutido, se estas impurezas magnéticas estiverem na superfície de um supercondutor com forte acoplamento spin-órbita, tal sistema deve dar origem a supercondutividade topológica com modos de Majorana. Neste trabalho, porém, nosso alvo não é procurar por supercondutividade topológica e, para simplificar a nossa abordagem, não consideramos acoplamento spin-órbita no nosso modelo.

O restante desta parte da tese está organizado da seguinte maneira. No capítulo 6 explicamos o funcionamento da DMFT e mostramos propriedades de uma função de

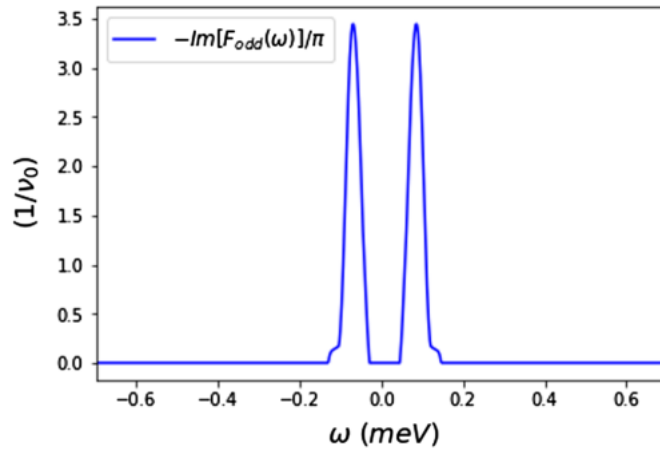


Figura 26 – Parte imaginária do pareamento  $odd-\omega$  extraída na posição da impureza (os valores são relevantes apenas dentro do gap) a partir da medição da DOS local da Fig. 23.

Green anômala, necessária para a investigação de pareamentos supercondutores. Nosso modelo e resultados são apresentados no capítulo 7, onde discutimos a presença de diferentes pareamentos supercondutores no sistema. O leitor interessado pode verificar no Apêndice B como encontramos as equações de DMFT para o sistema DMS. No Apêndice C são mostradas soluções das funções de Green para um supercondutor convencional limpo, i.e. sem impurezas.

## 6 Metodologia

A fim de estudar o comportamento de um supercondutor magnético diluído, fizemos uso de uma metodologia numérica, a teoria de campo médio dinâmico (DMFT, do inglês *dynamical mean-field theory*). Uma vez que não consideramos interações quárticas no modelo para um DMS, a DMFT aplicada a tal modelo é equivalente a outra metodologia mais simples, a *coherent potential approximation* (CPA) [127]. Decidimos usar a linguagem da DMFT aqui uma vez que esta pode ser mais facilmente generalizada para futuramente considerarmos interações quárticas envolvendo spins quânticos das impurezas. Tal metodologia é capaz de fornecer a função de Green local normal  $G(i\omega)$  e a anômala  $F(i\omega)$ . Neste capítulo falamos brevemente sobre a DMFT e sobre propriedades da função de Green anômala  $F(i\omega)$ .

### 6.1 *Dynamical mean-field theory*

A *dynamical mean-field theory* (DMFT), desenvolvida no final do séc. XX, contou com a contribuição de diversos autores, em particular com trabalhos de Walter Metzner e Dieter Vollhardt [129] e Antoine Georges e Gabriel Kotliar [130], e tem sido muito utilizada para estudar sistemas fortemente correlacionados. A ideia desse método é mapear a rede interagente em estudo em um modelo de uma única impureza quântica, e.g. descrita pelo modelo de uma impureza de Anderson, que é um sistema mais simples de resolver. Este modelo de uma impureza quântica é composto por um banho de elétrons não interagentes e um único sítio (ou impureza) interagente, o qual pode estar ocupado por 1 elétron, 2 elétrons de spins opostos ou estar desocupado, de forma que os elétrons podem migrar da impureza para o banho e vice-versa (ver Fig. 27). O problema de uma impureza quântica, embora seja mais simples do que uma rede interagente, também demanda metodologias

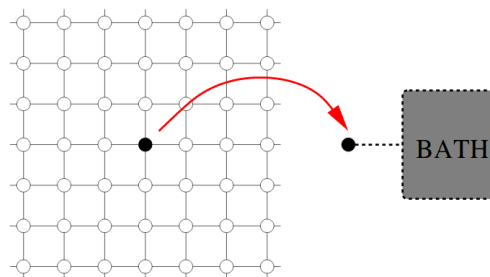


Figura 27 – Ilustração do esquema da DMFT, em que o sistema é mapeado no problema de uma única impureza em contato com um banho de elétrons. Figura extraída da Ref. [128].

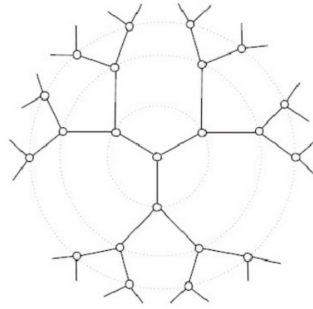


Figura 28 – Ilustração de uma rede de Bethe com número de coordenação  $d = 3$ . Figura adaptada da Ref. [92].

numéricas para ser resolvido, tais como a diagonalização exata ou Monte Carlo quântico. Os parâmetros do banho do problema de uma impureza dependem da rede original e são obtidos numericamente de forma autoconsistente (como será detalhado mais adiante nesta seção) [128, 130, 131].

É possível provar que o mapeamento da rede interagente original em um modelo de uma impureza quântica é exato no limite em que o número de coordenação  $d$  (i.e. o número de primeiros vizinhos na rede) tende a infinito, caso em que a autoenergia do sistema se torna local, i.e. independente do momento  $\mathbf{k}$  [129]. Quanto menor for  $1/d$  em uma rede mais preciso tende a ser o resultado da DMFT. Note, por exemplo, que numa rede cúbica o número de coordenação já é grande,  $d = 6$ , de forma que assumir que  $d \rightarrow \infty$  não prejudica tanto os resultados. Verifica-se que em 3 dimensões os resultados obtidos por DMFT são capazes de descrever qualitativamente diversas propriedades de materiais reais como a transição de Mott [131]. A DMFT pode ser aplicada a diversas redes. Um exemplo é a rede de Bethe, na qual só há um caminho possível para um elétron sair de um sítio  $i$  e chegar ao sítio  $j$ . A Fig. 28 mostra um exemplo de rede de Bethe com número de coordenação  $d = 3$ . Esta rede é frequentemente usada no limite  $d \rightarrow \infty$  pois neste caso as equações de DMFT se simplificam bastante e os resultados descrevem qualitativamente bem a física dos sistemas [97, 130, 132].

Uma limitação da DMFT é que ela não é apropriada para estudar sistemas com correlações não locais relevantes, uma vez que ela não consegue descrever flutuação espacial. Assim, em 2001 Gabriel Kotliar *et al.* propuseram uma extensão não local desta, a *cellular dynamical mean-field theory* (CDMFT) [133], a qual mapeia uma rede interagente original em um sistema de  $N_c$  impurezas num banho de elétrons de condução (ver Fig. 29, em que  $N_c = 4$ ). Agora, a função de Green do novo sistema e sua autoenergia são matrizes que expressam todas as possíveis relações entre os sítios do *cluster* de impurezas. A CDMFT é capaz de descrever tanto a fase normal quanto a supercondutora do modelo de Hubbard bidimensional [134], por exemplo.

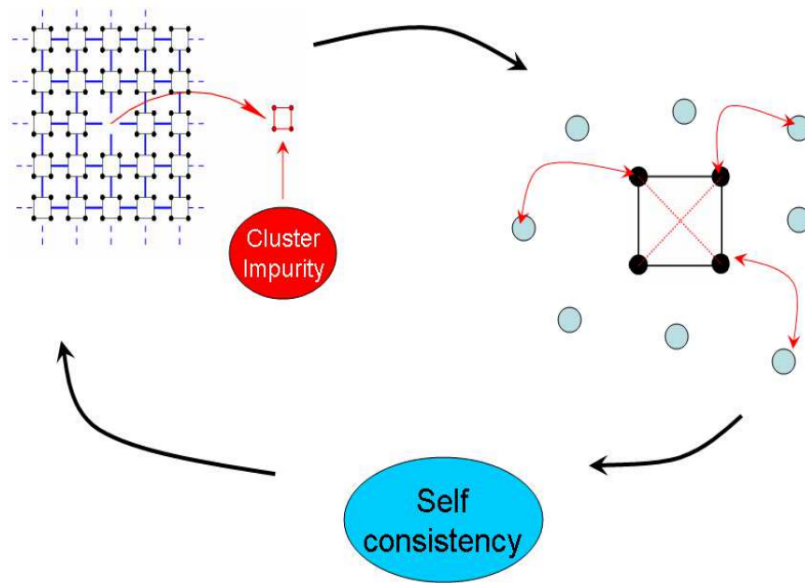


Figura 29 – Ilustração do esquema da CDMFT, em que o sistema é mapeado no problema de um *cluster* com  $N_c = 4$  impurezas em contato com um banho de elétrons. Figura extraída da Ref. [134].

Outra extensão da DMFT é a *nanoscale dynamical mean-field theory* (nano-DMFT) [135]. Desenvolvida por Serge Florens, esta metodologia é adequada para tratar sistemas interagentes cujo tamanho é intermediário entre a escala dos átomos e o *bulk* de materiais, sendo capaz de fornecer a função de Green local para cada sítio do sistema, seja ele uma junção ou outro dispositivo mesoscópico, sem supor que os sítios são todos idênticos. Tal metodologia é particularmente fácil de implementar quando se utiliza a rede de Bethe com  $d \rightarrow \infty$ .

No trabalho apresentado aqui estamos interessados em estudar spins clássicos imersos em uma rede supercondutora. Nossa intenção é obter o comportamento qualitativo de funções de Green locais nesse sistema. A fim de simplificar a abordagem e fazer uso da DMFT, evitando a análise computacionalmente mais cara que a CDMFT demanda, levamos em conta apenas correlações locais no sistema. Futuramente poderemos investigar mais a fundo propriedades não locais do supercondutor magnético diluído, como supercondutividade do tipo onda  $p$ , utilizando a CDMFT com *clusters* de 2 sítios. Além disso iniciamos a investigação de um sistema composto por uma ilha magnética envolvida por um material supercondutor convencional utilizando a nano-DMFT. Temos alguns resultados preliminares que mostram que estados de YSR aparecem perto da interface desses dois materiais. Daremos continuidade a esta investigação futuramente. No restante desta tese, porém, o foco é utilizar a DMFT e investigar impurezas magnéticas diluídas ao longo de um material supercondutor. Assim, apresentamos introdutoriamente a seguir as equações de DMFT.

A fim de apresentar as equações de DMFT seguimos as Refs. [128, 132] e tomamos como exemplo o modelo de Hubbard,

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \mu \sum_{i, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (6.1)$$

em que  $t_{ij}$  é o *hopping* entre sítios primeiros vizinhos  $\langle ij \rangle$ ,  $c_{i\sigma}^\dagger$  cria um elétron com spin  $\sigma$  no sítio  $i$ ,  $\mu$  é o potencial químico,  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  e  $U$  é a repulsão local entre dois elétrons de spins opostos. Para simplificar, consideramos que o sistema não passa por nenhuma quebra de simetria e está em uma fase paramagnética invariante por translação. Aqui estamos interessados em obter a função de Green local em um sítio  $i$  da rede,

$$G_{ii, \sigma}(\tau - \tau') = - \langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^\dagger(\tau') \rangle, \quad (6.2)$$

em que  $\tau$  e  $\tau'$  são tempos imaginários e  $T_\tau$  é um operador de ordenamento temporal (ver comentário sobre função de Green em tempo imaginário na seção 3.1).

O Hamiltoniano em estudo possui uma ação  $S$  correspondente, escrita na forma de uma integral funcional que depende dos graus de liberdade de todos os sítios da rede. É possível descrever a dinâmica efetiva de um sítio  $i = 0$  qualquer integrando os graus de liberdade dos outros sítios, obtendo uma ação efetiva

$$S_{\text{eff}} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau), \quad (6.3)$$

em que  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura e  $c(\tau)$ ,  $c^\dagger(\tau)$  são variáveis de Grassmann<sup>1</sup>. O Apêndice B mostra como essa equação de DMFT pode ser obtida por meio do método da cavidade em uma rede com  $d \rightarrow \infty$ . A função  $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ , conhecida como função de Weiss, descreve a amplitude de probabilidade efetiva para um férmion ser criado no sítio 0 no tempo imaginário  $\tau$ , tendo vindo do banho, e ser destruído em  $\tau'$ , voltando para o banho. A função de Weiss  $\mathcal{G}_0$  depende dos parâmetros do Hamiltoniano (6.1) e exerce o papel de uma função de Green despida para a ação efetiva  $S_{\text{eff}}$ , mas não deve ser confundida com a função de Green não interagente na rede, uma vez que o problema de uma impureza é obtido integrando os graus de liberdade dos demais elétrons interagentes. Com uma ação efetiva deve ser possível recuperar a função de Green local  $G_{00, \sigma}(\tau - \tau') = - \langle T_\tau c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^\dagger(\tau') \rangle_{S_{\text{eff}}}$ . Uma vez que o sistema é invariante por translação, temos  $G_{ii, \sigma} = G_{00, \sigma}$ ,  $\forall i$ .

Há outros Hamiltonianos mais fáceis de resolver numericamente cujas ações efetivas são escritas na forma da Eq. (6.3). Um exemplo é o modelo de uma impureza de Anderson, dado pelo Hamiltoniano

$$H_{\text{AIM}} = \sum_{l, \sigma} \tilde{\epsilon}_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} + \sum_{l, \sigma} V_l (a_{l\sigma}^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_{l\sigma}) + \epsilon_f (n_\uparrow^c + n_\downarrow^c) + U n_\uparrow^c n_\downarrow^c, \quad (6.4)$$

<sup>1</sup> Para aprender sobre variáveis de Grassmann o leitor pode ver a Ref. [69].

onde os operadores  $a_{l\sigma}^\dagger$  criam elétrons no banho,  $\tilde{\epsilon}_l$  são as energias dos elétrons do banho,  $c_\sigma^\dagger$  cria um elétron no sítio da impureza, o qual possui uma energia  $\epsilon_f$ ,  $V_l$  é a hibridização entre os elétrons do banho e da impureza,  $n_\sigma^c = c_\sigma^\dagger c_\sigma$  e  $U$  é a repulsão entre dois elétrons na impureza. Escolhendo  $\epsilon_f = -\mu$ , em que  $\mu$  é o potencial químico do modelo de Hubbard, temos que a ação efetiva do Hamiltoniano (6.4) no sítio da impureza tem a forma da Eq. (6.3) com a função de Weiss dada por

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n), \quad (6.5)$$

onde  $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$  são frequências de Matsubara para férmions,  $n$  é um número inteiro,  $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$  é a transformada de Fourier de  $\mathcal{G}_0(\tau)$  e a função hibridização  $\Delta(i\omega_n)$  é definida como

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_l}. \quad (6.6)$$

A princípio a função hibridização  $\Delta(i\omega_n)$  ou os parâmetros  $\tilde{\epsilon}_l$  e  $V_l$  podem ser escolhidos de forma que a função de Weiss da Eq. (6.5) coincida com a função de Weiss proveniente do modelo de Hubbard na rede original. Conseqüentemente, a função de Green local na impureza do modelo de Anderson  $G_{\text{imp},\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau c_\sigma(\tau) c_\sigma^\dagger(\tau') \rangle_{S_{\text{eff}}}$ , obtida pelas Eqs. (6.3) e (6.5), viria a coincidir com a função de Green local do modelo de Hubbard na rede original  $G_{ii,\sigma}(\tau - \tau')$ , definida na Eq. (6.2). Então aqui impomos que

$$G_{\text{imp},\sigma}(i\omega_n) = G_{ii,\sigma}(i\omega_n) = G(i\omega_n), \quad (6.7)$$

onde chamamos as funções de Green locais de  $G(i\omega_n)$  por simplicidade, uma vez que supomos uma fase paramagnética invariante por translação e a função de Green independe do índice de spin  $\sigma$ .

Sabemos pela equação de Dyson [ver Eq. (3.6) na primeira parte da tese] que a função de Green da rede original, definida da forma usual  $G_{ij}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$ , pode ser escrita na forma

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \quad (6.8)$$

onde  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  é a relação de dispersão do modelo da rede original não interagente, dada pela transformada de Fourier dos *hoppings*  $t_{ij}$ , e  $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$  é a autoenergia do modelo na rede. Somando a função acima em todos os momentos  $\mathbf{k}$ , a fim de encontrar a função de Green local  $G_{ii}(i\omega_n)$ , e utilizando a Eq. (6.5) encontramos

$$G(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\Delta(i\omega_n) + \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}. \quad (6.9)$$

No limite de dimensão infinita  $d \rightarrow \infty$  a autoenergia  $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$  se torna local [132, 136–138], i.e. independente de  $\mathbf{k}$ . A fim de simplificar a Eq. (6.9), a DMFT assume que a

autoenergia  $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$  é local mesmo se o sistema a ser estudado possuir dimensão finita. Também impomos que tal autoenergia é igual à autoenergia do problema efetivo de uma impureza. Ou seja,

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \simeq \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \quad (6.10)$$

em que

$$\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n). \quad (6.11)$$

Estas aproximações se tornam exatas no limite em que o número de coordenação tende a infinito,  $d \rightarrow \infty$  [130]. Com essas relações a Eq. (6.9) pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} G(i\omega_n) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\Delta(i\omega_n) + G^{-1}(i\omega_n) - \epsilon_{\mathbf{k}}} \\ &= \int d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\Delta(i\omega_n) + G^{-1}(i\omega_n) - \epsilon}, \end{aligned} \quad (6.12)$$

onde utilizamos a densidade de estados da rede não interagente  $D(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})$ .

A expressão acima, chamada de condição de autoconsistência por ter  $G$  dos dois lados da equação, relaciona, para cada frequência, a função de Green local  $G(i\omega_n)$  e a função hibridização  $\Delta(i\omega_n)$ . Alternativamente, podemos utilizar a Eq. (6.5) e a expressão acima para termos uma relação envolvendo  $G(i\omega_n)$  e a função de Weiss  $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ .

Agora temos um conjunto de equações que, em princípio, nos possibilitam determinar a função de Green local iterativamente, desde que tenhamos uma forma de resolver o problema de uma impureza de Anderson. Para resolver tal problema de uma impureza quântica é preciso escolher um método teórico e então fazer sua implementação numérica. Algumas opções utilizadas são Monte Carlo quântico, teoria de perturbação iterativa, diagonalização exata, dentre outras. É possível começar a iteração do *loop* da DMFT com uma tentativa inicial para a função hibridização  $\Delta(i\omega_n)$  [ou função de Weiss  $\mathcal{G}_0$  ou os parâmetros  $\tilde{\epsilon}_l$  e  $V_l$ ]. Utilizando um código numérico capaz de resolver o problema de uma impureza de Anderson a partir de  $\Delta(i\omega_n)$ , se calcula a função de Green da impureza  $G(i\omega_n)$ . Utilizando esta função juntamente com a Eq. (6.12) se encontra uma nova função  $\Delta(i\omega_n)$  [ou  $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ ]. Esta nova função é utilizada no código que resolve o problema de uma impureza de Anderson e uma nova função  $G(i\omega_n)$  é obtida, a qual, junto à Eq. (6.12), leva a uma nova  $\Delta(i\omega_n)$ . E assim este ciclo é repetido até que essas funções venham a convergir.

Em muitos casos este procedimento iterativo converge para uma única solução independentemente da escolha inicial de  $\Delta(i\omega_n)$ . Em alguns casos, porém, mais de uma solução pode ser encontrada (e.g. perto da transição de Mott). A DMFT é uma metodologia numérica aproximada, mas que se torna exata em alguns limites: quando o sistema é não

interagente  $U = 0$ ; no limite atômico  $t_{ij} = 0$ ; e no limite em que o número de coordenação tende a infinito  $d \rightarrow \infty$ .

A rede de Bethe com número de coordenação  $d \rightarrow \infty$  e *hopping* entre primeiros vizinhos  $t_{ij} = t/\sqrt{z}$  possui uma densidade de estados semicircular,  $D(\epsilon) = \sqrt{4t^2 - \epsilon^2}/2\pi t^2$ . Neste caso a condição de autoconsistência, Eq. (6.12), pode ser invertida, fornecendo

$$\Delta(i\omega_n) = t^2 G(i\omega_n). \quad (6.13)$$

Utilizando esta expressão junto com a Eq. (6.5) temos

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n + \mu - t^2 G(i\omega_n). \quad (6.14)$$

Portanto, quando se trata da rede de Bethe com  $d \rightarrow \infty$ , podemos utilizar as expressões acima nas iterações de DMFT para obter  $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$  ou  $\Delta(i\omega_n)$  a partir de  $G(i\omega_n)$ .

Por outro lado, no caso particular em que o sistema original é não interagente ( $U = 0$ ) a função de Green do problema de uma impureza, calculada a partir da ação efetiva da Eq. (6.3), é equivalente à função de Weiss,  $G(i\omega) = \mathcal{G}_0(i\omega)$ . No problema não interagente na rede de Bethe, a Eq. (6.14) leva a

$$G(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n + \mu - t^2 G(i\omega_n). \quad (6.15)$$

Neste caso trivial se obtém uma única equação para  $G(i\omega)$ , não sendo necessário resolver numericamente um modelo de impureza quântica, como o modelo de uma impureza de Anderson. O Apêndice B mostra mais detalhes de como obter as equações de DMFT mostradas nesta seção pelo método da cavidade.

Na seção 7.1 introduzimos um modelo aproximado para descrever uma rede supercondutora com impurezas magnéticas. O termo de supercondutividade no Hamiltoniano é do tipo campo médio, enquanto as impurezas magnéticas são descritas por spins clássicos. Desta forma o Hamiltoniano não tem termos quárticos, mas apenas quadráticos nos operadores fermiônicos. A rede adotada é a rede de Bethe com  $d \rightarrow \infty$ . Isto possibilita generalizar a abordagem discutida nesta seção para encontrar equações de DMFT para o problema desejado e, de forma similar ao caso da Eq. (6.15), não é necessário resolver um problema de uma impureza quântica. Neste caso não interagente a DMFT é equivalente à CPA, que é utilizada para estudar desordem. Futuramente, a fim de considerar interações quárticas envolvendo spins quânticos de impurezas magnéticas, em vez de considerar expressões equivalentes à Eq. (6.15) precisaremos considerar expressões equivalentes à Eq. (6.14) e utilizar um código numérico capaz de resolver o problema de uma impureza quântica.

Conforme veremos adiante, as funções de Green no problema de impurezas magnéticas clássicas são matrizes e há duas equações de DMFT acopladas, uma para sítios magnéticos e outra para sítios não magnéticos. Porém, antes de apresentarmos um modelo

para o supercondutor magnético diluído, discutimos na seção 6.2 propriedades das funções de Green anômalas, as quais nos permitem estudar o pareamento dos elétrons e distinguir quais tipos de supercondutividade estão presentes no sistema.

## 6.2 Função de Green anômala

A função de Green anômala  $F$  é uma função complexa que descreve a correlação entre pares de elétrons, correlação esta que pode levar o sistema a uma fase supercondutora<sup>2</sup>. Em um sistema com um único orbital a função de Green anômala no eixo imaginário é definida como  $F_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \tau) = -\langle T_{\tau} c_{\alpha}(\mathbf{r}, \tau) c_{\beta}(\mathbf{0}, 0) \rangle$ , em que  $\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow$  são spins. A antisimetria da função de onda de dois férmions impõe restrições na função de Green anômala. Assim, ao permutar dois elétrons, ou equivalentemente permutar os números quânticos associados a eles, tal função precisa sofrer uma troca de sinal. Consideremos  $S$  como sendo a paridade do par de Cooper com relação à operação  $\mathcal{S}$  que permuta os spins dos elétrons,  $P$  a paridade com relação ao operador  $\mathcal{P}$  que permuta as posições dos elétrons e  $T$  a paridade com relação ao operador  $\mathcal{T}$  que permuta os tempos dos mesmos. No caso em que os sítios considerados só possuem um orbital, a função de Green anômala *no eixo imaginário* satisfaz  $\mathcal{SPT}[F_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \tau)] = -F_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \tau)$  [19].

Um supercondutor BCS convencional singlete de onda  $s$  satisfaz  $S = -1$ ,  $P = 1$  e  $T = 1$ . Um supercondutor tripleto de onda  $p$  satisfaz  $S = 1$ ,  $P = -1$  e  $T = 1$ . Outras possibilidades que preservam o produto  $SPT = -1$  são  $S = 1$ ,  $P = 1$ ,  $T = -1$  e  $S = -1$ ,  $P = -1$ ,  $T = -1$ . Quando o sistema é multi-orbital, a variedade dos tipos de supercondutividade é ainda maior, pois a função de Green anômala  $F$  pode ser par ou ímpar sob a operação  $\mathcal{O}$  de permutação dos orbitais, i.e.  $O = +1, -1$ , e  $F$  precisa obedecer  $SPOT = -1$ . Quando  $T = 1$ , a função de Green anômala  $F(\tau)$  é uma função par do tempo imaginário  $\tau$  e sua transformada de Fourier  $F(i\omega)$  também é uma função par da frequência  $\omega$ . Neste caso dizemos que o supercondutor é do tipo *even-frequency* (*even- $\omega$* ). Quando  $T = -1$ ,  $F(\tau)$  e sua transformada de Fourier  $F(i\omega)$  são funções ímpares, e dizemos que o supercondutor é do tipo *odd-frequency* (*odd- $\omega$* ).

Utilizando a continuação analítica  $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$ ,  $\eta \rightarrow 0^+$ , encontra-se a função de Green anômala retardada,  $F_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \omega)$ , enquanto a avançada  $F_{\alpha,\beta}^A(\mathbf{r}, \omega)$  é encontrada utilizando  $i\omega \rightarrow \omega - i\eta$ . Devido à antissimetria da função de onda de dois elétrons, estas funções *no eixo real* precisam satisfazer  $\mathcal{SPT}[F_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \omega)] = -F_{\alpha,\beta}^A(\mathbf{r}, \omega)$ .

Em alguns casos, como veremos adiante, a função retardada  $F_{\alpha,\beta}(\mathbf{r} = 0, \omega)$  pode

<sup>2</sup> Se os elétrons num sistema possuem uma função de Green anômala  $F$  não nula, podemos afirmar que estes estão correlacionados, mas não necessariamente o sistema está numa fase supercondutora. Para que o sistema esteja numa fase supercondutora, além da presença da correlação é necessário que haja um condensado de pares de Cooper que leve a resistência do material a se anular abaixo de uma temperatura crítica.

conter a superposição de um pareamento singlete *even- $\omega$*  e de um pareamento tripleto *odd- $\omega$*  se  $\alpha \neq \beta$ . A componente *even- $\omega$*  (*e*) satisfaz  $F_{\alpha,\beta}^e(\omega) = [F_{\alpha,\beta}^e(-\omega)]^*$  e a componente de *odd- $\omega$*  (*o*) satisfaz  $F_{\alpha,\beta}^o(\omega) = -[F_{\alpha,\beta}^o(-\omega)]^*$ , onde  $F^*$  denota o transposto conjugado de  $F$ . Estas duas componentes podem ser extraídas facilmente da função  $F_{\alpha,\beta}$ ,

$$F_{\alpha,\beta}^{e/o}(\omega) = \frac{F_{\alpha,\beta}(\omega) \pm [F_{\alpha,\beta}(-\omega)]^*}{2}. \quad (6.16)$$

No próximo capítulo consideramos o modelo de um supercondutor convencional singlete de onda *s* com impurezas magnéticas. Utilizamos a DMFT para encontrar funções de Green anômalas locais, as quais descrevem a correlação entre dois elétrons no mesmo sítio. Verificamos que o pareamento singlete de onda *s* convencional também é gerado nos sítios magnéticos, por efeito de proximidade, e verificamos que houve aparecimento de pareamento tripleto *odd- $\omega$*  de onda *s* nos sítios magnéticos e nos não magnéticos. Este tipo de pareamento não convencional é o foco deste trabalho. Note que pareamentos com  $P = -1$  são antissimétricos espacialmente e como consequência se anulam quando a distância entre os dois elétrons é nula, i.e. quando os dois elétrons estão no mesmo sítio. Isso significa que a função de Green anômala local  $F(i\omega)$  obtida pela DMFT não é capaz de fornecer informação direta sobre pareamento do tipo onda *p*. Contudo, conseguimos demonstrar indiretamente o aparecimento de pareamento tripleto do tipo onda *p* no sistema utilizando cálculos analíticos juntamente a dados extraídos de  $F(i\omega)$ , obtida numericamente. Tais resultados são mostrados no capítulo a seguir.



## 7 Modelo e resultados

Ao longo deste capítulo mostramos propriedades de um supercondutor magnético diluído. Na seção 7.1 introduzimos um modelo para um DMS e apresentamos equações de DMFT para tal sistema. Na seção 7.2 apresentamos algumas propriedades de um semicondutor com impurezas magnéticas diluídas, que podem nos ajudar na compreensão da física de um DMS. Discutimos na seção 7.3 alguns resultados para um sistema DMS no caso em que os spins clássicos das impurezas estão distribuídos em várias direções. A seção 7.4 mostra os nossos resultados para um DMS onde todos os spins das impurezas estão alinhados na mesma direção.

### 7.1 Modelo e equações de DMFT para o DMS

Nesta seção introduzimos um Hamiltoniano para estudar um supercondutor magnético diluído (DMS). Em seguida mostramos as equações de DMFT para este modelo na rede de Bethe com número de coordenação  $d \rightarrow \infty$ .

Consideremos um sistema de impurezas magnéticas imersas num material supercondutor, como ilustrado na Fig. 30. Conforme foi demonstrado no Material Suplementar da Ref. [93], no caso em que há apenas uma impureza magnética no material supercondutor a presença de acoplamento spin-órbita não influencia as funções de Green locais. Assim, espera-se que num sistema supercondutor com uma concentração  $x \ll 1$  diluída de impurezas magnéticas o acoplamento spin-órbita não afete significativamente as funções de Green locais. Ignoramos, portanto, o efeito spin-órbita no nosso modelo, uma vez que estamos interessados em estudar apenas funções de Green locais. Além disso, a fim de simplificar o tratamento do sistema, consideramos que as impurezas magnéticas são descritas por spins clássicos  $\mathbf{S}$  e a supercondutividade é descrita por um pareamento  $\Delta$  de elétrons no mesmo

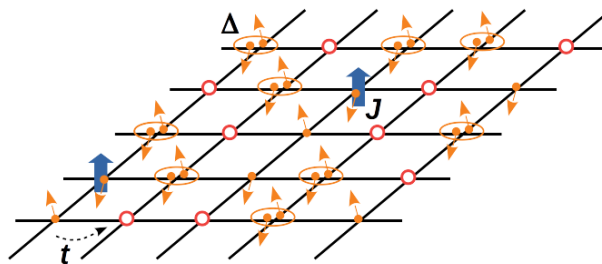


Figura 30 – Supercondutor Magnético Diluído: impurezas magnéticas, representadas por setas azuis, estão imersas numa rede supercondutora, onde elétrons em sítios não magnéticos possuem um pareamento  $\Delta$ . Os elétrons se deslocam entre sítios primeiros vizinhos por meio de um *hopping*  $t$ . O momento magnético da impureza  $\mathbf{S}$  interage com os elétrons por meio de um acoplamento  $J$ .

sítio.

Com base nas considerações acima, o Hamiltoniano que usamos para descrever o DMS é

$$H = \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} t_{ij} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + \sum_i (\Delta_i c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \Delta_i^* c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger) - \sum_{i, \alpha} \mu_i (c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}) + J \sum_{l, \theta, \alpha, \beta} S_l^\theta c_{l\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^\theta c_{l\beta}, \quad (7.1)$$

em que o operador  $c_{i\alpha}^\dagger$  cria um elétron com spin  $\alpha = \uparrow, \downarrow$  no sítio  $i$  e  $t_{ij}$  é o *hopping* entre sítios primeiros vizinhos  $\langle ij \rangle$ . Em sítios  $l$  encontram-se impurezas com momentos magnéticos  $S_l^\theta$ ,  $\theta = x, y, z$ , que estão acopladas com os elétrons por meio do parâmetro de troca  $J$  ( $\sigma^\theta$  são matrizes de Pauli). O termo  $\Delta_i$  descreve o pareamento supercondutor e consideramos  $\Delta_i = \Delta$  em sítios não magnéticos ( $nm$ ) e  $\Delta_i = \Delta_m$  em sítios magnéticos ( $m$ ). Os sítios não magnéticos possuem um potencial químico  $\mu_i = \mu$ , enquanto os sítios magnéticos possuem energia  $\mu_i = \mu + \delta_\mu$ . Os sítios magnéticos são distribuídos aleatoriamente de forma que cada sítio possui uma probabilidade  $0 \leq x \ll 1$  de ser magnético.

A aproximação de spins clássicos para as impurezas é válida se  $S \gg 1$  ou se a temperatura Kondo é baixa e o experimento é realizado em uma temperatura acima da temperatura Kondo  $T \gg T_K$  (ver capítulo 5) [96]. Por simplicidade consideramos  $T = 0$  e que os spins clássicos (com  $S \gg 1$ ) possuem direção e sentido congelados, i.e. fixos. Apesar disto, a princípio cada sítio  $l$  com impureza pode possuir uma direção diferente para o momento magnético  $\mathbf{S}_l$ .

