

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-graduação em Física

Moallison Ferreira Cavalcante

**DINÂMICA EM TEMPO REAL DO EFEITO KONDO E RESPOSTA
RAMAN ELETRÔNICA DA FASE COM ORDENAMENTO DE CARGA
DOS CUPRATOS SUPERCONDUTORES**

Belo Horizonte
2023

Moallison Ferreira Cavalcante

**DINÂMICA EM TEMPO REAL DO EFEITO KONDO E RESPOSTA
RAMAN ELETRÔNICA DA FASE COM ORDENAMENTO DE
CARGA DOS CUPRATOS SUPERCONDUTORES**

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.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Belo Horizonte

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

C377d Cavalcante, Moallison Ferreira.

Dinâmica em tempo real do efeito Kondo e resposta Raman eletrônica da fase com ordenamento de carga dos cupratos supercondutores / Moallison Ferreira Cavalcante. – 2023.

197 f. : il.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.

Bibliografia: f. 129-154.

1. Efeito Kondo. 2. Espectroscopia de Raman. 3. Cupratos supercondutores. 4. Elétrons. I. Título. II. Aguiar, Maria Carolina de Oliveira. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 539.124 (043)



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

ATA DE DEFESA DE TESE

ATA DA SESSÃO DE ARGUIÇÃO DA 418ª TESE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA, DEFENDIDA POR MOÁLLISON FERREIRA CAVALCANTE orientado pela professora Maria Carolina de Oliveira Aguiar, para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS, área de concentração física**. Às 08:30 horas de dezenove de julho de dois mil e vinte e três, reuniu-se a Comissão Examinadora, composta pelos professores **Maria Carolina de Oliveira Aguiar** (Orientadora - Departamento de Física/UFMG), **Antônio Sérgio Teixeira Pires** (Departamento de Física/UFMG), **Mariana Malard Sales Andrade** (Faculdade UnB Planaltina e Centro Internacional de Física/UnB), **Edson Vernek** (Instituto de Física/UFU) e **Eduardo Granado Monteiro da Silva** (Instituto de Física Gleb Wataghin/UNICAMP) para dar cumprimento ao Artigo 37 do Regimento Geral da UFMG, submetendo o Mestre **MOÁLLISON FERREIRA CAVALCANTE** à arguição de seu trabalho de Tese de Doutorado, que recebeu o título de "**Dinâmica em tempo real do efeito Kondo e resposta Raman eletrônica da fase com ordenamento de carga dos cupratos supercondutores**". O candidato fez uma exposição oral de seu trabalho durante aproximadamente 50 minutos. Após esta, os membros da comissão prosseguiram com a sua arguição, e apresentaram seus pareceres individuais sobre o trabalho, concluindo pela aprovação do candidato.

Belo Horizonte, 19 de julho de 2023.

Profa. Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Prof. Edson Vernek

Orientadora do estudante

Instituto de Física/UFU

Departamento de Física/UFMG

Prof. Antônio Sérgio Teixeira Pires

Prof. Eduardo Granado Monteiro da Silva

Departamento de Física/UFMG

Instituto de Física Gleb Wataghin/UNICAMP

Profa. Mariana Malard Sales Andrade

Faculdade UnB Planaltina e Centro Internacional de Física/UnB

Candidato: Moállison Ferreira Cavalcante



Documento assinado eletronicamente por **Eduardo Granado Monteiro da Silva, Usuário Externo**, em 09/08/2023, às 12:28, 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 **Mariana Malard Sales Andrade, Usuário Externo**, em 09/08/2023, às 13:57, 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 **Edson Vernek, Usuário Externo**, em 09/08/2023, às 14:21, 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 **Moállison Ferreira Cavalcante, Usuário Externo**, em 09/08/2023, às 14:45, 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 17/08/2023, às 11:03, 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 **Antonio Sergio Teixeira Pires, Professor do Magistério Superior**, em 17/08/2023, às 16:47, 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/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **2533145** e o código CRC **874AAD6E**.

*À minha mãe, Janaina, por ter sido forte e saído
vencedora da maior batalha que já lhe foi imposta.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família pelo irrestrito suporte. À minha mãe por todo o amor, ao meu pai por me ensinar o valor do trabalho e às minhas irmãs pelo carinho e cuidado. Esta tese é igualmente dedicada a Livia e a João.

Agradeço à Carol por ter me orientado durante esses quatro anos. Esteve sempre presente e disposta a me ajudar. Me deu grandes oportunidades, as quais eu sou muito grato. Além da Carol, também devo muito ao Rodrigo e ao Marcello. Os dois tiveram participação direta nesta tese e na minha formação como pessoa/físico.

Agradeço ao Plascak e a Mariceu por terem me recebido tão bem aqui em Belo Horizonte. Vocês são pessoas maravilhosas, não esquecerei dos almoços juntos e dos bons papos na sala.

Às excelentes amizades que fiz nesse período de doutorado, tanto no Brasil quanto na França, que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho. Em especial ao pessoal do laboratório de física de muitos corpos e aos colegas experimentais.

Ao apoio financeiro dado pelo(a) contribuinte brasileiro(a) em forma de bolsas de estudo repassadas pela CAPES (88887.373140/2019-00) e pelo CAPES-Cofecub (88887.637757/2021-00).

*(...) Mas o negócio não é bem eu, é Mané, Pedro e Romão,
Que também “foi” meus colegas, e “continua” no sertão
Não puderam estudar, e nem “sabe” fazer baião.
(Minha história, João do Vale)*

RESUMO

Nesta tese investigamos a física de dois sistemas de elétrons fortemente correlacionados. Na parte I deste documento nos dedicamos ao estudo da dinâmica em tempo real do efeito Kondo produzida por um protocolo de *quench*. Para isso, consideramos uma ou duas cadeias metálicas de elétrons interagentes (cadeias de Hubbard) acopladas a uma impureza magnética de spin $1/2$. O protocolo de *quench* consiste em assumir que, para tempos $\tau < 0$, as cadeias estão desacopladas da impureza, em $\tau = 0$ o acoplamento é subitamente ligado e, para $\tau > 0$, o sistema é deixado evoluir unitariamente no tempo. Determinamos uma expressão analítica para a relaxação da magnetização da impureza no regime de tempos $\tau \ll \tau_K$, onde τ_K é o tempo Kondo. Este resultado foi confirmado por meio de cálculos numéricos feitos no nosso grupo. Com base nesses resultados numéricos vimos também que o aumento da interação U entre os elétrons das cadeias leva a um decaimento mais rápido da magnetização, mostrando que a interação elétron-elétron favorece a formação do efeito Kondo. Estudando o transporte dependente do tempo através da impureza, determinamos uma expressão analítica para a escala de tempo equivalente ao tempo Kondo no caso interagente e, por esta expressão, concluímos que tal escala é reduzida quando U aumenta, em concordância com os resultados numéricos mencionados acima.

Na parte II desta tese investigamos a física dos cupratos supercondutores, motivados por resultados experimentais de espectroscopia Raman eletrônica relacionados à fase com ordenamento de carga (CDW) desses materiais. Por meio de uma abordagem fenomenológica, descrevemos uma ordem de carga no plano de CuO_2 . Analisando as propriedades espectrais do sistema, estabelecemos que a fase CDW deve ser mais facilmente detectável na região $\omega > 0$ (acima do nível de Fermi) da densidade de estados local. Nossos resultados para a resposta Raman B_{2g} mostram um comportamento geral *dip-hump*, como de fato é visto nos experimentos, que *independe* da estrutura de bandas considerada. Em oposição, a resposta Raman B_{1g} se mostra fortemente dependente da estrutura de bandas. Na segunda parte do trabalho, foi proposto um modelo mais geral, baseado no *ansatz* de Yang-Rice-Zhang, que leva em consideração também a fase *pseudogap* (PG). Vimos que a fase PG guia a dependência com a dopagem da escala de energia da fase CDW, em concordância com os experimentos. Este resultado é sugestivo de uma fase PG governando as diferentes escalas de energias de fases exóticas que aparecem na região *underdoped* do diagrama de fases dos cupratos.

Palavras-chave: Dinâmica do efeito Kondo, Líquido de Luttinger, Bosonização, Cupratos supercondutores, Fase com ordenamento de carga, Resposta Raman eletrônica.

ABSTRACT

In this thesis we investigate the physics of two strongly correlated electron systems. The part I of this document is dedicated to the study of the real-time dynamics of the Kondo effect produced by a quench protocol. For it, we consider one or two metallic chains of interacting electrons (Hubbard chains) coupled to a magnetic impurity of spin $1/2$. The quench protocol consists of assuming that, for times $\tau < 0$, the chains are decoupled from the impurity, at $\tau = 0$ the coupling is suddenly turned on and, for $\tau > 0$, the system evolves unitarily in time. We determine an analytical expression for the relaxation of the impurity magnetization in the time regime $\tau \ll \tau_K$, where τ_K is the Kondo time. This result was confirmed by numerical calculations performed in our group. Based on these numerical results, we observe that the increase in the interaction U between the electrons in the chains leads to a faster decay of the impurity magnetization, showing that the electron-electron interaction favors the formation of the Kondo effect. Further we studied the time-dependent transport through the impurity, from which we determine, in the interacting case, an analytical expression for the time scale equivalent to the Kondo time. According to the expression we obtained, we conclude that the Kondo scale is reduced when U increases, in agreement with the numerical results mentioned above.

In part II of this thesis we investigate the physics of superconducting cuprates, motivated by electronic Raman spectroscopy measurements of the charge density wave (CDW) phase observed in these materials. Through a phenomenological approach, we describe a charge order in the CuO_2 plane. Analyzing the spectral properties of the system, we establish that the CDW phase should be more easily detectable in the $\omega > 0$ (above the Fermi level) region of the local density of states. Our results for the B_{2g} Raman response show a general dip-hump behavior, as actually seen in the experiments, which is independent of the system band structure. In contrast, the B_{1g} Raman response is strongly band structure dependent. In the second part of the work, a more general model was proposed, based on the Yang-Rice-Zhang ansatz, which also takes into account the pseudogap (PG) phase. We conclude that the PG phase drives the doping dependence of the CDW energy scale, in agreement with the experiments. This result is suggestive of a PG phase governing the different energy scales of the exotic phases that appear in the underdoped region of the cuprate phase diagram.