Note que no caso particular em que não há impurezas magnéticas no sistema, o pareamento entre os elétrons é convencional do tipo *even- $\omega$*  singleto de onda  $s$ . Porém a presença das impurezas magnéticas clássicas quebra a simetria de reversão temporal do Hamiltoniano. Uma implicação disto é que agora o sistema passa a permitir a presença de pareamento do tipo *odd-frequency*, conforme será mostrado mais adiante.

A fim de escrever as equações de DMFT para o Hamiltoniano da Eq. (7.1) na rede de Bethe com  $d \rightarrow \infty$ , definimos o *spinor* de Nambu generalizado  $\psi_i(\tau) = (1/\sqrt{2})(c_{i,\uparrow}(\tau) \quad c_{i,\downarrow}(\tau) \quad c_{i,\uparrow}^\dagger(\tau) \quad c_{i,\downarrow}^\dagger(\tau))^T$  em que  $\tau$  é um tempo imaginário e  $c_{i,\alpha}(\tau)$  são variáveis de Grassmann,  $\alpha = \uparrow, \downarrow$ . O fator  $1/\sqrt{2}$  nesta definição aparece porque consideramos um *spinor* generalizado que dobra o número de componentes do *spinor* de Nambu convencional [139]. A partir deste *spinor* definimos a função de Green local no sítio  $i$ ,  $\hat{G}_i(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \sqrt{2} \psi_i(\tau) \sqrt{2} \psi_i^\dagger(\tau') \rangle$ , que é uma matriz  $4 \times 4$ . Consideramos que todos os sítios sem impureza magnética são idênticos, i.e. têm a mesma função de Green  $\hat{G}_i(i\omega) = \hat{G}_{nm}(i\omega)$ , e que todos os sítios com spin clássico dado pelo vetor  $\mathbf{S}$  são idênticos,  $\hat{G}_i(i\omega) = \hat{G}_m(i\omega, \mathbf{S})$ .

Neste capítulo estamos interessados em analisar gráficos da densidade de estados (DOS) em sítios magnéticos com spin clássico  $\mathbf{S}$ ,  $N_{m,\alpha}(\omega, \mathbf{S}) = (-1/\pi) \text{Im}[G_{m,\alpha}(\omega, \mathbf{S})]$ , e

em sítios não magnéticos,  $N_{nm,\alpha}(\omega) = (-1/\pi)\text{Im}[G_{nm,\alpha}(\omega)]$ , em que  $\alpha = \uparrow, \downarrow$ . Também observamos gráficos de funções de Green anômalas locais em sítios magnéticos,  $F_{m,\alpha\beta}(\omega, \mathbf{S})$ , e em sítios não magnéticos,  $F_{nm,\alpha\beta}(\omega)$ , em que  $\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow$ . Estas funções são facilmente extraídas das funções de Green matriciais  $\hat{G}_{nm}(\omega)$  e  $\hat{G}_m(\omega, \mathbf{S}_i)$ :  $G_{a,\uparrow} = (\hat{G}_a)_{1,1}$ ,  $G_{a,\downarrow} = (\hat{G}_a)_{2,2}$ ,  $F_{a,\uparrow\uparrow} = (\hat{G}_a)_{1,3}$ ,  $F_{a,\uparrow\downarrow} = (\hat{G}_a)_{1,4}$ ,  $F_{a,\downarrow\uparrow} = (\hat{G}_a)_{2,3}$ ,  $F_{a,\downarrow\downarrow} = (\hat{G}_a)_{2,4}$ , em que  $a = m, nm$ .

Utilizando um *hopping*  $t_{ij} = t/\sqrt{d}$  entre sítios primeiros vizinhos, as equações de DMFT para a rede de Bethe com  $d \rightarrow \infty$  são (ver derivação no Apêndice B)

$$\begin{aligned}\hat{G}_{nm}^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbf{1} + \mu \mathcal{H}^t - \mathcal{H}_{nm}^{\text{BCS}} - t^2 \mathcal{H}^t [x \langle \hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n)] \mathcal{H}^t, \\ \hat{G}_m^{-1}(i\omega_n, \mathbf{S}_0) &= i\omega_n \mathbf{1} + (\mu + \delta_\mu) \mathcal{H}^t - J \mathcal{H}^M(\mathbf{S}_0) - \mathcal{H}_m^{\text{BCS}} \\ &\quad - t^2 \mathcal{H}^t [x \langle \hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n)] \mathcal{H}^t,\end{aligned}\quad (7.2)$$

onde  $\langle \cdots \rangle_{\mathbf{S}}$  denota uma média sobre todas as direções possíveis para os spins clássicos pesados pela probabilidade de cada direção e

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^t &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{H}_i^{\text{BCS}} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta_i^* \\ 0 & 0 & -\Delta_i^* & 0 \\ 0 & -\Delta_i & 0 & 0 \\ \Delta_i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = m, nm \\ \mathcal{H}^M(\mathbf{S}_0) &= \begin{pmatrix} \mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma}^T \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (7.3)$$

Os elementos de  $\mathcal{H}^M$  acima são blocos  $2 \times 2$ , de forma que  $\mathcal{H}^M$  é uma matriz  $4 \times 4$ . O vetor de Pauli  $\boldsymbol{\sigma}$ , cujas componentes são as matrizes de Pauli, está sendo multiplicado pelo vetor  $\mathbf{S}_0$ , que representa o spin clássico de uma impureza localizada no sítio 0. As equações de DMFT que obtivemos [Eqs. (7.2)] são as mesmas equações obtidas por François Jamet [92].

A fim de resolver numericamente essas equações de DMFT se começa com uma tentativa inicial para as funções  $\hat{G}_{nm}(i\omega_n)$  e  $\hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S})$  (para cada direção possível para o vetor  $\mathbf{S}$ ), e estas funções entram no lado direito das equações de DMFT acima e geram novas funções  $\hat{G}_{nm}(i\omega_n)$  e  $\hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S})$ , que são novamente usadas no lado direito das equações. Este processo deve ser repetido até a convergência destas funções. Essa iteração pode ser feita no eixo imaginário para obter as funções de Green em termos das frequências de Matsubara,  $\hat{G}(i\omega_n)$ , ou pode ser realizada uma continuação analítica  $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$ , com *broadening*  $0 < \eta \ll 1$ , para obter funções de Green retardadas,  $\hat{G}(\omega)$ .

Se os spins de todas as impurezas magnéticas forem considerados alinhados na direção  $\hat{z}$ ,  $\mathbf{S} = S\hat{z}$ , as equações de DMFT se simplificam. Neste caso podemos definir o

spinor de Nambu  $\phi_i(\tau) = (c_{i,\uparrow}(\tau) \ c_{i,\downarrow}^\dagger(\tau))^T$  e definir a função de Green  $\hat{G}_{ii}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \phi_i(\tau) \phi_i^\dagger(\tau') \rangle$ . As equações de DMFT para este sistema são

$$\begin{aligned}\hat{G}_{nm}^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbf{1} + \mu \tau^z - \mathcal{H}_{nm}^{\text{BCS}} - t^2 \tau^z \left[ x \hat{G}_m(i\omega_n) + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \tau^z, \\ \hat{G}_m^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbf{1} + (\mu + \delta_\mu) \tau^z - \mathcal{H}_m^{\text{BCS}} - t^2 \tau^z \left[ x \hat{G}_m(i\omega_n) + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \tau^z \\ &\quad - JS \mathbf{1},\end{aligned}\tag{7.4}$$

em que  $\tau^z$  é a matriz de Pauli e

$$\mathcal{H}_i^{\text{BCS}} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_i^* \\ \Delta_i & 0 \end{pmatrix}.\tag{7.5}$$

Note que agora as funções de Green são matrizes  $2 \times 2$  e a resolução numérica dessas últimas equações de DMFT é mais rápida do que a resolução das Eqs. (7.2), que envolvem matrizes  $4 \times 4$ .

Conforme foi mencionado anteriormente, o Hamiltoniano considerado aqui não possui interações quárticas. Dessa forma o mapeamento da DMFT não leva a problemas de uma impureza quântica, mas a uma média das funções de Green na vizinhança de cada sítio, devido à presença de sítios  $m$  e  $nm$  nessa vizinhança [veja o termo  $-t^2 \mathcal{H}^t \left[ x \langle \hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \mathcal{H}^t$  nas Eqs. (7.2)]. Portanto, no caso não integrante que estamos considerando aqui, a DMFT é equivalente ao tratamento de desordem da *coherent potential approximation* (CPA) [127]. Futuramente poderemos estender este trabalho considerando impurezas magnéticas com spins quânticos, de forma que o mapeamento da DMFT levará a problemas de uma impureza quântica. Por causa desta possibilidade de estender este sistema considerando interações quárticas é que utilizamos aqui a linguagem de DMFT em vez de CPA.

No restante deste trabalho consideramos que os vetores  $\mathbf{S}_i$  são unitários, de forma que o módulo do spin tenha sido absorvido no acoplamento  $J$ . Também consideramos temperatura nula e  $t = 1$ . Frequentemente omitimos os subíndices de spin na função  $F_{i,\uparrow}(\omega)$ , escrevendo apenas  $F_i(\omega)$  por simplicidade. Primeiramente, na seção 7.2, analisamos brevemente um semicondutor ( $\Delta = 0$ ) dopado com impurezas magnéticas alinhadas. Na seção 7.3 falamos do caso em que são consideradas várias direções para os spins clássicos  $\mathbf{S}_l$  num sistema supercondutor. Na seção 7.4 focamos no caso de um supercondutor em que os spin clássicos estão alinhados na mesma direção.

## 7.2 Estado normal com impurezas alinhadas paralelamente

Inicialmente testamos as equações de DMFT para o caso particular de um material no estado normal ( $\Delta_m = \Delta = 0$ ) dopado com impurezas magnéticas cujos spins estão todos alinhados na direção  $\hat{z}$  e com  $\delta_\mu = 0$ . Nesse caso nosso sistema se reduz ao sistema

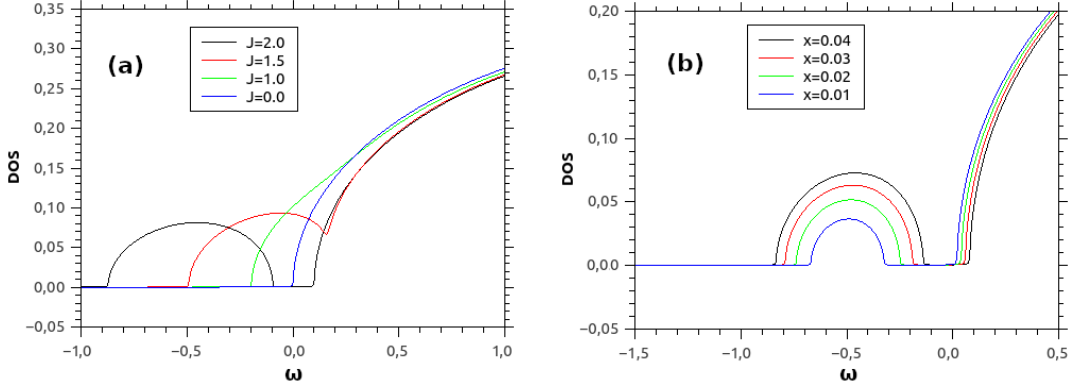


Figura 31 – Média sobre sítios magnéticos e não magnéticos da densidade de estados de elétrons com spin para baixo,  $xN_{m,\downarrow}(\omega) + (1-x)N_{nm,\downarrow}(\omega)$ , no estado normal  $\Delta_m = \Delta = 0$ . (a) Curvas obtidas variando  $J$  e usando  $x = 0.05$  e  $\mu = -2$ . (b) Curvas obtidas variando  $x$  e usando  $J = 2$  e  $\mu = -2$ .

considerado na Ref. [97], de um semiconductor dopado com impurezas magnéticas – um semiconductor magnético diluído. Os resultados reproduzidos e mostrados abaixo estão em concordância com os resultados encontrados nas Refs. [92, 97].

A Fig. 31 mostra a densidade de estados para elétrons de spin para baixo após realizar a média sobre sítios magnéticos e não magnéticos, i.e.  $xN_{m,\downarrow}(\omega) + (1-x)N_{nm,\downarrow}(\omega)$ . A Fig. 31(a), obtida com  $x = 0.05$  e  $\mu = -2$ , mostra a DOS média para vários valores de  $J$ . Quando  $J = 0$  o sistema é equivalente ao material sem impurezas e a densidade de estados é um semicírculo centrado em  $\omega = -\mu$ . Aumentando  $J$  a banda energética se deforma até que, para  $J > 1.5$ , uma pequena banda de impurezas é formada. A Fig. 31(b), obtida com  $J = 2$  e  $\mu = -2$ , mostra a DOS média para vários valores da concentração de impurezas  $x$ . Quanto maior  $x$ , maior a largura da banda de impurezas.

Observe que uma interação  $J > 0$  entre os spins clássicos  $\mathbf{S} = \hat{z}$  (o módulo de  $\mathbf{S}$  foi absorvido em  $J$ ) e os elétrons equivale a uma interação magnética que tende a diminuir a energia dos elétrons com spin para baixo que se encontram em sítios magnéticos. Isso leva à formação de uma banda de elétrons com menores energias, conforme vemos na Fig. 31. Essa banda eletrônica é preenchida com elétrons nas impurezas magnéticas, ou próximo a elas. Semelhantemente essa interação com  $J > 0$  tende a aumentar a energia de elétrons com spin para cima de forma que uma pequena banda energética para estes elétrons é formada em energias acima da borda superior da banda eletrônica inicial (não mostrado na figura). Se considerarmos  $J < 0$  o efeito é o oposto: a banda de impurezas com menor energia é a banda de elétrons com spin para cima, e a banda de impurezas com maiores energias corresponde a elétrons com spin para baixo.

Algumas propriedades vistas na presente seção, que lida com um semiconductor magnético diluído, também estão presentes no caso de um supercondutor magnético diluído, que será assunto das próximas seções. Conforme veremos, haverá formação de bandas de

impurezas quando  $|J|$  é grande o suficiente. Além disso a posição dessas bandas depende do acoplamento  $J$  e sua largura cresce com a concentração de impurezas  $x$ .

### 7.3 DMS com spins clássicos das impurezas em várias direções

Na presente seção consideramos impurezas magnéticas clássicas em um material supercondutor num caso particular onde várias direções são permitidas para os spins clássicos  $\mathbf{S}_i$ . Nosso objetivo aqui é reproduzir os resultados do relatório de mestrado de François Jamet [92], os quais não foram publicados em artigo científico mas nos servem de motivação e contribuem para a compreensão do sistema DMS com spins alinhados, que será considerado na seção 7.4. O sistema DMS com spins alinhados deu origem a um artigo [94]. A presente seção, que considera spins em várias direções, inclui também alguns poucos resultados não relatados na Ref. [92], os quais podem ser brevemente mencionados em um artigo futuro, no qual estudaremos diversos parâmetros de ordem em um DMS com impurezas alinhadas (discutido na subseção 7.4.3).

Note que quanto mais direções possíveis para  $\mathbf{S}_i$  maior é o custo computacional. Nesta seção nos restringimos ao caso em que estes vetores estão no plano  $xz$ . Consideramos  $s = 20$  direções possíveis neste plano, com ângulos  $\theta_n$  entre estes vetores  $\mathbf{S}$  e o eixo  $\hat{z}$  tais que  $\theta_n = 2\pi n/s$ ,  $n = 0, 1, \dots, s - 1$ . Poderíamos considerar que cada spin clássico tem uma probabilidade  $p = 1/s$  de estar em uma direção  $\theta_n$  qualquer, de forma que a probabilidade seria constante e independente do ângulo  $\theta_n$ . No entanto, a fim de comparar nossos resultados com os relatados na Ref. [92], consideramos  $p \sim |\sin \theta|$ , assim como feito por François Jamet. Essa distribuição de probabilidade implica que os spins das impurezas têm pouca probabilidade de estar alinhados em direções próximas de  $\theta = 0$  e  $\pi$  (i.e., do eixo  $\hat{z}$ ), e têm maiores chances de estar alinhados em direções próximas de  $\theta = \pi/2$  e  $3\pi/2$  (i.e., do eixo  $\hat{x}$ ). Portanto, todas as figuras mostradas nesta seção se referem ao sistema com esta distribuição  $p \sim |\sin \theta|$ . Não notamos alteração significativa nos resultados ao considerar outras distribuições, como  $p = 1/s$  com  $s = 20$  ou  $s = 2$ . As figuras apresentadas a seguir foram obtidas com  $t = 1$ ,  $\Delta_m = \Delta = 0.1$ ,  $\delta_\mu = 0$ ,  $\mu = 0$ ,  $s = 20$ ,  $x = 0.01$ ,  $\eta = 0.001$  e vários valores para  $J$ .

Uma vez que nesta seção consideramos spins clássicos com distribuição  $p \sim |\sin \theta|$  em vez da situação com spins alinhados, a DOS de elétrons com spin para cima em sítios  $nm$  é igual à DOS de elétrons com spin para baixo,  $N_{nm,\uparrow}(\omega) = N_{nm,\downarrow}(\omega)$ . Além disso a média da DOS de elétrons com spin para cima em sítios  $m$  é igual a esta média para os elétrons com spin para baixo,  $\langle N_{m\uparrow}(\omega, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} = \langle N_{m\downarrow}(\omega, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}}$ . Note que quando  $J = 0$  o sistema é equivalente a um supercondutor limpo, i.e. sem impurezas magnéticas, de forma que as funções de Green normal e anômala, sejam elas em sítios  $nm$  ou  $m$ , correspondem às funções de Green num supercondutor limpo (com  $x = 0$ ). A Fig. 32(a) mostra a DOS

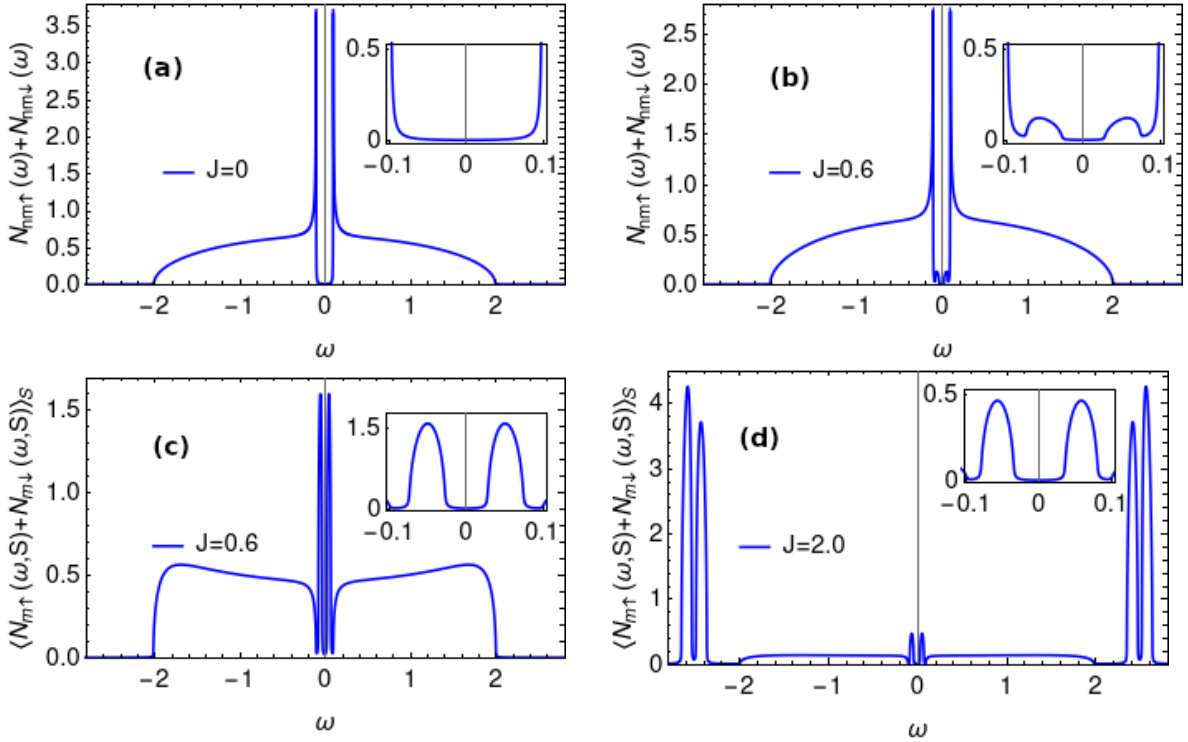


Figura 32 – DOS total,  $N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ , em um DMS onde os spins clássicos estão distribuídos em várias direções. Aqui foi utilizado  $t = 1$ ,  $\Delta = 0.1$ ,  $\Delta_m = 0.1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\delta_{\mu} = 0$ ,  $x = 0.01$  e *broadening*  $\eta = 0.001$ . O *inset* de cada painel mostra a mesma função plotada no painel principal para baixas energias,  $|\omega| < |\Delta|$ . Os gráficos mostram um guia para os olhos em  $\omega = 0$ . (a) Quando  $J = 0$  as impurezas magnéticas não produzem nenhum efeito, e a DOS em sítios  $nm$  (mostrada no painel) é idêntica à DOS em sítios  $m$ , as quais equivalem a um supercondutor sem impurezas magnéticas. (b) DOS em sítios  $nm$  com  $J = 0.6$ . Note a presença de pequenas bandas de Shiba dentro do gap supercondutor. (c) Média da DOS sobre sítios  $m$  com  $J = 0.6$ . As bandas de Shiba são bem maiores nos sítios  $m$ . Essas bandas se aproximam uma da outra à medida em que se aumenta o valor de  $J < 1$ . (d) Média da DOS sobre sítios  $m$  com  $J = 2$ . Para este valor de  $J$  as bandas de Shiba se cruzaram (elas se sobrepõem em  $J \simeq 1$ ). Além disso outras bandas de impurezas aparecem em altas energias,  $|\omega| \simeq 2.5$ .

total  $N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$  em sítios  $nm$  quando  $J = 0$ . A Fig. 32(b) mostra a DOS em sítios  $nm$  quando  $J = 0.6$ , enquanto a Fig. 32(c) mostra a média da DOS em sítios  $m$ , também com  $J = 0.6$ . Quando  $J \neq 0$  surgem bandas de Shiba dentro do gap supercondutor, que se aproximam uma da outra à medida em que se aumenta  $|J|$ . Quando  $|J| \simeq 1$  as bandas de Shiba estão sobrepostas e, ao continuar aumentando  $|J|$ , elas se cruzam. A Fig. 32(d) mostra a média da DOS em sítios magnéticos com  $J = 2$ , após o cruzamento das bandas de Shiba. Observe que para valores altos de  $J$  surgem outras bandas de impurezas em maiores energias,  $|\omega| > 2$ . Estes estados são semelhantes às bandas que surgem no semiconductor magnético diluído da seção 7.2. As bandas de impurezas possuem um peso espectral muito mais significativo em sítios magnéticos do que em sítios não magnéticos, uma vez que

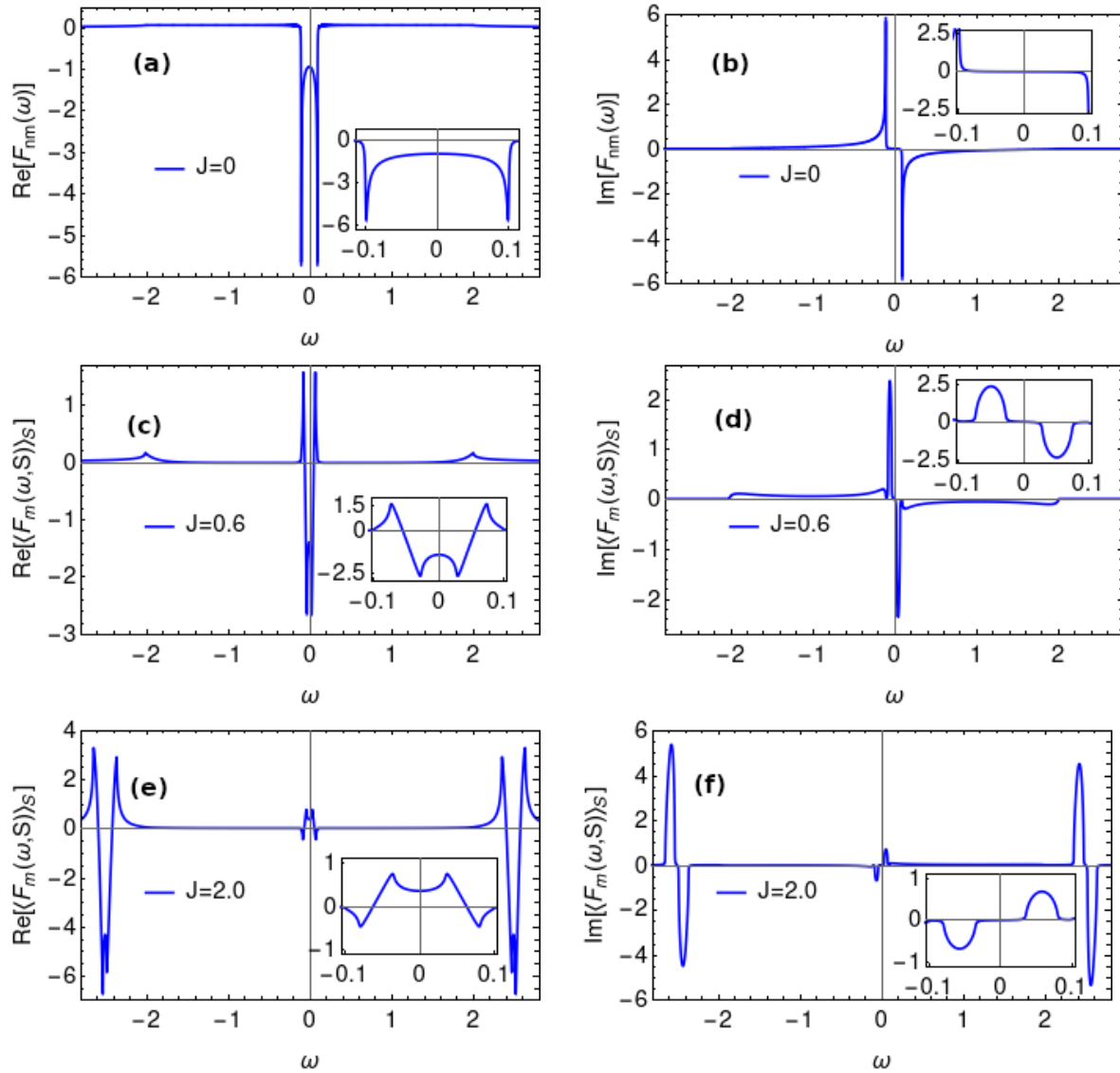


Figura 33 – Função de Green anômala  $F_{\uparrow\downarrow}$  obtida com os mesmos parâmetros utilizados na Fig. 32. A parte real desta função de Green é mostrada nos painéis à esquerda, (a), (c) e (e), enquanto a parte imaginária é mostrada nos painéis à direita, (b), (d) e (f). (a) e (b) mostram as componentes desta função de Green em sítios  $nm$  com  $J = 0$ , que corresponde ao supercondutor limpo. (c) e (d) mostram a média da função de Green anômala em sítios  $m$  com  $J = 0.6$ . (e) e (f) mostram a média desta função em sítios  $m$  com  $J = 2$ . O *inset* de cada painel mostra a mesma função plotada no painel principal para baixas energias.

surtem da hibridização de estados de YSR em que elétrons estão localizados nas impurezas magnéticas (ou na vizinhança delas).

As Figs. 33(a)-33(b) mostram, respectivamente, a parte real e a imaginária da função de Green anômala  $F_{\uparrow\downarrow}$  em sítios  $nm$  quando  $J = 0$ , i.e. para um supercondutor limpo. Note que  $\text{Im}[F_{\uparrow\downarrow}(\omega)]$  se anula dentro do gap. Este pareamento supercondutor  $F_{\uparrow\downarrow}$  é diferente em sítios magnéticos quando  $J \neq 0$ . As Figs. 33(c)-33(d) mostram a média desta

função em sítios magnéticos  $\langle F_m(\omega, \mathbf{S}) \rangle_{\mathcal{S}}$  com  $J = 0.6$ . Enquanto a parte imaginária deste pareamento contém bandas ou saliências nos intervalos de energias  $\omega$  onde se encontram as bandas de Shiba, a parte real do pareamento é linear nestas energias. As Figs. 33(e)-33(f) exibem estas mesmas funções com  $J = 2$  mostrando que, em comparação com  $J = 0.6$ , o pareamento supercondutor também é expressivo em energias correspondentes às bandas de impurezas em altas energias,  $|\omega| > 2$ . Observe nos *insets* das Figs. 33(c)-33(f) que quando as bandas de Shiba se cruzam em  $|J| \simeq 1$  o sinal de  $\langle F_m(\omega, \mathbf{S}) \rangle_{\mathcal{S}}$  muda.

Nos sítios não magnéticos, por outro lado, a função de Green anômala praticamente não se altera ao aumentar  $J$ , de forma que sua parte real  $\text{Re}[F_{nm}(\omega)]$  é parecida com o caso  $J = 0$  da Fig. 33(a), enquanto sua parte imaginária  $\text{Im}[F_{nm}(\omega)]$  é parecida com o caso  $J = 0$  da Fig. 33(b). Note que a parte real das funções de Green anômalas mostradas nesta seção são funções pares da energia  $\omega$ , enquanto a parte imaginária destas funções de Green anômalas são funções ímpares de  $\omega$ . Isto significa que estas funções descrevem um pareamento do tipo *even-frequency*.

A investigação mostrada na presente seção considerou várias direções possíveis para os spins clássicos das impurezas magnéticas. Consideramos que tais spins clássicos estão restritos ao plano  $xz$  e a probabilidade  $p$  de cada direção depende de seu ângulo  $\theta$  com o eixo  $z$  na forma  $p \sim |\sin \theta|$ . Consideramos esta situação a fim de verificar os resultados obtidos na Ref. [92] e obtivemos os mesmos resultados, os quais levantam algumas questões, que passamos a discutir. Mencionamos que a média da função de Green anômala sobre os sítios magnéticos muda de sinal ao aumentar o acoplamento além de  $|J| \sim 1$ . Este valor de  $|J|$  corresponde à ocasião em que as bandas de Shiba se sobrepõem. Ou seja, um parâmetro de ordem supercondutor se anula e muda de sinal justamente quando duas bandas energéticas se encontram e se cruzam. Isto é indício de uma transição de fase ocorrendo no material. De fato, no caso de uma única impureza em um supercondutor convencional, há uma mudança no sinal do pareamento supercondutor convencional no sítio da impureza simultaneamente a uma transição de fase quântica de primeira ordem, os quais ocorrem quando os estados de YSR se cruzam em  $J_{crit}$ . Se  $J < J_{crit}$ , os elétrons estão todos pareados, enquanto se  $J > J_{crit}$  um elétron se liga à impureza e ocorre uma blindagem do spin desta [96]. Na próxima seção discutiremos com mais detalhes evidências de uma transição de fase quântica no caso com muitas impurezas, na situação em que todos os spins clássicos estão alinhados na mesma direção.

Além de considerar  $p \sim |\sin \theta|$ , também verificamos o caso de uma distribuição de probabilidade constante e independente do ângulo  $\theta$ ,  $p = 1/s$ , com  $s$  sendo um número par ( $s = 20$  e  $s = 2$  por exemplo) e obtivemos resultados similares aos que apresentamos nas Figs. 32-33. Em todas estas situações, para cada direção  $\mathbf{S}$  possível para o spin clássico, a direção oposta  $-\mathbf{S}$  também é permitida e ambas possuem a mesma probabilidade  $p(\mathbf{S})$ , que é uma função par da direção  $\mathbf{S}$ . As impurezas magnéticas quebram a simetria de

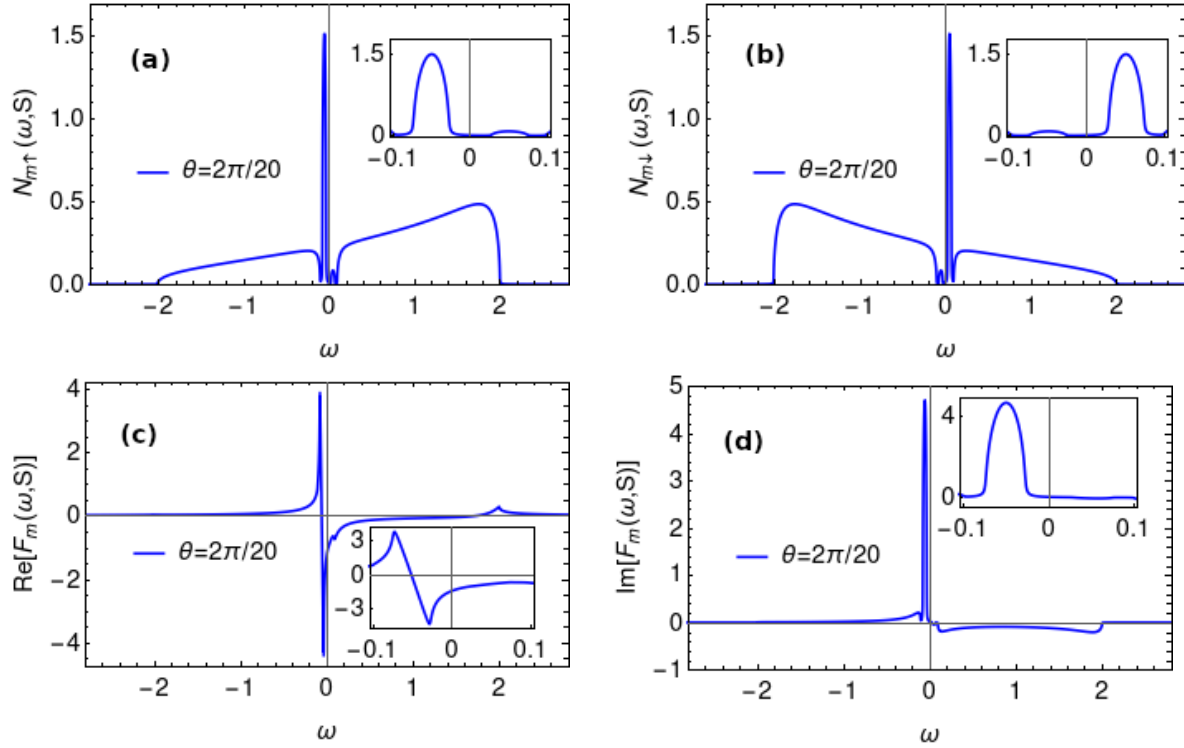


Figura 34 – Funções calculadas em sítios magnéticos utilizando os mesmos parâmetros da Fig. 32 e  $J = 0.6$ . Os spins clássicos das impurezas possuem várias direções permitidas e as funções plotadas não correspondem a médias sobre todas as direções possíveis, mas correspondem aos sítios cujo spin clássico  $\mathbf{S}$  faz um ângulo  $\theta = 2\pi/20$  com o eixo  $\hat{z}$ . (a) DOS de elétrons com spin para cima. (b) DOS de elétrons com spin para baixo. (c) Parte real da função de Green anômala  $F_{\uparrow\downarrow}$ . (d) Parte imaginária da função de Green anômala  $F_{\uparrow\downarrow}$ . O *inset* de cada painel mostra a mesma função plotada no painel principal para baixas energias.

reversão temporal, de forma que é permitido que apareçam componentes de pareamento do tipo *odd-frequency* nas funções de Green anômalas. Contudo, o uso destas probabilidades  $p(\mathbf{S})$  como funções pares da direção dos spins clássicos faz com que a média do pareamento sobre todos os sítios magnéticos,  $\langle F_m(\omega, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}}$ , descreva um pareamento puramente do tipo *even-frequency*. Como consequência, o pareamento local nos sítios não magnéticos também é somente do tipo *even- $\omega$* . Por outro lado verificamos que  $F_m(\omega, \mathbf{S})$ , sem realizar a média sobre as direções dos spins clássicos, não descreve um pareamento puramente *even- $\omega$* , mas contém uma componente do tipo *odd- $\omega$* . A partir daqui e até o final deste capítulo os resultados apresentados são novos e não constam no trabalho de François Jamet [92] que, ao analisar os sítios magnéticos, apresentou apenas as médias sobre as direções,  $\langle \dots \rangle_{\mathbf{S}}$ .

A Fig. 34 foi obtida utilizando os mesmos parâmetros que as figuras anteriores nesta seção, a mesma distribuição de probabilidade  $p \sim |\sin \theta_n|$  com  $s = 20$  e  $J = 0.6$ . Ela mostra densidades de estados e a função de Green anômala em sítios magnéticos nos quais  $\theta = 2\pi/20$ . Não escolhemos o ângulo  $\theta = 0$  pois  $p(\theta = 0) = 0$ . A Fig. 34(a) mostra

$N_{m\uparrow}$  enquanto a Fig. 34(b) mostra  $N_{m\downarrow}$ . Note que, neste caso, cada banda de Shiba é majoritariamente composta por uma espécie eletrônica e, para  $J = 0.6$ , a banda de menores energias é predominantemente relacionada a elétrons com spin para cima, enquanto a banda de cima está mais relacionada com elétrons de spin para baixo. Nos sítios em que  $\theta = \pi/2$ , i.e.  $\mathbf{S} = \hat{x}$  (não mostrado), as duas espécies eletrônicas contribuem com igual peso para cada uma das bandas de Shiba. As Figs. 34(c)-34(d) mostram, respectivamente, a parte real e a parte imaginária de  $F_m$ . Note que a parte real (imaginária) de  $F_m(\omega, \mathbf{S})$  não é simétrica (antissimétrica), de forma que o pareamento não é mais do tipo *even- $\omega$*  apenas, mas também contém uma componente *odd- $\omega$* . Este pareamento *odd- $\omega$*  é tripleto de onda  $s$ .

Na Fig. 34 podemos notar alguma similaridade entre a densidade de estados dentro do gap superconductor e a parte imaginária da função de Green anômala. Observe que as bandas de Shiba possuem o mesmo formato da ressonância que é vista em  $\text{Im}(F_m)$  [veja o *inset* das Figs. 34(a), 34(b) e 34(d)]. Discutimos a similaridade destas funções na seção 7.4, onde investigamos a situação em que todos os spins clássicos estão alinhados em uma única direção e também verificamos outras questões levantadas na presente seção.

## 7.4 DMS com spins clássicos alinhados paralelamente

Na presente seção consideramos o caso em que os spins clássicos de todas as impurezas magnéticas estão alinhados na mesma direção. Inspirados na seção anterior, em que várias direções para tais spins foram permitidas, temos algumas perguntas a responder: Quais tipos de pareamento superconductor estão presentes neste sistema? Qual pareamento é dominante? O sistema passa por uma transição de fase? Há alguma relação entre o formato das bandas de Shiba e o pareamento superconductor? Buscamos responder estas perguntas a seguir. Na subseção 7.4.1 mostramos algumas propriedades do modelo. Em seguida, na subseção 7.4.2 mostramos que há uma relação entre as bandas de Shiba e o pareamento do tipo *odd- $\omega$* , detalhando como este pareamento pode ser extraído experimentalmente a partir da DOS. Por fim, na subseção 7.4.3 comparamos os parâmetros de ordem de diferentes tipos de supercondutividade e discutimos se há mais pistas de uma transição de fase no sistema.

### 7.4.1 Propriedades gerais do modelo

Antes de apresentar gráficos de densidades de estados e de funções de Green anômalas, discutimos a seguir algumas propriedades das funções de Green obtidas pelas equações de DMFT, as quais podem nos ajudar na compreensão de um sistema DMS. Verificamos numericamente que a função de Green anômala retardada satisfaz

$$F_{\uparrow\downarrow}(\omega) = [F_{\downarrow\uparrow}(-\omega)]^*. \quad (7.6)$$

Esta expressão é válida para sítios  $m$  e  $nm$  separadamente. Ao definir as componentes de *even-frequency*  $F_{\alpha\beta}^e(\omega) = [F_{\alpha\beta}(\omega) + F_{\alpha\beta}(-\omega)^*]/2$  e *odd-frequency*  $F_{\alpha\beta}^o(\omega) = [F_{\alpha\beta}(\omega) - F_{\alpha\beta}(-\omega)^*]/2$ , em que  $\alpha = \uparrow, \downarrow$ ,  $\beta = \uparrow, \downarrow$  e  $\alpha \neq \beta$ , elas satisfazem  $F_{\alpha\beta}^{e,o}(\omega) = \pm F_{\alpha\beta}^{e,o}(-\omega)^*$ . Devido à Eq. (7.6) essas funções são tais que  $F_{\uparrow\downarrow}^e(\omega) = -F_{\downarrow\uparrow}^e(\omega)$  e  $F_{\uparrow\downarrow}^o(\omega) = +F_{\downarrow\uparrow}^o(\omega)$ , o que significa que  $F_{\uparrow\downarrow}^e$  e  $F_{\downarrow\uparrow}^e$  descrevem um pareamento do tipo *even-frequency* singlete, enquanto  $F_{\uparrow\downarrow}^o$  e  $F_{\downarrow\uparrow}^o$  descrevem um pareamento do tipo *odd-frequency* tripleto. Quando  $\mathbf{S} = \hat{z}$  as funções  $F_{\uparrow\uparrow}$  e  $F_{\downarrow\downarrow}$  são nulas.

Por outro lado verificamos que quando as impurezas estão totalmente polarizadas na direção  $\hat{x}$  ou  $\hat{y}$ , as funções  $F_{\uparrow\downarrow}$  e  $F_{\downarrow\uparrow}$  possuem unicamente a componente de *even- $\omega$* , enquanto a componente de *odd- $\omega$*  está presente nas funções  $F_{\downarrow\downarrow}$  e  $F_{\uparrow\uparrow}$ . De modo geral, para qualquer direção  $\mathbf{S}$  a matriz com as funções de Green anômalas retardadas  $\hat{F}(\omega)$  satisfaz

$$\hat{F}(\omega) = \begin{pmatrix} F_{\uparrow\uparrow}(\omega) & F_{\uparrow\downarrow}(\omega) \\ F_{\downarrow\uparrow}(\omega) & F_{\downarrow\downarrow}(\omega) \end{pmatrix} = F^e(\omega)(i\sigma_y) + F^o(\omega)(\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{\sigma})(i\sigma_y), \quad (7.7)$$

onde  $F^e(\omega)$  e  $F^o(\omega)$  independem da direção de  $\mathbf{S}$ . Semelhantemente, a matriz  $2 \times 2$  com as funções de Green normais satisfaz

$$\hat{G}_{2 \times 2}(\omega) = \begin{pmatrix} G_{\uparrow}(\omega) & G_{\uparrow\downarrow}(\omega) \\ G_{\downarrow\uparrow}(\omega) & G_{\downarrow}(\omega) \end{pmatrix} = g^e(\omega)\mathbf{1} + g^o(\omega)(\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (7.8)$$

onde  $G_{\alpha\beta}(\omega)$  é o propagador eletrônico de um estado com spin  $\beta$  para um estado com spin  $\alpha$ . Verificamos que  $\text{Im}[g^e(\omega)]$  e  $\text{Re}[g^o(\omega)]$  são funções simétricas, enquanto  $\text{Re}[g^e(\omega)]$  e  $\text{Im}[g^o(\omega)]$  são funções antissimétricas, se  $\delta_\mu = \mu = 0$ . As Eqs. (7.7)-(7.8) são válidas para sítios magnéticos e sítios não-magnéticos.

Também verificamos numericamente que as funções de Green avançadas satisfazem  $\hat{F}^A(\omega) = F^e(\omega)^*(i\sigma_y) + F^o(\omega)^*(\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{\sigma})(i\sigma_y)$  e  $\hat{G}_{2 \times 2}^A(\omega) = g^e(\omega)^*\mathbf{1} + g^o(\omega)^*(\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ , onde as funções  $F^{e,o}(\omega)$ ,  $g^{e,o}(\omega)$  são as mesmas que aparecem nas expressões para funções de Green retardadas. Finalmente, a matriz com as funções retardadas  $\hat{F}$  satisfaz  $\mathcal{S}POT(\hat{F}) = -\hat{F}^A$ , que é uma condição necessária para as funções de Green anômalas no eixo real, devido à antissimetria dos elétrons [19] (ver seção 6.2).

Uma vez que compreendemos como a direção de  $\mathbf{S}$  afeta as funções de Green, a partir daqui nos restringimos à situação em que todos os spins clássicos estão na direção  $\mathbf{S} = +\hat{z}$ . Nesse caso as densidades de estados de elétrons com spin para cima e para baixo carregam informações de ambas as funções  $g^e$  e  $g^o$ , enquanto a função de Green anômala  $F_{\uparrow\downarrow}$  carrega informações de  $F^e$  e  $F^o$ .

Conforme discutido anteriormente, ao posicionar todos os spins clássicos na direção  $\mathbf{S} = \hat{z}$  é possível usar o *spinor* de Nambu  $\phi_i = (c_{i,\uparrow}(\tau) \quad c_{i,\downarrow}^\dagger(\tau))^T$  e definir a função de Green como uma matriz  $2 \times 2$ ,  $\hat{G}_i(\tau) = -\langle T\phi_i(\tau)\phi_i^\dagger(0) \rangle$ . A partir da equação de DMFT (7.4) para esta função de Green, derivamos analiticamente a relação

$$\hat{G}_{nm}(\omega; x, J, \Delta, \mu) = -\hat{G}_m^*(-\omega + J; 1 - x, J, -\Delta, -\mu). \quad (7.9)$$

Esta equação foi derivada no caso particular em que  $\delta_\mu = 0$  e considerando o mesmo valor para o pareamento  $\Delta$  em sítios  $m$  e  $nm$ . Esta relação basicamente nos diz que, ao inverter a concentração de impurezas  $x \rightarrow 1 - x$ , a DOS de elétrons com spin para cima em sítios não magnéticos (ou magnéticos) se torna a DOS de elétrons com spin para baixo em sítios magnéticos (ou não magnéticos), com energia  $\omega$  deslocada por  $J$ . Algo similar ocorre com a função de Green anômala: tal função em sítios magnéticos se torna a função em sítios não magnéticos com energia deslocada por um termo  $J$ . Este deslocamento energético por um termo  $J$  sugere que a parte real (imaginária) da função de Green anômala não é mais simétrica (antissimétrica). Portanto, o pareamento dos elétrons no material superconductor será uma superposição de pareamentos dos tipos *even- $\omega$*  e *odd- $\omega$* .

A seguir veremos mais algumas características das densidades de estados e funções de Green anômalas no nosso modelo DMS, as quais podem ser verificadas por meio da Fig. 35, que foi obtida utilizando  $t = 1$ ,  $\mu = -0.05$ ,  $\delta_\mu = -0.5$ ,  $\Delta = -0.1$ ,  $\Delta_m = 0$ ,  $J = -0.65$ ,  $x = 0.01$  e *broadening*  $\eta = 10^{-3}$  (necessário quando se faz a continuação analítica  $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$ ). Nas Figs. 35(a), 35(c) e 35(e) são mostradas, respectivamente, a DOS,  $\text{Re}[F_{\uparrow\downarrow}(\omega)]$  e  $\text{Im}[F_{\uparrow\downarrow}(\omega)]$  em sítios magnéticos, enquanto nas Figs. 35(b), 35(d) e 35(f) são mostradas essas mesmas funções em sítios não magnéticos.

Embora tenhamos considerado  $\Delta_m = 0$ , um gap superconductor é gerado nos sítios magnéticos devido ao efeito de proximidade com os sítios superconductores [107]. Também ocorre o surgimento de bandas de impurezas dentro do gap, as quais são totalmente polarizadas [ver Fig. 35(a)], ou seja, uma banda é formada unicamente por elétrons com spin para cima e outra banda corresponde aos de spin para baixo quando todas as impurezas clássicas estão polarizadas na mesma direção  $\mathbf{S} = \hat{z}$ . Essa mesma polarização das bandas de Shiba ocorre nos sítios não magnéticos, embora em tais sítios essas bandas sejam menores [ver Fig. 35(b)].

As bandas de Shiba se aproximam ao aumentar  $|J|$ , se cruzam quando  $|J| \sim 1$  e outras bandas de impurezas de maiores energias surgem quando  $|J|$  é grande o suficiente, de forma semelhante à que foi vista na seção 7.3, em que os spins clássicos podem possuir várias direções. No caso da presente seção, porém, todas as bandas de impurezas são polarizadas, i.e. cada uma delas corresponde a apenas uma espécie eletrônica (spin para cima ou spin para baixo). É possível perceber que, no sistema fora de simetria partícula-buraco ( $\mu \neq 0$  ou  $\delta_\mu \neq 0$ ), as bandas de impurezas têm pesos diferentes para cada espécie eletrônica. Por exemplo, na Fig. 35(a) a banda de Shiba de elétrons com spin para cima possui um peso espectral maior do que a banda de spin para baixo.

Pelas Figs. 35(c) e 35(e) podemos notar o surgimento de pareamento tipo *odd- $\omega$*  em sítios magnéticos devido à quebra de simetria de reversão temporal causada pelo campo magnético efetivo nas impurezas [19], de forma semelhante à que acontece no caso de uma única impureza magnética [93, 126]. Este pareamento *odd- $\omega$*  está presente em todo o

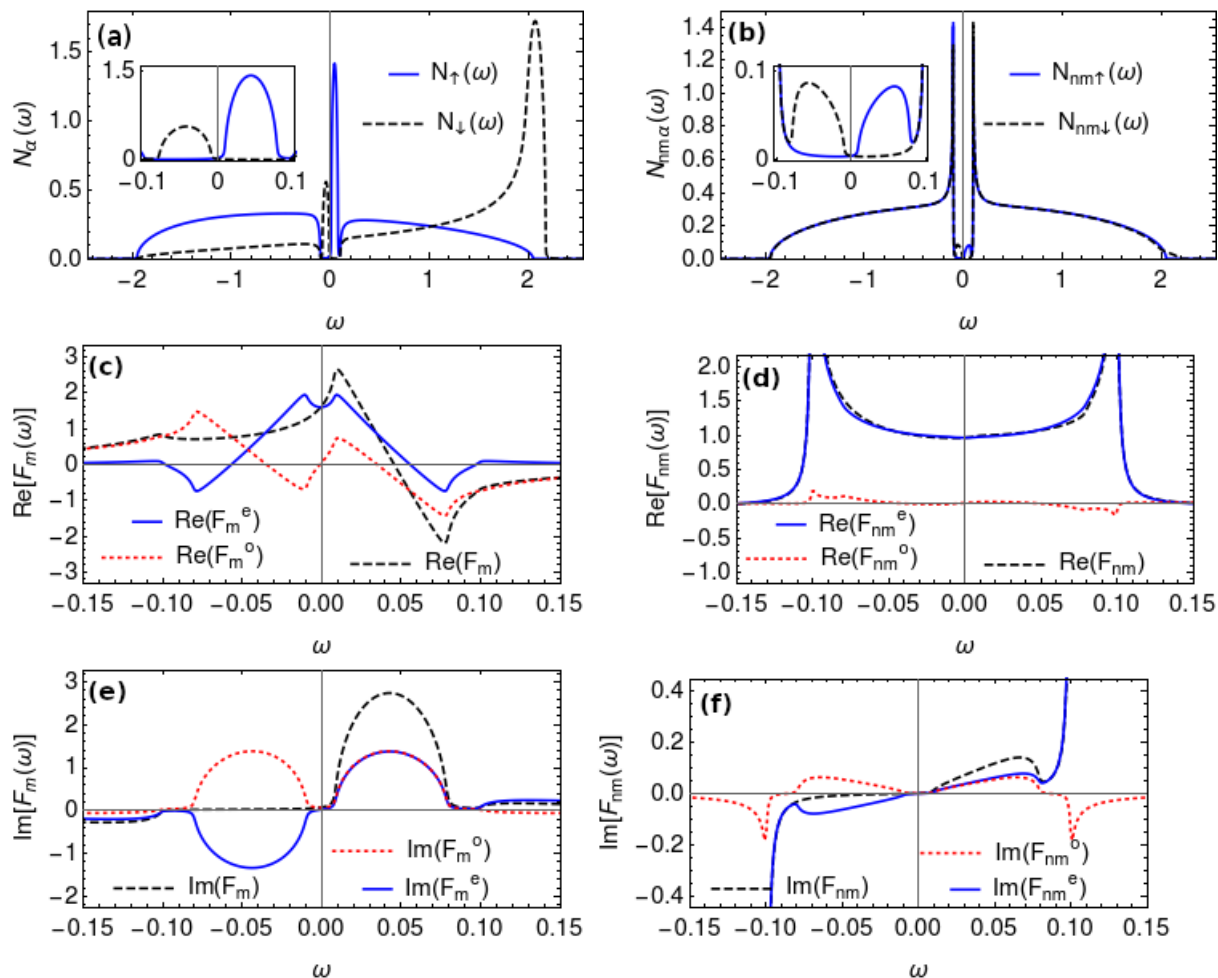


Figura 35 – Resultados numéricos obtidos utilizando as equações de DMFT (7.2) com  $t = 1$ ,  $\mu = -0.05$ ,  $\delta_\mu = -0.5$ ,  $\Delta = -0.1$ ,  $\Delta_m = 0$ ,  $J = -0.65$ ,  $x = 0.01$  e *broadening*  $\eta = 10^{-3}$ . O painel (a) mostra todo o espectro de  $N_\uparrow$  e  $N_\downarrow$  em sítios  $m$ , enquanto (b) mostra estas funções em sítios  $nm$ . O *inset* destas figuras mostra o comportamento de  $N_\uparrow$  e  $N_\downarrow$  em baixas energias  $|\omega| < |\Delta|$ . A parte real de  $F_{\uparrow\downarrow}$  em sítios  $m$  é mostrada em (c) e em sítios  $nm$  é mostrada em (d), enquanto a parte imaginária de  $F_{\uparrow\downarrow}$  em sítios  $m$  é mostrada em (e) e em sítios  $nm$  em (f), para baixas energias. As componentes de *even- $\omega$*  e *odd- $\omega$*  destas funções também são mostradas.

sistema, sendo consideravelmente menor em sítios não magnéticos [compare os painéis (c) e (e) com os (d) e (f)]. Na próxima subseção mostramos como o pareamento supercondutor pode ser obtido a partir da DOS em sítios magnéticos.

#### 7.4.2 Extrair o pareamento *odd-frequency* da DOS

Enquanto a densidade de estados pode ser obtida experimentalmente a partir de medidas de STS (*scanning tunneling spectroscopy*), geralmente é difícil extrair a função supercondutora  $F(\omega)$  e, em particular, a componente de *odd- $\omega$* . Recentemente foi mostrado que esta função supercondutora pode ser extraída num sistema composto por

uma única impureza magnética num supercondutor. Em trabalho do qual participei [93], exploramos o problema de uma única impureza e derivamos uma expressão analítica relacionando a parte simétrica da densidade de estados no sítio magnético com a parte imaginária de  $F_m^o(\omega)$ , aplicando, em seguida, tal expressão a medições de STS. Na presente seção nós generalizamos a abordagem desenvolvida para uma impureza para o presente sistema composto por várias impurezas magnéticas diluídas num supercondutor (DMS), no qual há bandas de Shiba com pareamento *odd- $\omega$*  delocalizados no sistema. Para esta finalidade, primeiramente investigamos como as bandas de Shiba escalam com a concentração de desordem  $x$ . Em seguida, derivamos expressões analíticas relacionando a densidade de estados com a função supercondutora. Os resultados apresentados aqui podem ser encontrados na Ref. [94] já citada.

#### 7.4.2.1 Bandas de Shiba e a concentração de impurezas

Note, na Fig. 35(a), que as bandas de Shiba em sítios magnéticos possuem um formato semicircular, o qual reflete o formato da densidade de estados da rede de Bethe  $D(\varepsilon)$ . De fato, a presença de uma banda de quasipartículas com uma massa renormalizada e uma densidade de estados que reflete a DOS da rede não interagente é uma característica de soluções da DMFT para estados metálicos fortemente interagentes [140]. Aqui, os estados fortemente correlacionados são aqueles correspondentes à rede de sítios magnéticos, que estão sujeitos à interação  $J$ . Assim, é de se esperar que esta banda de quasipartículas carregue informações sobre a concentração de impurezas  $x$ .

Fizemos vários gráficos das bandas de Shiba em sítios  $m$  variando  $x$  e mantendo os demais parâmetros do sistema constantes, considerando valores pequenos para o *broadening*  $\eta$ . Percebemos que a altura das bandas de Shiba escala com  $\sim x^{-1/2}$ , enquanto a largura destas bandas escala com  $\sim x^{1/2}$ . Considerando isto e que o formato das bandas de Shiba reflete o formato da rede não interagente  $D(\varepsilon)$ , derivamos que

$$N_{\uparrow/\downarrow}(\omega) = \frac{a_{\uparrow/\downarrow}}{bx^{1/2}} D\left(\frac{\omega \mp E_0}{bx^{1/2}}\right), \quad (7.10)$$

onde  $E_0$ ,  $b$ ,  $a_{\uparrow}$  e  $a_{\downarrow}$  dependem dos parâmetros do modelo  $t$ ,  $\mu$ ,  $\delta_{\mu}$ ,  $\Delta$ ,  $\Delta_m$  e  $J$ , mas não variam significativamente com  $x$  no regime em que  $x \ll 1$ . Observe que  $\omega = \pm E_0$  são as posições centrais das bandas de Shiba. A princípio  $a_{\uparrow}$  e  $a_{\downarrow}$ , que são associados às alturas das duas bandas de Shiba, podem ser diferentes um do outro. Na Fig. 36(a) mostramos a banda de Shiba superior (com  $\omega > 0$ ) para vários valores diferentes de  $x$ , utilizando os mesmos parâmetros da Fig. 35 mas com um *broadening* menor,  $\eta = 10^{-4}$ . O colapso de todas as curvas sobre a mesma curva demonstra a validade da escala com  $x$  discutida acima.

Uma expressão semelhante se aplica para  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$ ,

$$\text{Im}[F_m^o(\omega)] = \frac{a_F}{bx^{1/2}} \sum_{s=\pm 1} D\left(\frac{\omega - sE_0}{bx^{1/2}}\right). \quad (7.11)$$

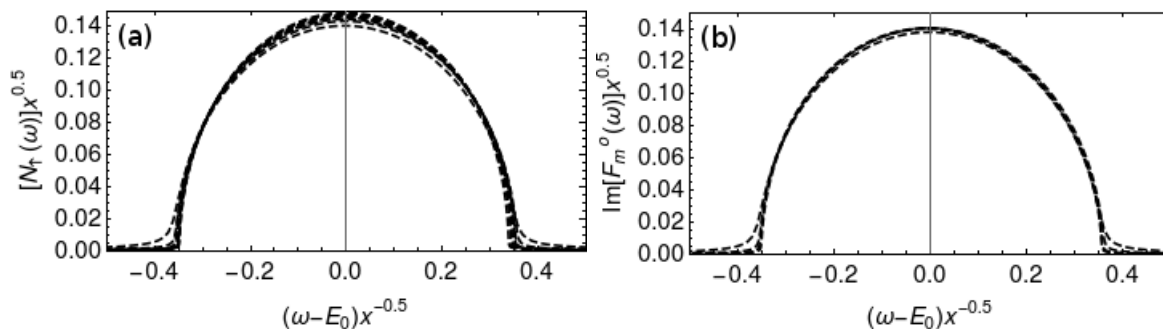


Figura 36 – Bandas de Shiba centradas em  $E_0 > 0$  usando os mesmos parâmetros da Fig. 35, mas com  $\eta = 10^{-4}$  e fazendo uma escala com  $x$ . Os eixos horizontais foram multiplicados por  $x^{-1/2}$  e os verticais por  $x^{1/2}$ . (a) mostra  $N_{\uparrow}$  usando  $x = 0.0001, 0.001, 0.005, 0.01, 0.015, 0.02, 0.025, 0.03$ . (b) mostra  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$  usando  $x = 0.0001, 0.001, 0.005, 0.01$ . As bandas de Shiba se sobrepõem para  $x > 0.01$  e  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$  se torna a superposição de dois semicírculos. Por esta razão as curvas com valores mais altos de  $x$  foram omitidas em (b). Foi importante considerar um *broadening* pequeno para que as curvas viessem a se sobreporem adequadamente.

Veja na Fig. 36(b) que as curvas de  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$  também se colapsam ao utilizar a mesma escala com  $x$ . Note que os parâmetros  $b$  e  $E_0$  que aparecem nesta expressão são os mesmos que aparecem na Eq. (7.10), para um dado valor dos parâmetros do Hamiltoniano  $t, \mu, \delta_{\mu}, \Delta, \Delta_m$  e  $J$ . Ou seja, as posições, a largura e o formato das bandas de Shiba na DOS correspondem às posições, a largura e o formato das ressonâncias que aparecem em  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$ . O que varia é a altura das ressonâncias, que em  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$  é proporcional a  $a_F$ . Note na Eq. (7.11) que, dependendo dos valores de  $E_0$  e  $bx^{1/2}$ , as duas ressonâncias podem se sobreporem, ou seja, a banda de Shiba de spin para cima pode se sobreporem com a de spin para baixo.

As Eqs. (7.10)-(7.11) nos levam a uma relação útil entre o pareamento tipo *odd- $\omega$*  e a densidade de estados,

$$\text{Im}[F_m^o(\omega)] = a_F \left[ \frac{N_{\uparrow}(\omega)}{a_{\uparrow}} + \frac{N_{\downarrow}(\omega)}{a_{\downarrow}} \right]. \quad (7.12)$$

As expressões (7.10)-(7.12) são válidas mesmo quando as bandas de Shiba se sobrepõem. A Eq. (7.12), obtida a partir de observações numéricas, é semelhante à expressão que foi obtida analiticamente no caso de uma única impureza magnética [93]. Assim, neste trabalho se demonstra que a validade desta expressão é estendida para o caso de bandas de Shiba delocalizadas ao longo de um supercondutor com uma concentração  $x$  de impurezas. Na subsecção 7.4.2.2 demonstramos analiticamente a validade desta expressão.

As Eqs. (7.10)-(7.11) foram obtidas utilizando valores muito pequenos para o *broadening*,  $\eta = 10^{-4} \simeq 0^+$ . Neste caso, observamos que a função de Green em torno de

uma banda de Shiba possui a forma

$$G_{m\uparrow/\downarrow}(\omega) = \pi f_{\uparrow/\downarrow}\omega + d_{\uparrow/\downarrow} - i\pi \frac{a_{\uparrow/\downarrow}}{bx^{1/2}} D\left(\frac{\omega \mp E_0}{bx^{1/2}}\right), \quad (7.13)$$

com parâmetros adicionais  $f_{\uparrow/\downarrow}$  e  $d_{\uparrow/\downarrow}$ . A fim de considerar valores finitos para  $\eta$ , tais expressões precisam ser generalizadas. Substituindo  $\omega \rightarrow \omega + i\eta$  na expressão anterior podemos encontrar uma expressão para  $N_{\uparrow/\downarrow}(\omega) = -\text{Im}[G_{m\uparrow/\downarrow}(\omega + i\eta)]/\pi$ . Impondo que  $\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} N_{\uparrow/\downarrow}(\omega) = 0$ , encontramos

$$N_{\uparrow/\downarrow}(\omega) = \frac{a_{\uparrow/\downarrow}}{bx^{1/2}} \left\{ \text{Re} \left[ D\left(\frac{\omega \mp E_0 + i\eta}{bx^{1/2}}\right) \right] - \frac{g\eta}{bx^{1/2}} \right\}. \quad (7.14)$$

Para a rede de Bethe que estamos considerando,  $g = D(0)/W = 1/(2\pi t^2)$ , onde  $W = 2t$  é um *cutoff* para a banda energética no estado normal. O mesmo raciocínio aplicado acima para obter uma expressão para  $N_{\uparrow/\downarrow}(\omega)$  com  $\eta$  finito pode ser usado para  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$ , de forma que chegamos em

$$\text{Im}[F_m^o(\omega)] = \frac{a_F}{bx^{1/2}} \sum_{s=\pm} \left\{ \text{Re} \left[ D\left(\frac{\omega - sE_0 + i\eta}{bx^{1/2}}\right) \right] - \frac{g\eta}{bx^{1/2}} \right\}. \quad (7.15)$$

As Eqs. (7.14)-(7.15) estão em perfeita concordância com curvas numéricas obtidas com diversos valores de  $\eta$  e  $x$ . No limite de uma única impureza  $x \rightarrow 0$  as Eqs. (7.14)-(7.15) se tornam funções Lorentzianas,

$$N_{\uparrow/\downarrow} = \frac{\eta a_{\uparrow/\downarrow}/\pi}{(\omega \mp E_0)^2 + \eta^2}, \quad (7.16)$$

$$\text{Im}[F_m^o(\omega)] = \sum_{s=\pm} \frac{\eta a_F/\pi}{(\omega - sE_0)^2 + \eta^2}. \quad (7.17)$$

Comparando as equações anteriores, concluímos que a Eq. (7.12) também é válida para valores arbitrários de  $x$  e  $\eta$ . Tal expressão nos permite determinar  $\text{Im}[F_m^o]$  a partir da densidade de estados, a qual pode ser obtida a partir de experimentos de STS, se tivermos informações sobre as constantes  $a_{\uparrow/\downarrow}$  e  $a_F$ . Conforme mencionado anteriormente, os coeficientes  $a_{\uparrow/\downarrow}$ ,  $a_F$  e  $E_0$  não variam significativamente com a concentração de impurezas no regime em que  $x \ll 1$ . Expressões para esses coeficientes podem ser mais facilmente determinadas no limite de uma única impureza, o que será calculado na subseção a seguir. Assim, se a concentração de impurezas  $x$  for pequena e se a densidade de estados no estado normal, na ausência de impurezas, puder ser assumida aproximadamente constante em baixas energias, o que é o caso de muitos dos supercondutores convencionais, temos que

$$a_F = \text{sgn}(J\Delta) \frac{\pi}{2} \sqrt{a_{\uparrow} a_{\downarrow}}. \quad (7.18)$$

Este resultado, que será demonstrado na próxima subseção, foi derivado considerando o caso em que  $\Delta_m = 0$ , de forma que o pareamento em sítios  $m$  é gerado por efeito de

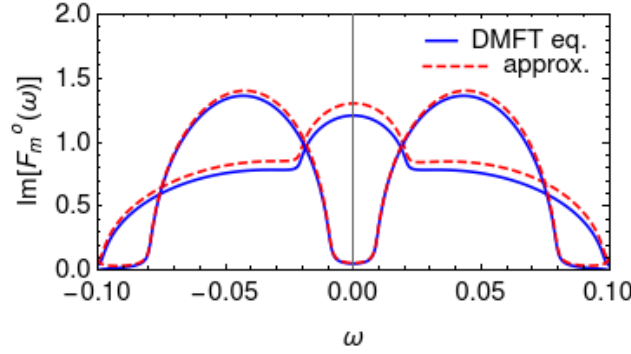


Figura 37 –  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$  obtida usando os mesmos parâmetros da Fig. 35 e  $\eta = 10^{-3}$ , mas com diferentes valores de  $x$ ,  $x = 0.01$ , onde as duas bandas de Shiba não se sobrepõem, e  $x = 0.03$ , onde as duas bandas se sobrepõem, dando origem a uma ressonância em torno de  $\omega = 0$ . As linhas contínuas foram obtidas utilizando as equações de DMFT (7.2), enquanto as linhas tracejadas correspondem à Eq. (7.19).

proximidade. Substituindo esta expressão na Eq. (7.12) encontramos a seguinte expressão, a qual relaciona o pareamento *odd- $\omega$*  com as densidades de estados  $N_{\uparrow/\downarrow}(\omega)$ ,

$$\text{Im}[F_m^o(\omega)] = \text{sgn}(J\Delta) \frac{\pi}{2} \sqrt{N_{\uparrow}(E_0)N_{\downarrow}(-E_0)} \left[ \frac{N_{\uparrow}(\omega)}{N_{\uparrow}(E_0)} + \frac{N_{\downarrow}(\omega)}{N_{\downarrow}(-E_0)} \right]. \quad (7.19)$$

Note que em muitos casos as duas bandas de Shiba não se sobrepõem em  $\omega = 0$  e assim possuem polarização de spin, como mostrado na Fig. 35(a). Neste caso podemos identificar  $N_{\uparrow}(\omega) = N(\omega > 0)$  e  $N_{\downarrow}(\omega) = N(\omega < 0)$ , onde  $N(\omega) = N_{\uparrow}(\omega) + N_{\downarrow}(\omega)$  é a densidade de estados total, a qual é mais facilmente obtida a partir de medições convencionais de STS. Então podemos escrever

$$\text{Im}[F_m^o(\omega)] = \text{sgn}(J\Delta) \frac{\pi}{2} \sqrt{N(E_0)N(-E_0)} \left[ \frac{N(\omega)}{N(\text{sgn}(\omega)E_0)} \right]. \quad (7.20)$$

Mesmo quando as duas bandas de YSR se sobrepõem perto de  $\omega = 0$ , ainda pode ser possível realizar um ajuste experimental da densidade de estados que separe as componentes  $N_{\uparrow/\downarrow}(\omega)$ . Então a Eq. (7.19) pode ser usada como uma boa aproximação, se as bandas de Shiba se sobrepõem em um curto intervalo dentro do gap supercondutor. Quando não for possível realizar este ajuste experimental da densidade de estados, pode-se tentar medir as componentes  $N_{\uparrow/\downarrow}(\omega)$  separadamente através de STS dependente de spin [141].