Keywords: Dynamics of the Kondo effect, Luttinger liquids, Bosonization, Cuprates superconductors, Charge density wave phase, Electronic Raman response.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Diagrama de Kmetko-Smith	19
Figura 2 – Assinatura do efeito Kondo na resistividade de metais	25
Figura 3 – Ressonância Kondo no nível de Fermi	27
Figura 4 – Efeito Kondo em pontos quânticos	29
Figura 5 – Impureza magnética acoplada antiferromagneticamente à extremidade de um fio metálico	30
Figura 6 – Propriedades locais da impureza em função da interação elétron-elétron U na cadeia de Hubbard	35
Figura 7 – Decaimento da corrente como uma lei de potência depois de <i>quench</i> na interação em um líquido de Luttinger	36
Figura 8 – Realização experimental da interação entre momentos magnéticos localizados e estados delocalizados em uma rede óptica	38
Figura 9 – Densidade de estados da impureza para diferentes tempos depois do <i>quench</i>	39
Figura 10 – Dispersão de energia para o gás de elétrons unidimensional	41
Figura 11 – Renormalização do parâmetro λ descrito pela Eq. (3.38).	49
Figura 12 – Geometria <i>embedding</i>	54
Figura 13 – Decaimento da magnetização da impureza quando esta é acoplada a uma única cadeia	63
Figura 14 – Decaimento da magnetização da impureza quando esta é acoplada a duas cadeias de elétrons interagentes	64
Figura 15 – Geometria <i>side coupling</i>	65
Figura 16 – Sistema físico usado para estudar o transporte dependente do tempo através da impureza magnética	69
Figura 17 – Representação esquemática de um processo que gera o correlator da Eq. (5.38)	76
Figura 18 – Comportamento esquemático da corrente de carga cruzando a impureza para diferentes valores da interação elétron-elétron	83
Figura 19 – Mecanismo dinâmico de spin do hamiltoniano Kondo responsável por gerar uma corrente de spin que flui para o fio	85
Figura 20 – Relaxação do spin da impureza	87
Figura 21 – Impureza magnética acoplada (na geometria <i>side coupling</i>) à origem de um líquido de Luttinger e à borda de um supercondutor topológico que suporta um modo zero de Majorana	88
Figura 22 – Detalhes da estrutura cristalina e dos orbitais atômicos dos cupratos	92
Figura 23 – Esquema geral do diagrama de fases dos cupratos	93

Figura 24 – Resultado experimental da evolução do peso espectral, em função da dopagem, no nível de Fermi da fase <i>pseudogap</i>	95
Figura 25 – Dicotomia entre as regiões nodal e anti-nodal da fase PG	96
Figura 26 – Mapa de condutância revelando uma ordem de carga de 4 células unitárias de periodicidade	97
Figura 27 – Medidas experimentais usando a técnica de espalhamento ressonante de raios X (RXS) ao longo das direções nodal e antinodal do espaço $\mathbf{k}$.	97
Figura 28 – Espectro de espalhamento Raman para o material $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$	98
Figura 29 – Detalhes do espalhamento Raman eletrônico	99
Figura 30 – Resultados experimentais da resposta Raman eletrônica	100
Figura 31 – Superfície de Fermi e dispersão ao longo do caminho $k_\perp$	108
Figura 32 – Densidade de estados local para as fases com e sem ordem de carga . .	109
Figura 33 – Representação esquemática do espalhamento Raman eletrônico	110
Figura 34 – Vértices B_{1g} e B_{2g}	111
Figura 35 – Resultados experimentais e teóricos para a resposta Raman relativa B_{2g}	112
Figura 36 – Comportamento geral esquemático da resposta Raman B_{2g}	113
Figura 37 – Condutividade óptica das fases com e sem ordem de carga	115
Figura 38 – Representação esquemática do modelo (7.37) no espaço real	118
Figura 39 – Propriedades espectrais na região de coexistência das fases CDW e PG segundo (7.45)	120
Figura 40 – Respostas Raman na região de coexistência CDW-PG	121
Figura 41 – Resultados experimentais e teóricos para as escalas de energia das fases CDW e PG em função da dopagem	122
Figura 42 – Impureza magnética acoplada antiferromagneticamente à extremidade de um fio metálico	158
Figura 43 – Diagramas que aparecem na expansão da função de Green $G_{ab}(\tau, \tau')$. .	173
Figura 44 – Figura esquemática de um recorte da rede quadrada	184
Figura 45 – Dispersão, densidade de estados local e superfície de Fermi para elétrons livres na rede quadrada	185
Figura 46 – Decomposição diagramática de <i>ladder</i> para a resposta Raman	194

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	–	Valores dos parâmetros não-universais obtidos fitando as curvas numéricas	64
Tabela 2	–	Operadores que perturbam o ponto fixo de acoplamento forte $\lambda_K = \infty$ com suas respectivas dimensões de escala.	82
Tabela 3	–	Três conjuntos de parâmetros para a estrutura de bandas	105

LISTA DE ABREVIATURAS

ARPES	Espectroscopia de fotoemissão resolvida em ângulo (do inglês <i>Angle resolved photoemission spectroscopy</i>)
BCS	(Teoria) Bardeen-Cooper-Schrieffer
BZ	(Primeira) Zona de Brillouin (do inglês <i>Brillouin zone</i>)
CDW	Onda de densidade de carga (do inglês <i>charge density wave</i>)
DOS	Densidade de estados local (do inglês <i>Local density of states</i>)
DMRG	Grupo de renormalização da matriz densidade (do inglês <i>Density matrix renormalization group</i>)
FL	Líquido de Fermi (do inglês <i>Fermi liquid</i>)
FP	Ponto fixo (do inglês <i>Fixed point</i>)
FS	Superfície de Fermi (do inglês <i>Fermi surface</i>)
KS	(Diagrama) Kmetko-Smith
LL	Líquido de Luttinger
PDW	Onda de densidade de pares de Cooper (do inglês <i>Pair density wave</i>)
PH	(Simetria) Partícula-buraco (do inglês <i>Particle-hole</i>)

PG	(Fase) <i>Pseudo-gap</i>
QD	Ponto quântico (do inglês <i>Quantum dot</i>)
rBZ	Zona de Brillouin reduzida (do inglês <i>Reduced Brillouin zone</i>)
RG	Grupo de renormalização (do inglês <i>Renormalization group</i>)
SC	(Fase) Supercondutora
STM	Microscopia de tunelamento por varredura (do inglês <i>Scanning tunneling microscopy</i>)
YRZ	(<i>Ansatz</i>) Yang-Rice-Zhang

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
	Parte I: Dinâmica em tempo real do efeito Kondo	23
2	EFEITO KONDO E DINÂMICA <i>QUENCH</i>	24
2.1	Efeito Kondo	24
2.1.1	Modelo de Anderson	26
2.1.2	Realização do efeito Kondo em pontos quânticos	28
2.1.3	Efeito Kondo em 1D	31
2.2	Dinâmica <i>quench</i>	36
3	METODOLOGIA	40
3.1	Elétrons livres em uma dimensão	40
3.1.1	Bosonização	42
3.2	Elétrons interagentes: líquido de Luttinger	44
3.3	Acoplamento com impureza	47
3.3.1	Impureza não-magnética	47
3.3.1.1	Um pouco de grupo de renormalização (RG)	48
3.3.2	Impureza magnética: efeito Kondo em um LL	51
4	RESULTADOS: DINÂMICA DA RELAXAÇÃO DE UM SPIN ACOPLADO A FIOS METÁLICOS INTERAGENTES	53
4.1	Impureza acoplada a duas cadeias (geometria <i>embedding</i>)	53
4.1.1	Relaxação do spin da impureza	58
4.1.2	Comparação com resultados de tDMRG	62
4.2	Impureza acoplada a um único sítio (geometria <i>side coupling</i>)	65
4.3	Conclusões deste trabalho	66
5	RESULTADOS: TRANSPORTE ATRAVÉS DE UMA IMPUREZA MAGNÉTICA	68
5.1	Transporte dependente do tempo	68
5.2	Transporte de carga	70
5.2.1	Elétrons livres	71
5.2.2	Elétrons interagentes	74
5.2.3	Entendendo os resultados com base no RG	78
5.2.4	j_c em tempos $\tau \gg \tau_K$	80
5.3	Razão Universal	83

5.4	Projeto em andamento: assinaturas na dinâmica <i>quench</i> de modos zero de Majorana	88
5.5	Conclusões deste trabalho	88
Parte II: Respostas dinâmicas da fase CDW dos cupratos supercondutores . .		90
6	CUPRATOS SUPERCONDUTORES	91
6.1	Introdução aos cupratos	91
6.2	Diagrama de fases	93
6.3	Alguns resultados experimentais	95
6.4	Modelo de uma banda para cupratos	100
7	RESULTADOS: RESPOSTAS DINÂMICAS DA FASE CDW DOS CUPRATOS SUPERCONDUTORES	102
7.1	Ordem de carga (CDW)	102
7.1.1	Propriedades espectrais da fase CDW	107
7.1.2	Respostas Raman da fase CDW	110
7.1.3	Condutividade óptica da fase CDW	114
7.2	Coexistência das fases CDW e PG	115
7.2.1	<i>Ansatz</i> de Yang-Rice-Zhang (YRZ)	116
7.2.2	Modelando CDW e PG	117
7.2.3	Propriedades espectrais na região de coexistência	119
7.2.4	Respostas Raman na região de coexistência	121
7.2.5	Escala de energia das fases CDW e PG	122
7.3	Conclusões deste trabalho	123
8	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	125
REFERÊNCIAS		129
APÊNDICE A – CORRELATOR BOSÔNICO		155
APÊNDICE B – EQUAÇÃO DE ESCALA DO HAMILTONIANO KONDO E MAPA EM 1D.		157
B.1	Mapeamento em 1D	157
B.2	Equação de escala de λ_K	158
APÊNDICE C – DETALHES DO CÁLCULO DA MAGNETIZAÇÃO DA IMPUREZA		163
C.1	<i>Embedding</i>	163
C.2	<i>Side coupling</i>	164

	APÊNDICE D – DETALHES DO CÁLCULO DA CORRENTE . . .	166
D.1	Transformação	166
D.2	$\tau \ll \tau_K$	167
D.2.1	$U = 0$	167
D.2.2	$U > 0$	170
D.2.3	Cálculo da função de correlação Bruxa	171
D.3	$\tau \gg \tau_K$	173
D.3.1	$U = 0$	173
D.3.2	$U > 0$	175
	APÊNDICE E – RESULTADOS: ASSINATURAS DE MODOS ZERO	
	DE MAJORANA NA DINÂMICA <i>QUENCH</i> . . .	177
E.1	Modelo de baixas energias	177
E.2	Magnetização da impureza	178
E.3	Equações do RG	178
	APÊNDICE F – METODOLOGIA DA PARTE II	180
F.1	Modelando elétrons livres	180
F.2	Função de Green	181
F.3	Modelo interagente	186
F.4	Função de Green-Matsubara	187
F.5	Integrais de caminho	188
F.6	Modelo de duas bandas	190
	APÊNDICE G – DERIVAÇÃO DA RESPOSTA RAMAN ELETRÔNICA	193
G.1	Soma de Matsubara	194
G.2	Resolvendo (alternativamente) o modelo (7.37)	196

1 Introdução

A presente tese está inserida na área de Sistemas Quânticos de Muitos Corpos Fortemente Correlacionados. Em termos gerais, nessa área nos preocupamos em estudar sistemas que apresentam uma forte correlação entre seus constituintes, de forma que qualquer descrição em termos de partículas independentes é insuficiente para tratar esses sistemas. Uma característica marcante de tais sistema é a presença dos chamados fenômenos emergentes.

Fenômenos emergentes

Partindo de uma visão microscópica simplificada, um sólido pode ser modelado levando-se em consideração o caráter itinerante (cinético) dos íons e elétrons e a interação coulombiana entre estes [1]. Assim, com base nessa visão *reducionista*, para entendermos as propriedades físicas de um sólido seria suficiente resolvermos a equação de Schrödinger [2] com o seguinte hamiltoniano geral:

$$H = H_{\text{el}}^{\text{kin}} + H_{\text{ion}}^{\text{kin}} + H_{\text{el-ion}}^{\text{int}} + H_{\text{el-el}}^{\text{int}} + H_{\text{ion-ion}}^{\text{int}}, \quad (1.1)$$

sendo $H_{\text{el}}^{\text{kin}}$ ($H_{\text{ion}}^{\text{kin}}$) o termo cinético dos elétrons (íons) e os outros termos, $H_{\text{el-ion}}^{\text{int}}$, $H_{\text{el-el}}^{\text{int}}$ e $H_{\text{ion-ion}}^{\text{int}}$, os que descrevem a interação coulombiana elétron-íon, elétron-elétron e íon-íon, respectivamente. À parte da (grande) questão técnica de como solucionar a equação de Schrödinger com o hamiltoniano acima, que a princípio nos forneceria toda informação necessária para descrever o sólido, o problema se mostra ainda mais dramático ou fundamental. Isso porque obter a função de onda $\Psi(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{R}_\alpha\})^1$ não necessariamente nos fornecerá toda informação relevante para entender as propriedades do sistema [3]. Como colocado por P. W. Anderson no seu célebre artigo *More is Different* [4]:

*The ability to reduce everything to simple fundamental
laws does not imply the ability to start from those laws
and reconstruct the universe.*

O ponto crucial é que à medida que a complexidade do sistema cresce, como quando construímos o hamiltoniano (1.1) adicionando átomo a átomo com intuito de descrever um sólido, novos fenômenos *emergem*, os quais não podem ser entendidos à luz das leis fundamentais, sendo necessário formular novas descrições para a nova escala.