Na Fig. 37 mostramos  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$  obtida para diferentes valores de  $x$ , incluindo um caso em que as bandas de Shiba se sobrepõem em torno de  $\omega = 0$ . As linhas tracejadas foram obtidas a partir da Eq. (7.19) e são comparadas com as soluções diretas das equações de DMFT (7.2), mostradas em linhas contínuas. A proximidade dessas curvas evidencia a validade da análise e resultados apresentados aqui. Por fim, note que após obter  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$  por meio do método apresentado aqui, através das relações de Kramers-Kronig podemos também obter  $\text{Re}[F_m^o(\omega)]$ .

Sabemos que a supercondutividade é rapidamente destruída à medida em que se aumenta a concentração de impurezas magnéticas [21, 22]. Por este motivo as expressões que mostramos aqui só são válidas se a concentração de impurezas for pequena o suficiente.

#### 7.4.2.2 Derivando os resultados

Nesta subseção primeiro demonstramos analiticamente a validade da Eq. (7.12) para uma densidade pequena de impurezas  $x \ll 1$  a partir das equações de DMFT. Em seguida derivamos expressões para os coeficientes  $a_{\uparrow/\downarrow}$  e  $a_F$  no limite de uma única impureza magnética no sistema, também utilizando as equações de DMFT para esta finalidade. Seguimos aqui alguns dos passos dados em [93]. Por simplicidade consideramos que  $\Delta_m = 0$ , embora as contas possam ser generalizadas para permitir  $\Delta_m \neq 0$ .

Pelas Eqs. (7.4), temos

$$\hat{G}_m^{-1} = \hat{G}_{nm}^{-1} + \hat{R}, \quad (7.21)$$

onde  $\hat{R} = \delta_\mu \tau^z + \Delta \tau^x - J \mathbf{1}$ . Substituindo as expressões para as inversas das matrizes  $2 \times 2$   $\hat{G}_m$  e  $\hat{G}_{nm}$  na Eq. (7.21), obtivemos as relações

$$\frac{F_m(\omega)}{\det \hat{G}_m(\omega)} = \frac{F_{nm}(\omega)}{\det \hat{G}_{nm}(\omega)} - \Delta, \quad (7.22)$$

$$\frac{G_{m\uparrow}(\omega)}{\det \hat{G}_m(\omega)} = \frac{G_{nm\uparrow}(\omega)}{\det \hat{G}_{nm}(\omega)} - J - \delta_\mu, \quad (7.23)$$

$$-\frac{G_{m\downarrow}^*(-\omega)}{\det \hat{G}_m(\omega)} = -\frac{G_{nm\downarrow}^*(-\omega)}{\det \hat{G}_{nm}(\omega)} - J + \delta_\mu. \quad (7.24)$$

Da Eq. (7.22) se encontra uma expressão para  $\det \hat{G}_m(\omega)$  e, usando-a nas Eqs. (7.23)-(7.24), se encontra

$$\begin{aligned} N_\uparrow(\omega) \pm N_\downarrow(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{F_m(\omega)}{F_{nm}(\omega) - \Delta \det \hat{G}_{nm}(\omega)} \left[ G_{nm\uparrow}(\omega) - (J + \delta_\mu) \det \hat{G}_{nm}(\omega) \right] \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{F_m^*(-\omega)}{F_{nm}^*(-\omega) - \Delta \det \hat{G}_{nm}^*(-\omega)} \left[ G_{nm\downarrow}(\omega) + (J - \delta_\mu) \det \hat{G}_{nm}^*(-\omega) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Note que a Eq. (7.25) foi obtida das equações de DMFT (7.4) sem nenhuma aproximação adicional. Assumindo uma baixa densidade de impurezas  $x \ll 1$  podemos supor que os sítios  $nm$  são fracamente afetados pelas impurezas. Então podemos escrever  $\hat{G}_{nm}(\omega) \simeq \hat{G}_s(\omega)$ , em que  $\hat{G}_s$  é a função de Green do supercondutor limpo, e a Eq. (7.25) leva a

$$N_\uparrow(\omega) \pm N_\downarrow(\omega) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \left[ \frac{G_s(\omega) - \delta_\mu \det \hat{G}_s(\omega)}{F_s(\omega) - \Delta \det \hat{G}_s(\omega)} F_m^{e/o}(\omega) - \frac{J \det \hat{G}_s(\omega)}{F_s(\omega) - \Delta \det \hat{G}_s(\omega)} F_m^{o/e}(\omega) \right], \quad (7.26)$$

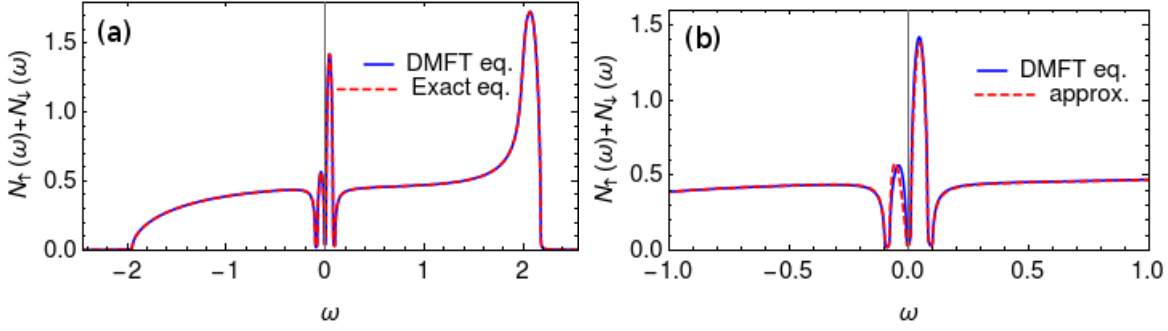


Figura 38 – Densidade de estados,  $N_{\uparrow}(\omega) + N_{\downarrow}(\omega)$ , usando os mesmos parâmetros da Fig. 35 com  $x = 0.01$  e  $\eta = 10^{-3}$ . As linhas sólidas azuis correspondem à solução das equações de DMFT (7.2). Em (a), a linha tracejada vermelha corresponde à Eq. (7.25), mostrando que ela é exata para todo o espectro. Em (b), a linha tracejada vermelha corresponde à expressão aproximada (7.26), mostrando que esta última é uma boa aproximação para a primeira para um longo intervalo de energias.

onde  $G_s(\omega)$  e  $F_s(\omega)$  são funções de Green normal e anômala, respectivamente, e são elementos da matriz  $\hat{G}_s(\omega)$ .

A Fig. 38 compara  $N_{\uparrow}(\omega) + N_{\downarrow}(\omega)$  obtida numericamente a partir das equações de DMFT (7.4) (curva azul contínua) com expressões analíticas (curva vermelha tracejada). A Eq. (7.25) é plotada na Fig. 38(a), enquanto a Eq. (7.26) é mostrada na Fig. 38(b). Foram usados  $G_s$ ,  $F_s$ ,  $G_{nm}$ ,  $F_{nm}$ ,  $F_m^e$  e  $F_m^o$  obtidos numericamente. A Eq. (7.25) é exata e, portanto, na Fig. 38(a) as duas curvas são idênticas em todo o espectro. Note pela Fig. 38(b) que a Eq. (7.26) é uma boa aproximação para a solução da equação de DMFT para um longo intervalo de energias. Contudo, esta aproximação pode ser inapropriada para altas energias  $|\omega| \sim W$ , onde  $\hat{G}_{nm}(\omega)$  pode ser mais fortemente afetado pelas impurezas e a aproximação  $\hat{G}_{nm}(\omega) \simeq \hat{G}_s(\omega)$  se torna falha.

Para  $|\omega| < |\Delta|$ , i.e. dentro gap supercondutor, podemos aproximar o denominador da Eq. (7.26) por  $F_s(\omega) - \Delta \det \hat{G}_s(\omega) \simeq F_s(\omega)$  se  $|\Delta/t| \ll 1$ , que é o caso dos supercondutores convencionais. Da definição  $F_m^{e/o}(\omega) = [F_m(\omega) \pm F_m(-\omega)^*]/2$ , calculamos que

$$\text{Im}\{F_m^e(\omega) - \text{sgn}(\omega E_0)[F_m^o(\omega) - F_m(-\text{sgn}(E_0)|\omega|)]\} = 0. \quad (7.27)$$

Multiplicando esta igualdade por  $[G_s(\omega) - G_s^*(-\omega)]/[\pi F_s(\omega)]$  e adicionando o resultado à Eq. (7.26), encontramos

$$\begin{aligned} N_{\uparrow}(\omega) + N_{\downarrow}(\omega) &= C_o(\omega)\text{Im}[F_m^e(\omega)] + C_e(\omega)\text{Im}[F_m^o(\omega)] \\ &\quad + C_r(\omega)\text{Im}[F_m(-\text{sgn}(E_0)|\omega|)], \end{aligned} \quad (7.28)$$

onde

$$\begin{aligned}
C_o(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \frac{G_s(\omega) + G_s^*(-\omega)}{F_s(\omega)} + \frac{2\delta_\mu \det \hat{G}_s(\omega)}{\pi F_s(\omega)}, \\
C_e(\omega) &= \frac{2J \det \hat{G}_s(\omega)}{\pi F_s(\omega)} - \frac{\text{sgn}(\omega E_0) G_s(\omega) - G_s^*(-\omega)}{\pi F_s(\omega)}, \\
C_r(\omega) &= \frac{\text{sgn}(\omega E_0) G_s(\omega) - G_s^*(-\omega)}{\pi F_s(\omega)}.
\end{aligned} \tag{7.29}$$

Estas funções podem ser simplificadas para  $\omega$  dentro do gap, onde as partes imaginárias de  $G_s(\omega)$  e  $F_s(\omega)$  se anulam. Para uma dada densidade de estados  $D(\epsilon)$ , estes coeficientes  $C_o(\omega)$ ,  $C_e(\omega)$  e  $C_r(\omega)$  podem ser expressos em termos dos parâmetros do modelo (veja o Apêndice C.1) fazendo uma expansão em série de potências de  $D(\epsilon)$  em torno de  $\epsilon = \mu$  e mantendo os termos de primeira ordem. Encontramos

$$\begin{aligned}
C_o(\omega) &\simeq \left[ -\frac{4}{\pi^2} \frac{D'(\mu)W}{D(\mu)} + 2\delta_\mu D(\mu) \right] \frac{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}{\Delta}, \\
C_e(\omega) &\simeq 2J D(\mu) \frac{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}{\Delta} - \text{sgn}(E_0) \frac{2|\omega|}{\pi \Delta}, \\
C_r(\omega) &\simeq \text{sgn}(E_0) \frac{2|\omega|}{\pi \Delta}.
\end{aligned} \tag{7.30}$$

Aqui,  $W$  é um *cuttoff* proporcional à largura de banda e  $D'(\epsilon)$  é a derivada da densidade de estados. A função  $\text{Im}[F_m(\omega)]$  se anula fora da ressonância que ocorre em torno de  $\omega = E_0$  [veja por exemplo a Fig. 35(e)] e então a função  $\text{Im}[F_m(-\text{sgn}(E_0)|\omega|)]$ , que aparece na Eq. (7.28), se anula para todo  $\omega$  onde as bandas de Shiba não se sobrepõem. Além disso, se  $x$  é pequeno o suficiente, é esperado que estas bandas venham a se sobrepor apenas para  $|\omega| \ll |\Delta|$ , onde  $C_r(\omega)$  é desprezível [veja a Eq. (7.30)]. Então o último termo da Eq. (7.28) será desprezado.

A função  $\text{Im}[F_m^e(\omega)]$  é antissimétrica, enquanto  $\text{Im}[F_m^o(\omega)]$ ,  $C_e(\omega)$  e  $C_o(\omega)$  são simétricas em relação a  $\omega$ . Extraíndo a parte simétrica ( $s$ ) e a parte antissimétrica ( $a$ ) da Eq. (7.28) obtemos

$$[N_\uparrow(\omega) + N_\downarrow(\omega)]^{s/a} \simeq C_{e/o}(\omega) \text{Im}[F_m^{o/e}(\omega)]. \tag{7.31}$$

Agora note que as funções  $N(\omega) = N_\uparrow(\omega) + N_\downarrow(\omega)$  e  $\text{Im}[F_m^{o/e}(\omega)]$  se anulam rapidamente quando se afasta de  $\omega = E_0$ , enquanto  $C_o(\omega)$  e  $C_e(\omega)$  variam lentamente perto de  $\omega = E_0$ . Então podemos substituir  $C_{e/o}(\omega)$  por  $C_{e/o}(E_0)$ :

$$[N_\uparrow(\omega) + N_\downarrow(\omega)]^{s/a} \simeq C_{e/o}(E_0) \text{Im}[F_m^{o/e}(\omega)]. \tag{7.32}$$

A Eq. (7.32) é, portanto, uma boa aproximação mesmo quando as bandas de YSR se sobrepõem, se esta sobreposição ocorre num curto intervalo dentro do gap.

Agora derivamos a relação entre o pareamento *odd- $\omega$*  e a densidade de estados, Eq. (7.12), que inferimos através da análise de como as bandas de Shiba escalam com

$x$ . Primeiro note que integrando a Eq. (7.10) se encontra  $\int_{-\infty}^{+\infty} N_{\uparrow/\downarrow} d\omega = a_{\uparrow/\downarrow}$ , e então  $N_{\uparrow}(-\omega)/a_{\uparrow} = N_{\downarrow}(\omega)/a_{\downarrow}$ . Usando esta relação na Eq. (7.32) se recupera a Eq. (7.12) desde que

$$a_F = \frac{a_{\uparrow} + a_{\downarrow}}{2C_e(E_0)}. \quad (7.33)$$

Note que  $C_e(E_0)$  é calculado pela Eq. (7.30) e, pela Eq. (7.12), podemos finalmente extrair o pareamento  $odd-\omega$  se pudermos determinar o acoplamento magnético  $J$ . Como este acoplamento pode ser difícil de extrair a partir de experimentos, a seguir simplificamos a Eq. (7.33) utilizando o limite de uma única impureza. Lembre-se de que  $a_F$ ,  $a_{\uparrow}$  e  $a_{\downarrow}$  independem de  $x$  no regime  $x \ll 1$ .

A partir das equações de DMFT para uma única impureza,  $x \rightarrow 0$ , temos

$$\begin{aligned} \hat{G}_m &= [\hat{G}_s^{-1} + \hat{R}]^{-1} \\ &= \frac{1}{\det[\hat{G}_s^{-1}(\omega) + \hat{R}]} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (7.34)$$

onde

$$\begin{aligned} g_{11} &= \frac{G_s(\omega)}{\det[\hat{G}_s(\omega)]} - J - \delta_{\mu}, \\ g_{12} &= g_{21} = \frac{F_s(\omega)}{\det[\hat{G}_s(\omega)]} - \Delta, \\ g_{22} &= -\frac{G_s^*(-\omega)}{\det[\hat{G}_s(\omega)]} - J + \delta_{\mu}. \end{aligned} \quad (7.35)$$

Podemos considerar  $F_s(\omega)/\det\hat{G}_s(\omega) - \Delta \simeq F_s(\omega)/\det\hat{G}_s(\omega)$  para  $|\omega| < |\Delta|$  quando  $|\Delta|/t \ll 1$ . O denominador da Eq. (7.34) pode ser reescrito como

$$\frac{1}{\det[\hat{G}_s^{-1}(\omega) + \delta_{\mu}\tau^z - J\mathbf{1}]} = \frac{\det[\hat{G}_s(\omega)]}{F_s(\omega)\zeta(\omega)}, \quad (7.36)$$

onde

$$\zeta(\omega) = (J^2 - \delta_{\mu}^2) \frac{\det[\hat{G}_s(\omega)]}{F_s(\omega)} + \delta_{\mu} \frac{G_s(\omega) + G_s^*(-\omega)}{F_s(\omega)} - J \frac{G_s(\omega) - G_s^*(-\omega)}{F_s(\omega)} + F_s^{-1}(\omega). \quad (7.37)$$

Note que as funções que aparecem na Eq. (7.37) são dadas explicitamente nas Eqs. (C.6)-(C.9). Há um polo na função de Green quando a função  $\zeta(\omega)$  se anula, o qual produz os estados de YSR dentro do gap. Isso ocorre em  $\omega = E_0$  dado por

$$E_0 = -\text{sgn}(\alpha) \frac{|\Delta|\gamma}{\sqrt{\gamma^2 + 4\alpha^2}}, \quad (7.38)$$

onde definimos  $\gamma = 1 - h_A\beta + \beta^2 - \alpha^2$ ,  $\alpha = \pi D(\mu)J$ ,  $\beta = \pi D(\mu)\delta_{\mu}$  e  $h_A = 4D'(\mu)W/[\pi D(\mu)]$ .

Em seguida, realizando a inclusão de um *broadening*  $\eta$  finito nas funções  $G_s(\omega)$  e  $F_s(\omega)$ , substituindo essas expressões na Eq. (7.34) e fazendo uma expansão de  $\hat{G}_m(\omega)$  em torno de  $\omega = E_0$ , encontramos as expressões Lorentzianas das Eqs. (7.16)-(7.17), com a condição de que os coeficientes  $a_{\uparrow/\downarrow}$ ,  $a_F$  satisfaçam

$$a_{\uparrow/\downarrow} = \frac{2\pi D(\mu)|\alpha\Delta|[\gamma + 2\alpha^2 \pm \alpha(-h_A + 2\beta)]}{(\gamma^2 + 4\alpha^2)^{3/2}}, \quad (7.39)$$

$$a_F = \frac{\pi^2 D(\mu)\alpha\Delta}{\gamma^2 + 4\alpha^2}, \quad (7.40)$$

onde consideramos  $h_A = 4D'(\mu)W/[\pi D(\mu)] \ll 1$ , i.e. assumimos que a densidade de estados no estado normal é quase constante em baixas energias. A partir das Eqs. (7.39)-(7.40) calculamos que

$$a_F = \text{sgn}(\alpha\Delta)\frac{\pi}{2}\sqrt{a_{\uparrow}a_{\downarrow}}, \quad (7.41)$$

o que prova a Eq. (7.18). Também reescrevemos  $C_e(E_0)$ , calculado pela Eq. (7.30), usando a Eq. (7.38),

$$\begin{aligned} C_e(E_0) &= \frac{2\text{sgn}(\alpha\Delta)(\gamma + 2\alpha^2)}{\pi\sqrt{\gamma^2 + 4\alpha^2}} \\ &= \frac{\text{sgn}(\alpha\Delta)(a_{\uparrow} + a_{\downarrow})}{\pi\sqrt{a_{\uparrow}a_{\downarrow}}}. \end{aligned} \quad (7.42)$$

Conforme discutido anteriormente, embora a Eq. (7.41) tenha sido derivada no regime de uma única impureza, ela também é válida para uma concentração finita e pequena de impurezas. Assim, provamos a validade da Eq. (7.19), a qual nos permite obter o pareamento supercondutor do tipo *odd-frequency* em sítios magnéticos a partir de medições da densidade de estados. Vimos ao longo deste trabalho que um supercondutor magnético diluído possui pareamentos do tipo *even- $\omega$*  singlete e *odd- $\omega$*  tripleto. Na próxima seção utilizamos parâmetros de ordem para quantificar cada um desses pareamentos, bem como verificamos a presença de um outro tipo de pareamento supercondutor: *even- $\omega$*  tripleto de paridade espacial ímpar (e.g. de onda  $p$ ).

### 7.4.3 Cálculo dos parâmetros de ordem

Mencionamos na seção 7.3 que, quando há várias direções possíveis para os spins clássicos das impurezas, o pareamento supercondutor  $F(\omega)$  sofre algumas mudanças quando as bandas de Shiba se cruzam em  $J \simeq 1$ . Naquele caso havia uma mudança de sinal na componente *even- $\omega$*  em sítios magnéticos. No caso investigado na presente seção, onde todos os spins clássicos estão alinhados, há uma mudança de sinal na componente *even- $\omega$*  em sítios magnéticos e também na componente *odd- $\omega$*  nos sítios não magnéticos. Esta mudança no sinal de  $F^{e.o}(\omega)$  se dá em quase todo o espectro energético. Na presente

subseção investigamos evidências da existência de uma transição de fase quântica no sistema quando  $J \simeq 1$ . Também procuramos quantificar e comparar os diferentes pareamentos supercondutores que podem estar presentes no sistema. Para este fim definimos parâmetros de ordem independentes do tempo e da frequência  $\omega$ , os quais são mais fáceis de analisar do que a função supercondutora  $F(\omega)$  que temos usado até o momento. Discutimos um parâmetro de ordem para o pareamento do tipo *odd-frequency* seguindo as Refs. [19,104,125]. Para simplificar as contas, nesta subseção consideramos  $\delta_\mu = 0$ , de forma que todos os sítios, magnéticos e não magnéticos, possuem o mesmo potencial químico. Também usamos  $\Delta_m = \Delta_{nm} = \Delta$ , que é razoável em algumas situações em que o pareamento gerado por efeito de proximidade nos sítios  $m$  possui a mesma ordem de grandeza que em sítios  $nm$ . Utilizamos este regime apenas visando obter resultados preliminares. Tais resultados serão generalizados para valores arbitrários de  $\Delta_m$  e  $\delta_\mu$  num futuro próximo.

Considere as funções

$$F_{i,j}^s(\tau) = \frac{F_{i\uparrow,j\downarrow}(\tau) - F_{i\downarrow,j\uparrow}(\tau)}{2}, \quad (7.43)$$

$$F_{i,j}^{Tx}(\tau) = \frac{F_{i\downarrow,j\downarrow}(\tau) - F_{i\uparrow,j\uparrow}(\tau)}{\sqrt{2}}, \quad (7.44)$$

$$F_{i,j}^{Ty}(\tau) = -i \frac{F_{i\downarrow,j\downarrow}(\tau) + F_{i\uparrow,j\uparrow}(\tau)}{\sqrt{2}}, \quad (7.45)$$

$$F_{i,j}^{Tz}(\tau) = \frac{F_{i\uparrow,j\downarrow}(\tau) + F_{i\downarrow,j\uparrow}(\tau)}{\sqrt{2}}, \quad (7.46)$$

onde  $\tau$  é um tempo imaginário e  $F_{i\alpha,j\beta} = -\langle T_\tau c_{i\alpha}(\tau) c_{j\beta}(0) \rangle$ ,  $\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow$ . A função dada pela Eq. (7.43) se refere a um pareamento singlete de elétrons nos sítios  $i$  e  $j$  enquanto as Eqs. (7.44)-(7.46) são as componentes de um vetor de pareamento do tipo tripleto  $\mathbf{F}_{i,j}^T(\tau)$ . Quando  $i = j = 0$  omitimos um índice e usamos, para simplificar,  $F_0^s = F_{0,0}^s(\tau = 0)$  como parâmetro de ordem para o pareamento do tipo *even- $\omega$*  singlete e  $\mathbf{O}_0^T = \frac{d\mathbf{F}_{0,0}^T}{d\tau}(\tau = 0)$  como um parâmetro de ordem para o pareamento *odd- $\omega$*  tripleto no sítio  $i = 0$ . Ambos os parâmetros de ordem são do tipo onda  $s$ , uma vez que são pareamentos de elétrons no mesmo sítio.

A seguir derivamos uma expressão relacionando o parâmetro de ordem de *odd- $\omega$*  com outros parâmetros de ordem. Tomando a derivada de  $F_{0,\sigma\sigma'}(\tau) = -\langle T_\tau c_{0,\sigma}(\tau) c_{0,\sigma'}(0) \rangle$  e usando a equação de movimento  $\frac{dc_{0,\sigma}(\tau)}{d\tau} = [H, c_{0,\sigma}](\tau)$  encontramos

$$\frac{dF_{0,\sigma\sigma'}}{d\tau}(\tau = 0) = -\langle [H, c_{0,\sigma}] c_{0,\sigma'} \rangle. \quad (7.47)$$

Calculando o comutador acima, encontramos

$$[H, c_{0,\sigma}] = -\sum_{\langle 0,j \rangle} t_{j,0} c_{j\sigma} - J \sum_{\beta\theta} S_0^\theta \sigma_{\sigma\beta}^\theta c_{0\beta} + \Delta^* (c_{0\uparrow}^\dagger \delta_{\downarrow\sigma} - c_{0\downarrow}^\dagger \delta_{\uparrow\sigma}) + \mu c_{0,\sigma}, \quad (7.48)$$

onde  $\delta_{\alpha\beta} = 1$  se  $\alpha = \beta$  e  $\delta_{\alpha\beta} = 0$  se  $\alpha \neq \beta$ ,  $\sigma^\theta$  são as matrizes de Pauli com  $\theta = x, y, z$  e  $\mathbf{S}_0$  é o spin clássico no sítio  $i = 0$  se este sítio é um sítio magnético e é zero caso contrário.

Com as expressões anteriores calculamos que

$$\begin{aligned}
\frac{dF_{0,\uparrow\uparrow}}{d\tau}(\tau=0) &= -\sum_{\langle 0,j \rangle} t_{j,0} F_{j\uparrow,0\uparrow}(\tau=0) - J\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\uparrow\downarrow} F_{\downarrow\uparrow}(\tau=0) + \Delta^* \langle c_{0\downarrow}^\dagger c_{0\uparrow} \rangle + \mu \cdot 0, \\
\frac{dF_{0,\downarrow\downarrow}}{d\tau}(\tau=0) &= -\sum_{\langle 0,j \rangle} t_{j,0} F_{j\downarrow,0\downarrow}(\tau=0) - J\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\downarrow\uparrow} F_{\uparrow\downarrow}(\tau=0) - \Delta^* \langle c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow} \rangle + \mu \cdot 0, \\
\frac{dF_{0,\uparrow\downarrow}}{d\tau}(\tau=0) &= -\sum_{\langle 0,j \rangle} t_{j,0} F_{j\uparrow,0\downarrow}(\tau=0) - J\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\uparrow\uparrow} F_{\uparrow\downarrow}(\tau=0) + \Delta^* \langle c_{0\downarrow}^\dagger c_{0\downarrow} \rangle + \mu F_{\uparrow\downarrow}(0), \\
\frac{dF_{0,\downarrow\uparrow}}{d\tau}(\tau=0) &= -\sum_{\langle 0,j \rangle} t_{j,0} F_{j\downarrow,0\uparrow}(\tau=0) - J\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\downarrow\downarrow} F_{\downarrow\uparrow}(\tau=0) - \Delta^* \langle c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow} \rangle + \mu F_{\downarrow\uparrow}(0).
\end{aligned} \tag{7.49}$$

Finalmente, usando as relações acima chegamos na seguinte expressão para o parâmetro de ordem de *odd- $\omega$*  num sítio 0 qualquer,

$$\mathbf{O}_0^T = -\sqrt{2}J\mathbf{S}_0 F_0^s - \sqrt{2}\Delta^* \langle \mathbf{s}_0 \rangle + \mathbf{P}_0^T, \tag{7.50}$$

onde definimos

$$\langle \mathbf{s}_0 \rangle = \langle 1/2 \sum_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{0,\sigma'} \rangle, \tag{7.51}$$

$$\mathbf{P}_0^T = -\sum_{\langle 0,j \rangle} t_{j,0} \mathbf{F}_{j,0}^T(\tau=0). \tag{7.52}$$

Note que  $\langle \mathbf{s}_0 \rangle$  é a polarização induzida no sítio  $i=0$  enquanto  $\mathbf{F}_{j,0}^T(\tau=0)$  e  $\mathbf{P}_0^T$  descrevem um pareamento *even- $\omega$* , tripleto e de paridade ímpar na coordenada espacial (e.g. onda  $p$ ), onde  $j$  e 0 podem representar sítios magnéticos ou não magnéticos, desde que sejam primeiros vizinhos.

A Eq. (7.50) sugere que o aparecimento do pareamento *odd- $\omega$*  está relacionado com a coexistência da supercondutividade convencional e magnetismo [19] (veja os dois primeiros termos no lado direito da equação) e podem também estar relacionados com a presença do pareamento tripleto de paridade espacial ímpar. Note que a Eq. (7.50) é bem geral no sentido que ela só leva em consideração o Hamiltoniano. Ela é válida para qualquer rede, número de primeiros vizinhos e qualquer configuração para as direções de  $\mathbf{S}_i$ , não necessitando que os sítios magnéticos (ou não magnéticos) sejam todos idênticos.

Agora nos restringimos ao caso em que todos os spins magnéticos clássicos estão alinhados na direção  $\hat{z}$  e consideramos uma rede de Bethe com  $d \rightarrow \infty$ . Uma vez que  $\mathbf{F}_{j,0}^T(\tau=0)$  possui paridade espacial ímpar,  $j$  e 0 podem ser sítios  $m$  ou  $nm$ , e na rede de Bethe todos os sítios  $m$  são idênticos e todos os sítios  $nm$  também o são, então temos  $\mathbf{F}_{m,nm}^T(\tau=0) = -\mathbf{F}_{nm,m}^T(\tau=0)$  e  $\mathbf{F}_{m,m}^T(\tau=0) = 0 = \mathbf{F}_{nm,nm}^T(\tau=0)$ . Portanto, usando  $t_{j,0} = t/\sqrt{d}$ ,

$$\mathbf{P}_0^T = t\sqrt{d} p_0 \mathbf{F}_{nm,m}^T(\tau=0), \tag{7.53}$$

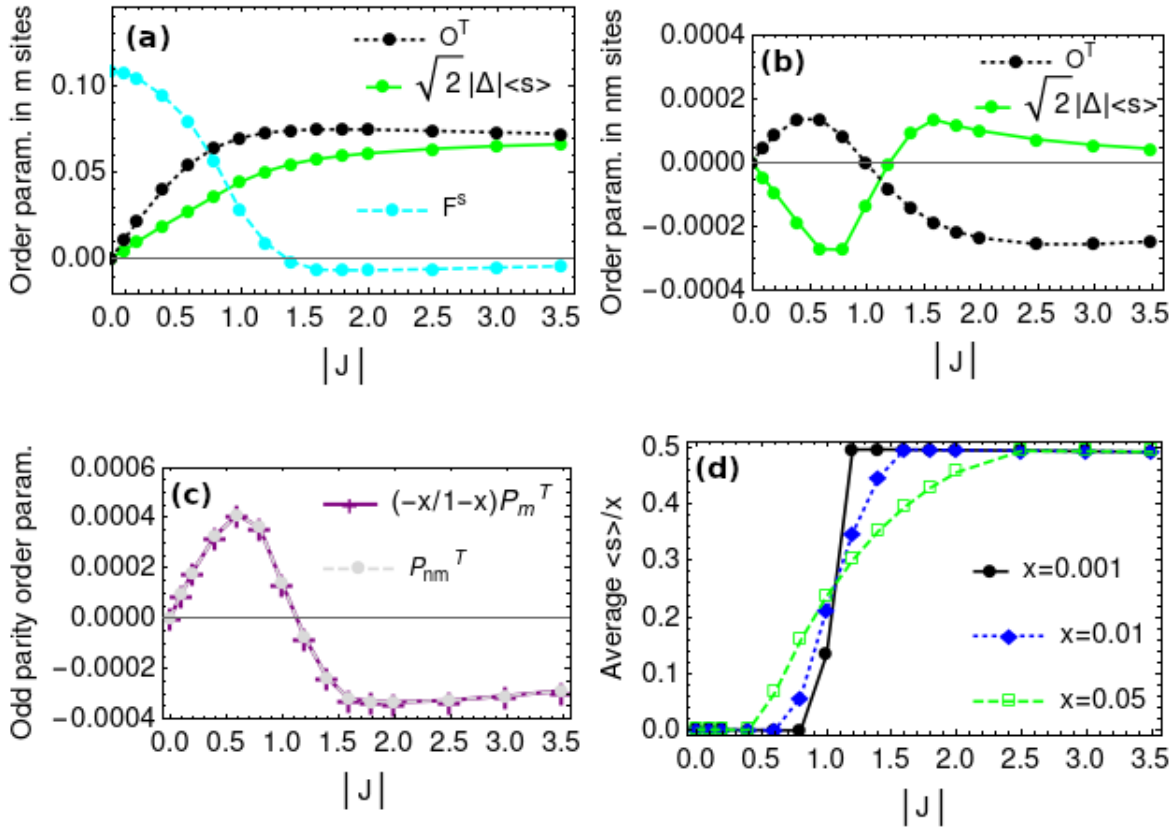


Figura 39 – Parâmetros de ordem calculados utilizando as equações de DMFT no eixo imaginário com  $k_B T = 0.0001$ , fixando  $t = 1$ ,  $\Delta_m = \Delta = -0.1$ ,  $\delta_\mu = \mu = 0$  e variando  $J < 0$ . Os painéis mostram a componente  $z$  dos parâmetros de ordem uma vez que as componentes  $x$  e  $y$  se anulam quando as impurezas estão alinhadas na direção  $z$ . (a) mostra parâmetros de ordem em sítios  $m$ . (b) mostra parâmetros de ordem em sítios  $nm$ . (c) mostra parâmetros de ordem de paridade espacial ímpar entre sítios  $m$  and  $nm$ . Em (a), (b) e (c) consideramos  $x = 0.01$ . (d) mostra a média sobre sítios  $m$  e  $nm$  da polarização eletrônica induzida dividida por  $x$ , i.e.  $[x\langle s_m \rangle + (1-x)\langle s_{nm} \rangle]/x$ . Os cálculos numéricos foram feitos considerando 500.000 valores de frequências de Matsubara e o erro de convergência adotado é  $10^{-7}$ .

onde  $p_0 = -(1-x)$  para a expressão em sítios magnéticos e  $p_0 = x$  em sítios não magnéticos. Usando a Eq. (7.53) com o índice  $0 = nm$  e com  $0 = m$  podemos ver que  $\mathbf{P}_{nm}^T = \frac{-x}{(1-x)} \mathbf{P}_m^T$ . Mais adiante mostramos numericamente que esta relação é satisfeita, demonstrando a precisão e confiabilidade dos métodos utilizados aqui. Usando resultados da DMFT somos capazes de calcular diretamente  $F_0^s$ ,  $\langle \mathbf{s}_0 \rangle$  e  $\mathbf{O}_0^T$ . Portanto, usando a Eq. (7.50) podemos calcular também  $\mathbf{P}_0^T = \mathbf{O}_0^T + \sqrt{2}J\mathbf{S}_0 F_0^s + \sqrt{2}\Delta^* \langle \mathbf{s}_0 \rangle$ , em que  $0 = m, nm$ .

A Fig. 39 mostra o comportamento de alguns parâmetros de ordem e foi obtida utilizando as equações de DMFT no eixo imaginário variando  $J$  e fixando  $t = 1$ ,  $\Delta = -0.1$ ,  $\mu = 0$ ,  $x = 0.01$  além de  $\Delta_m = \Delta$  e  $\delta_\mu = 0$ , conforme mencionado anteriormente. Usamos  $J < 0$ , correspondendo a uma interação ferromagnética. Uma vez que consideramos as

impurezas alinhadas na direção  $\hat{z}$ , as componentes  $x$  e  $y$  dos vetores  $\langle \mathbf{s}_0 \rangle$ ,  $\mathbf{O}_0^T$  e  $\mathbf{P}_0^T$  se anulam. Na Fig. 39 mostramos apenas a componente  $z$  destes vetores.

A Fig. 39(a) mostra alguns parâmetros de ordem em sítios magnéticos. Vemos que a magnetização aumenta monotonicamente com  $J$ . O parâmetro de ordem de  $odd-\omega$  também aumenta e então satura. O parâmetro de ordem de  $even-\omega$  singleto muda de sinal, o que está em concordância com o fato de  $F_m^e(\omega)$  também mudar de sinal em  $|J| \sim 1$  para quase todo o espectro energético, conforme discutimos anteriormente.

A Fig. 39(b) apresenta alguns parâmetros de ordem em sítios não magnéticos. Para valores pequenos de  $|J|$  há uma polarização induzida nesses sítios, a qual é oposta à polarização dos sítios magnéticos. Quando  $|J|$  é grande o suficiente de forma que as bandas de Shiba tenham se cruzado, a magnetização nos sítios  $nm$  é paralela à direção da polarização induzida nos sítios  $m$ . O oposto ocorre com o sinal do parâmetro de ordem de  $odd-\omega$  nos sítios  $nm$ : quando  $|J| < 1$ ,  $\text{sgn}(O_{nm}^T) = \text{sgn}(O_m^T)$  e, quando  $|J| > 1$ ,  $\text{sgn}(O_{nm}^T) \neq \text{sgn}(O_m^T)$ . O pareamento singleto  $even-\omega$  em sítios  $nm$ , que não é mostrado, é muito maior que os outros parâmetros de ordem mostrados na Fig. 39(b) e é aproximadamente independente de  $J$  para os pequenos valores de  $x$  considerados aqui,  $F_{nm}^s \simeq 0.1$ .

A componente na direção  $\hat{z}$  de  $\mathbf{P}_0^T$  (com  $0 = nm$  e  $0 = m$ ), que é associada ao pareamento  $even-\omega$  tripleto de paridade espacial ímpar, é apresentada na Fig. 39(c). A função  $[-x/(1-x)]\mathbf{P}_m^T$  é representada por uma linha contínua roxa enquanto  $\mathbf{P}_{nm}^T$  é mostrada em uma linha tracejada cinza. Note que estas duas curvas se sobrepõem perfeitamente, demonstrando a precisão e confiabilidade do método utilizado aqui, conforme mencionado anteriormente. Observe que estas funções também mudam de sinal quando as bandas de Shiba se cruzam em  $|J| \simeq 1$ . Uma vez que o termo  $\mathbf{P}_0^T$  é finito e nós consideramos aqui  $d \rightarrow \infty$ , é possível ver pela Eq. (7.53) que a função de Green  $\mathbf{F}_{nm,m}^T$  se anula com  $1/\sqrt{d}$ , conforme esperado (ver Apêndice B).

A Fig. 39(d) mostra, para vários valores de  $x$  e  $J$ , a média sobre todos os sítios da polarização eletrônica induzida,  $(1-x)\langle \mathbf{s}_{nm} \rangle + x\langle \mathbf{s}_m \rangle$ . Antes das bandas de Shiba se cruzarem essa polarização é nula pois a polarização dos sítios  $nm$  é oposta à dos sítios  $m$ , de forma que estas se cancelam. Após o cruzamento das bandas de Shiba, ambos os sítios possuem polarização na mesma direção e sentido, de forma que a polarização média é  $x/2$ . Ou seja, cada impureza contribui com uma polarização  $1/2$  para os elétrons em sua vizinhança após o cruzamento das bandas de Shiba em  $|J| > 1$ .

Notamos então que, para pequenas concentrações de impurezas  $x$ , o comportamento de diversos parâmetros de ordem do sistema muda perto de  $|J| \simeq t = 1$ , quando as bandas de Shiba se cruzam. Todas estas mudanças são assinaturas de uma transição de fase quântica no sistema. Assim como no caso de uma única impureza magnética [96], se  $|J| < t$  a função de onda do estado fundamental é formada unicamente por elétrons pareados, enquanto as impurezas não são blindadas. Por outro lado, se  $|J| > t$  a função

de onda do estado fundamental contém elétrons que estão ligados às impurezas e causam uma blindagem dos spins delas (no caso de  $J$  antiferromagnético). Neste caso, o número quântico de spin da função de onda eletrônica é não nulo. Note, porém, que esta transição de fase não faz com que o pareamento *odd- $\omega$*  nem o pareamento de paridade espacial ímpar sejam dominantes sobre o pareamento singlete de onda  $s$  ao considerar o *bulk* do sistema. No regime de impurezas diluídas  $x \ll 1$  que temos considerado, ao realizar a média dos parâmetros de ordem supercondutores sobre todos os sítios, o parâmetro de ordem de *even- $\omega$*  singlete de onda  $s$  [ $x F_m^s + (1-x) F_{nm}^s$ ] é consideravelmente maior do que os demais, uma vez que  $F_{nm}^s \simeq 0.1$ . Podemos esperar, portanto, que tal pareamento seja dominante sobre os demais no regime  $x \ll 1$ , mesmo após o cruzamento das bandas de Shiba com  $|J| > 1$ . Por outro lado, as influências do pareamento do tipo *odd- $\omega$*  e do pareamento de paridade espacial ímpar provavelmente podem ser verificadas localmente nas impurezas magnéticas. Uma evidência disto é que, conforme mostrado na subseção 7.4.2, o pareamento *odd- $\omega$*  está intimamente relacionado com a presença das bandas de Shiba dentro do gap supercondutor.

## 7.5 Discussão

A seguir fazemos uma breve discussão sobre os resultados que apresentamos na segunda parte desta tese, onde investigamos um supercondutor magnético diluído, i.e. um supercondutor convencional com uma pequena concentração de impurezas magnéticas. Introduzimos um modelo na rede de Bethe considerando pareamento supercondutor local do tipo campo médio e interação com spins clássicos nos sítios magnéticos. Utilizamos a *dynamical mean-field theory* para encontrar funções de Green locais neste sistema. Uma vez que as impurezas consideradas possuem spin clássico, a abordagem utilizada aqui é equivalente à *coherent potential approximation* para tratamento de desordem.

Vimos ao longo do trabalho que duas bandas de Shiba surgem na densidade de estados dentro do gap supercondutor. Tais bandas são estreitas e aparecem devido à superposição dos estados de Yu-Shiba-Rusinov, que são localizados nas impurezas, de forma que essas bandas possuem peso espectral maior em sítios magnéticos. À medida em que se aumenta a intensidade do acoplamento magnético, as bandas de Shiba se aproximam uma da outra, se sobrepõem e se cruzam.

Quando são permitidas várias direções para os spins das impurezas magnéticas, as bandas de Shiba não são polarizadas, i.e. cada banda de Shiba tem contribuições de elétrons de spin para cima e de spin para baixo. Nesta situação os sítios magnéticos possuem pareamento supercondutor do tipo singlete *even-frequency* convencional e também pareamento tripleto *odd-frequency*, embora ao realizar a média deste pareamento *odd-frequency* sobre todos os sítios magnéticos o resultado seja nulo. Como consequência, nos

sítios não magnéticos o pareamento tripleto *odd-frequency* também se anula.

Na situação em que todos os spins das impurezas estão alinhados ao longo do eixo  $z$ , as bandas de Shiba são polarizadas, i.e. uma banda de Shiba corresponde apenas a elétrons com spin para cima, enquanto a outra banda corresponde a elétrons com spin para baixo. O pareamento do tipo singleto *even-frequency* está presente em todo o sistema, tanto em sítios não magnéticos quanto nos magnéticos, sendo gerado nestes por efeito de proximidade. O pareamento tripleto *odd-frequency*, gerado pela quebra da simetria de reversão temporal devido ao campo magnético efetivo das impurezas, também está presente em todo o sistema, sendo mais intenso nos sítios magnéticos.

Também vimos que o formato das bandas de Shiba na densidade de estados em sítios magnéticos é semelhante ao formato da parte imaginária da função de Green anômala. Uma análise de como estas funções escalam com a concentração de impurezas e alguns cálculos analíticos nos possibilitaram encontrar uma expressão envolvendo estas duas funções. As previsões desta expressão possuem excelente concordância com resultados numéricos da *dynamical mean-field theory*. Assim, o pareamento tripleto *odd-frequency* pode ser determinado a partir de medições experimentais que forneçam a densidade de estados, como a espectroscopia de tunelamento por varredura.

Derivamos analiticamente uma expressão relacionando o parâmetro de ordem supercondutor do tipo *odd-frequency* com outros parâmetros de ordem, mostrando que no nosso modelo a presença de supercondutividade *odd-frequency* está relacionada com a presença de supercondutividade convencional do tipo singleto *even-frequency* junto a uma polarização de spin e também está relacionada com a presença de supercondutividade de paridade espacial ímpar (e.g. de onda  $p$ ). Ainda considerando a situação em que os spins clássicos das impurezas estejam alinhados, calculamos os diferentes parâmetros de ordem no sistema. Mostramos que todos os três tipos de pareamento mencionados aqui estão presentes no modelo considerado, inclusive o pareamento de paridade espacial ímpar. Pudemos obter este último, que é não local e está presente na vizinhança das impurezas, graças a uma combinação de *dynamical mean-field theory* com cálculos analíticos.

À medida em que se aumenta a intensidade do acoplamento magnético, quando ocorre o cruzamento das bandas de Shiba o sistema passa por algumas mudanças. Nos sítios magnéticos, o sinal do pareamento *even-frequency* muda e seu módulo diminui, enquanto nos sítios não magnéticos mudam os sinais da polarização eletrônica induzida e do pareamento *odd-frequency*. O sinal do pareamento de paridade espacial ímpar também muda. Além disso, a polarização média dos elétrons deixa de ser nula e assume um valor proporcional à concentração de impurezas. Todas estas mudanças simultâneas no sistema são evidências de que este passa por uma transição de fase quântica entre estados com diferentes números quânticos de spin. Abaixo de um acoplamento magnético crítico, os spins das impurezas não são blindados, enquanto acima deste acoplamento crítico a blindagem

ocorre. Por um lado, vimos que o pareamento dominante quando se faz a média em todos os sítios é o pareamento do tipo singleto *even-frequency*, antes e após o cruzamento das bandas de Shiba. Por outro lado, os demais pareamentos supercondutores devem exercer alguma influência sobre propriedades locais do sistema.

Utilizamos a *nanoscale dynamical mean-field theory* a fim de estudar um sistema formado por uma ilha magnética, composta exclusivamente por sítios com spins clássicos, envolta por um material supercondutor convencional. Resultados preliminares, que não são mostrados aqui, evidenciam o aparecimento de um gap supercondutor nos sítios magnéticos, o surgimento de estados localizados dentro desse gap e o aparecimento de pareamento *odd-frequency*. Estes surgem próximo da interface dos dois materiais e desaparecem à medida em que se afasta da interface. Investigaremos mais a fundo esse sistema em um futuro próximo.

Todos os nossos resultados para um supercondutor magnético diluído utilizaram a rede de Bethe com número de coordenação  $d \rightarrow +\infty$ . Uma vez que esta rede é idealizada e apresenta dificuldade em captar a distância entre as impurezas, é importante que trabalhos futuros investiguem um supercondutor magnético diluído em uma rede real a fim de verificar as propriedades que discutimos aqui.

No capítulo 8 apresentamos nossas conclusões e perspectivas sobre os resultados que mostramos na parte II desta tese, além das conclusões da parte I.

## 8 Conclusão

A presente tese foi dividida em duas partes. Na parte I estudamos uma impureza móvel em um semimetal topológico 2D com toque quadrático de bandas. Tal impureza interage com o mar de Fermi através de uma repulsão local e de um termo de troca de spin anisotrópico. Neste sistema há regimes em que a impureza se comporta como um pólaron de Fermi. Por outro lado, também encontramos regimes em que a interação se torna efetivamente atrativa a baixas energias e a impureza forma estados ligados com um férmion majoritário, formando uma molécula. Estes estados ligados devem estar presentes até mesmo no caso de interações arbitrariamente pequenas. Nossos resultados indicam que a simetria dos estados ligados é uma superposição de onda  $s$  e onda  $d$ . Este trabalho traz luz sobre o tema de impurezas móveis em sistemas com toque quadrático de bandas mostrando que o comportamento das impurezas é basicamente determinado pela razão das massas efetivas dos férmions majoritários e pela relação entre os acoplamentos.

Pode ser importante calcularmos a mobilidade ou o coeficiente de difusão da impureza em função da temperatura. Na região de *crossover* dos acoplamentos, ao reduzir a escala de energia do sistema, o módulo do acoplamento de troca efetivo tem um mínimo quando a repulsão local efetiva se anula, antes de se tornar atrativa. Assim, esperamos que a mobilidade possa ter um comportamento não monotônico com a temperatura, eventualmente possuindo um máximo próximo da energia onde a repulsão local efetiva se anula. Tal comportamento não monotônico é interessante e incomum em sistemas com impurezas móveis. Devido à alta complexidade dos cálculos analíticos envolvendo propagadores na forma matricial com temperatura finita, tal mobilidade deveria ser calculada numericamente.

Atualmente estamos estudando este sistema com toque quadrático de bandas na presença de uma densidade pequena mas finita de impurezas móveis. Nossa expectativa é que tal sistema deve levar a um pareamento supercondutor entre as impurezas e os férmions majoritários. Tal pareamento deve ser de onda  $s$  e/ou onda  $d$ . Uma vez que não consideramos dependência temporal na função supercondutora, este possível pareamento é do tipo *even-frequency* e, portanto, deve ser singlete. Tal pareamento teria origem na interação de troca de spin anisotrópica e assim levaria a uma superfluidez com pareamento não convencional. Esta investigação tem potencial para auxiliar na compreensão de materiais com diferentes fases supercondutoras uma vez que nosso sistema pode possuir uma superposição ou competição de onda  $s$  e onda  $d$ .

Os nossos resultados neste sistema com toque quadrático de bandas devem estimular outras pesquisas na área, como o efeito de outros tipos de interação de longo alcance

envolvendo impurezas móveis. O modelo que propomos, bem como nossos resultados, podem ser verificados experimentalmente em redes óticas com moléculas polares. Redes óticas já foram utilizadas para produzir um semimetal topológico com toque quadrático de bandas, e moléculas polares já foram utilizadas em redes óticas para produzir a interação de troca de spin anisotrópica de longo alcance que utilizamos aqui. Seria interessante verificar experimentalmente se neste sistema com apenas uma impureza ocorre formação de estados ligados, i.e. moléculas maiores, devido a interações que podem ser arbitrariamente pequenas. Este tipo de experimento também poderia verificar se o coeficiente de difusão da impureza tem um comportamento não monotônico com a temperatura, refletindo o caráter não monotônico das constantes de acoplamento com a escala de energia. Também seria importante investigar experimentalmente se existiria uma fase com superfluidez na situação em que haja uma densidade pequena, porém finita, de impurezas.

Na parte II desta tese consideramos impurezas magnéticas clássicas diluídas em um supercondutor convencional (singleto *even-frequency* de onda  $s$ ). A interação dos elétrons de condução com as impurezas leva à formação de estados ligados de Yu-Shiba-Rusinov na vizinhança das impurezas e a superposição destes estados dá origem às bandas de Shiba dentro do gap supercondutor. Mostramos que nos sítios magnéticos surge supercondutividade não convencional do tipo *odd-frequency* tripleto, a qual aparece devido à quebra de simetria de reversão temporal e está relacionada com a formação das bandas de Shiba. Se os spins das impurezas estiverem alinhados na mesma direção as bandas de Shiba são polarizadas e o pareamento *odd-frequency* surge inclusive nos sítios não magnéticos. Demonstramos que o pareamento *odd-frequency* em sítios magnéticos pode ser determinado a partir de medições experimentais que forneçam a densidade de estados, como a espectroscopia de tunelamento por varredura. Verificar experimentalmente a presença de supercondutividade não convencional do tipo *odd-frequency* tem sido um grande desafio. Os nossos resultados trazem luz sobre este problema pois não só indicam a presença de *odd-frequency* em um supercondutor magnético diluído mas também fornecem uma estimativa da amplitude deste pareamento dentro do gap supercondutor.

Os resultados teóricos apresentados neste trabalho devem motivar outras investigações à procura de assinaturas da supercondutividade *odd-frequency* em supercondutores magnéticos diluídos. Em particular, a formação das bandas de Shiba com pareamento *odd-frequency*, que se delocalizam pelo *bulk* do supercondutor, deve levantar outras questões sobre o impacto deste pareamento não somente sobre propriedades espectrais, mas também em propriedades de transporte, à procura de aplicações na área de spintrônica. Além disso, nosso trabalho deve inspirar mais investigações da relação entre o pareamento *odd-frequency* e a formação de estados ligados de Majorana dentro do gap supercondutor perto da interface de um supercondutor convencional e uma ilha magnética, em que os átomos magnéticos nesta ilha podem ser diluídos ou densos. Estados ligados de Majorana são esperados neste sistema se houver acoplamento spin-órbita na superfície do supercondutor

convencional.

Temos resultados preliminares do estudo de uma ilha magnética densa imersa em um supercondutor convencional sem acoplamento spin-órbita, que realizamos usando a *nanoscale dynamical mean-field theory* na rede de Bethe. Vimos a formação de um gap supercondutor nos sítios magnéticos próximos da interface, o surgimento de estados localizados e pareamento *odd-frequency*, os quais desaparecem à medida em que se afasta da interface. Para que nossos resultados a respeito desta ilha magnética num supercondutor se tornem mais realistas, é necessário considerar uma rede real e adaptar a *nanoscale dynamical mean-field theory* para fazer uma autoconsistência sobre todos os sítios do sistema mesoscópico em consideração. Neste caso deve ser possível considerar acoplamento spin-órbita de Rashba no Hamiltoniano e observar o aparecimento de estados ligados de Majorana na interface como assinatura de supercondutividade topológica. Isto tem um custo computacional bem maior, porém é factível se ainda forem consideradas impurezas magnéticas clássicas.

É possível estudar propriedades não locais e pareamentos supercondutores entre sítios primeiros vizinhos em um supercondutor magnético diluído utilizando a *cellular dynamical mean-field theory* com *clusters* de 2 sítios, por exemplo. Uma investigação com esta metodologia pode trazer mais luz para a compreensão deste tipo de sistema e daria mais detalhes a respeito do pareamento de paridade espacial ímpar (e.g. onda  $p$ ). Por fim, o nosso modelo para um supercondutor magnético diluído pode ser alterado para considerar impurezas magnéticas quânticas em vez de clássicas. Isto também teria um custo computacional consideravelmente maior, mas é interessante investigar se esta mudança traria alterações significativas nos nossos resultados.

Note que ambas as partes da tese discutem sistemas de muitos corpos com impurezas, que levam a estados ligados e podem dar origem a supercondutividade não convencional. Na parte I levamos em conta impurezas móveis, cuja interação de troca de spin com os férmions do banho leva à formação de estados ligados entre férmions e impurezas. Na parte II as impurezas consideradas são imóveis e sua interação de spin também faz com que os elétrons do banho estejam ligados às impurezas. Quanto à supercondutividade singleto de onda  $s$  ou onda  $d$  que pode surgir no sistema com toque quadrático de bandas, uma das componentes do par de Cooper seria o férmion do banho e a outra componente seria a própria impureza, uma vez que esta é móvel. Haveria uma correlação entre essas partículas no mesmo instante de tempo. Já no supercondutor magnético diluído, o pareamento não convencional ocorre entre dois férmions do banho, os quais já teriam um pareamento supercondutor convencional na ausência de impurezas magnéticas. Neste caso o spin das impurezas muda a componente de spin do par de Cooper de singleto para tripleto e o pareamento *odd-frequency* ocorre entre elétrons de spins opostos que ocupam um certo sítio em momentos diferentes.



# Referências

- [1] Chalker, John: *Quantum Theory of Condensed Matter*. Lecture Notes, Physics Department, Oxford University, página 2, 2013. Citado na página 15.
- [2] Varma, CM, Z Nussinov e Wim Van Saarloos: *Singular or non-Fermi liquids*. Physics Reports, 361(5-6):267–417, 2002. Citado na página 15.
- [3] Mattuck, Richard D: *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*. Courier Corporation, 1976. Citado nas páginas 15, 16 e 33.
- [4] Coleman, Piers: *Introduction to many-body physics*. Cambridge University Press, 2015. Citado na página 16.
- [5] Mahan, Gerald D: *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013. Citado nas páginas 16, 33, 34, 35, 36, 37, 53 e 142.
- [6] Onnes, H. Kamerlingh: *Further experiments with liquid helium. C. On the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures etc. IV. The resistance of pure mercury at helium temperatures*. Em *KNAW, Proceedings*, volume 13, páginas 1274–1276, 1911. Citado na página 16.
- [7] Meissner, W. e R. Ochsenfeld: *Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit*. Naturwissenschaften, 21:787–788, 1933. <https://doi.org/10.1007/BF01504252>. Citado na página 16.
- [8] London, F., H. London e Frederick Alexander Lindemann: *The electromagnetic equations of the superconductor*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences, 149(866):71–88, 1935. <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1935.0048>. Citado na página 16.
- [9] Ginzburg, V. L. e L. D. Landau: *On the Theory of superconductivity*. Zh. Eksp. Teor. Fiz., 20:1064–1082, 1950. Citado na página 16.
- [10] Abrikosov, AA: *Vliyanie razmerov na kriticheskoe pole sverkhprovodnikov vtoroi gruppy*. Doklady Akademii Nauk SSSR, 86:489, 1952. Citado na página 16.
- [11] Bardeen, J., L. N. Cooper e J. R. Schrieffer: *Theory of Superconductivity*. Phys. Rev., 108:1175–1204, Dec 1957. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>. Citado na página 17.

- [12] Delft, Dirk van e Peter Kes: *The discovery of superconductivity*. Physics Today, 63:38, 2010. <https://doi.org/10.1063/1.3490499>. Citado na página 17.
- [13] Tinkham, M.: *Introduction to Superconductivity*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 2004, ISBN 9780486134727. Citado na página 18.
- [14] Bednorz, J. G. e K. A. Müller: *Possible highTc superconductivity in the Ba-La-Cu-O system*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 64:189–193, 1986. <https://doi.org/10.1007/BF01303701>. Citado na página 18.
- [15] Wu, M. K., J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang e C. W. Chu: *Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure*. Phys. Rev. Lett., 58:908–910, Mar 1987. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.908>. Citado na página 18.
- [16] Ray, Pia Jensen: *Structural investigation of La(2-x)Sr(x)CuO(4+y) - Following staging as a function of temperature*. Master's thesis. Niels Bohr Institute, Faculty of Science, University of Copenhagen. Copenhagen, Denmark, November 2015. <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.2075680.v2>. Citado na página 19.
- [17] Miyake, K.: *Seminário sobre: High Field Properties of Uranium Ferromagnetic Superconductors, Dai Aoki*, 2012 (acesso em 11 de Nobembro, 2020). <http://www.esrf.eu/files/live/sites/www/files/events/conferences/2012/synemag-2012/Aoki.pdf>. Citado na página 20.
- [18] Ran, Sheng, Chris Eckberg, Qing Ping Ding, Yuji Furukawa, Tristin Metz, Shanta R. Saha, I Lin Liu, Mark Zic, Hyunsoo Kim, Johnpierre Paglione e Nicholas P. Butch: *Nearly ferromagnetic spin-triplet superconductivity*. Science, 365(6454):684–687, 2019, ISSN 0036-8075. <https://science.sciencemag.org/content/365/6454/684>. Citado na página 19.
- [19] Linder, Jacob e Alexander V. Balatsky: *Odd-frequency superconductivity*. Rev. Mod. Phys., 91:045005, Dec 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.91.045005>. Citado nas páginas 20, 72, 75, 84, 98, 99, 110 e 111.
- [20] Anderson, P.W.: *Theory of dirty superconductors*. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 11(1):26 – 30, 1959, ISSN 0022-3697. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369759900368>. Citado na página 20.
- [21] Abrikosov, A. A. e L. P. Gor'kov: *Zh. É ksp. Teor. Fiz. 39, 1781 1960 Sov. Phys. JETP*, 12:1243, 1961. Citado nas páginas 20 e 105.

- [22] Shiba, Hiroyuki: *Classical Spins in Superconductors*. Progress of Theoretical Physics, 40(3):435–451, setembro 1968, ISSN 0033-068X. <https://doi.org/10.1143/PTP.40.435>. Citado nas páginas 20, 21, 71, 72 e 105.
- [23] Landau, L. D.: *Über die bewegung der elektronen in kristalgitter*. Phys. Z. Sowjetunion, 3:644–645, 1933. Citado na página 20.
- [24] Mannella, Norman, Wanli L Yang, Xing J Zhou, Hong Zheng, John F Mitchell, Jan Zaanen, Thomas P Devereaux, Naoto Nagaosa, Zahid Hussain e Z X Shen: *Nodal quasiparticle in pseudogapped colossal magnetoresistive manganites*. Nature, 438(7067):474–478, 2005. <https://doi.org/10.1038/nature04273>. Citado na página 21.
- [25] Lee, Patrick A., Naoto Nagaosa e Xiao Gang Wen: *Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity*. Rev. Mod. Phys., 78:17–85, Jan 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.17>. Citado na página 21.
- [26] Schirotzek, André, Cheng Hsun Wu, Ariel Sommer e Martin W. Zwierlein: *Observation of Fermi Polarons in a Tunable Fermi Liquid of Ultracold Atoms*. Phys. Rev. Lett., 102:230402, Jun 2009. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.230402>. Citado nas páginas 21, 25 e 26.
- [27] Kondo, Jun: *Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys*. Progress of Theoretical Physics, 32(1):37–49, julho 1964, ISSN 0033-068X. <https://doi.org/10.1143/PTP.32.37>. Citado na página 21.
- [28] Yu, Luh: *Bound state in superconductors with paramagnetic impurities*. Acta Physica Sinica, 21:75–91, 1965. <http://wulixb.iphy.ac.cn/en/article/id/851>. Citado nas páginas 21 e 71.
- [29] Rusinov, A. I.: *Superconductivity near a paramagnetic impurity*. JETP Lett. (USSR) (Engl. Transl.); (United States), 9:146, Jan 1969. Citado nas páginas 21 e 71.
- [30] Hohenberg, P.C. e A.P. Krekhov: *An introduction to the Ginzburg–Landau theory of phase transitions and nonequilibrium patterns*. Physics Reports, 572:1 – 42, 2015, ISSN 0370-1573. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157315000514>. Citado na página 21.
- [31] Kane, C. L. e E. J. Mele:  *$Z_2$  Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*. Phys. Rev. Lett., 95:146802, Sep 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.146802>. Citado na página 21.
- [32] Moore, Joel E.: *The birth of topological insulators*. Nature, 464:194–198, 2010. <https://doi.org/10.1038/nature08916>. Citado na página 21.

- [33] Wan, Xiangang, Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath e Sergey Y. Savrasov: *Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates*. Phys. Rev. B, 83:205101, May 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.205101>. Citado na página 21.
- [34] Li, Si, Zhi Ming Yu, Yugui Yao e Shengyuan A. Yang: *Type-II topological metals*. Frontiers of Physics, 15:43201. <https://doi.org/10.1007/s11467-020-0963-7>. Citado na página 21.
- [35] Trang, C. X., N. Shimamura, K. Nakayama, S. Souma, K. Sugawara, I. Watanabe, K. Yamauchi, T. Oguchi, K. Segawa, T. Takahashi, Yoichi Ando e T. Sato: *Conversion of a conventional superconductor into a topological superconductor by topological proximity effect*. Nature Communications, 11:159, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13946-0>. Citado na página 21.
- [36] Frolov, S. M., M. J. Manfra e J. D. Sau: *Topological superconductivity in hybrid devices*. Nature Physics, 16:718–724, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41567-020-0925-6>. Citado na página 21.
- [37] Berry, Michael Victor: *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 392(1802):45–57, 1984. Citado na página 21.
- [38] Xiao, Di, Ming Che Chang e Qian Niu: *Berry phase effects on electronic properties*. Rev. Mod. Phys., 82:1959–2007, Jul 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.1959>. Citado na página 21.
- [39] Li, Jian, Titus Neupert, Zhijun Wang, AH MacDonald, A Yazdani e B Andrei Bernevig: *Two-dimensional chiral topological superconductivity in Shiba lattices*. Nature Communications, 7:12297, 2016. <https://doi.org/10.1038/ncomms12297>. Citado nas páginas 22, 74 e 75.
- [40] Caracanhas, M. A. e R. G. Pereira: *Tunable breakdown of the polaron picture for mobile impurities in a topological semimetal*. Phys. Rev. B, 94:220302, Dec 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.220302>. Citado nas páginas 25, 29, 30, 31, 32, 46, 50 e 51.
- [41] Santos, Flávio L. N., Mônica A. Caracanhas, M. C. O. Aguiar e Rodrigo G. Pereira: *Bound states in two-dimensional Fermi systems with quadratic band touching*. Phys. Rev. B, 101:155120, Apr 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.155120>. Citado na página 25.