¹ Sendo $\mathbf{r}_i$ ($\mathbf{R}_\alpha$) o vetor que localiza um elétron (íon).

Um dos mais intrigantes exemplos de fenômenos emergentes é a separação spin-carga que ocorre em um sistema de elétrons interagentes em uma dimensão [5]. Nesses sistemas o elétron sofre um “decaimento” em duas quasi-partículas (partículas que só existem devido ao meio) independentes e que se propagam com velocidades distintas, uma carregando o grau de liberdade de carga e outra que carrega informação sobre o spin eletrônico. Em termos de uma descrição de partícula única, a explicação desse fenômeno não seria possível, uma vez que esse desacoplamento dos graus de liberdade carga e spin só é possível devido à interação entre os muitos elétrons [5]. No trabalho [6] os autores conseguiram demonstrar esse fenômeno no contexto de redes ópticas², revelando que a razão dos módulos das velocidades de carga e spin é $v_c/v_s = 5.3 \pm 0.4$.

Materiais complexos

Materiais em que os elétrons são fortemente correlacionados exibem um grande número de fenômenos físicos interessantes, indo da supercondutividade de alta temperatura crítica ao comportamento de férmions pesados [8]. Em geral, uma rota para identificar esses materiais complexos é procurar por materiais que são compostos por elementos de transição, actínídeos e terras raras, em que os orbitais atômicos mais localizados (orbitais d ou f) estão semipreenchidos. O fato dos elétrons estarem mais próximos dos núcleos atômicos leva à formação de momentos magnéticos locais e a uma maior relevância da repulsão coulombiana entre os elétrons. A Fig. 1 mostra o diagrama de Kmetko-Smith (KS) para os elementos de transição arranjados de acordo com o grau de localização dos elétrons de valência, dos menos localizados (em azul) aos mais localizados (em vermelho).

A competição entre diferentes mecanismos nesses sistemas é responsável por produzir novas fases quânticas da matéria. Por exemplo, os elementos que estão ao longo da diagonal principal do diagrama de KS apresentam uma competição entre o mecanismo de localização, proveniente da interação coulombiana elétron-elétron, e delocalização, proveniente do caráter itinerante (energia cinética) dos elétrons no material. Em determinadas situações a interação eletrônica torna-se tão intensa que chega a suprimir completamente a mobilidade eletrônica no sistema, levando a uma transição metal-isolante de Mott [10]. Este é exatamente o caso do material V_2O_3 [11], em que a diminuição da pressão sobre o sistema leva a um aumento da interação eletrônica nos orbitais $3d$ do vanádio.

A fase isolante de Mott também aparece no contexto dos óxidos de cobre (cupratos) [12]. Esses compostos são constituídos, em primeira aproximação, por planos de CuO_2 fracamente acoplados, o que leva a uma física efetivamente bidimensional [13]. Ao

² Redes ópticas desempenham um grande papel na investigação de fenômenos quânticos de muitos corpos [7]. Com o uso de lasers contra-propagantes é possível criar e controlar potenciais periódicos efetivos nos quais átomos frios podem ser aprisionados, simulando assim a física de um sólido. O alto controle de parâmetros como mobilidade e interação eletrônica, geometria e dimensionalidade, fazem desses sistemas um palco ideal para testar várias propostas teóricas.

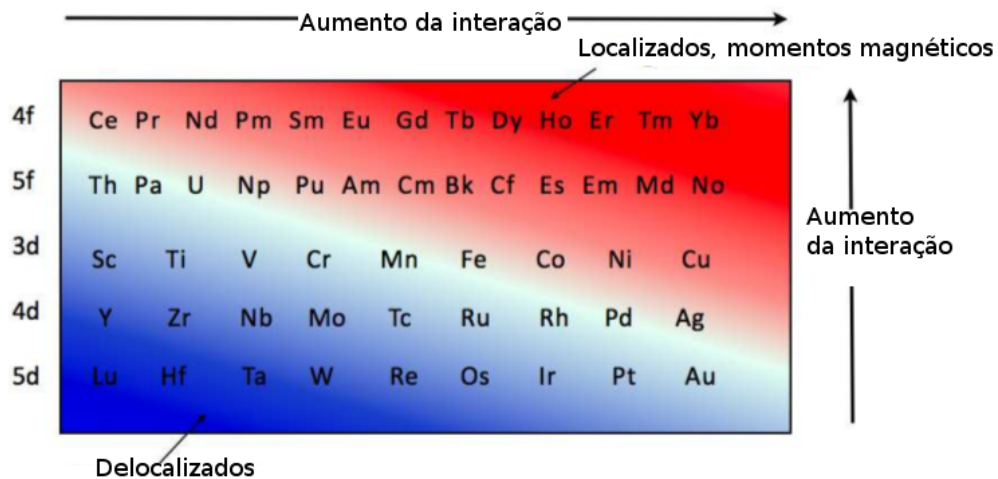


Figura 1 – Diagrama de Kmetko-Smith. Os elementos de transição estão arranjados dos menos localizados (em azul) para os mais localizados (em vermelho). Figura adaptada de [9].

dopar a fase isolante, por exemplo modificando a concentração de oxigênio no composto $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, logo observa-se que esta fase cede lugar a diversas fases metálicas, com comportamentos que não são descritos pela teoria de bandas padrão [1], e a uma fase supercondutora de alta temperatura crítica, que também não segue uma descrição em termos da teoria dos supercondutores convencionais formulada por Bardeen, Cooper e Schrieffer (teoria BCS) [14]. Tendo completado 37 anos da primeira observação, feita por J. G. Bednorz e K. A. Müller [15], da existência de uma fase supercondutora não-convencional nos cupratos, até os dias atuais não há uma explicação microscópica para esse fenômeno, isto é, para o mecanismo responsável por esta fase.

A fase supercondutora não é a única fase que não é bem entendida no diagrama de fases dos cupratos [12]. Algumas das fases metálicas mencionadas acima ainda continuam sendo alvo de intenso debate. Este é o caso da fase com ordenamento de carga (CDW) [16]. Nesta fase, os elétrons do plano de CuO_2 se rearranjam em uma distribuição periódica de carga, resultando em uma quebra da simetria translacional da distribuição eletrônica na rede. A recente detecção experimental de assinaturas desta fase dentro da espectroscopia Raman eletrônica [17] apontou fortes indícios de sua relação com a fase supercondutora e com outra fase metálica, a fase *pseudogap*. Um entendimento da relação entre essas três fases poderia fornecer pista para o mecanismo da supercondutividade de alta temperatura crítica nos cupratos.

O acoplamento entre os diferentes graus de liberdade também pode resultar em estados fundamentais com novas propriedades físicas. Materiais metálicos que apresentam em sua composição elementos químicos com orbitais *f* semipreenchidos, que se encontram no canto superior direito do diagrama de KS, tendem a formar momentos magnéticos

locais, os quais se acoplam com o spin dos elétrons de condução. Quando há uma rede desses momentos magnéticos, esse acoplamento leva ao comportamento de férmion pesado, visto, por exemplo, no material CeAl_3 [9], onde o elétron adquire uma massa efetiva muito maior que sua massa no vácuo. Por outro lado, quando a concentração desses momentos magnéticos é baixa, o acoplamento resulta no chamado efeito Kondo [18]. Como resultado deste efeito, observa-se um maior espalhamento dos elétrons de condução pelos momentos magnéticos em baixas temperaturas, levando a um aumento da resistividade do material. Esse crescimento da resistividade em baixas temperaturas é explicado pela formação de um estado singleto de muitos corpos entre esses momentos magnéticos locais e o spin resultante vindo dos elétrons de condução [18].

O efeito Kondo é visto experimentalmente desde 1934 [19] e entendido desde 1964 devido ao célebre trabalho de J. Kondo [20]. Apesar dos quases 50 anos passados desde a proposição por Kondo do mecanismo de interação entre os spins, pouco se sabe sobre o papel da interação elétron-elétron, entre os elétrons de condução, sobre o efeito. Em sistemas metálicos tridimensionais é razoável desprezar esta interação dada a teoria de líquido de Fermi de Landau³. Porém, quando se analisa sistemas metálicos em baixa dimensão, essencialmente unidimensionais, onde essa teoria não se aplica, dando lugar à teoria de líquido de Luttinger [5], é esperado que o problema ganhe novos contornos.

Por fim, vale ressaltar que além do interesse puramente científico de entender a física de sistemas complexos, há também um interesse na produção de novas tecnologias baseadas em fenômenos que ocorrem nesses sistemas, como a supercondutividade de alta temperatura crítica nos cupratos. A revolução tecnológica criada pela invenção do transistor só foi possível graças a um profundo entendimento de como os elétrons se comportam em semicondutores; logo, o caminho para se chegar a novas tecnologias passa por uma exaustiva pesquisa a nível de ciência básica.

Visão geral da tese

A presente tese está estruturada em duas partes, a primeira dedicada ao estudo da dinâmica em tempo real⁴ do efeito Kondo em sistemas de elétrons interagentes e a segunda às respostas Raman da fase com ordenamento de carga dos cupratos supercondutores. Abaixo descrevemos em mais detalhes como cada uma dessas duas partes está estruturada.

Parte I: Dinâmica em tempo real do efeito Kondo

Como discutido logo acima, a questão do papel desempenhado pela interação

³ Nesta teoria as excitações de baixas energias do sistema de elétrons interagentes são quasi-partículas não interagentes com parâmetros renormalizados devido à interação [9].

⁴ A expressão “tempo real” é usada muitas vezes durante a parte I. Por tempo real queremos dizer o tempo físico que medimos com nossos relógios, em oposição ao conceito de tempo imaginário usado para definir uma teoria perturbativa em temperatura diferente de zero.

elétron-elétron sobre o efeito Kondo ainda carece de investigação. Na primeira parte desta tese nós abordaremos esse problema no contexto da dinâmica em tempo real do efeito Kondo produzida por um protocolo de *quench* [21, 22].

O capítulo 2 é dedicado a uma breve revisão da literatura sobre o efeito Kondo relacionada ao nosso trabalho. Depois de uma longa discussão sobre o efeito Kondo em metais tridimensionais e em sistemas de baixa de dimensão, serão discutidos alguns trabalhos da literatura que motivaram os trabalhos desta primeira parte da tese. No capítulo 3 será desenvolvida a metodologia que usaremos para tratar o problema, a saber, o método de Bosonização [5, 23]. Neste capítulo também discutiremos alguns aspectos do efeito Kondo em um líquido de Luttinger. No capítulo 4 apresentaremos os resultados do primeiro trabalho da parte I da tese. Neste capítulo analisaremos a relaxação, em função do tempo, da magnetização de uma impureza acoplada a um sistema de elétrons interagentes em uma dimensão. Os resultados deste projeto foram publicados na revista Phys. Rev. B [24]. O capítulo seguinte a este, 5, também é um capítulo de resultados. Neste capítulo serão apresentados nossos resultados para as propriedades de transporte através da impureza magnética e uma generalização do resultado para a relaxação da magnetização obtido no capítulo anterior. Os resultados desse segundo trabalho também foram publicados na revista Phys. Rev. B [25]. Ao final do capítulo 5 também discutiremos brevemente um novo projeto iniciado há poucos meses, no qual investigaremos o *interplay* do efeito Kondo e dos modos zero de Majorana olhando para propriedades dinâmicas. Nossos resultados iniciais encontram-se no apêndice E.