- [42] Bloch, Immanuel, Jean Dalibard e Sylvain Nascimbène: *Quantum simulations with ultracold quantum gases*. Nature Physics, 8:267–276, 2012. <https://doi.org/10.1038/nphys2259>. Citado na página 25.
- [43] Massignan, Pietro, Matteo Zaccanti e Georg M Bruun: *Polarons, dressed molecules and itinerant ferromagnetism in ultracold Fermi gases*. Reports on Progress in Physics, 77(3):034401, feb 2014. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/77/3/034401>. Citado nas páginas 25 e 53.
- [44] Zöllner, Sascha, G. M. Bruun e C. J. Pethick: *Polarons and molecules in a two-dimensional Fermi gas*. Phys. Rev. A, 83:021603, Feb 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.021603>. Citado na página 25.
- [45] Mathy, Charles J. M., Meera M. Parish e David A. Huse: *Trimers, Molecules, and Polarons in Mass-Imbalanced Atomic Fermi Gases*. Phys. Rev. Lett., 106:166404, Apr 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.166404>. Citado nas páginas 25 e 52.
- [46] Parish, Meera M.: *Polaron-molecule transitions in a two-dimensional Fermi gas*. Phys. Rev. A, 83:051603, May 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.051603>. Citado nas páginas 25 e 52.
- [47] Klawunn, Michael e Alessio Recati: *Fermi polaron in two dimensions: Importance of the two-body bound state*. Phys. Rev. A, 84:033607, Sep 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.84.033607>. Citado nas páginas 25 e 52.
- [48] Schmidt, Richard, Tilman Enss, Ville Pietilä e Eugene Demler: *Fermi polarons in two dimensions*. Phys. Rev. A, 85:021602, Feb 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.85.021602>. Citado nas páginas 25 e 52.
- [49] Koschorreck, Marco, Daniel Pertot, Enrico Vogt, Bernd Frohlich, Michael Feld e Michael Kohl: *Attractive and repulsive Fermi polarons in two dimensions*. Nature, 485(7400):619–622, maio 2012. <http://dx.doi.org/10.1038/nature11151>. Citado na página 25.
- [50] Kohstall, C., M. Zaccanti, M. Jag, A. Trenkwalder, P. Massignan, G. M. Bruun, F. Schreck e R. Grimm: *Metastability and coherence of repulsive polarons in a strongly interacting Fermi mixture*. Nature, 485(7400):615–618, maio 2012. <http://dx.doi.org/10.1038/nature11065>. Citado na página 25.
- [51] Scazza, F., G. Valtolina, P. Massignan, A. Recati, A. Amico, A. Burchianti, C. Fort, M. Inguscio, M. Zaccanti e G. Roati: *Repulsive Fermi Polarons in a Resonant Mixture of Ultracold  $^6\text{Li}$  Atoms*. Phys. Rev. Lett., 118:083602, Feb 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.083602>. Citado na página 25.

- [52] Grusdt, F., N. Y. Yao, D. Abanin, M. Fleischhauer e E. Demler: *Interferometric measurements of many-body topological invariants using mobile impurities*. Nat. Comm., 7(1):11994, 2016. <https://doi.org/10.1038/ncomms11994>. Citado na página 25.
- [53] Camacho-Guardian, A., N. Goldman, P. Massignan e G. M. Bruun: *Dropping an impurity into a Chern insulator: A polaron view on topological matter*. Phys. Rev. B, 99:081105, Feb 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.081105>. Citado na página 25.
- [54] Qin, Fang, Xiaoling Cui e Wei Yi: *Polaron in a  $p + ip$  Fermi topological superfluid*. Phys. Rev. A, 99:033613, Mar 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.99.033613>. Citado na página 25.
- [55] Grusdt, F., N. Y. Yao e E. A. Demler: *Topological polarons, quasiparticle invariants, and their detection in one-dimensional symmetry-protected phases*. Phys. Rev. B, 100:075126, Aug 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.075126>. Citado na página 25.
- [56] Caracanhas, M. A., V. S. Bagnato e R. G. Pereira: *Tkachenko Polarons in Vortex Lattices*. Phys. Rev. Lett., 111:115304, Sep 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.115304>. Citado na página 25.
- [57] Punk, Matthias e Subir Sachdev: *Mobile impurity near the superfluid–Mott-insulator quantum critical point in two dimensions*. Phys. Rev. A, 87:033618, Mar 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.033618>. Citado na página 25.
- [58] Yan, Zoe Z., Yiqi Ni, Carsten Robens e Martin W. Zwierlein: *Bose polarons near quantum criticality*. Science, 368(6487):190–194, 2020, ISSN 0036-8075. <https://science.sciencemag.org/content/368/6487/190>. Citado na página 25.
- [59] Bloch, Immanuel: *Quantum gases in optical lattices*. Physics World, 17:25 – 29, 2004. Citado na página 26.
- [60] Greiner, Markus e Simon Fölling: *Optical lattices*. Nature, 453:736–738, 2008. <https://doi.org/10.1038/453736a>. Citado nas páginas 26 e 27.
- [61] Yan, Bo, Steven A. Moses, Bryce Gadway, Jacob P. Covey, Kaden R. A. Hazzard, Ana Maria Rey, Deborah S. Jin e Jun Ye: *Observation of dipolar spin-exchange interactions with lattice-confined polar molecules*. Nature, 501(7468):521–525, 2013. <https://doi.org/10.1038/nature12483>. Citado nas páginas 27, 28 e 43.

- [62] Lahaye, T, C Menotti, L Santos, M Lewenstein e T Pfau: *The physics of dipolar bosonic quantum gases*. Rep. Prog. Phys., 72(12):126401, nov 2009. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/72/12/126401>. Citado na página 26.
- [63] Hazzard, Kaden R. A., Bryce Gadway, Michael Foss-Feig, Bo Yan, Steven A. Moses, Jacob P. Covey, Norman Y. Yao, Mikhail D. Lukin, Jun Ye, Deborah S. Jin e Ana Maria Rey: *Many-Body Dynamics of Dipolar Molecules in an Optical Lattice*. Phys. Rev. Lett., 113:195302, Nov 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.195302>. Citado na página 27.
- [64] Zou, Haiyuan, Erhai Zhao e W. Vincent Liu: *Frustrated Magnetism of Dipolar Molecules on a Square Optical Lattice: Prediction of a Quantum Paramagnetic Ground State*. Phys. Rev. Lett., 119:050401, Jul 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.050401>. Citado nas páginas 27 e 43.
- [65] Raghu, S., E. Berg, A. V. Chubukov e S. A. Kivelson: *Effects of longer-range interactions on unconventional superconductivity*. Phys. Rev. B, 85:024516, Jan 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.024516>. Citado na página 29.
- [66] Gorshkov, Alexey V., Salvatore R. Manmana, Gang Chen, Jun Ye, Eugene Demler, Mikhail D. Lukin e Ana Maria Rey: *Tunable Superfluidity and Quantum Magnetism with Ultracold Polar Molecules*. Phys. Rev. Lett., 107:115301, Sep 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.115301>. Citado nas páginas 29 e 43.
- [67] Mahan, G. D.: *Mobility of Polarons*. Phys. Rev., 142:366–371, Feb 1966. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.142.366>. Citado na página 29.
- [68] Mahan, G. D.: *Excitons in Metals: Infinite Hole Mass*. Phys. Rev., 163:612–617, Nov 1967. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.163.612>. Citado na página 29.
- [69] Shankar, R.: *Renormalization-group approach to interacting fermions*. Rev. Mod. Phys., 66:129–192, Jan 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66.129>. Citado nas páginas 29, 38, 49 e 80.
- [70] Sun, Kai, Hong Yao, Eduardo Fradkin e Steven A. Kivelson: *Topological Insulators and Nematic Phases from Spontaneous Symmetry Breaking in 2D Fermi Systems with a Quadratic Band Crossing*. Phys. Rev. Lett., 103:046811, Jul 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.046811>. Citado nas páginas 29, 30, 31, 45, 46 e 64.

- [71] Chubukov, Andrey V, Maxim Khodas e Rafael M Fernandes: *Magnetism, superconductivity, and spontaneous orbital order in iron-based superconductors: Which comes first and why?* Physical Review X, 6(4):041045, 2016. Citado na página 29.
- [72] Punk, M., P. T. Dumitrescu e W. Zwerger: *Polaron-to-molecule transition in a strongly imbalanced Fermi gas.* Phys. Rev. A, 80:053605, Nov 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.80.053605>. Citado na página 29.
- [73] Nielsen, H.B. e M. Ninomiya: *Absence of neutrinos on a lattice: (I). Proof by homotopy theory.* Nuclear Physics B, 185(1):20 – 40, 1981, ISSN 0550-3213. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321381903618>. Citado na página 30.
- [74] Kogut, John B.: *The lattice gauge theory approach to quantum chromodynamics.* Rev. Mod. Phys., 55:775–836, Jul 1983. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.55.775>. Citado na página 30.
- [75] Haldane, F. D. M.: *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly".* Phys. Rev. Lett., 61:2015–2018, Oct 1988. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2015>. Citado na página 30.
- [76] Hatsugai, Yasuhiro, Takahiro Fukui e Hideo Aoki: *Topological analysis of the quantum Hall effect in graphene: Dirac-Fermi transition across van Hove singularities and edge versus bulk quantum numbers.* Phys. Rev. B, 74:205414, Nov 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.205414>. Citado na página 30.
- [77] Wilson, Kenneth G.: *Quantum Field - Theory Models in Less Than 4 Dimensions.* Phys. Rev. D, 7:2911–2926, May 1973. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.7.2911>. Citado na página 30.
- [78] Vojta, Matthias, Ying Zhang e Subir Sachdev: *Quantum Phase Transitions in d-Wave Superconductors.* Phys. Rev. Lett., 85:4940–4943, Dec 2000. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.85.4940>. Citado na página 30.
- [79] Raghu, S., Xiao Liang Qi, C. Honerkamp e Shou Cheng Zhang: *Topological Mott Insulators.* Phys. Rev. Lett., 100:156401, Apr 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.156401>. Citado na página 30.
- [80] Sur, Shouvik, Shou Shu Gong, Kun Yang e Oskar Vafek: *Quantum anomalous Hall insulator stabilized by competing interactions.* Phys. Rev. B, 98:125144, Sep 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.125144>. Citado na página 31.

- [81] Zeng, Tian Sheng, Wei Zhu e Donna Sheng: *Tuning topological phase and quantum anomalous Hall effect by interaction in quadratic band touching systems*. npj Quantum Materials, 3(1):49, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41535-018-0120-5>. Citado na página 31.
- [82] Ölschläger, Matthias, Georg Wirth, Thorge Kock e Andreas Hemmerich: *Topologically Induced Avoided Band Crossing in an Optical Checkerboard Lattice*. Phys. Rev. Lett., 108:075302, Feb 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.075302>. Citado na página 31.
- [83] Sun, Kai, W. Vincent Liu, Andreas Hemmerich e S. Das Sarma: *Topological semimetal in a fermionic optical lattice*. Nat. Phys., 8(1):67–70, 2012. Citado na página 31.
- [84] Li, Xiaopeng e W Vincent Liu: *Physics of higher orbital bands in optical lattices: a review*. Rep. Prog. Phys., 79(11):116401, sep 2016. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0034-4885/79/11/116401>. Citado na página 31.
- [85] Pawlak, Kelly Ann, James M. Murray e Oskar Vafek: *Emergence of superconductivity in a doped single-valley quadratic band crossing system of spin- $\frac{1}{2}$  fermions*. Phys. Rev. B, 91:134509, Apr 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.134509>. Citado na página 31.
- [86] Wick, G. C.: *The Evaluation of the Collision Matrix*. Phys. Rev., 80:268–272, Oct 1950. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.80.268>. Citado na página 34.
- [87] Feynman, R. P.: *Space-Time Approach to Quantum Electrodynamics*. Phys. Rev., 76:769–789, Sep 1949. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.76.769>. Citado na página 35.
- [88] Wilson, Kenneth G. e J. Kogut: *The renormalization group and the  $\epsilon$  expansion*. Physics Reports, 12(2):75 – 199, 1974, ISSN 0370-1573. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157374900234>. Citado na página 37.
- [89] Gubbels, K. B. e H. T. C. Stoof: *Renormalization Group Theory for the Imbalanced Fermi Gas*. Phys. Rev. Lett., 100:140407, Apr 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.140407>. Citado na página 38.
- [90] Cardy, J., P. Goddard e J. Yeomans: *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 1996, ISBN 9780521499590. Citado na página 49.
- [91] Salpeter, E. E. e H. A. Bethe: *A Relativistic Equation for Bound-State Problems*. Phys. Rev., 84:1232–1242, Dec 1951. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.84.1232>. Citado na página 54.

- [92] Jamet, François: *Rapport de stage: Interface entre supraconductivité et magnétisme quantique: une nouvelle route vers la supraconductivité topologique?*, 2016. Citado nas páginas 69, 78, 89, 91, 92, 95 e 96.
- [93] Perrin, Vivien, Flávio L. N. Santos, Gerbold C. Ménard, Christophe Brun, Tristan Cren, Marcello Civelli e Pascal Simon: *Unveiling Odd-Frequency Pairing around a Magnetic Impurity in a Superconductor*. Phys. Rev. Lett., 125:117003, Sep 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.125.117003>. Citado nas páginas 69, 71, 75, 87, 99, 101, 102 e 105.
- [94] Santos, Flávio L. N., Vivien Perrin, François Jamet, Marcello Civelli, Pascal Simon, Maria C. O. Aguiar, Eduardo Miranda e Marcelo J. Rozenberg: *Odd-frequency superconductivity in dilute magnetic superconductors*. Phys. Rev. Research, 2:033229, Aug 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.033229>. Citado nas páginas 69, 92 e 101.
- [95] Phillips, Philip: *Advanced solid state physics*. Cambridge University Press, 2012. Citado na página 70.
- [96] Balatsky, A. V., I. Vekhter e Jian Xin Zhu: *Impurity-induced states in conventional and unconventional superconductors*. Rev. Mod. Phys., 78:373–433, May 2006. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.373>. Citado nas páginas 70, 71, 88, 95 e 113.
- [97] Chattopadhyay, A., S. Das Sarma e A. J. Millis: *Transition Temperature of Ferromagnetic Semiconductors: A Dynamical Mean Field Study*. Phys. Rev. Lett., 87:227202, Nov 2001. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.227202>. Citado nas páginas 72, 78 e 91.
- [98] Berezinskii, V. L.: *New model of the anisotropic phase of superfluid He<sup>3</sup>*. Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters, 20:287, novembro 1974. [http://www.jetpletters.ac.ru/ps/1792/article\\_27363.shtml](http://www.jetpletters.ac.ru/ps/1792/article_27363.shtml). Citado na página 72.
- [99] Tanaka, Yukio, Masatoshi Sato e Naoto Nagaosa: *Symmetry and Topology in Superconductors –Odd-Frequency Pairing and Edge States–*. Journal of the Physical Society of Japan, 81(1):011013, 2012. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.81.011013>. Citado na página 72.
- [100] Balatsky, Alexander e Elihu Abrahams: *New class of singlet superconductors which break the time reversal and parity*. Phys. Rev. B, 45:13125–13128, Jun 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.45.13125>. Citado na página 73.

- [101] Abrahams, Elihu, Alexander Balatsky, D. J. Scalapino e J. R. Schrieffer: *Properties of odd-gap superconductors*. Phys. Rev. B, 52:1271–1278, Jul 1995. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.1271>. Citado na página 73.
- [102] Kirkpatrick, T. R. e D. Belitz: *Disorder-induced triplet superconductivity*. Phys. Rev. Lett., 66:1533–1536, Mar 1991. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.66.1533>. Citado na página 73.
- [103] Aguiar, M. C. O.: *Efeitos de temperatura e de interação finita em sistemas desordenados correlacionados*. Tese de doutorado. Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP. Campinas, Brasil, Maio 2003. <http://lilith.fisica.ufmg.br/~aguiar/tese.pdf>. Citado na página 73.
- [104] Coleman, P., E. Miranda e A. Tsvelik: *Odd-frequency pairing in the Kondo lattice*. Phys. Rev. B, 49:8955–8982, Apr 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.8955>. Citado nas páginas 73 e 110.
- [105] Bergeret, F. S., A. F. Volkov e K. B. Efetov: *Long-Range Proximity Effects in Superconductor-Ferromagnet Structures*. Phys. Rev. Lett., 86:4096–4099, Apr 2001. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.4096>. Citado na página 73.
- [106] Bergeret, F. S., A. F. Volkov e K. B. Efetov: *Manifestation of triplet superconductivity in superconductor-ferromagnet structures*. Phys. Rev. B, 68:064513, Aug 2003. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.064513>. Citado na página 73.
- [107] Bergeret, F. S., A. F. Volkov e K. B. Efetov: *Odd triplet superconductivity and related phenomena in superconductor-ferromagnet structures*. Rev. Mod. Phys., 77:1321–1373, Nov 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.77.1321>. Citado nas páginas 73 e 99.
- [108] Linder, Jacob e Jason W. A. Robinson: *Superconducting spintronics*. Nature Physics, 11(4):307–315, Apr 2015, ISSN 1745-2481. <https://doi.org/10.1038/nphys3242>. Citado na página 74.
- [109] Eschrig, Matthias: *Spin-polarized supercurrents for spintronics: a review of current progress*. Reports on Progress in Physics, 78(10):104501, Sep 2015. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/78/10/104501>. Citado na página 74.
- [110] Tanaka, Y. e A. A. Golubov: *Theory of the Proximity Effect in Junctions with Unconventional Superconductors*. Phys. Rev. Lett., 98:037003, Jan 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.037003>. Citado na página 74.

- [111] Eschrig, M., T. Loewander, T. Champel, J. Kopu e G. Schoen: *Symmetries of Pairing Correlations in Superconductor–Ferromagnet Nanostructures*. *Journal of Low Temperature Physics*, 147:457, 2007. Citado na página 74.
- [112] Kallin, Catherine e John Berlinsky: *Chiral superconductors*. *Reports on Progress in Physics*, 79(5):054502, apr 2016. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/79/5/054502>. Citado na página 74.
- [113] Nadj-Perge, Stevan, Ilya K. Drozdov, Jian Li, Hua Chen, Sangjun Jeon, Jungpil Seo, Allan H. MacDonald, B. Andrei Bernevig e Ali Yazdani: *Observation of Majorana fermions in ferromagnetic atomic chains on a superconductor*. *Science*, 346(6209):602–607, 2014, ISSN 0036-8075. <https://science.sciencemag.org/content/346/6209/602>. Citado na página 74.
- [114] Ruby, Michael, Falko Pientka, Yang Peng, Felix von Oppen, Benjamin W. Heinrich e Katharina J. Franke: *End States and Subgap Structure in Proximity-Coupled Chains of Magnetic Adatoms*. *Phys. Rev. Lett.*, 115:197204, Nov 2015. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.197204>. Citado na página 74.
- [115] Pawlak, R., M. Lisiel, J. Klinovaja, T. Meier, S. Kawai, T. Gladzel, D. Loss e E. Meyer: *Probing atomic structure and Majorana wavefunctions in mono-atomic Fe chains on superconducting Pb surface*. *npj Quantum Information*, 2:16035, 2016. Citado na página 74.
- [116] Jeon, Sangjun, Yonglong Xie, Jian Li, Zhijun Wang, B. Andrei Bernevig e Ali Yazdani: *Distinguishing a Majorana zero mode using spin-resolved measurements*. *Science*, 358(6364):772–776, 2017, ISSN 0036-8075. <https://science.sciencemag.org/content/358/6364/772>. Citado na página 74.
- [117] Kim, Howon, Alexandra Palacio-Morales, Thore Posske, Levente Rózsa, Krisztián Pálotás, László Szunyogh, Michael Thorwart e Roland Wiesendanger: *Toward tailoring Majorana bound states in artificially constructed magnetic atom chains on elemental superconductors*. *Science Advances*, 4(5), 2018. <https://advances.sciencemag.org/content/4/5/eaar5251>. Citado na página 74.
- [118] Nayak, Chetan, Steven H. Simon, Ady Stern, Michael Freedman e Sankar Das Sarma: *Non-Abelian anyons and topological quantum computation*. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1083–1159, Sep 2008. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.1083>. Citado na página 74.
- [119] Aasen, David, Michael Hell, Ryan V. Mishmash, Andrew Higginbotham, Jeroen Danon, Martin Leijnse, Thomas S. Jespersen, Joshua A. Folk, Charles M. Marcus, Karsten Flensberg e Jason Alicea: *Milestones Toward Majorana-Based Quantum*

- Computing*. Phys. Rev. X, 6:031016, Aug 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.6.031016>. Citado na página 74.
- [120] Nakosai, Sho, Yukio Tanaka e Naoto Nagaosa: *Two-dimensional p-wave superconducting states with magnetic moments on a conventional s-wave superconductor*. Phys. Rev. B, 88:180503, Nov 2013. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.180503>. Citado na página 75.
- [121] Röntynen, Joel e Teemu Ojanen: *Topological Superconductivity and High Chern Numbers in 2D Ferromagnetic Shiba Lattices*. Phys. Rev. Lett., 114:236803, Jun 2015. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.236803>. Citado na página 75.
- [122] Cayao, Jorge, Christopher Triola e Annica M. Black-Schaffer: *Odd-frequency superconducting pairing in one-dimensional systems*. The European Physical Journal Special Topics, 229:545–575, Feb 2020. <https://doi.org/10.1140/epjst/e2019-900168-0>. Citado na página 75.
- [123] Hwang, Sun Yong, Pablo Buset e Björn Sothmann: *Odd-frequency superconductivity revealed by thermopower*. Phys. Rev. B, 98:161408, Oct 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.161408>. Citado na página 75.
- [124] Krieger, Jonas A., Anna Pertsova, Sean R. Giblin, Max Döbeli, Thomas Prokscha, Christof W. Schneider, Andreas Suter, Thorsten Hesjedal, Alexander V. Balatsky e Zaher Salman: *Proximity-Induced Odd-Frequency Superconductivity in a Topological Insulator*. Phys. Rev. Lett., 125:026802, Jul 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.125.026802>. Citado na página 75.
- [125] Weiss, Stephan e Jürgen König: *Odd-triplet superconductivity in single-level quantum dots*. Phys. Rev. B, 96:064529, Aug 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.064529>. Citado nas páginas 75 e 110.
- [126] Kuzmanovski, Dushko, Rubén Seoane Souto e Alexander V. Balatsky: *Odd-frequency superconductivity near a magnetic impurity in a conventional superconductor*. Phys. Rev. B, 101:094505, Mar 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.094505>. Citado nas páginas 75 e 99.
- [127] Ziman, Jonh M.: *Models of disorder*. Cambridge University Press, 1979. Citado nas páginas 77 e 90.
- [128] Georges, Antoine: *Strongly Correlated Electron Materials: Dynamical Mean-Field Theory and Electronic Structure*. Em *AIP Conference Proceedings*, volume 715, páginas 3–74. AIP, 2004. Citado nas páginas 77, 78 e 80.

- [129] Metzner, Walter e Dieter Vollhardt: *Correlated Lattice Fermions in  $d = \infty$  Dimensions*. Phys. Rev. Lett., 62:324–327, Jan 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.324>. Citado nas páginas 77 e 78.
- [130] Georges, Antoine e Gabriel Kotliar: *Hubbard model in infinite dimensions*. Physical Review B, 45(12):6479, 1992. Citado nas páginas 77, 78 e 82.
- [131] Kotliar, Gabriel e Dieter Vollhardt: *Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory*. Physics Today, 57(3):53–60, 2004. Citado na página 78.
- [132] Georges, Antoine, Gabriel Kotliar, Werner Krauth e Marcelo J. Rozenberg: *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*. Rev. Mod. Phys., 68:13–125, Jan 1996. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.68.13>. Citado nas páginas 78, 80, 81, 151, 152 e 157.
- [133] Kotliar, Gabriel, Sergej Y Savrasov, Gunnar Pálsson e Giulio Biroli: *Cellular dynamical mean field approach to strongly correlated systems*. Physical Review Letters, 87(18):186401, 2001. Citado na página 78.
- [134] Civelli, Marcello: *Investigation of strongly correlated electron systems with cellular dynamical mean field theory*. PhD Thesis submitted to Rutgers University, January 2006. <https://arxiv.org/abs/0710.2802>. Citado nas páginas 78 e 79.
- [135] Florens, Serge: *Nanoscale Dynamical Mean-Field Theory for Molecules and Mesoscopic Devices in the Strong-Correlation Regime*. Phys. Rev. Lett., 99:046402, Jul 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.046402>. Citado na página 79.
- [136] Müller-Hartmann, E.: *Correlated fermions on a lattice in high dimensions*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 74:507–512, 1989. <https://doi.org/10.1007/BF01311397>. Citado na página 81.
- [137] Müller-Hartmann, E.: *The Hubbard model at high dimensions: some exact results and weak coupling theory*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 76:211–217, 1989. <https://doi.org/10.1007/BF01312686>. Citado na página 81.
- [138] Müller-Hartmann, E.: *Fermions on a lattice in high dimensions*. International Journal of Modern Physics B, 03(12):2169–2187, 1989. <https://doi.org/10.1142/S0217979289001391>. Citado na página 81.
- [139] Altomare, Fabio e Albert M Chang: *One-dimensional superconductivity in nanowires*. John Wiley & Sons, 2013. Citado nas páginas 88 e 154.

- 
- [140] Rozenberg, M. J., G. Kotliar e X. Y. Zhang: *Mott-Hubbard transition in infinite dimensions. II*. Phys. Rev. B, 49:10181–10193, Apr 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.10181>. Citado na página 101.
- [141] Wiesendanger, Roland: *Spin mapping at the nanoscale and atomic scale*. Rev. Mod. Phys., 81:1495–1550, Nov 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.1495>. Citado na página 104.



# Apêndices



# APÊNDICE A – Equações de grupo de renormalização

Neste apêndice mostramos como podemos aplicar diagramas de Feynman e grupo de renormalização de Wilson, discutidos no capítulo 3, ao problema de impurezas móveis em um sistema com toque quadrático de bandas, discutido no capítulo 4. A seção A.1 mostra os diagramas utilizados e como obter as equações de RG, utilizando os resultados de integrais em um *loop* disponíveis na seção A.2.

## A.1 Cálculos de Diagramas

Aqui mostramos como obter as equações de RG para as constantes de acoplamento, massa efetiva e peso de quase partícula. Para as constantes de acoplamento, consideramos o caso mais geral onde as impurezas possuem um potencial químico  $\mu \geq 0$ . O Hamiltoniano que utilizamos é dado pela Eq. (4.63), o qual inclui os acoplamentos  $g$ ,  $g_{\perp}$  e  $g_{\uparrow}$ . As constantes de acoplamento  $g$  e  $g_{\perp}$  representam interações locais entre um férmion majoritário e uma impureza, o primeiro sendo uma interação de espalhamento usual de onda  $s$  enquanto  $g_{\perp}$  espalha férmions entre estados das diferentes subredes. Consideramos também uma interação local entre férmions majoritários  $g_{\uparrow}$ . Aqui também calculamos as equações de RG para a massa efetiva da impureza e seu peso de quase partícula mas, devido à complexidade do cálculo do diagrama *sunrise*, tais equações foram obtidas no caso particular de uma única impureza com  $\mu = 0$ , sem interação entre férmions majoritários, i.e.  $g_{\uparrow} = 0$ .

A fim de obter as Eqs. de RG para os acoplamentos, dividimos o Hamiltoniano em duas partes,  $H_I = H_{UJ} + H_{V_{\uparrow}}$ , onde o termo  $H_{UJ}$  contém as interações entre um férmion majoritário e uma impureza enquanto  $H_{V_{\uparrow}}$  é a interação entre dois férmions majoritários. Assim, calculamos aqui dois tipos de propagadores, baseados nas equações

$$\Pi(\{x_i\}) = -\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_{\tau} f_1(x_1) f_2^{\dagger}(x_2) f_3(x_3) f_4^{\dagger}(x_4) e^{-\int_0^{\beta} H_I(\tau) d\tau} \right\}_{\text{con}}, \quad (\text{A.1})$$

$$\Pi^{(1)}(\{x_i\}) = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_{\tau} f_1(x_1) f_2^{\dagger}(x_2) f_3(x_3) f_4^{\dagger}(x_4) \int d^{d+1}x \mathcal{H}_I(x) \right\}_{\text{con}}, \quad (\text{A.2})$$

$$\Pi^{(2)}(\{x_i\}) = -\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_{\tau} f_1(x_1) f_2^{\dagger}(x_2) f_3(x_3) f_4^{\dagger}(x_4) \int d^{d+1}x \int d^{d+1}x' \mathcal{H}_I(x) \mathcal{H}_I(x') \right\}_{\text{con}}, \quad (\text{A.3})$$

que correspondem às Eqs. (3.1)-(3.3), as quais repetimos aqui. Definimos os propagadores do tipo 1 como aqueles em que  $f_1 = c_{n_1}$ ,  $f_2 = c_{n_2}$ ,  $f_3 = d$ ,  $f_4 = d$ , onde  $n_1, n_2 \in \{A, B\}$ . Os propagadores do tipo 2 são aqueles em que  $f_1, f_2 = c_A$ ,  $f_3, f_4 = c_B$ . Ao utilizar a Eq. (A.2)



Figura 40 – Diagramas conectados de primeira ordem dos tipo 1 e 2, respectivamente. As linhas contínuas representam férmions do banho, enquanto as tracejadas representam os de impureza. O ponto representa o acoplamento entre os férmions, que pode ser  $g_{\uparrow\downarrow}$  ou  $g_{\uparrow}$ .

para calcular propagadores de primeira ordem do tipo 1, o único termo que gera um diagrama conectado é o que vem de  $H_{UJ}$ . Analogamente, para propagadores de primeira ordem do tipo 2 o único diagrama conectado vem de  $H_{V_{\uparrow}}$ . Dessa forma, as interações  $H_{UJ}$  e  $H_{V_{\uparrow}}$  estão relacionadas, respectivamente, aos propagadores que denominamos dos tipos 1 e 2. Os dois diagramas conectados estão representados nas Figs. 40(a) e 40(b), mostrando os vértices  $g_{\uparrow\downarrow} = g\mathbf{1} + g_{\perp}\sigma_x$  e  $g_{\uparrow}$ , respectivamente. Note que agrupamos os acoplamentos  $g$  e  $g_{\perp}$  em  $g_{\uparrow\downarrow}$  para simplificação.

Dados estes propagadores de primeira ordem, nossa tarefa é utilizar a Eq. (A.3) para calcular os dois tipos de propagadores em um *loop*, que surgem da expansão em segunda ordem nos acoplamentos. Os diagramas em um *loop* do tipo 1 renormalizam as constantes de acoplamento de  $H_{UJ}$ , isto é,  $g$  e  $g_{\perp}$ . Os do tipo 2 renormalizam  $g_{\uparrow}$ , que é a constante de acoplamento associada a  $H_{V_{\uparrow}}$ . Os diagramas em um *loop* do nosso problema se encontram na Fig. 41. Estes se caracterizam pela presença de uma única integral

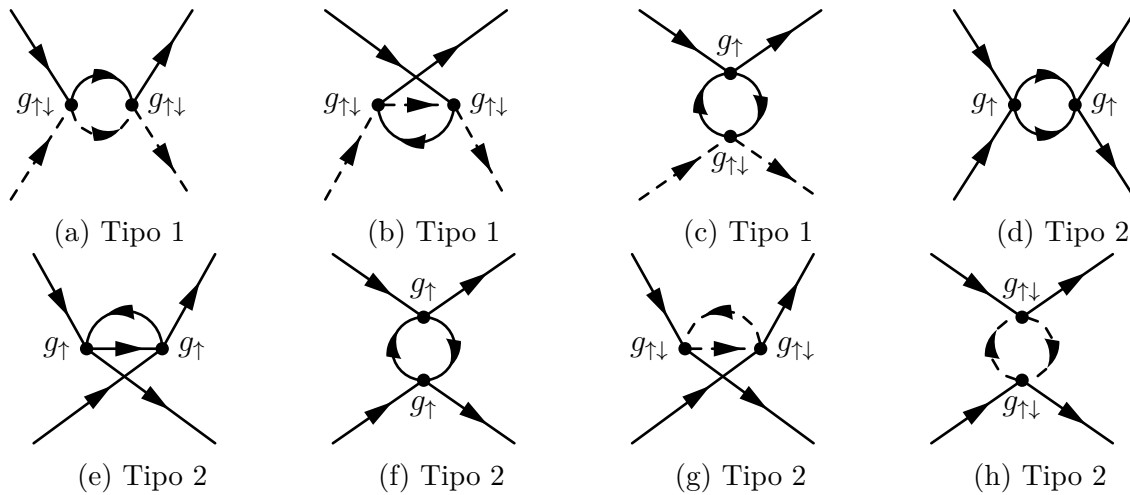


Figura 41 – Diagramas em um *loop* que podem contribuir para a renormalização das constantes de acoplamento. Em cada vértice podemos ter acoplamentos  $g_{\uparrow\downarrow}$  ou  $g_{\uparrow}$ , conforme indicado nos diagramas. As linhas contínuas representam férmions do banho, enquanto as tracejadas representam os de impureza. Os diagramas (a)-(c) são do tipo 1 e os diagramas (d)-(h) são do tipo 2.

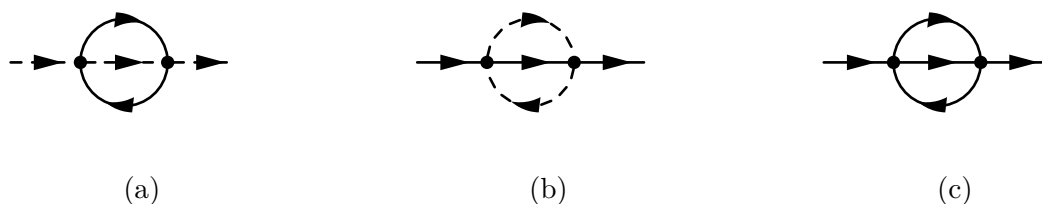


Figura 42 – Diagramas de segunda ordem que contribuem para as equações de RG das massas efetivas e dos pesos de quase partícula. As linhas contínuas representam férmions do banho, enquanto as tracejadas representam os de impureza. Os diagramas (a) e (b) possuem acoplamentos  $g_{\uparrow\downarrow}$  e o diagrama (c),  $g_{\uparrow}$ . O diagrama (a) renormaliza a autoenergia  $\Sigma$  das impurezas, enquanto (b) e (c) renormalizam  $\Sigma$  dos férmions majoritários.

no momento interno  $\mathbf{p}$  e são os que podem trazer contribuição para a renormalização das constantes de acoplamento. Os propagadores das Figs. 41(a)-(c) são do tipo 1 e os diagramas 41(d)-(h) são do tipo 2. Observe que os propagadores de um *loop* do tipo 1 não possuem somente acoplamentos  $g_{\uparrow\downarrow}$ , mas também  $g_{\uparrow}$ . Isso implica que  $g_{\uparrow}$  pode contribuir para a renormalização de  $g$  e  $g_{\perp}$ . Semelhantemente, os diagramas do tipo 2 possuem também interações  $g_{\uparrow\downarrow}$ , as quais podem contribuir para a renormalização de  $g_{\uparrow}$ . Após calcular as contribuições de todos os propagadores do tipo 1 (2) e amputar as pernas externas é fácil chegar às Eqs. de RG para  $g$  e  $g_{\perp}$  ( $g_{\uparrow}$ ) [ver seção 3.2].

Podemos também calcular as contribuições dos propagadores de dois pontos (i.e. de uma única partícula) para as autoenergias e, conseqüentemente, para as equações de RG das massas efetivas e dos pesos de quase partícula, tanto para os férmions majoritários quanto para as impurezas. Os diagramas em dois *loops* (provenientes da expansão da função de Green em segunda ordem nos acoplamentos) que podem trazer contribuição para as equações de RG estão representados na Fig. 42. Em tais diagramas, chamados de *sunrise*, as linhas internas dão duas voltas e estes propagadores se caracterizam pela presença de duas integrais em momentos internos  $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ . O diagrama 42(a) renormaliza a autoenergia das impurezas enquanto os diagramas 42(b)-(c) renormalizam a autoenergia dos férmions majoritários. Conforme será discutido mais adiante, no cálculo da autoenergia nos restringiremos ao caso de uma única impureza com  $\mu = 0$  e  $g_{\uparrow} = 0$ , de forma que realizaremos apenas o cálculo do diagrama 42(a).

Nas subseções a seguir mostramos os resultados das contribuições dos diagramas mostrados aqui para as Eqs. de RG, começando pelas constantes de acoplamento. Utilizamos um esquema de grupo de renormalização de Wilson segundo o qual integramos os momentos internos dentro da concha  $K' < |\mathbf{p}| < K$ , em que  $K' = Ke^{-dl/2}$ , sendo o potencial químico das impurezas  $\mu \ll K^2/2M$ . O elemento infinitesimal  $dl$  (multiplicado por  $K/2$ ) é a espessura da concha na qual integramos os momentos e  $l$  está relacionado com o fluxo de grupo de renormalização. As equações de RG podem ser expressas como derivadas das

constantes de acoplamento, peso de quase partícula e massa efetiva em relação a  $l$ , isto é,  $dg/dl$ ,  $dZ/dl$  e  $dM/dl$ .

### A.1.1 Renormalização de $g$ e $g_{\perp}$

Aqui mostraremos as contribuições para as equações de RG dos propagadores do tipo 1, em que tomamos, nas Eqs. (A.1)-(A.3),  $f_1 = c_{n_1}$ ,  $f_2 = c_{n_2}$ ,  $f_3 = d$ ,  $f_4 = d$ , com  $n_1, n_2 \in \{A, B\}$ .

A fim de calcular o propagador de primeira ordem nas constantes de acoplamento, representado pela Fig. 40(a), utilizamos a Eq. (A.2),

$$\begin{aligned} \Pi^{(1)}(\{x_i\}) &= \frac{4\pi}{m_+} \int d^3x \operatorname{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_{\tau} c_{n_1}(x_1) c_{n_2}^{\dagger}(x_2) d(x_3) d^{\dagger}(x_4) \psi_c^{\dagger}(x) (g\mathbb{1} + g_{\perp} \sigma_x) \psi_c(x) \right. \\ &\quad \left. \times d^{\dagger}(x) d(x) \right\}_{\text{con}} \\ &= \frac{4\pi}{m_+} \sum_l \int d^3x \operatorname{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_{\tau} c_{n_1}(x_1) c_{n_2}^{\dagger}(x_2) d(x_3) d^{\dagger}(x_4) c_l^{\dagger}(x) [g c_l(x) \right. \\ &\quad \left. + g_{\perp} c_{l^*}(x)] d^{\dagger}(x) d(x) \right\}_{\text{con}}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

em que  $l^*$  é a subrede diferente de  $l$ , de forma que se  $l = A$  então  $l^* = B$ , e vice-versa. Agora, utilizando o teorema de Wick [5] a fim de obter o propagador do diagrama 40(a), temos

$$\begin{aligned} \Pi_{(40a)}^{(1)}(\{x_i\}) &= \frac{4\pi}{m_+} \sum_l \int d^3x [g \mathcal{G}_{l, n_2}(x - x_2) + g_{\perp} \mathcal{G}_{l^*, n_2}(x - x_2)] \mathcal{G}_{n_1, l}(x_1 - x) G_d(x - x_4) \\ &\quad \times G_d(x_3 - x), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

em que  $G_d$  é o propagador não interagente das impurezas, dado pela Eq. (4.22), e  $\mathcal{G}_{n_1, n_2}$  são as componentes do propagador matricial não interagente  $\hat{G}$  dos férmions majoritários, dadas pela equação (4.25). Tirando a transformada de Fourier da expressão acima em relação às variáveis  $x_i$ , temos

$$\begin{aligned} \Pi_{(40a)}^{(1)}(\{p_i\}) &= \frac{4\pi}{m_+} \sum_l \mathcal{G}_{n_1, l}(p_1) [g \mathcal{G}_{l, n_2}(p_2) + g_{\perp} \mathcal{G}_{l^*, n_2}(p_2)] G_d(p_4) G_d(p_3) \\ &\quad \times \int d^3x e^{i(-p_1 x + p_2 x - p_3 x + p_4 x)} \\ &= \frac{4\pi}{m_+} \sum_l \mathcal{G}_{n_1, l}(p_1) [g \mathcal{G}_{l, n_2}(p_2) + g_{\perp} \mathcal{G}_{l^*, n_2}(p_2)] G_d(p_4) G_d(p_3) \\ &\quad \times \delta(-p_1 + p_2 - p_3 + p_4) \\ &= \frac{4\pi}{m_+} [\hat{G}(p_1) (g\mathbb{1} + g_{\perp} \sigma_x) \hat{G}(p_2)]_{(n_1, n_2)} G_d(p_3) G_d(p_4) \delta(p_1 + p_3 - p_2 - p_4), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

onde o subíndice  $(n_1, n_2)$  se refere ao elemento da matriz entre colchetes.

Veamos agora os propagadores de segunda ordem. Usando a Eq. (A.3), temos

$$\begin{aligned} \Pi^{(2)}(\{x_i\}) &= - \left( \frac{4\pi}{m_+} \right)^2 \sum_{l_1, l_2} \int d^3x \int d^3x' \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau c_{n_1}(x_1) c_{n_2}^\dagger(x_2) d(x_3) d^\dagger(x_4) c_{l_1}^\dagger(x) \right. \\ &\quad \times \left. \left[ g c_{l_1}(x) + g_\perp c_{l_1^*}(x) \right] d^\dagger(x) d(x) c_{l_2}^\dagger(x') \left[ g c_{l_2}(x') + g_\perp c_{l_2^*}(x') \right] d^\dagger(x') d(x') \right\}_{\text{con}}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

A fim de calcular a contribuição que vem do diagrama 41(a), usamos o teorema de Wick e encontramos

$$\begin{aligned} \Pi_{(41a)}^{(2)}(\{x_i\}) &= - \left( \frac{4\pi}{m_+} \right)^2 \sum_{l_1, l_2} \int d^3x \int d^3x' \mathcal{G}_{n_1, l_2}(x_1 - x') \left[ g \mathcal{G}_{l_1, n_2}(x - x_2) \right. \\ &\quad \left. + g_\perp \mathcal{G}_{l_1^*, n_2}(x - x_2) \right] G_d(x_3 - x') G_d(x - x_4) G_d(x' - x) \left[ g \mathcal{G}_{l_2, l_1}(x' - x) \right. \\ &\quad \left. + g_\perp \mathcal{G}_{l_2^*, l_1}(x' - x) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Tirando a transformada de Fourier da expressão anterior, chegamos em

$$\begin{aligned} \Pi_{(41a)}^{(2)}(\{p_i\}) &= - \left( \frac{4\pi}{m_+} \right)^2 \sum_{l_1, l_2} \mathcal{G}_{n_1, l_2}(p_1) \left[ g \mathcal{G}_{l_1, n_2}(p_2) + g_\perp \mathcal{G}_{l_1^*, n_2}(p_2) \right] G_d(p_3) G_d(p_4) \\ &\quad \times \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} G_d(p_4 - q) \left[ g \mathcal{G}_{l_2, l_1}(p_2 + q) + g_\perp \mathcal{G}_{l_2^*, l_1}(p_2 + q) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

A integral  $\int d^3q = \int d^2q \times \int d\nu$  acima é realizada em todas as frequências  $\nu \in (-\infty, +\infty)$ , enquanto a componente de momento  $\mathbf{q}$  percorre a casca esférica infinitesimal. Integrais deste tipo aparecem em vários diagramas em um *loop* e, para simplificar, na seção A.2 colocamos o resultado de integrais como esta. Utilizando a Eq. (A.32) conclui-se que o resultado do fator dado pela integral da expressão acima [i.e. a segunda linha da expressão (A.9)] é

$$\frac{\mu_+ dl}{4\pi} \frac{K^2}{K^2 - 2\mu_+ \mu} \left( g \delta_{l_2, l_1} + g_\perp \delta_{l_2^*, l_1} \right), \quad (\text{A.10})$$

em que  $\mu$  é o potencial químico das impurezas e

$$\begin{aligned} \mu_\alpha^{-1} &= \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m_\alpha} \right), \quad \alpha = +, -, \\ \mu_0^{-1} &= \left( \frac{1}{m_+} + \frac{1}{m_-} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Então temos

$$\begin{aligned} \Pi_{(41a)}^{(2)}(\{p_i\}) &= - \left( \frac{4\pi}{m_+} \right)^2 \sum_{l_1, l_2} \mathcal{G}_{n_1, l_2}(p_1) \left[ g \mathcal{G}_{l_1, n_2}(p_2) + g_\perp \mathcal{G}_{l_1^*, n_2}(p_2) \right] G_d(p_3) G_d(p_4) \\ &\quad \times \frac{\mu_+ dl}{4\pi} \frac{K^2}{K^2 - 2\mu_+ \mu} \left( g \delta_{l_2, l_1} + g_\perp \delta_{l_2^*, l_1} \right) \\ &= - \left( \frac{4\pi}{m_+} \right)^2 \frac{\mu_+ dl}{4\pi} \frac{K^2}{K^2 - 2\mu_+ \mu} \left\{ \hat{G}(p_1) [(g^2 + g_\perp^2) \mathbf{1} + 2g g_\perp \sigma_x] \hat{G}(p_2) \right\}_{(n_1, n_2)} \\ &\quad \times G_d(p_3) G_d(p_4) \delta(p_1 + p_3 - p_2 - p_4). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Seguindo o mesmo raciocínio para calcular os propagadores representados nas Figs. 41(b) e 41(c) temos, respectivamente

$$\begin{aligned} \Pi_{(41b)}^{(2)}(\{p_i\}) &= \left(\frac{4\pi}{m_+}\right)^2 \frac{\mu_- dl}{4\pi} \frac{K^2}{K^2 - 2\mu_- \mu} \{\hat{G}(p_1)[(g^2 + g_\perp^2)\mathbb{1} + 2gg_\perp\sigma_x]\hat{G}(p_2)\}_{(n_1, n_2)} \\ &\quad \times G_d(p_3)G_d(p_4)\delta(p_1 + p_3 - p_2 - p_4), \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \Pi_{(41c)}^{(2)}(\{p_i\}) &= -\left(\frac{4\pi}{m_+}\right)^2 \frac{\mu_0 dl g_\perp g_\uparrow}{2\pi} \{\hat{G}(p_1)\sigma_x\hat{G}(p_2)\}_{(n_1, n_2)} G_d(p_3)G_d(p_4) \\ &\quad \times \delta(p_1 + p_3 - p_2 - p_4), \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Observando as Eqs. (A.12)-(A.14) e comparando-as com a expressão (A.6), vemos que os termos nos propagadores em um *loop* que envolvem a matriz  $\mathbb{1}$  renormalizam  $g$ , enquanto os termos que envolvem a matriz  $\sigma_x$  renormalizam  $g_\perp$ . Assim, somando todas as contribuições acima e amputando as pernas externas (i.e. desconsiderando o produto dos propagadores não interagentes envolvendo os momentos  $p_i, i = 1, \dots, 4$ , e a função delta de Dirac, que está relacionada com a conservação de momento), obtemos

$$\begin{aligned} g' &= g + \frac{4\pi}{m_+} \frac{(g^2 + g_\perp^2)dl}{4\pi} \left( \frac{\mu_- K^2}{K^2 - 2\mu_- \mu} - \frac{\mu_+ K^2}{K^2 - 2\mu_+ \mu} \right), \\ g'_\perp &= g_\perp + \frac{4\pi}{m_+} \frac{2gg_\perp dl}{4\pi} \left( \frac{\mu_- K^2}{K^2 - 2\mu_- \mu} - \frac{\mu_+ K^2}{K^2 - 2\mu_+ \mu} \right) + \frac{4\pi}{m_+} \frac{\mu_0 dl g_\perp g_\uparrow}{2\pi}, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

em que  $g'$  e  $g'_\perp$  são, respectivamente, os vértices de interação renormalizados correspondentes a  $g$  e  $g_\perp$ . Fazendo  $dg/dl = (g' - g)/dl$  e  $dg_\perp/dl = (g'_\perp - g_\perp)/dl$  obtemos duas equações de grupo de renormalização,

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dl} &= \frac{(g^2 + g_\perp^2)}{m_+} \left( \frac{\mu_- K^2}{K^2 - 2\mu_- \mu} - \frac{\mu_+ K^2}{K^2 - 2\mu_+ \mu} \right), \\ \frac{dg_\perp}{dl} &= \frac{2gg_\perp}{m_+} \left( \frac{\mu_- K^2}{K^2 - 2\mu_- \mu} - \frac{\mu_+ K^2}{K^2 - 2\mu_+ \mu} \right) + \frac{2\mu_0 g_\perp g_\uparrow}{m_+}, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

as quais são também mostradas no texto principal [ver Eq. (4.64)].

### A.1.2 Renormalização de $g_\uparrow$

Nesta subseção calculamos a Eq. de RG para  $g_\uparrow$  considerando os propagadores do tipo 2, dados por  $f_1, f_2 = c_A$ ,  $f_3, f_4 = c_B$ . Para o propagador em primeira ordem nas constantes de acoplamento, representado pela Fig. 40(b), temos

$$\Pi_{(40b)}^{(1)}(\{p_i\}) = \frac{4\pi}{m_+} g_\uparrow [\hat{G}(p_1)i\sigma_y\hat{G}(p_3)]_{(n_1, n_3)} [\hat{G}(p_2)i\sigma_y\hat{G}(p_4)]_{(n_2, n_4)} \delta(p_1 + p_3 - p_2 - p_4). \quad (\text{A.17})$$

Somando os diagramas 41(d)-41(h) temos

$$\begin{aligned} \Pi^{(2)}(\{p_i\}) &= \left(\frac{4\pi}{m_+}\right)^2 \frac{g_\uparrow^2 dl}{2\pi(m_+ + m_-)} [\hat{G}(p_1)i\sigma_y\hat{G}(p_3)]_{(n_1, n_3)} [\hat{G}(p_2)i\sigma_y\hat{G}(p_4)]_{(n_2, n_4)} \\ &\quad \times \delta(p_1 + p_3 - p_2 - p_4). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Considerando as expressões acima da mesma forma feita na subseção anterior, chega-se à equação de grupo de renormalização

$$\frac{dg_{\uparrow}}{dl} = \frac{2g_{\uparrow}^2\mu_0}{m_+}. \quad (\text{A.19})$$

Esta expressão também é mostrada no texto principal [ver Eq. (4.64)].

### A.1.3 Renormalização de $M$ e $Z$

A fim de encontrar equações de RG para massas efetivas e pesos de quase partícula, é necessário calcular os diagramas do tipo *sunrise*, que possuem dois *loops*. Tais propagadores, que envolvem integrais em momentos internos  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{p}'$ , são difíceis de resolver analiticamente. Por este motivo aqui consideramos o caso particular de uma única impureza com  $\mu = 0$  e não levaremos em conta interações entre férmions majoritários,  $g_{\uparrow} = 0$ . Tal caso particular corresponde ao sistema considerado nas seções 4.1-4.3. Nesse problema de uma única impureza o diagrama 42(b) se anula. O diagrama 42(c) também se anula ao assumir  $g_{\uparrow} = 0$ . Resta-nos, portanto, calcular o diagrama *sunrise* da Fig. 42(a).

A contribuição do diagrama 42(a) para a autoenergia pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} \Sigma_{(42a)}^{(2)}(p) &= \left(\frac{4\pi}{m_+}\right)^2 \sum_{l_1, l_2} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} [g\mathcal{G}_{l_1, l_2}(p') + g_{\perp}\mathcal{G}_{l_1^*, l_2}(p')] \times [g\mathcal{G}_{l_2, l_1}(p'') \\ &\quad + g_{\perp}\mathcal{G}_{l_2^*, l_1}(p'')] G_d(p' - p'' + p). \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Vemos que a expressão acima é uma combinação linear de funções do tipo

$$\begin{aligned} I_{l_1 l_2, l_3 l_4, d}(p) &= \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} \mathcal{G}_{l_1, l_2}(p') \mathcal{G}_{l_3, l_4}(p'') G_d(p' - p'' + p) \\ &= \int \frac{d^2 p'}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2 p''}{(2\pi)^2} U_{l_1, -}(\mathbf{p}') U_{l_2, -}(\mathbf{p}') U_{l_3, +}(\mathbf{p}'') U_{l_4, +}(\mathbf{p}'') \\ &\quad \times \frac{1}{\epsilon_+(\mathbf{p}'') - \epsilon_-(\mathbf{p}') + E(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'' + \mathbf{p}) - i\omega}, \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

onde já resolvemos as integrais nas frequências usando o teorema dos resíduos. Substituindo este resultado na Eq. (A.20), encontramos  $\Sigma_{(42a)}^{(2)}(p)$  em termos de integrais nos momentos  $\mathbf{p}'$  e  $\mathbf{p}''$ .

A autoenergia proveniente do diagrama *sunrise* pode ser expandida na forma  $\Sigma^{(2)}(\mathbf{p}, \omega) \simeq (ai\omega + b\frac{p^2}{2M} + c) dl$  (veja a seção 3.2 e note que aqui consideramos que os acoplamentos  $g$  e  $g_{\perp}$  estão absorvidos em  $a$ ,  $b$  e  $c$ ). Aqui estamos trabalhando no *ensemble* canônico fixando o número de impurezas no sistema  $N_{\downarrow} = 1$ , de forma que a renormalização do potencial químico da impureza não tem nenhum efeito físico. Por isso não estamos interessados em calcular  $d\mu/dl$ . As equações de RG para  $Z_d$  e  $M$  são obtidas a partir de  $a$

e  $b$ , sendo independentes de  $c$ ,

$$\frac{dZ_d}{dl} = \frac{Z'_d - Z_d}{dl} = Z_d a, \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{dM}{dl} = \frac{M' - M}{dl} = -M(a + b). \quad (\text{A.23})$$

As funções  $a$  e  $b$  são encontradas a partir da autoenergia  $\Sigma$  fazendo

$$a = \frac{\partial \Sigma}{\partial i\omega}(\mathbf{p} = 0, i\omega = 0), \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{b}{M} = \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial p^2}(\mathbf{p} = 0, i\omega = 0). \quad (\text{A.25})$$

Usando as derivadas acima em  $\Sigma_{(42a)}^{(2)}(p)$  [ver Eqs. (A.20)-(A.21)] encontramos expressões para  $a$  e  $b$  em termos de integrais em  $dp' d\phi_{\mathbf{p}'} dp'' d\phi_{\mathbf{p}''}$ . As integrais nos ângulos  $d\phi_{\mathbf{p}'} d\phi_{\mathbf{p}''}$  são resolvidas primeiro. Depois, a fim de resolver as integrais em  $dp' dp''$ , consideramos que  $p'^2 + p''^2$  precisa estar dentro de uma casca esférica, i.e. estamos considerando que a soma do quadrado dos módulos dos momentos internos deve percorrer uma casca esférica. Isto é feito considerando a mudança de variáveis  $p' = k \cos \alpha$ ,  $p'' = k \sin \alpha$ , onde integramos nos intervalos  $\alpha \in (0, \pi/2)$ ,  $k \in (Ke^{-dl/2}, K)$ . A integral em  $dk$  fornece um fator proporcional a  $dl$  enquanto a integral em  $d\alpha$  só pode ser resolvida numericamente. Após manipular as expressões para  $a$  e  $b$  encontramos as equações de RG,

$$\begin{aligned} \frac{dZ_d}{dl} &= -\frac{2\mu_- \mu_+ Z_d}{m_+^2} \left[ g^2 F_1(r_+, r_-) + g_{\perp}^2 F_2(r_+, r_-) \right], \\ \frac{dM}{dl} &= \frac{2(\mu_- \mu_+)^{3/2}}{m_+^2} \left[ g^2 F_3(r_+, r_-) + g_{\perp}^2 F_4(r_+, r_-) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

As expressões acima correspondem às Eqs. de RG para  $Z_d$  e  $M$  mostradas na Eq. (4.26). As funções  $F_i(r_+, r_-)$ ,  $i = 1, \dots, 4$  são definidas como

$$F_1 = \int_0^{\pi/2} d\alpha \frac{(1+r_+^{-1})(1+r_-^{-1})}{\sin \alpha \cos \alpha} \left[ -1 + \frac{L}{(L^2 - \sin^2(2\alpha))^{1/2}} \right], \quad (\text{A.27})$$

$$F_2 = \frac{1}{4} \int_0^{\pi/2} d\alpha (1+r_+^{-1})(1+r_-^{-1}) \sin(2\alpha) \left[ -1 + \frac{4L}{(L^2 - \sin^2(2\alpha))^{3/2}} \right], \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned} F_3 &= 2 \int_0^{\pi/2} d\alpha \frac{[(1+r_+^{-1})(1+r_-^{-1})]^{3/2}}{(L^2 - \sin^2(2\alpha))^{3/2}} \left\{ (1-3L) \sin(2\alpha) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2[(L^2 - \sin^2(2\alpha))^{3/2} - L^3]}{\sin(2\alpha)} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

$$F_4 = \int_0^{\pi/2} d\alpha \frac{[(1+r_+^{-1})(1+r_-^{-1})]^{3/2}}{(L^2 - \sin^2(2\alpha))^{5/2}} \sin(2\alpha) \left[ (1-3L) \sin^2(2\alpha) + 2L^2 \right], \quad (\text{A.30})$$

onde

$$L(\alpha) = (1+r_-^{-1}) \cos^2 \alpha + (1+r_+^{-1}) \sin^2 \alpha. \quad (\text{A.31})$$

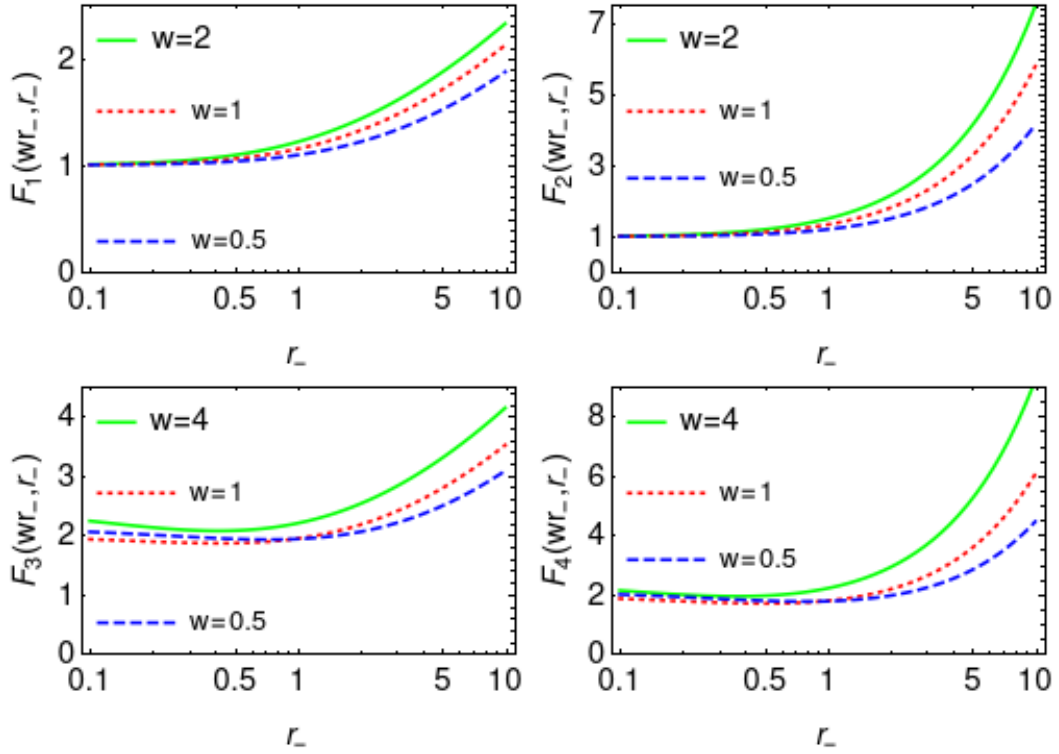


Figura 43 – Gráficos de  $F_1(wr_-, r_-), \dots, F_4(wr_-, r_-)$  em função de  $r_-$  para diferentes valores de  $w$ . Os eixos das abscissas estão em escala logarítmica.

Devido à dificuldade de resolver as integrais acima analiticamente, mostramos aqui o comportamento destas funções com base em resultados numéricos. Definindo  $w = r_+/r_-$ , mostramos gráficos de  $F_i(wr_-, r_-)$  em função de  $r_-$  para diferentes valores de  $w$ . Sabemos que a massa efetiva da impureza  $M$  tende a aumentar com o fluxo do grupo de renormalização, de forma que  $r_- = m_-/M$  tende a diminuir. Semelhantemente,  $r_+ = m_+/M$  tende a diminuir, enquanto  $w = r_+/r_-$  se mantém constante. Portanto, os gráficos que disponibilizamos aqui focam em mostrar o comportamento das funções  $F_i(wr_-, r_-)$  para  $w$  da ordem de 1 e  $r_-$  não muito grande. As funções  $F_1, \dots, F_4$  são mostradas nas Figs. 43(a)-43(d), respectivamente. Note nas figuras que  $F_1(wr_-, r_-), F_2(wr_-, r_-) \simeq 1$  enquanto  $F_3(wr_-, r_-), F_4(wr_-, r_-) \simeq 2$  quando  $r_- \leq 1$ . Isso nos permite uma melhor análise qualitativa das equações de RG (A.26). A fim de realizar uma análise mais precisa, é possível integrar as equações de RG numericamente e, em cada passo, resolver numericamente as expressões para as funções  $F_i(r_+, r_-)$  com o valor de  $M$  renormalizado.

Observe que ao tomar  $g_\uparrow = 0$  na Eq. (A.19) temos que tal acoplamento permanece nulo ao reduzir a escala de energia. Nesse caso, ao considerar  $\mu = 0$  nas Eqs. (A.16), estas se simplificam. No regime que consideramos aqui calculamos a renormalização de  $Z_d$ , que deve ser levado em conta nas Eqs. (A.16). Tais equações de RG foram obtidas a partir da integral em um *loop* e dentro do *loop* temos o produto de um propagador não interagente de férmions majoritários e um propagador não interagente de uma impureza. Os férmions majoritários possuem peso de quase partícula unitário, enquanto as impurezas possuem

peso de quase partícula  $Z_d$ . Assim, este fator  $Z_d$  entra no lado direito das Eqs. (A.16) e recuperamos as Eqs. de RG mostradas no texto principal [i.e. Eqs. (4.26)].

## A.2 Integrais na casca esférica

Para cada diagrama em um *loop* utilizado na correção dos vértices efetivos, precisamos calcular integrais de produtos de dois propagadores livres. A integral na energia  $d\nu$  é feita em todo o espectro energético, enquanto a integral no momento interno  $d^2p$  é realizada na casca circular  $Ke^{-dl/2} < p < K$ , onde  $dl \ll 1$ . A fim de não precisar fazer repetidamente estes cálculos para cada diagrama, calculamos as seguintes integrais com parâmetros genéricos  $e$ ,  $\mathbf{f}$ ,  $g$ , no regime em que  $\mu \ll K^2/2M$  e considerando que os momentos e as energias das pernas externas são desprezíveis,  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rightarrow 0$ ,  $\omega_1, \omega_2 \rightarrow 0$ ,

$$\begin{aligned}
I_{ab,cd,\alpha} &= \int \frac{d^2p d\nu}{(2\pi)^3} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1, i\nu + i\omega_1) \mathcal{G}_{cd}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2, i\alpha\nu + i\omega_2) \\
&= -\alpha \frac{dl}{16\pi} \left[ 2\mu_0(\Delta_1 - \Delta_2 + 3\Delta_3)\delta_{\alpha,+} + \frac{m_+ + m_-}{2}(3\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3)\delta_{\alpha,-} \right], \\
I_{ab,d,\alpha}^{(e,\mathbf{f},g)} &= \int \frac{d^2p d\nu}{(2\pi)^3} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1, i\nu + i\omega_1) G_d(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2, i\alpha\nu + i\omega_2)(ep^2 + \mathbf{f} \cdot \mathbf{p} + g) \\
&= -\alpha \frac{\mu_{-\alpha} K^2 dl \delta_{\alpha,b}}{4\pi} \left[ e + \frac{2\mu_{-\alpha}\mu e + g}{K^2 - 2\mu_{-\alpha}\mu} \right], \\
I_{d,d,\alpha}^{(e,\mathbf{f},g)} &= \int \frac{d^2p d\nu}{(2\pi)^3} G_d(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1, i\nu + i\omega_1) G_d(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2, i\alpha\nu + i\omega_2)(ep^2 + \mathbf{f} \cdot \mathbf{p} + g) \\
&= -\alpha \frac{MK^2 dl}{4\pi} \left[ e + \frac{2M\mu e + g}{K^2 - 2M\mu} \right] \delta_{\alpha,-},
\end{aligned} \tag{A.32}$$

em que  $\alpha = +, -$ . Os subíndices de  $\mathcal{G}$  envolvem  $a, b, c, d \in \{A, B\}$ , onde  $A$  e  $B$  denotam as subredes do sistema inicial:  $\mathcal{G}_{ab}$  são propagadores dos férmions do banho (spin para cima) da subrede  $a$  para  $b$  e o análogo vale para  $\mathcal{G}_{cd}$ ;  $G_d$ , por sua vez, é o propagador dos férmions de impureza (spin para baixo). As funções de Green não interagentes  $G_d$  e  $\mathcal{G}_{ab}$  são dadas pelas Eqs. (4.22) e (4.25), respectivamente. Aqui,  $\mu$  é o potencial químico das impurezas e  $\mu_{\pm} = m_{\pm}M/(M + m_{\pm})$  e  $\mu_0 = m_+m_-/(m_+ + m_-)$  são massas reduzidas. Também definimos

$$\begin{aligned}
\Delta_1 &= \delta_{a,b}\delta_{c,d}\delta_{a,c}, \quad (a = b = c = d), \\
\Delta_2 &= \delta_{a,b^*}\delta_{c,d^*} \quad (a \neq b, c \neq d), \\
\Delta_3 &= \delta_{a,b}\delta_{c,d}\delta_{a,c^*} \quad (a = b \neq c = d),
\end{aligned} \tag{A.33}$$

onde o asterisco “ $*$ ” significa que, se  $b = A$ , então  $b^* = B$ , e vice-versa.

A seguir vamos mostrar alguns detalhes do cálculo de  $I_{ab,cd,\alpha}$ . O cálculo das demais integrais anteriores é similar. Para calcular tais integrais, usamos alguns resultados. Seja

$$g(z) = \frac{1}{(z - z_1)(z - z_2)} = \frac{1}{(z - z_1)(z_1 - z_2)} + \frac{1}{(z - z_2)(z_2 - z_1)} \tag{A.34}$$

uma função complexa. O Teorema dos Resíduos nos fornece

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(z)dz = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^{+R} g(z)dz + \int_{\curvearrowright} g(z)dz = \oint_c g(z)dz = 2\pi i \text{Res}(g, z_i) = \frac{2\pi i \chi}{z_1 - z_2}, \quad (\text{A.35})$$

onde a notação  $\int_{\curvearrowright}$  indica que estamos realizando uma integral ao longo de um semicírculo na parte de cima do plano complexo, que passa pelos pontos  $z = \pm R$ . Na expressão anterior,  $\text{Res}(g, z_i)$  é o resíduo da função  $g$  e  $\chi$  depende das partes imaginárias dos polos  $\text{Im}(z_1)$  e  $\text{Im}(z_2)$ :  $\chi = 1$  se  $\text{Im}(z_1) > 0$  e  $\text{Im}(z_2) < 0$ ;  $\chi = -1$  se  $\text{Im}(z_1) < 0$  e  $\text{Im}(z_2) > 0$ ; e  $\chi = 0$  se  $\text{Im}(z_1)$  e  $\text{Im}(z_2)$  tiverem o mesmo sinal.