Parte II: Respostas Raman da fase com ordenamento de carga dos cupratos supercondutores

A segunda parte desta tese busca investigar as respostas Raman da fase com ordenamento de carga dos cupratos. Como comentado acima, recentes resultados vindos de espectroscopia Raman eletrônica [17] conseguiram medir assinaturas desta fase; porém, não há trabalhos teóricos que expliquem tais resultados. Este é o objetivo da segunda parte desta tese.

No capítulo 6 será introduzida a física dos cupratos: a estrutura eletrônica desses materiais e as diversas fases eletrônicas que emergem ao doparmos a fase isolante de Mott. Em especial daremos mais atenção à fase com ordenamento de carga e à fase *pseudogap*, as quais serão tema de investigação do capítulo seguinte. O capítulo 7 é um capítulo de resultados. Na primeira parte deste capítulo investigaremos as propriedades espectrais e as respostas Raman da fase com ordenamento de carga. Na segunda parte, buscando descrever uma situação mais realística, levaremos em consideração tanto os efeitos da ordem de carga quanto da fase *pseudogap*, o que nos permitirá tratar o problema das escalas de energia, em função da dopagem, destas fases. Os resultados expostos nesse

capítulo foram publicados na revista Phys. Rev. B [26].

Esta tese conta ainda com um conjunto massivo de apêndices que fornecem mais detalhes dos problemas aqui tratados, como também dos métodos utilizados.

Unidades

Ao longo desta tese consideraremos $\hbar = K_B = c = 1$. Desta forma, temos as seguintes relações entre as unidades: $[\text{energia}] = [\text{tempo}]^{-1} = [\text{temperatura}] = [\text{comprimento}]^{-1}$.

Parte I: Dinâmica em tempo real do efeito Kondo

2 Efeito Kondo e dinâmica *quench*

Este capítulo de introdução da parte I dedica-se a dois tópicos principais, a saber, o efeito Kondo [18] e a dinâmica gerada por um protocolo de *quench* [21, 22]. Sobre o primeiro tópico, uma breve revisão será feita, relatando o efeito Kondo em metais e em sistemas de baixa dimensão, como pontos quânticos. Com respeito à dinâmica *quench*, introduziremos os aspectos mais importantes do tema, junto com uma recente e pertinente, para o nosso trabalho, realização experimental.

2.1 Efeito Kondo

Um problema de grande interesse na área de sistemas fortemente correlacionados é o de um metal com baixa concentração de impurezas magnéticas [18]. Elementos químicos com orbitais *d* ou *f* semipreenchidos, como terras raras e actínídeos, possuem uma tendência em formar momentos magnéticos locais, dado que a função de onda eletrônica para esses orbitais é bem localizada [9]. Em um composto metálico, esse momento magnético acopla-se com o spin dos elétrons de condução e resulta em propriedades anômalas (em comparação a um metal limpo) [18]. A primeira assinatura da existência de um acoplamento não-trivial entre uma impureza magnética e os elétrons de condução se deu na resistividade elétrica de alguns materiais em função da temperatura: na região de baixas temperaturas, a resistividade cresce quando a temperatura é reduzida (veja a Fig. 2). Este comportamento deixa claro que algum mecanismo que desfavorece o transporte está sendo evidenciado a baixas temperaturas.

Algumas décadas após a descoberta experimental do fenômeno, em 1964, o físico Jun Kondo [20] tratou o acoplamento dos elétrons do “mar” metálico com a impureza magnética como sendo descrito pelo hamiltoniano

$$H_K = J_K \mathbf{S}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}_{\text{imp}}), \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{S}_{\text{imp}}$ é o spin da impureza, $\mathbf{s}(\mathbf{r}_{\text{imp}})$ é a densidade de spin (spin/volume) dos elétrons de condução na vizinhança da impureza ($\mathbf{r}_{\text{imp}}$) e J_K dá a intensidade da interação. Tratando o acoplamento J_K como um parâmetro perturbativo, Kondo mostrou que o acoplamento dado em (2.1) produz uma contribuição logarítmica $\propto J_K^3 \ln(\Lambda_0/T)$ para a resistividade¹ [18, 20]. Este termo, quando combinado com a contribuição vinda de outros mecanismos de espalhamento, elétron-fônon por exemplo, produz o crescimento da resistividade observado nos experimentos apenas se $J_K > 0$, ou seja, quando a interação é antiferromagnética. Isto

¹ Aqui $\Lambda_0 \gg T$ representa a largura de banda para os elétrons de condução, isto é, a janela de energias na qual esses elétrons são efetivamente excitados.

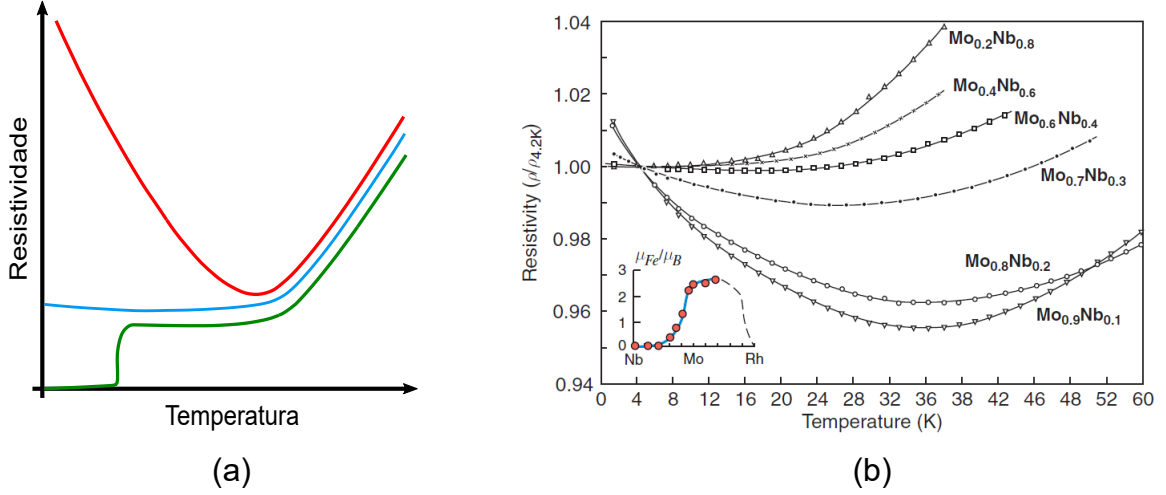


Figura 2 – (a) Resistividade para três tipos de sistemas metálicos em função da temperatura. Em azul temos um metal limpo (sem impurezas magnéticas), em verde um metal que sofre uma transição para a fase supercondutora e em vermelho um metal com presença de impurezas magnéticas. Figura adaptada de [27]. (b) Medidas de resistividade em ligas de molibdênio (Mo) e nióbio (Nb) dopadas com 1/100 de ferro (Fe). Quando a concentração de Mo ultrapassa o percentual de 0.6 podemos notar que a resistividade passa a crescer à medida que a temperatura diminui. Isto se dá como consequência do momento magnético desenvolvido pelo Fe ao irmos em direção a uma alta concentração de Mo (veja o *inset*). Figura retirada de [9].

mostra que, na região de baixas temperaturas, o spin da impureza $\mathbf{S}_{\text{imp}}$ tende a formar um estado singlete (de muitos corpos) com o spin efetivo $\mathbf{s}(\mathbf{r}_{\text{imp}})$ dos elétrons de condução. A temperatura que caracteriza a formação desse estado é a chamada temperatura Kondo, dada por [18]

$$T_K \sim \Lambda_0 e^{-1/(2\rho_0 J_K)}, \quad (2.2)$$

sendo ρ_0 a densidade de estados dos elétrons de condução no nível de Fermi.

O aumento da resistividade em temperaturas baixas pode ser, agora, entendido intuitivamente. A interação antiferromagnética $J_K > 0$, sentida pelos elétrons que estão nos arredores da impureza e responsável por formar o estado singlete, faz com que a impureza se comporte como um centro espalhador de maior raio para os elétrons que não estão participando da formação do estado singlete, dada a nuvem eletrônica (nuvem Kondo) que se forma ao redor da impureza. Isto faz com que mais elétrons sejam espalhados pela impureza e, consequentemente, ocorra um aumento da resistividade do material.

O resultado obtido por Kondo é válido apenas no chamado regime de acoplamento fraco², isto é, para o intervalo de temperaturas $T \gg T_K$. Podemos perceber isto ao reduzirmos a temperatura do sistema, o que leva a uma divergência do termo logarítmico

² Esta terminologia vem da teoria do Grupo de Renormalização (RG). Na seção 2.1.3 usaremos ideias do RG para analisar o problema Kondo em mais detalhes.

da resistividade. Isto nos mostra que, na região de temperaturas $T \ll T_K$, o acoplamento Kondo J_K não pode ser tratado como um parâmetro perturbativo. Portanto, uma nova descrição, baseada no fato do spin da impureza ter sido blindado pelos elétrons de condução, deve ser feita.

Depois de alguns anos do mecanismo microscópico para a interação impureza-elétrons ter sido colocado por J. Kondo, uma imagem simples para o comportamento de baixa energia (estado fundamental) do modelo Kondo foi alcançada, devido em grande parte às contribuições de P.W. Anderson [28–30], K. Wilson [31], P. Nozières [32, 33], N. Andrei [34] e P. B. Wiegmann [35]. No processo de reduzir a temperatura do sistema, o acoplamento Kondo J_K pode ser visto não como um parâmetro constante, mas sim tendo seu valor aumentado mais e mais, como ficará claro no próximo capítulo com a linguagem apropriada do Grupo de Renormalização. Em temperaturas suficientemente baixas, depois que a impureza foi blindada, devido aos elétrons de condução, podemos encarar J_K como tendo sido renormalizado para ∞ [18, 36]. Isto faz com que para os outros elétrons, que não participaram do processo da blindagem, a impureza possa ser encarada como uma impureza não-magnética, pois $\langle \mathbf{S}_{\text{imp}} \rangle = 0$. Desta forma, agora o problema passa a ser o de uma impureza não-magnética embebida em um “mar” de elétrons de condução [36].

A existência de uma escala de energia característica do problema, isto é, T_K , permite-nos identificar também uma escala de comprimento característica, a chamada nuvem Kondo, dada por $\xi_K \equiv \frac{v_F}{T_K}$, onde v_F é a velocidade de Fermi dos elétrons de condução [37]. Interpreta-se esta escala como sendo o tamanho da região na qual as correlações antiferromagnéticas da impureza com os elétrons de condução estão presentes. Recentemente os autores do trabalho [38] conseguiram medir indícios da nuvem Kondo em pontos quânticos, com ξ_K sendo da ordem de micrômetros, isto é, 10^4 vezes o espaçamento médio interatômico. Esse valor de ξ_K permite-nos estimar o chamado *tempo Kondo* τ_K , que, como discutiremos ao final deste capítulo, será um dos temas centrais desta primeira parte da tese. Dado que $\xi_K = \frac{v_F}{T_K}$, temos $\tau_K \sim 1/T_K = \frac{\xi_K}{v_F} \approx 1\text{ps}$.

2.1.1 Modelo de Anderson

A interação spin-spin 2.1 entre o momento magnético localizado e o mar de elétrons de condução é proveniente de um modelo mais geral que considera o grau de liberdade atômico da impureza, o chamado modelo de uma impureza de Anderson [39]. O modelo de Anderson é descrito pelo seguinte hamiltoniano

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \epsilon_d n_d + U_d n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}d} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{H.c.} \right). \quad (2.3)$$

Aqui $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ é o operador de criação de um elétron de condução com momento $\mathbf{k}$, spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$. O subíndice d descreve os estados localizados da impureza, sendo $d_\sigma^\dagger$ o operador que cria um elétron com spin σ e energia ϵ_d , $n_d = n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}$, com $n_{d\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$, o operador

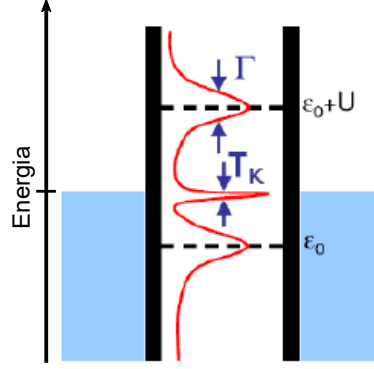


Figura 3 – Ressonância Kondo no nível de Fermi. A largura da ressonância é dada pela temperatura Kondo; veja a Eq. (2.4). Nesta figura temos $\epsilon_0 \equiv \epsilon_d$ e $U \equiv U_d$. Figura retirada da apresentação “Quantum Noise of a Carbon Nanotube Quantum Dot in the Kondo Regime”, R. Deblock, Chernogolovka, 2012.

que conta o número de elétrons na impureza e $U_d > 0$ a repulsão coulombiana local. O último termo $\propto V_{kd}$ descreve a hibridização entre a impureza e os elétrons de condução, fazendo com que a ocupação da impureza passe a variar.

Nesta situação em que a impureza só possui um nível energético ϵ_d , o número máximo de elétrons na impureza é 2. Os estados energéticos da impureza são quatro: 0 (orbital d vazio), ϵ_d (orbital d ocupado com um elétron de spin $\uparrow$), ϵ_d (orbital d ocupado com um elétron de spin $\downarrow$) e $2\epsilon_d + U_d$ (orbital d ocupado com dois elétrons de spins opostos). Já para os elétrons de condução $c_{\mathbf{k}\sigma}$, temos um contínuo de energias $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Em temperatura nula, onde todos os estados abaixo do nível de Fermi $\epsilon_F = 0$ estão preenchidos, a impureza tende a desenvolver um momento magnético quando $\epsilon_d < 0$, favorecendo a ocupação simples $n_d = 1$ na impureza, e $2\epsilon_d + U_d > 0$, desfavorecendo a dupla ocupação $n_d = 2$ [18].

No caso da existência de um momento magnético local na impureza, teremos o efeito Kondo em temperaturas baixas. Os elétrons $c_{\mathbf{k}}$ do mar formam um estado singleto com a impureza, levando ao aparecimento de um pico ressonante na densidade de estados da impureza em energia zero (nível de Fermi); veja a Fig. 3. Esse pico é de natureza distinta, se comparado com os outros dois picos de partícula única posicionados em ϵ_d e $\epsilon_d + U_d$, pois é consequência de um estado de muitos corpos (singleto impureza-elétrons) em temperaturas $T \ll T_K$ [18]. Em termos dos parâmetros do modelo de Anderson, Haldane [40] mostrou que

$$T_K \sim \sqrt{\Gamma U_d} \exp\left(\frac{\epsilon_d(\epsilon_d + U_d)\pi}{2\Gamma U_d}\right), \quad (2.4)$$

sendo $\Gamma \propto |V_{kd}|^2$ a função hibridização [9, 18]. Experimentos com pontos quânticos [41, 42], como será discutido mais abaixo, envolvem um preciso controle sobre quantidades como ϵ_d , U_d e Γ , possibilitando assim uma determinação de T_K .

Como dito inicialmente, a interação spin-spin (2.1) tratada por Kondo pode ser

derivada do modelo de Anderson (2.3). O mapeamento entre os dois modelos é obtido por meio de uma transformação de Schrieffer-Wolff [43], a qual elimina as ocupações $n_d = 0$ e $n_d = 2$. Isto é feito reescrevendo o hamiltoniano de Anderson (2.3) na forma matricial na base $\Psi = (\psi_0, \psi_1, \psi_2)$, onde ψ_i é a função de onda do sistema quando a impureza tem uma ocupação i , e encontrando o hamiltoniano efetivo (hamiltoniano Kondo) que satisfaça uma equação do tipo Schrödinger para ψ_1 [18]. Depois de efetuar o procedimento descrito acima e tomar o limite de baixas energias para os elétrons de condução, chegaremos no seguinte hamiltoniano efetivo

$$H_{\text{eff}} = H_0 + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathbf{s}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \cdot \mathbf{S}_d + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'}, \quad (2.5)$$

sendo H_0 o primeiro termo na Eq. (2.3), $\mathbf{S}_d = d^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} d$, com $d_i^\dagger = (d_{i\uparrow}^\dagger, d_{i\downarrow}^\dagger)$ e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ um vetor com as matrizes de Pauli, o operador de spin da impureza e $\mathbf{s}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = c_{\mathbf{k}}^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_{\mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}}^\dagger$ tendo uma definição similar à de $d^\dagger)$ o operador densidade de spin para os elétrons de condução. Os acoplamentos na equação acima são

$$J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}d} V_{\mathbf{k}'d} \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_d} + \frac{1}{\epsilon_d + U_d - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \right), \quad (2.6)$$

e

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{V_{\mathbf{k}d} V_{\mathbf{k}'d}}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_d} - \frac{1}{\epsilon_d + U_d - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \right). \quad (2.7)$$

O termo $\propto W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ descreve um espalhamento efetivo elétron-elétron mediado pela impureza. Devido a este termo não envolver o spin da impureza, tal termo não contribuirá na análise do efeito Kondo. O segundo termo na Eq. (2.5) é a interação spin-spin introduzida por Kondo para explicar o crescimento anômalo da resistividade [18].

2.1.2 Realização do efeito Kondo em pontos quânticos

O efeito Kondo também vem sendo estudado em pontos quânticos (QD) [27, 38, 41, 42, 44–47]. Um QD funciona como uma espécie de um pequeno dispositivo semiconductor que confina um número controlável de elétrons nas três direções espaciais [44]. Devido ao tamanho pequeno desses sistema, variando de alguns nanômetros a micrômetros, os elétrons aprisionados só podem ter certas energias discretas, como no modelo de Anderson, fazendo com que uma investigação de fenômenos puramente quânticos, como o efeito Kondo, seja possível [27]. A Fig. 4 (a) traz uma imagem de um dispositivo que funciona como QD.

Assim como em metais com baixa concentração de impurezas magnéticas, a existência de um momento magnético local no QD, que hibridiza com um mar de elétrons de condução, leva ao efeito Kondo. Porém, devido à geometria diferente do acoplamento impureza-elétrons (veja a Fig. 4 (a)), as assinaturas nas propriedades de transporte da formação de um estado singlete de muitos corpos, envolvendo o spin do QD e os elétrons dos reservatórios, são diferentes [27].

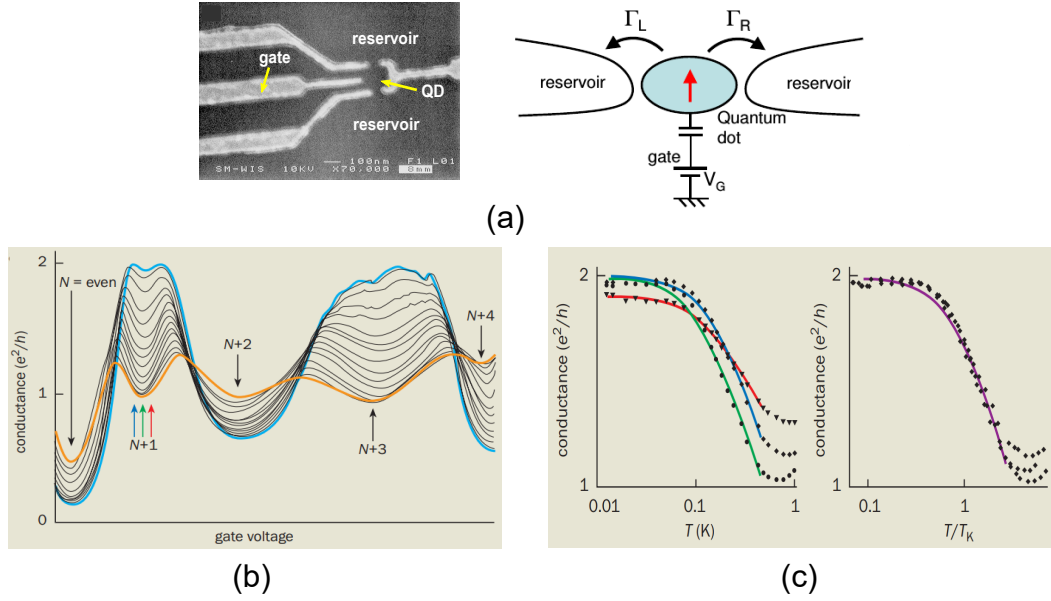


Figura 4 – **(a)** Mais à esquerda temos uma imagem feita com a técnica de microscopia eletrônica de varredura que mostra a vista superior de um dispositivo que funciona como um QD. O dispositivo é construído em cima de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs, que confina os elétrons em 2D (2DEG), enquanto que, com o auxílio de um potencial de *gate*, os elétrons são confinados em uma pequena ilha do plano (QD). Figura adaptada de [42]. Mais à direita, temos a representação esquemática de um QD genérico. **(b)** Medidas da condutância através do ponto quântico no intervalo de temperaturas de 25 mK (curva azul) até 1 K (curva laranja). Ao variar o *gate* V_G é possível controlar o número de elétrons confinados no QD. Vemos que, quando este número de elétrons é ímpar, a condutância cresce e atinge o valor máximo $2e^2/h$ quando a temperatura é reduzida. **(c)** Universalidade da condutância através do ponto quântico. Mais à esquerda, dados experimentais obtidos para três valores do potencial de *gate* indicados na figura (b) pelas setas verde, azul e vermelha. Mais à direita, os dados foram colapsados em uma única curva $f(T/T_K)$, revelando o limite universal da física Kondo. Figuras (b, c) foram retiradas de [27].