Temos, portanto,

$$\begin{aligned} I_{ab,cd,\alpha} &= \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1, i\nu + i\omega_1) \mathcal{G}_{cd}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2, i\alpha\nu + i\omega_2) \\ &= \sum_{\lambda, \lambda'} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \frac{U_{a,\lambda}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1) U_{b,\lambda}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1) U_{c,\lambda'}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2) U_{d,\lambda'}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2)}{[i\nu + i\omega_1 - \epsilon_\lambda(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1)] \times [i\alpha\nu + i\omega_2 - \epsilon_{\lambda'}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2)]} \\ &= \alpha \sum_{\lambda, \lambda'} \frac{\lambda \delta_{\lambda', -\alpha\lambda}}{(2\pi)^2} \int d^2 p \frac{U_{a,\lambda}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1) U_{b,\lambda}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1) U_{c,\lambda'}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2) U_{d,\lambda'}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2)}{i\omega_1 - i\alpha\omega_2 + \alpha\epsilon_{-\alpha\lambda}(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{k}_2) - \epsilon_\lambda(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1)}. \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Agora integraremos o momento interno dentro da concha  $K' < |\mathbf{p}| < K$ , em que  $K' = Ke^{-dl/2}$ . O elemento  $dl \ll 1$  está relacionado com a espessura da concha na qual integramos o momento e também está ligado com o fluxo de grupo de renormalização. Sabendo que  $|\mathbf{k}_1|, |\mathbf{k}_2| \ll |\mathbf{p}|$ , consideraremos que  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 = 0$ ,

$$\begin{aligned} I_{ab,cd,\alpha} &= \alpha \sum_{\lambda} \frac{\lambda}{(2\pi)^2} \int_{K'}^K dp \frac{dp p}{\alpha\epsilon_{-\alpha\lambda}(\alpha\mathbf{p}) - \epsilon_\lambda(\mathbf{p})} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_p U_{a,\lambda}(\phi_p) U_{b,\lambda}(\phi_p) U_{c,\lambda'}(\phi_p) U_{d,\lambda'}(\phi_p) \\ &= \alpha \sum_{\lambda} \frac{\lambda}{(2\pi)^2} \left[ -\lambda dl \left( \frac{1}{m_{-\alpha\lambda}} + \frac{1}{m_\lambda} \right)^{-1} \right] \times \frac{\pi}{4} \left\{ \left[ \Delta_1 - \Delta_2 + 3\Delta_3 \right] \delta_{\alpha,+} \right. \\ &\quad \left. + \left[ 3\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 \right] \delta_{\alpha,-} \right\} \\ &= -\alpha \frac{dl}{16\pi} \left[ 2\mu_0 (\Delta_1 - \Delta_2 + 3\Delta_3) \delta_{\alpha,+} + \frac{m_+ + m_-}{2} (3\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3) \delta_{\alpha,-} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

onde usamos as expressões (4.6) e (4.7) na primeira linha.



# APÊNDICE B – Equações de DMFT pelo método da cavidade

Neste apêndice seguiremos a Ref. [132] e mostraremos como o método da cavidade para dedução da *dynamical mean-field theory* pode ser aplicado ao modelo de Hubbard. Tal método é simples e pode ser facilmente generalizado para diversos modelos. Em seguida o método da cavidade será utilizado para obtenção das equações de DMFT para o modelo do supercondutor magnético diluído apresentado na seção 7.1.

## B.1 Equações de DMFT para o modelo de Hubbard

A idéia por trás do método da cavidade é focar em certo sítio da rede, por exemplo o sítio  $i = 0$ , e integrar os graus de liberdade de todos os demais sítios da rede. Desta forma se obtém uma dinâmica efetiva para o sítio  $i = 0$ .

Consideremos o modelo de Hubbard,

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \mu \sum_{i, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (\text{B.1})$$

em que  $t_{ij}$  é o *hopping* entre sítios primeiros vizinhos  $\langle ij \rangle$ ,  $c_{i\sigma}^\dagger$  cria um elétron com spin  $\sigma$  no sítio  $i$ ,  $\mu$  é o potencial químico,  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  e  $U$  é a repulsão local entre dois elétrons de spins opostos. Para simplificar, consideraremos que o sistema não passa por nenhuma quebra de simetria de forma que o sistema está em uma fase paramagnética invariante por translação. A função de partição do sistema pode ser escrita em termos de uma integral funcional sobre variáveis de Grassmann,

$$Z = \int \prod_{i\sigma} dc_{i\sigma}^\dagger dc_{i\sigma} e^{-S}, \quad (\text{B.2})$$

em que a ação  $S$  é dada por

$$S = \int_0^\beta d\tau \left( \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger \partial_\tau c_{i\sigma} - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right). \quad (\text{B.3})$$

Agora, a fim de definir uma ação efetiva para o sítio  $i = 0$ , integramos os graus de liberdade dos férmions nos outros sítios,

$$\frac{e^{-S_{eff}[c_{0,\sigma}^\dagger, c_{0,\sigma}]} }{Z_{eff}} = \frac{1}{Z} \int \prod_{i \neq 0, \sigma} dc_{i\sigma}^\dagger dc_{i\sigma} e^{-S}. \quad (\text{B.4})$$

Uma expressão para  $S_{eff}$  nos possibilitaria calcular todas as funções de correlação locais do modelo original de Hubbard. Para encontrar tal expressão para  $S_{eff}$ , separamos a ação original  $S$  em três partes,

$$S = S_0 + \Delta S + S^{(0)}, \quad (\text{B.5})$$

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \left( \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{0\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} \right), \quad (\text{B.6})$$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} t_{i0} (c_{i\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{i\sigma}). \quad (\text{B.7})$$

Note que  $S_0$  é a contribuição da ação relacionada apenas ao sítio  $i = 0$ , enquanto  $\Delta S$  está relacionado com a conexão deste sítio aos demais. Finalmente,  $S^{(0)} = S - S_0 - \Delta S$  é a ação numa rede em que o sítio  $i = 0$  foi removido, bem como todas as ligações deste sítio com os demais, funcionando como se tivesse sido criada uma *cavidade* em torno do sítio  $i = 0$ .

Ao definir  $\eta_i = t_{i0} c_{0\sigma}$  e realizar a integral na Eq. (B.4) sobre férmions com  $i \neq 0$ , chega-se em

$$S_{eff} = S_0 + \text{const.} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i_1 \dots j_n, \sigma} \int d\tau_{i_1}, \dots, d\tau_{j_n} \eta_{i_1}^\dagger(\tau_{i_1}) \dots \eta_{i_n}^\dagger(\tau_{i_n}) \eta_{j_1}(\tau_{j_1}) \dots \eta_{j_n}(\tau_{j_n}) \\ \times G_{i_1 \dots j_n}^{(0)}(\tau_{i_1} \dots \tau_{i_n}, \tau_{j_1} \dots \tau_{j_n}). \quad (\text{B.8})$$

Na equação acima, os índices  $i_1, \dots, j_n$  percorrem os sítios conectados ao sítio  $i = 0$  por meio de um *hopping*  $t_{i0}$ . Observe que no modelo em questão, Eq. (B.1), só há *hopping* entre primeiros vizinhos. A integral na expressão acima é sobre os tempos imaginários  $\tau_{i_1}, \dots, \tau_{j_n}$  e  $G_{i_1 \dots j_n}^{(0)}(\tau_{i_1} \dots \tau_{i_n}, \tau_{j_1} \dots \tau_{j_n})$  é uma função de Green definida no sistema com a cavidade, i.e. sem o sítio  $i = 0$ .

A expressão acima para a ação efetiva se simplifica bastante no limite onde  $d$  é grande. Consideremos que o *hopping*  $t_{ij}$  escala com  $1/\sqrt{d}$ . O termo com  $n = 1$  é o único que não se anula no limite  $d \rightarrow \infty$ . Nesse termo, os somatórios em  $i$  e em  $j$  geram juntos um fator da ordem  $d^2$ , os *hoppings* presentes nos fatores  $\eta_i^\dagger, \eta_j$  geram juntos um fator da ordem  $1/d$  e a função de Green  $G_{ij}^{(0)}$  escala com  $1/\sqrt{d}^{|i-j|}$ , em que  $|i - j|$  é a distância de Manhattan<sup>1</sup> entre os sítios  $i$  e  $j$ . No nosso caso,  $|i - j| = 2$ . Desta forma o termo com  $n = 1$  escala com  $d^0$ . Por outro lado, é possível provar que qualquer termo com  $n > 1$  se anula no limite de  $d$  grande [132]. Portanto, no limite  $d \rightarrow \infty$ , temos

$$S_{eff} = \sum_{i,j,\sigma} \int d\tau_i d\tau_j \eta_i^\dagger(\tau_i) \eta_j(\tau_j) G_{ij}^{(0)}(\tau_i, \tau_j) + S_0 + \text{const.} \\ = \sum_{i,j,\sigma} \int d\tau_i d\tau_j t_{i,0} t_{j,0} c_{0\sigma}^\dagger(\tau_i) c_{0\sigma}(\tau_j) G_{ij}^{(0)}(\tau_i, \tau_j) + S_0 + \text{const.} \quad (\text{B.9})$$

<sup>1</sup> A distância de Manhattan entre os vetores  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  e  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$  é definida como  $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| = |x_1 - y_1| + |x_2 - y_2| + \dots + |x_n - y_n|$ .

Utilizando a Eq. (B.6), temos

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau), \quad (\text{B.10})$$

em que a transformada de Fourier de  $\mathcal{G}_0^{-1}(\tau)$  é

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu - \sum_{ij} t_{0i} t_{0j} G_{ij}^{(0)}(i\omega). \quad (\text{B.11})$$

Note que a expressão (B.10) para a ação efetiva equivale à Eq. (6.3) no texto principal.

Na rede de Bethe, em particular, a função de Green  $G_{ij}^{(0)}(i\omega)$  na presença da cavidade se anula se  $i \neq j$ . Isso ocorre porque nessa rede um caminho que conecta os sítios  $i$  e  $j$ , que são primeiros vizinhos do sítio 0, deveria obrigatoriamente passar pelo sítio 0. A função de Green  $G_{ii}^{(0)}(i\omega)$  no sistema com cavidade é equivalente à função de Green  $G_{ii}(i\omega)$  no sistema sem cavidade no limite  $d \rightarrow \infty$ , pois adicionar um sítio primeiro vizinho tem uma influência desprezível na função de Green no limite em que o número de primeiros vizinhos  $d$  tende a infinito. Por fim, usamos que o nosso sistema é invariante por translação, de forma que a função de Green é a mesma em todos os sítios,  $G_{ii}(i\omega) = G(i\omega)$ . Assim,

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu - t^2 G(i\omega), \quad (\text{B.12})$$

onde usamos  $t_{0i} = t/\sqrt{d}$ . Conforme discutido na seção 6.1, no caso em que o sistema é não interagente ( $U = 0$ ) temos  $\mathcal{G}_0(i\omega) = G(i\omega)$ , e a Eq. (B.12) acima se torna

$$G^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu - t^2 G(i\omega). \quad (\text{B.13})$$

Na seção a seguir usamos o procedimento discutido na presente seção, chamado método da cavidade, para encontrar as equações de DMFT para o supercondutor magnético diluído.

## B.2 Equações de DMFT para o supercondutor magnético diluído

Nesta seção derivamos com o método da cavidade as equações de DMFT para o modelo utilizado na seção 7.1 a fim de descrever um supercondutor magnético diluído (DMS). O Hamiltoniano usado para descrever o DMS é

$$H = \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} t_{ij} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + \sum_i (\Delta_i c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \Delta_i^* c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger) - \sum_{i, \alpha} \mu_i (c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}) + J \sum_{l, \theta, \alpha, \beta} S_l^\theta c_{l\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^\theta c_{l\beta}. \quad (\text{B.14})$$

Em sítios não magnéticos temos pareamento supercondutor  $\Delta_i = \Delta_{nm} = \Delta$ , potencial químico  $\mu_i = \mu_{nm} = \mu$  e não há impurezas magnéticas ( $\mathbf{S}_i = 0$ ), enquanto em sítios magnéticos estes parâmetros podem assumir valores diferentes,  $\Delta_i = \Delta_m$ ,  $\mu_i = \mu_m = \mu + \delta_\mu$  e  $\mathbf{S}_i \neq 0$ . O somatório no índice  $l$  acima percorre os sítios magnéticos e os spins  $\mathbf{S}_i$  podem, a princípio, ter uma direção diferente para cada sítio magnético.  $J$  é um acoplamento magnético e  $\sigma_{\alpha\beta}^\theta$  são matrizes de Pauli ( $\theta = x, y, z$ ). A partir deste Hamiltoniano escrevemos a ação,

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{i,\alpha} c_{i\alpha}^\dagger(\tau) (\partial_\tau - \mu_i) c_{i\alpha}(\tau) + \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} t_{ij} c_{i\alpha}^\dagger(\tau) c_{j\alpha}(\tau) + \sum_i (\Delta_i c_{i\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) + \Delta_i^* c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau)) + J \sum_{l,\theta,\alpha,\beta} S_l^\theta c_{l\alpha}^\dagger(\tau) \sigma_{\alpha\beta}^\theta c_{l\beta}(\tau) \right]. \quad (\text{B.15})$$

A fim de continuar a derivação das equações de DMFT, vamos agora dividir o problema em dois casos diferentes, tratados nas duas subseções a seguir. O primeiro caso é a situação mais geral em que os spins das impurezas magnéticas podem estar em diferentes direções, i.e. a direção de  $\mathbf{S}_i$  varia com o sítio  $i$ . O segundo caso é a situação mais simples em que os spins clássicos de todas as impurezas magnéticas estão na mesma direção,  $\mathbf{S} = S\hat{z}$ .

### B.2.1 Spins clássicos em diferentes direções

Seja  $\psi_i(\tau) = (1/\sqrt{2})(c_{i,\uparrow}(\tau) \quad c_{i,\downarrow}(\tau) \quad c_{i,\uparrow}^\dagger(\tau) \quad c_{i,\downarrow}^\dagger(\tau))^T$  um *spinor* de Nambu generalizado. O fator  $1/\sqrt{2}$  nesta definição aparece porque consideramos um *spinor* generalizado que dobra o número de componentes do *spinor* de Nambu convencional [139]. Com este *spinor* a ação é reescrita e assume a forma

$$S = \int_0^\beta d\tau \sum_i \psi_i^\dagger(\tau) \left( \partial_\tau \mathbf{1} - \mu_i \mathcal{H}^t + J \mathcal{H}_i^M + \mathcal{H}_i^{\text{BCS}} \right) \psi_i(\tau) + \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} \psi_i^\dagger(\tau) \mathcal{H}^t \psi_j(\tau), \quad (\text{B.16})$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^t &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{H}_i^{\text{BCS}} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta_i^* \\ 0 & 0 & -\Delta_i^* & 0 \\ 0 & -\Delta_i & 0 & 0 \\ \Delta_i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{H}_i^M &= \begin{pmatrix} \mathbf{S}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\mathbf{S}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}^T \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Os elementos de  $\mathcal{H}_i^M$  acima são blocos  $2 \times 2$ , de forma que  $\mathcal{H}_i^M$  é uma matriz  $4 \times 4$ . O vetor de Pauli  $\boldsymbol{\sigma}$ , cujas componentes são as matrizes de Pauli, está sendo multiplicado

pelo vetor  $\mathbf{S}_i$ , que representa o spin clássico de uma impureza localizada no sítio  $i$  caso este sítio seja magnético. Se o sítio  $i$  for não magnético,  $\mathbf{S}_i = 0$ .

A fim de aplicar o método da cavidade, definimos

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \psi_0^\dagger(\tau) \left( \partial_\tau \mathbb{1} - \mu_0 \mathcal{H}^t + J\mathcal{H}_0^M + \mathcal{H}_0^{\text{BCS}} \right) \psi_0(\tau), \quad (\text{B.18})$$

$$\Delta S = \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle i0 \rangle} t_{i0} \psi_i^\dagger(\tau) \mathcal{H}^t \psi_0(\tau) + t_{0i} \psi_0^\dagger(\tau) \mathcal{H}^t \psi_i(\tau), \quad (\text{B.19})$$

$$S^{(0)} = S - S_0 - \Delta S. \quad (\text{B.20})$$

Em seguida, definimos  $\eta_i(\tau) = t_{i0} \mathcal{H}^t \psi_0(\tau)$  e chegamos a uma expressão semelhante à Eq. (B.8), obtida pelo método da cavidade aplicado ao modelo de Hubbard. Tomando novamente o limite  $d \rightarrow \infty$  e considerando a rede de Bethe com  $t_{i0} = t/\sqrt{d}$ , se chega em

$$S_{eff} = S_0 + \sum_{\langle i0 \rangle} \int_0^\beta d\tau d\tau' \eta_i^\dagger(\tau) \hat{G}_{ii}^{(0)}(\tau - \tau') \eta_i(\tau') \quad (\text{B.21})$$

$$= S_0 + t^2 \int_0^\beta d\tau d\tau' \psi_0^\dagger(\tau) \mathcal{H}^t \left( \frac{1}{d} \sum_{\langle i0 \rangle} \hat{G}_{ii}(\tau - \tau') \right) \mathcal{H}^t \psi_0(\tau'), \quad (\text{B.22})$$

em que  $\hat{G}_{ii}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \sqrt{2} \psi_i(\tau) \sqrt{2} \psi_i^\dagger(\tau') \rangle$  é uma função de Green matricial local no sítio  $i$ . Os fatores  $\sqrt{2}$  nesta definição de função de Green aparecem porque consideramos um *spinor* generalizado que dobra o número de componentes do *spinor* de Nambu convencional. A função  $\hat{G}_{ii}^{(0)}(\tau - \tau')$  é a função de Green local no sítio  $i$  no sistema com a cavidade, que equivale a  $\hat{G}_{ii}(\tau - \tau')$  quando  $d \rightarrow \infty$ . Agora consideramos que  $x$  é a probabilidade de cada sítio vizinho de 0 ser magnético e que as direções dos spins clássicos das impurezas magnéticas  $\mathbf{S}_i$  podem ter uma distribuição de probabilidade qualquer. Consideraremos ainda que todos os sítios vizinhos de 0 sem impureza magnética são idênticos, i.e. têm a mesma função de Green  $\hat{G}_{ii}(\tau) = \hat{G}_{nm}(\tau)$ , e que todos os sítios com spin clássico dado pelo vetor  $\mathbf{S}$  são idênticos,  $\hat{G}_{ii}(\tau) = \hat{G}_m(\tau, \mathbf{S})$ . Assim, o somatório em  $i$  dá

$$(1/d) \sum_{\langle i0 \rangle} \hat{G}_{ii}(\tau - \tau') = x \langle \hat{G}_m(\tau - \tau', \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} + (1-x) \hat{G}_{nm}(\tau - \tau'), \quad (\text{B.23})$$

onde  $\langle \dots \rangle_{\mathbf{S}}$  denota uma média sobre todas as direções possíveis para os spins clássicos pesados pela probabilidade de cada direção.

Finalmente, substituindo a Eq. (B.18) na Eq. (B.22) e considerando a transformada de Fourier do *spinor*  $\psi_0(\tau)$ , encontramos a ação efetiva para o sítio 0,

$$S_{eff} = -\frac{1}{\beta} \sum_n \psi_0^\dagger(i\omega_n) \hat{\mathcal{G}}_0^{-1}(i\omega_n) \psi_0(i\omega_n), \quad (\text{B.24})$$

em que

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}_0^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbb{1} + \mu_0 \mathcal{H}^t - J\mathcal{H}_0^M - \mathcal{H}_0^{\text{BCS}} \\ &\quad - t^2 \mathcal{H}^t \left[ x \langle \hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \mathcal{H}^t. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Como o sistema não possui interações quárticas, mas apenas interações quadráticas, a função de Green  $\hat{G}$  calculada através da ação efetiva [Eq. (B.24)] é simplesmente a função de Weiss  $\hat{G}_0$ . Considerando então que o sítio 0 pode ser magnético ou não magnético, chegamos às equações de DMFT para o sistema DMS,

$$\begin{aligned}\hat{G}_{nm}^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbf{1} + \mu \mathcal{H}^t - \mathcal{H}_{nm}^{\text{BCS}} - t^2 \mathcal{H}^t \left[ x \langle \hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \mathcal{H}^t, \\ \hat{G}_m^{-1}(i\omega_n, \mathbf{S}_0) &= i\omega_n \mathbf{1} + (\mu + \delta_\mu) \mathcal{H}^t - J \mathcal{H}^{\text{M}}(\mathbf{S}_0) - \mathcal{H}_m^{\text{BCS}} \\ &\quad - t^2 \mathcal{H}^t \left[ x \langle \hat{G}_m(i\omega_n, \mathbf{S}) \rangle_{\mathbf{S}} + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \mathcal{H}^t.\end{aligned}\quad (\text{B.26})$$

Estas equações correspondem às equações mostradas no texto principal, Eqs. (7.2).

### B.2.2 Spins clássicos alinhados na mesma direção

No caso particular em que os spins de todas impurezas clássicas estão na mesma direção,  $\mathbf{S} = S \hat{z}$ , as equações de DMFT se simplificam consideravelmente. Neste caso pode-se tomar o *spinor* de Nambu  $\phi_i(\tau) = (c_{i,\uparrow}(\tau) \quad c_{i,\downarrow}^\dagger(\tau))^T$  e definir a função de Green  $\hat{G}_{ii}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \phi_i(\tau) \phi_i^\dagger(\tau') \rangle$ . Seguindo os mesmos passos da subseção anterior, chega-se às equações de DMFT

$$\begin{aligned}\hat{G}_{nm}^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbf{1} + \mu \tau^z - \mathcal{H}_{nm}^{\text{BCS}} - t^2 \tau^z \left[ x \hat{G}_m(i\omega_n) + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \tau^z, \\ \hat{G}_m^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n \mathbf{1} + (\mu + \delta_\mu) \tau^z - \mathcal{H}_m^{\text{BCS}} - t^2 \tau^z \left[ x \hat{G}_m(i\omega_n) + (1-x) \hat{G}_{nm}(i\omega_n) \right] \tau^z \\ &\quad - JS \mathbf{1},\end{aligned}\quad (\text{B.27})$$

em que  $\tau^z$  é a matriz de Pauli e

$$\mathcal{H}_i^{\text{BCS}} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_i^* \\ \Delta_i & 0 \end{pmatrix}.\quad (\text{B.28})$$

Essas equações de DMFT correspondem às Eqs. (7.4), mostradas no texto principal. Note que agora as funções de Green são matrizes  $2 \times 2$  e a resolução numérica das equações de DMFT desta subseção é mais rápida do que a resolução das Eqs. (B.26), que envolvem matrizes  $4 \times 4$ .

# APÊNDICE C – Soluções da equação de DMFT para um supercondutor

Neste apêndice derivamos analiticamente soluções da equação de *dynamical mean-field theory* para um supercondutor convencional sem impurezas cujo pareamento se origina de uma interação de campo médio  $\Delta$ . Na seção C.1 mostramos resultados aproximados válidos para qualquer rede e densidade de estados. Tais resultados já são conhecidos e foram rederivados por nós para utilização no nosso artigo. Na seção C.2 mostramos expressões exatas que derivamos para a função de Green supercondutora na rede de Bethe.

## C.1 Densidade de estados arbitrária

As funções de Green normal  $G_s$  e anômala  $F_s$  em uma rede não interagente, sem impurezas, com um pareamento supercondutor  $\Delta$  podem ser calculadas utilizando a DMFT a partir das relações<sup>1</sup>

$$G_s(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon D(\epsilon) \frac{\zeta^* - \epsilon}{|\zeta - \epsilon|^2 + \Sigma_\Delta^2}, \quad (\text{C.1})$$

$$F_s(i\omega_n) = -\Sigma_\Delta(i\omega_n) \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon D(\epsilon) \frac{1}{|\zeta - \epsilon|^2 + \Sigma_\Delta^2}, \quad (\text{C.2})$$

onde  $D(\epsilon)$  é a densidade de estados no estado normal,  $\zeta = i\omega_n + \mu$  e consideramos  $\Sigma_\Delta \simeq \Delta \in \mathbb{R}$  [132].

Usando continuação analítica e tomando a parte imaginária de  $G_s$  e  $F_s$  se obtém, para  $|\omega| > |\Delta|$ ,

$$\begin{aligned} \text{Im}[G_s(\omega)] = & \frac{\text{sgn}(\omega)\pi}{2} \left\{ \frac{-\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \left[ D(\mu + \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}) + D(\mu - \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}) \right] \right. \\ & \left. - \left[ D(\mu + \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}) - D(\mu - \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

$$\text{Im}[F_s(\omega)] = -\frac{\pi}{2} \text{sgn}(\omega) \left[ D(\mu + \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}) + D(\mu - \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}) \right] \frac{\Delta}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}. \quad (\text{C.4})$$

Para  $|\omega| < |\Delta|$ ,  $\text{Im}[G_s(\omega)] = \text{Im}[F_s(\omega)] = 0$ .

<sup>1</sup> Essas expressões para funções de Green podem ser encontradas ao generalizar a abordagem de DMFT apresentada na seção 6.1, considerando funções de Green e autoenergia matriciais, cujos elementos fora de diagonais estão relacionados com o pareamento supercondutor  $\Delta$ . Detalhes podem ser encontrados nas páginas 32-33 da Ref. [132].

Usando as relações de Kramers-Kronig e tomando a expansão em série de Taylor de  $D(\mu \pm \sqrt{\omega^2 - \Delta^2})$  até a primeira ordem em torno de  $\mu$ , se encontra para  $|\omega| < |\Delta|$

$$\text{Re}[G_s(\omega)] \simeq -\pi D(\mu) \frac{\omega}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} - 2D'(\mu)W, \quad (\text{C.5})$$

$$\text{Re}[F_s(\omega)] \simeq -\pi D(\mu) \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}, \quad (\text{C.6})$$

onde  $D'(\mu) = dD(\epsilon)/d\epsilon|_{\epsilon=\mu}$  e  $W$  é um *cutoff* que corresponde à borda da banda energética.

Considerando as relações anteriores é possível calcular, dentro do gap,

$$\frac{G_s(\omega) + G_s^*(-\omega)}{F_s(\omega)} \simeq \frac{4D'(\mu)W}{\pi D(\mu)\Delta} \sqrt{\Delta^2 - \omega^2}, \quad (\text{C.7})$$

$$\frac{G_s(\omega) - G_s^*(-\omega)}{F_s(\omega)} \simeq \frac{2\omega}{\Delta}, \quad (\text{C.8})$$

$$\begin{aligned} \frac{\det[\hat{G}_s(\omega)]}{F_s(\omega)} &= -\frac{G_s(\omega)G_s^*(-\omega) + F_s(\omega)^2}{F_s(\omega)} \\ &\simeq \frac{\pi^2 D(\mu)^2 + [2D'(\mu)W]^2}{\pi D(\mu)\Delta} \sqrt{\Delta^2 - \omega^2} \\ &\simeq \frac{\pi D(\mu)}{\Delta} \sqrt{\Delta^2 - \omega^2}, \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

onde foi considerado que as bandas no estado normal são quase planas em baixas energias,  $D'(\mu)W/D(\mu) \ll 1$ . Substituindo os resultados acima na Eq. (7.29) chegamos na Eq. (7.30).

## C.2 Rede de Bethe

Aqui mostramos como derivamos uma solução exata para a Eq. de DMFT para a rede de Bethe supercondutora na ausência de impurezas. A equação de DMFT para este sistema pode ser obtida pela Eq. (B.27) com  $x \rightarrow 0$ ,

$$\hat{G}_s^{-1} = \hat{R} - t^2 \sigma^z \hat{G}_s \sigma^z, \quad (\text{C.10})$$

$$\hat{R} = i\omega \mathbb{1} + \mu \sigma^z - \Delta \sigma^x. \quad (\text{C.11})$$

Seja  $\hat{T}$  a matriz que diagonaliza  $\hat{R}$ ,  $\hat{R} = \hat{T} \hat{R}_D \hat{T}^{-1}$ , onde  $\hat{R}_D$  é diagonal. Também definimos  $\hat{G}_T = \hat{T}^{-1} \hat{G}_s \sigma^z \hat{T}$  e  $\sigma_T^z = \hat{T}^{-1} \sigma^z \hat{T}$ . Multiplicando cada termo da Eq. (C.10) pelo lado esquerdo por  $t^{-2} \hat{T}^{-1} \sigma^z$  e multiplicando pelo lado direito por  $\hat{G}_s \sigma^z \hat{T}$ , chegamos em

$$\hat{G}_T^2 - t^{-2} \sigma_T^z \hat{R}_D \hat{G}_T + t^{-2} \mathbb{1} = 0. \quad (\text{C.12})$$

Note que esta equação quadrática é tal que o coeficiente multiplicando  $\hat{G}_T^2$  (i.e.,  $\mathbb{1}$ ) e o termo constante ( $t^{-2} \mathbb{1}$ ) são matrizes diagonais. A solução para esta equação quadrática é

$$\hat{G}_T = \frac{1}{2t^2} \sigma_T^z \hat{R}_D \pm \frac{1}{2} \sqrt{t^{-4} \sigma_T^z \hat{R}_D \sigma_T^z \hat{R}_D - 4t^{-2} \mathbb{1}}. \quad (\text{C.13})$$

A fim de simplificar as relações anteriores definimos  $\hat{R}^z = \sigma^z \hat{R} = \hat{V} \hat{R}_D^z \hat{V}^{-1}$ , onde  $\hat{R}_D^z$  é diagonal e  $\hat{V}$  diagonaliza  $\hat{R}^z$ . Então temos

$$\sigma_T^z \hat{R}_D \sigma_T^z \hat{R}_D = \hat{T}^{-1} \hat{R}^z \hat{R}^z \hat{T} = (\hat{T}^{-1} \hat{V}) \hat{R}_D^z \hat{R}_D^z (\hat{V}^{-1} \hat{T}). \quad (\text{C.14})$$

Uma vez que  $(\hat{R}_D^z \hat{R}_D^z)$  é diagonal, vemos que  $(\hat{T}^{-1} \hat{V})$  diagonaliza  $\sigma_T^z \hat{R}_D \sigma_T^z \hat{R}_D$ . Então podemos reescrever a raiz quadrada na Eq. (C.13) como

$$\begin{aligned} \sqrt{t^{-4} \sigma_T^z \hat{R}_D \sigma_T^z \hat{R}_D - 4t^{-2} \mathbf{1}} &= \sqrt{(\hat{T}^{-1} \hat{V})(t^{-4} \hat{R}_D^z \hat{R}_D^z - 4t^{-2} \mathbf{1})(\hat{V}^{-1} \hat{T})} \\ &= \sqrt{[(\hat{T}^{-1} \hat{V})(t^{-4} \hat{R}_D^z \hat{R}_D^z - 4t^{-2} \mathbf{1})^{1/2} (\hat{V}^{-1} \hat{T})]^2} \\ &= (\hat{T}^{-1} \hat{V})(t^{-4} \hat{R}_D^z \hat{R}_D^z - 4t^{-2} \mathbf{1})^{1/2} (\hat{V}^{-1} \hat{T}). \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Então

$$\hat{G}_T = \frac{1}{2t^2} \sigma_T^z \hat{R}_D \pm \frac{1}{2} (\hat{T}^{-1} \hat{V})(t^{-4} \hat{R}_D^z \hat{R}_D^z - 4t^{-2} \mathbf{1})^{1/2} (\hat{V}^{-1} \hat{T}). \quad (\text{C.16})$$

Finalmente temos, usando  $\hat{G}_s = \hat{T} \hat{G}_T \hat{T}^{-1} \sigma^z$ ,

$$\hat{G}_s = \frac{1}{2t^2} \sigma^z \hat{R} \sigma^z \pm \frac{1}{2} \hat{V} (t^{-4} \hat{R}_D^z \hat{R}_D^z - 4t^{-2} \mathbf{1})^{1/2} \hat{V}^{-1} \sigma^z. \quad (\text{C.17})$$

Note que agora aparece a raiz quadrada de uma matriz diagonal, que é igual à raiz quadrada de suas componentes. Os elementos diagonais de  $\hat{R}_D^z$  são os autovalores de  $\hat{R}^z$ , que são  $r_\alpha = \mu + \alpha \sqrt{(i\omega)^2 - \Delta^2}$ ,  $\alpha = +, -$ . Substituindo os seus correspondentes autovetores normalizados  $\mathbf{v}_\alpha$  dentro de  $\hat{V}$ , podemos usar a Eq. (C.17) e encontrar uma expressão para  $\hat{G}_s$ .

Calculamos a Eq. (C.17) a fim de obter uma expressão para  $[G_s(\omega) + G_s^*(-\omega)]/F_s(\omega)$  dentro do gap. Como resultado obtivemos uma expressão analítica grande e complicada, mas que se ajusta perfeitamente em um semicírculo. Em  $\omega = 0$  pudemos encontrar a expressão aproximada  $[G_s(0) + G_s^*(-0)]/F_s(0) \simeq -\mu \operatorname{sgn}(\Delta)/t$ . Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{G_s(\omega) + G_s^*(-\omega)}{F_s(\omega)} &= \frac{G_s(0) + G_s^*(-0)}{F_s(0)} \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\Delta^2}} \simeq -\frac{\mu \operatorname{sgn}(\Delta)}{t} \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\Delta^2}} \\ &\simeq -\frac{\mu}{t\Delta} \sqrt{\Delta^2 - \omega^2}. \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Esta expressão é um pouco mais precisa do que a Eq. (C.7) aplicada à rede de Bethe. Nesta rede temos  $D(\epsilon) = \sqrt{4t^2 - \epsilon^2}/2\pi t^2$  e portanto a Eq. (C.7) fornece  $[G_s(\omega) + G_s^*(-\omega)]/F_s(\omega) \simeq -2\mu \sqrt{\Delta^2 - \omega^2}/\pi t \Delta$ , diferindo da Eq. (C.18) por um fator  $2/\pi$ . Embora a Eq. (C.18) seja mais precisa, a princípio ela só é válida na rede de Bethe. A Eq. (C.7), válida para redes arbitrárias, é uma aproximação razoavelmente boa para o tipo de investigação que fazemos na parte II desta tese. Esta expressão mais geral foi utilizada na seção 7.4.2 e, conforme se vê na Fig. 37, também leva a bons resultados.