Por meio da aplicação de uma diferença de potencial entre os reservatórios de elétrons (veja a Fig. 4 (a)), podemos investigar o transporte *através* do QD [27, 41, 42]. Ao reduzir suficientemente a temperatura, é visto que os elétrons passam através do QD de forma ideal (com condutância $2e^2/h$), isto é, como se o QD se tornasse transparente nessa região de temperaturas [42]. Vemos que, diferente do crescimento da resistividade apresentada em sistemas metálicos, neste caso é uma total diminuição da resistividade (do QD) que configura o efeito Kondo. Este fenômeno é consequência da emergência da ressonância na densidade de estados do QD no nível de Fermi [9], que se dá, agora, devido à formação de um estado singleto entre um momento magnético no QD e os elétrons dos reservatórios em temperaturas $T \ll T_K$. Na Fig. 4 (b) mostramos resultados experimentais para a condutância pelo QD em função do potencial de *gate* (veja a Fig. 4 (a)), que permite variar o número de elétrons no QD. Quando este número é ímpar, ou seja, quando

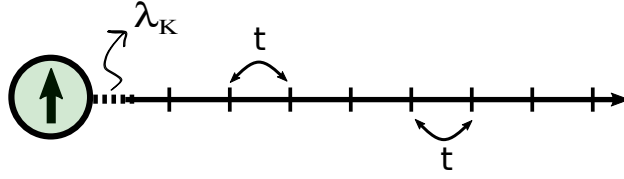


Figura 5 – Impureza magnética acoplada antiferromagneticamente à extremidade de um fio metálico.

há um momento magnético não-nulo no QD, a condutância em baixas temperaturas atinge o valor ideal $2e^2/h$, relatando a formação do estado singleto. Por outro lado, quando o número de elétrons é par, a condutância do QD diminui ao reduzirmos a temperatura [27], uma vez que não há mais um momento magnético no QD que hibridiza com os elétrons dos reservatórios.

Um outro aspecto que caracteriza o efeito Kondo é a existência de uma única escala de energia, T_K , do problema. Isto implica que muitos dos observáveis envolvidos na física Kondo³ são dados por funções da razão T/T_K , onde *todos* os parâmetros microscópicos relevantes para descrever o problema entram em T_K . Este fato leva ao conceito de universalidade do efeito Kondo [48]. No caso específico de um QD, esses parâmetros são o nível energético interno do QD, a interação elétron-elétron no QD e a hibridização reservatórios-QD (similarmente ao modelo de Anderson, veja a Eq. (2.4)). Na Fig. 4 (c) mostramos que a condutância através do QD é uma função apenas da razão T/T_K , independente do valor do potencial de *gate* considerado (dentro do regime Kondo).

A universalidade também se reflete nas propriedades de tamanho finito do sistema, onde é esperada, para alguns observáveis, uma dependência funcional em termos da razão ξ_K/L , sendo L o comprimento linear do sistema [49–51]. Por exemplo, no trabalho [50], no qual foi estudado o transporte de carga através de um QD acoplado a um sistema de elétrons unidimensional, os autores mostraram que a condutância do QD é dada por uma função da razão ξ_K/L . Além disso, neste trabalho os autores também mostraram que a condutância é sensível ao tamanho finito L do sistema, como consequência da formação ou não do efeito Kondo. Quando $\xi_K/L \gg 1$, eles mostraram que o efeito Kondo não acontece, levando a uma pequena condutância do QD. Porém, para $\xi_K/L \ll 1$, isto é, quando o tamanho da nuvem Kondo é muito menor que o comprimento do sistema, o efeito Kondo acontece, produzindo uma condutância ideal de $2e^2/h$.

³ Não todos, como veremos ao longo desta tese.

2.1.3 Efeito Kondo em 1D

A fim de esclarecer alguns conceitos discutidos até então, em especial o limite de acoplamento forte quando a impureza foi blindada pelos elétrons de condução, consideraremos agora uma situação em que uma impureza magnética de spin $S_0 = 1/2$ é acoplada à origem de um gás de elétrons unidimensional, como esquematizado na Fig. 5. Assumindo que já estamos no limite Kondo, isto é, com um momento magnético local na impureza, o hamiltoniano que descreve o sistema na rede é [48, 52]

$$H = -t \sum_{i=1}^{N-1} (c_i^\dagger c_{i+1} + \text{H.c.}) + J_K \mathbf{S}_0 \cdot c_1^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_1, \quad (2.8)$$

onde $c_i^\dagger \equiv (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)$ é o spinor contendo os operadores de criação de um elétron que vive em uma cadeia com $N \gg 1$ sítios e $\mathbf{S}_0 = c_0^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_0$ é o operador de spin da impureza que, por suposição, está no sítio $i = 0$. O primeiro termo do hamiltoniano acima descreve o movimento dos elétrons pela cadeia (com energia cinética proporcional a t), enquanto o segundo fornece o acoplamento impureza-elétrons de condução, com $0 < J_K \ll t$ sendo o acoplamento Kondo.

O termo Kondo é energeticamente favorável à formação de um estado de spin singlete entre a impureza e um elétron que pode ocupar o sítio 1 da cadeia. Como já mencionado, isso pode ser visto com o auxílio da teoria do Grupo de Renormalização aplicada ao efeito Kondo [18]. Como está detalhado no apêndice B, ao reduzirmos a temperatura do sistema o acoplamento Kondo J_K se comporta como⁴ [36, 48]:

$$\lambda_K(T) \approx \frac{\lambda_0}{1 - \lambda_0 \ln(\Lambda_0/T)}, \quad (2.9)$$

onde $\lambda_K(T) \equiv J_K(T)/(2\pi v_F)$, sendo v_F a velocidade de Fermi e $T \leq \Lambda_0$. λ_0 corresponde ao valor inicial $J_K(\Lambda_0)/(2\pi v_F) \ll 1$, chamado limite universal do efeito Kondo. Para o valor antiferromagnético de J_K , isto é, positivo, vemos que, à medida que a temperatura é reduzida, J_K é renormalizado para valores mais altos, o que aumenta a relevância da interação impureza-elétrons. Por outro lado, supondo agora um acoplamento ferromagnético $J_K < 0$, vemos o acoplamento Kondo efetivo é renormalizado para valores menores, implicando na não formação do estado singlete em temperaturas baixas e no spin da impureza se desacoplando da cadeia [18].

A temperatura Kondo identifica a escala de energia na qual ocorre o *crossover* entre as regiões de acoplamento fraco, $J_K \ll 1$, e acoplamento forte, $J_K \gg 1$. Esta escala é determinada pela condição $\lambda_K(T_K) \sim \mathcal{O}(1)$, isto é, um número da ordem de 1. Pela Eq. (2.9) obtemos que $T_K \sim \Lambda_0 e^{-1/\lambda_0}$, em concordância com o resultado prévio (2.2). Assim, para $T \gg T_K$ a impureza está acoplada fracamente ao mar de elétrons de condução,

⁴ Este resultado é obtido solucionando a seguinte equação: $d\lambda_K/d\ln(\Lambda) = -\lambda_K^2 + \mathcal{O}(\lambda_K^3)$, proveniente de uma teoria de perturbação de segunda ordem em λ_K . Veja o apêndice B para mais detalhes.

enquanto para $T \ll T_K$ a impureza está completamente blindada devido à formação do estado singleto. Dessa forma, para $T \gg T_K$ uma teoria de perturbação em J_K é controlável, no sentido que podemos prever o comportamento de diversos observáveis considerando uma série de potências em J_K . Por exemplo, a susceptibilidade magnética da impureza é dada por [18]

$$\chi_{\text{imp}}(T \gg T_K) \propto \frac{1}{T} \left[1 - \frac{1}{\ln(T/T_K)} \right] + \mathcal{O}(\lambda_0^3), \quad (2.10)$$

onde a contribuição em ordem zero, $1/T$, é a lei de Curie-Weiss, visto que nesta ordem o spin na impureza é livre.

Vejam os agora o que acontece na região de acoplamento forte $T \ll T_K$. Em termos do modelo de rede (2.8), nesta região de temperaturas a impureza formou um estado de spin singleto com um elétron que vive no sítio 1 da cadeia e, dado que a energia dessa ligação é da ordem de $J_K \gg t$, devido à renormalização de J_K , os outros elétrons da cadeia não podem ir para esse sítio e nem para o sítio da impureza, pois para isso acontecer seria necessário uma grande quantidade de energia para quebrar o estado singleto. Assim, nesse limite, o sistema é equivalente a uma cadeia com $N - 1$ sítios e a impureza totalmente desacoplada. Com isso, vemos que o limite de acoplamento forte $\lambda_K = \infty$ é equivalente ao limite de acoplamento fraco $\lambda_K = 0$ com uma condição de contorno modificada: os elétrons da cadeia não podem acessar o sítio 1 [36, 48].

Mesmo a impureza tendo desacoplado do resto do sistema quando $T \ll T_K$, este desacoplamento induz uma interação efetiva elétron-elétron nas vizinhanças de onde a impureza estava [36, 48, 52]. O comportamento de diversos observáveis nessa região de temperaturas pode ser obtido tratando tal interação perturbativamente. Por exemplo, para a susceptibilidade magnética da impureza discutida anteriormente, temos o resultado [48]

$$\chi_{\text{imp}}(T \ll T_K) \propto \frac{1}{T_K} + \mathcal{O}(g^2), \quad (2.11)$$

em primeira ordem em g , sendo $g \ll 1$ a intensidade da interação elétron-elétron induzida pela formação do estado singleto. Este resultado finito para a susceptibilidade magnética em $T = 0$ reflete o fato do spin da impureza ter sido blindado pelo elétron que está no sítio 1 [18], desaparecendo assim qualquer traço de magnetismo do problema.

Por fim, para $T \sim T_K$ o problema torna-se não-perturbativo, de modo que tratamentos analíticos baseados em teorias de perturbação são proibitivos [36]. Porém, devido à universalidade do efeito Kondo e de nessa região de T termos um *crossover*, não uma transição de fase, entre os limites de acoplamento forte e fraco, os resultados nas Eq.'s (2.10) e (2.11) são conectados por uma função universal contínua da razão T/T_K . De fato, resultados exatos obtidos via *ansatz* de Bethe [34, 35] mostram que [36, 48]

$$\chi_{\text{imp}} = \frac{1}{4T_K} f(T/T_K), \quad (2.12)$$

sendo $f(x)$ uma função universal, isto é, independente dos detalhes microscópicos t e J_K ; nos limites $T \gg T_K$ e $T \ll T_K$ a expressão é obtida dos resultados (2.10) e (2.11), respectivamente. Em geral, nessa região de temperaturas o problema Kondo só pode ser tratado por meio de técnicas numéricas, como, por exemplo, DMRG ou Monte Carlo quântico [49, 53].

Efeito Kondo em cadeias de spin

O problema Kondo também foi estudado em cadeias de spin de Heisenberg [49, 53–57], especificamente em cadeias de spin que estão na fase desordenada (fase líquido de Luttinger; veja o capítulo 3), as quais não possuem um *gap* de energia em temperaturas baixas. Dado que em cadeias de spin 1/2 o espaço de Hilbert do sistema tem dimensão 2^N , sendo N o número de sítios da cadeia, que é bem menor que o espaço de Hilbert de cadeias de elétrons, de dimensão 4^N , o custo computacional para tratar numericamente tais sistema é bem menor. Por exemplo, no trabalho [56] os autores analisaram, tanto numericamente com DMRG quanto analiticamente com teoria de perturbação, a influência do sinal da interação spin-spin *na* cadeia, isto é, uma interação ferromagnética ou antiferromagnética. Foi mostrado que em ambas as situações há a formação do estado singleto em temperaturas baixas, porém o desacoplamento da impureza do resto do sistema faz, para o caso antiferromagnético, a cadeia de spin ser quebrada em duas. Já nos trabalhos [49, 53, 54], os autores mostraram, entre outras coisas, o comportamento universal de diversos observáveis em termos da razão ξ_K/L .

O efeito Kondo em cadeias de spin leva naturalmente ao efeito Kondo de muitos canais [36, 53]. Diferentemente das situações vistas até agora com o modelo de Anderson, Eq. (2.3), e o acoplamento com uma cadeia unidimensional de elétrons, Eq. (2.8), a física Kondo de muitos canais surge quando a impureza se acopla a diferentes “espécies” de elétrons [18, 36, 58–62]. Essas novas espécies podem ser encaradas como novas cadeias de elétrons, em similaridade com o caso que foi estudado acima (Eq.(2.8)). O hamiltoniano Kondo neste caso torna-se:

$$H_K = J\mathbf{S}_0 \cdot \sum_{i=1}^k c_{i1}^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_{i1}, \quad (2.13)$$

onde c_{i1} é o operador de aniquilação no primeiro sítio da cadeia $i = 1, \dots, k$ e por suposição consideramos o mesmo acoplamento J para todos os canais, implicando em uma simetria $SU(k)$ do problema. O acoplamento Kondo J ainda renormaliza para valores altos em baixas energias⁵, fazendo com a impureza forme um estado singleto com os elétrons que estão nos primeiros sítios das cadeias. Porém, a blindagem só será completa se $S_0 = k/2$. No caso geral, quando $S_0 \neq k/2$, teremos um spin efetivo s de magnitude $s = |S_0 - k/2|$ [36].

⁵ A equação que diz como J renormaliza é a seguinte: $d\lambda/d\ln(\Lambda) = -[\lambda^2 - (k/2)\lambda^3] + \mathcal{O}(\lambda^4)$, sendo $\lambda = J\rho_0$ o acoplamento Kondo sem dimensão. Para uma derivação em detalhes veja o apêndice B de [63].

O spin efetivo também acopla-se às cadeias na forma usual da interação Kondo, porém com um acoplamento Kondo efetivo igual a $J_{\text{eff}} \propto t^2/J \ll 1$, sendo t o *hopping* nas cadeias (veja a Eq. (2.8)). Na situação conhecida como *underscreened*, onde $S_0 > k/2$, o sinal de J_{eff} é negativo; logo, concluímos que nesta situação o estado fundamental do sistema é constituído de um spin $s = |S_0 - k/2|$ desacoplado das cadeias. Já para o caso *overscreened*, onde $S_0 < k/2$, o sinal de J_{eff} é positivo, produzindo um novo estado fundamental com propriedades não-líquido de Fermi. Nozières e Blandin [58] mostraram que de fato no limite $k \gg 1$ o acoplamento Kondo na Eq. (2.13) renormaliza para um valor finito $J_c \approx 2/k$ [62]. Assim como o efeito Kondo “tradicional” de 1 canal ($k = 1$), o efeito Kondo de muitos canais também foi realizado em QD para o caso $k = 2$ (Kondo de 2 canais) [64].

Efeito Kondo com elétrons interagentes

Usualmente o efeito Kondo é estudado na suposição de um mar de elétrons de condução não-interagentes; veja as Eq.’s (2.3) e (2.8). Esta suposição tem sua base na teoria de líquido de Fermi de Landau [9], que nos permite “desprezar” as interações elétron-elétron no mar em baixas energias. Porém, é sabido que para sistemas definidos em baixa dimensão, essencialmente unidimensionais, como o da Eq. (2.8), essa teoria deve ser substituída pela teoria de líquido de Luttinger [5], na qual as interações elétron-elétron desempenham um papel importante (como na separação spin-carga discutida no capítulo anterior 1). Assim, no estudo do efeito Kondo em uma dimensão, devemos nos preocupar com o papel desempenhado por tais interações.

O efeito Kondo em um líquido de Luttinger foi estudado em diversos trabalhos [52, 65–69]. Um dos primeiros trabalhos a tratar este tema foi realizado por Lee e Toner [65]. Usando a teoria do Grupo de Renormalização os autores mostraram que o efeito Kondo ainda acontece na presença de interação eletrônica; porém, o comportamento do sistema próximo do regime de acoplamento fraco $J_K \ll 1$ não é mais ditado pela Eq. (2.9). Nesta nova situação, o acoplamento Kondo renormaliza para altos valores como uma lei de potência, com expoente que depende do valor da interação elétron-elétron no sistema. Algo similar foi visto para o efeito Kondo em cadeias de spin no trabalho [56]. Já no trabalho [52], os autores estudaram um QD acoplado à extremidade de um líquido de Luttinger. Eles mostraram, entre outras coisas, que a temperatura Kondo adquire uma dependência com J_K distinta daquela da Eq. (2.2), a saber, $T_K \sim e^{-\text{const.}/\sqrt{J_K}}$, a qual também foi vista no efeito Kondo em cadeias de spin no trabalho [53].

Do ponto de vista de estudos numéricos, no trabalho [70] os autores investigaram, usando DMRG, o modelo de uma impureza de Anderson na situação em que os elétrons de condução são descritos pelo hamiltoniano da cadeia de Hubbard, veja a Eq. (4.1) do capítulo 4. A Fig. 6 traz alguns dos principais resultados do trabalho. Na Fig. 6 (a) temos

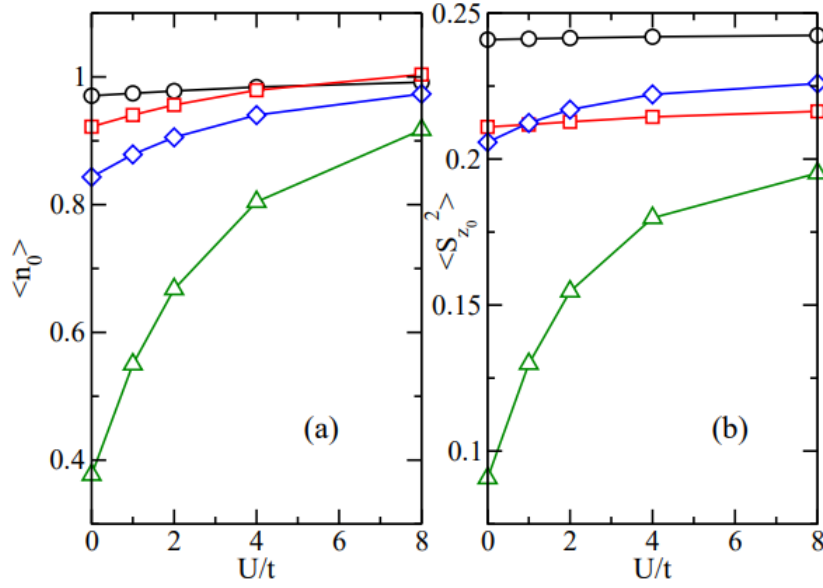


Figura 6 – Propriedades locais da impureza em função da interação elétron-elétron U na cadeia de Hubbard. **(a)** Ocupação média da impureza e **(b)** valor esperado $\langle S_{z_0}^2 \rangle$ da impureza. Círculos pretos correspondem a $U_d = 8$ e $t' = 0.5$, quadrados vermelhos a $U_d = 8$ e $t' = 1.0$, losangos azuis a $U_d = 4$ e $t' = 0.5$ e triângulos verdes a $U_d = 2$ e $t' = 0.5$. Resultados obtidos considerando uma cadeia com $L = 96$ sítios. Figura retirada de [70].

a ocupação média no sítio da impureza, para diferentes valores da interação elétron-elétron U_d no sítio da impureza e da hibridização t' entre os elétrons da cadeia e a impureza ($V_{\mathbf{k}}$ na Eq. (2.3)), em função da interação elétron-elétron U nas cadeias de Hubbard. Focando na dependência com U , percebemos que quanto maior o valor de U mais perto do regime Kondo, $n_0 = 1$, o sistema se encontra, revelando que o efeito Kondo é favorecido pelas interações nas cadeias. Na Fig. 6 **(b)** mostramos os resultados para o valor esperado $\langle S_{z_0}^2 \rangle$ da impureza. Também vemos que o aumento da interação U conduz a um regime Kondo mais bem definido.

Por último, um ponto que merece ser ressaltado é a natureza unidimensional do problema Kondo [63]. Devido à interação impureza-elétrons ser uma interação local, do tipo delta de Dirac $\delta(\mathbf{r})$, é sabido que apenas o canal s (com momento angular zero) participa do acoplamento Kondo em um sistema metálico em $D > 1$, o que nos permite mapear o problema em um equivalente em $1D$, com um hamiltoniano igual àquele (2.8). Veja o apêndice B para mais detalhes sobre esse mapeamento.

Como comentado no capítulo de introdução 1, um dos nossos objetivos nesta tese é estudar a influência da interação elétron-elétron no efeito Kondo. Assim, nos próximos capítulos voltaremos a discutir esse tema.

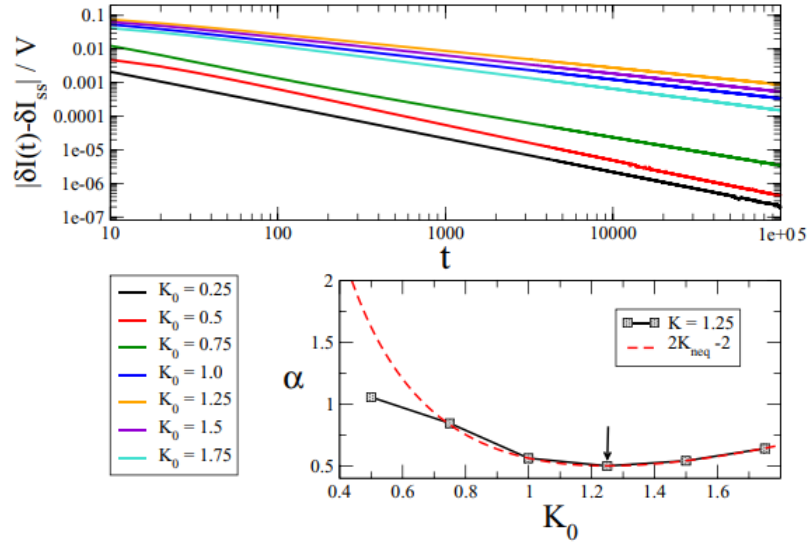


Figura 7 – Decaimento da corrente como uma lei de potência. Parte superior da figura: corrente através da impureza para diferentes valores da diferença $\Delta K = K - K_0$, sendo K_0 (K) o valor da interação antes (depois) do *quench*, numa escala log-log. Parte inferior: mais à esquerda temos os diversos valores de K_0 considerados (fixando $K = 1.25$), enquanto mais à direita temos o comportamento do expoente α da corrente (veja a Eq.(2.14)). Os pontos marcados com quadrados cinzas foram obtidos numericamente e a linha pontilhada vermelha representa o resultado analítico $\alpha = 2(K_{\text{neq}} - 1)$, sendo $K_{\text{neq}} = \frac{K_0}{2} \left(1 + \frac{K^2}{K_0^2}\right)$ o expoente de não-equilíbrio. Figura retirada de [81].

2.2 Dinâmica *quench*

Uma área de pesquisa que vem atraindo cada vez mais atenção, tanto dos teóricos quanto dos experimentais, é a investigação da dinâmica em tempo real de sistemas quânticos de muitos corpos fora de equilíbrio [6, 21, 22, 70–85]. Esses estudos buscam compreender, entre outras coisas, como se dá a formação temporal de estados complexos de muitos corpos, como o estado singleto do efeito Kondo discutido nas seções anteriores [71, 86–89]. Uma maneira simples de simular a dinâmica de não-equilíbrio em sistemas fechados é por meio dos chamados protocolos de *quench*, ou simplesmente um *quench* [21, 22]. Consideremos um sistema descrito por um hamiltoniano $H(g)$, onde g representa um parâmetro ou um conjunto deles, e suponhamos ainda que o sistema seja preparado inicialmente, no tempo⁶ $\tau = 0$, em um dado autoestado $|\Psi_0\rangle$ de $H(g)$. Um *quench* quântico é definido pela mudança súbita (ou muito mais rápida do que qualquer outra escala de tempo característica interna do sistema) $H \rightarrow H' = H(g')$, após o qual o sistema é deixado evoluir unitariamente de acordo com o novo hamiltoniano H' [21, 22, 90, 91]. Assim, questões relevantes sobre como as funções de correlação e os valores esperados dos observáveis evoluem no tempo surgem.

Sistemas unidimensionais são uma boa plataforma para o estudo da dinâmica gerada

⁶ Daqui por diante denotaremos o tempo real por τ .

por um protocolo de *quench*, como consequência de um maior controle, seja por meio de técnicas analíticas [5] ou numéricas [92], no tratamento desses sistemas [22]. Por exemplo, A. Mitra e M. Schiró no trabalho [81] analisaram o transporte fora do equilíbrio através de uma impureza não-magnética acoplada, após um *quench*, a um líquido de Luttinger de férmions sem spin. O *quench* efetuado nesse caso consistia em mudar abruptamente a intensidade da interação (K) entre os férmions, ao mesmo tempo em que uma diferença de potencial $V \ll 1$ era ligada. Analisando o transporte de carga através da impureza, em diferentes limites de tempo, os autores conseguiram determinar que a corrente escala no tempo como

$$\delta I(\tau) - \delta I_{ss} \sim \frac{1}{\tau^\alpha}, \quad (2.14)$$

isto é, seguindo uma lei de potência com um expoente α que depende da diferença dos valores da interação antes (K_0) e depois (K) do *quench*. Aqui δI_{ss} é o valor da corrente no equilíbrio ($\tau = \infty$). Na Fig. 7 apresentamos um plot do resultado acima numa escala log-log e para diferentes valores de K_0 e $K = 1.25$ (veja o canto inferior direito da figura). Vemos pela figura que, quanto maior a diferença $\Delta = |K - K_0|$, maior é o expoente α e, consequentemente, mais rápido é o decaimento da corrente em direção ao valor de equilíbrio.

Os cálculos analíticos feitos nesta primeira parte da tese foram motivados pelo trabalho discutido acima, como consequência de uma interação entre M. Schiró e a orientadora deste tese em 2019 em Paris. Na ocasião, ela apresentou um pôster com alguns resultados numéricos prévios de tDMRG para a dinâmica pós-*quench* do efeito Kondo, resultados estes obtidos pela professora Helena Bragança na época do seu doutorado aqui na UFMG [93]. M. Schiró apontou o seu trabalho e sugeriu que uma análise similar a que ele fez poderia ser feita para o nosso caso de férmions com spin. No capítulo 4 apresentaremos esses resultados numéricos de tDMRG junto com os analíticos.

Realização experimental em redes ópticas

Uma das maiores razões pelo crescente interesse na investigação da dinâmica produzida pelos protocolos de *quench* vem também da possibilidade de simular tal dinâmica no laboratório [6, 72, 75–79, 83, 85, 94, 95]. Por exemplo, no trabalho [85] os autores simularam a dinâmica pós-*quench* de relaxação de um momento magnético localizado que interage com estados delocalizados, similarmente ao que ocorre no efeito Kondo. No contexto de redes ópticas, foi possível simular partículas localizadas (as quais desempenham o papel de impurezas) em poços de potenciais ao longo de cadeias unidimensionais que interagem com os estados delocalizados das cadeias (mar de condução), veja a Fig. 8 (a). Por meio de um campo magnético intenso, $|\mathbf{B}| = 20\text{G}$, os autores prepararam um estado inicial (por efeito Zeeman) no qual apenas as partículas com uma dada polarização de spin, $|\downarrow\rangle$, são aprisionadas nos poços de potenciais.

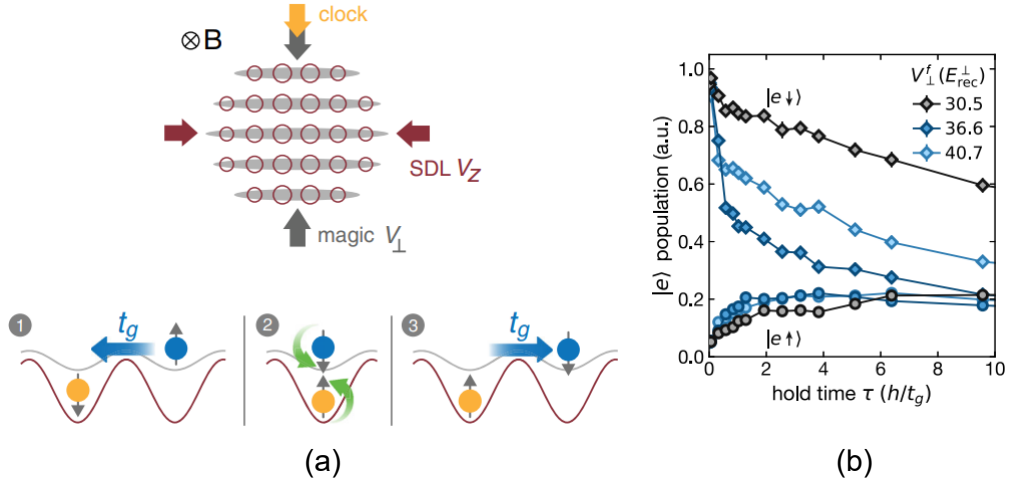


Figura 8 – Realização experimental da interação entre momentos magnéticos localizados e estados delocalizados [85]. **(a)** Representação esquemática da rede óptica que simula cadeias unidimensionais (regiões em cinza) independentes, com poços de potenciais periódicos (círculos vermelhos) ao longo das cadeias. A profundidade dos poços é controlada por meio dos potenciais V_z e $V_{\perp}$, dados nas unidades $E_{\text{rec}}^z = 2.57\text{kHz}$ e $E_{\text{rec}}^{\perp} = 2.00\text{kHz}$, respectivamente. Na presença de um campo magnético intenso, $|\mathbf{B}|$ 20G, prepara-se um estado inicial no qual apenas as partículas com spin $|\downarrow\rangle$ estão aprisionadas nos poços. Mais abaixo vemos uma ilustração esquemática da interação entre os momentos magnéticos localizados (em amarelo) e os estados delocalizados da cadeia (em azul), resultando no processo de spin *flip*. **(b)** Evolução temporal do momento magnético localizado depois de um *quench* nos potenciais, $V_z(E_{\text{rec}}^z) = 8 \rightarrow 5.7$ e $V_{\perp}(E_{\text{rec}}^{\perp}) = 45 \rightarrow V_{\perp}^f$ (veja o topo da figura), e no campo magnético $|\mathbf{B}| \rightarrow 1\text{G}$. Devido à interação com os estados delocalizados e a redução da intensidade do campo magnético, há uma consequente relaxação do spin das partículas localizadas. Figura adaptada de [85].

O protocolo de *quench* consistiu em reduzir subitamente a intensidade do campo magnético (para 1G) e a profundidade dos poços de potenciais (controlada por V_z e $V_{\perp}$ na Fig. 8(a)), de forma que os estados localizados e os delocalizados comecem a interagir. Devido ao processo de spin *flip* entre as partículas (veja a parte inferior da Fig. 8 (a)), há uma relaxação do spin dos estados localizados, como pode ser constatado na Fig. 8 (b), a qual exibe a evolução temporal pós-*quench* da população dos estados $|\downarrow\rangle$ (inicialmente 1) e $|\uparrow\rangle$.

Dinâmica *quench* do efeito Kondo

Na primeira parte desta tese nos preocuparemos em investigar a dinâmica *quench* do efeito Kondo, isto é, um protocolo de *quench* que nos permita estudar a formação temporal do efeito, similarmente ao que foi feito no trabalho [70] mas para elétrons interagentes. Um dos primeiros trabalhos a abordar a dinâmica *quench* do efeito Kondo foi [71], onde os autores consideraram um *quench* no nível energético ϵ_d de uma impureza em contato

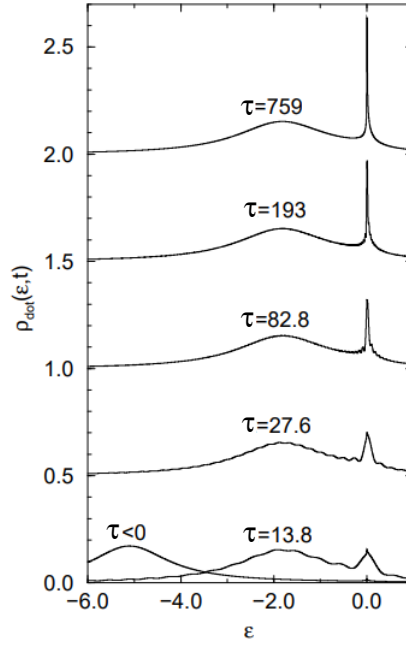


Figura 9 – Densidade de estados $\rho_{\text{dot}}(\epsilon, \tau)$ da impureza para diferentes tempos depois do *quench* $\epsilon_d(\tau) = -5 + 3\theta(\tau)$, sendo $\theta(\tau)$ a função de Heaviside e ϵ_d o nível energético da impureza. O tempo aqui é dado em unidades de $1/\Gamma$, sendo Γ o acoplamento impureza-reservatórios, e a temperatura é $T = 0.0025\Gamma$. À medida que o tempo evolui vemos que um pico se forma no nível de Fermi ($\epsilon = 0$), revelando a formação do estado singlete. Para tempos longos o resultado se aproxima do resultado de equilíbrio (calculado com $\epsilon_d = -2$). Figura adaptada de [71].

com reservatórios de elétrons não-interagentes, como esquematizado na Fig. 4 (a). Devido ao fato do acoplamento Kondo J_K ser inversamente proporcional a ϵ_d (veja a Eq. (2.6)), uma redução súbita no valor de ϵ_d leva o sistema a um regime Kondo mais bem definido. Assim, inicialmente o sistema é preparado em um estado inicial com $\epsilon_d = -5$ (em unidade de energia da hibridização Γ), fora do regime Kondo, e repentinamente ϵ_d é modificado para o valor $\epsilon_d = -2$ e o sistema é deixado evoluir unitariamente no tempo.

Como podemos notar na densidade de estados da impureza exposta na Fig. 9, a ressonância Kondo vai sendo formada à medida que o tempo passa. Para tempos da ordem de $1/T_K$, a densidade de estados dependente do tempo se torna igual à densidade de estados no equilíbrio, isto é, calculada com o valor pós-*quench* de ϵ_d [71]. Nesse trabalho os autores também concluíram que um tempo finito τ pós-*quench* faz o papel de uma temperatura efetiva $T_{\text{eff}}(\tau) \approx \frac{2}{\pi\tau}$, para tempos curtos. Isto explica o porquê de em tempos da ordem de $1/T_K$ a densidade de estados dependente do tempo ser igual à densidade de estados no equilíbrio.

Visando nosso objetivo de estudar o efeito Kondo em sistemas unidimensionais de elétrons interagentes, no capítulo seguinte 3 introduziremos o ferramental que usaremos para calcular observáveis dependentes do tempo nos capítulos 4 e 5.

3 Metodologia

Este capítulo de metodologia tem por objetivo introduzir a física de elétrons interagentes em uma dimensão focando nas propriedades de baixas energias do sistema. Tomando como ponto de partida o gás de elétrons livres, será construído um modelo com interação que captura a física desejada, o modelo de líquido de Luttinger (LL) [5, 23]. Este modelo é exatamente solúvel quando mapeado em termos de graus de liberdade bosônicos por meio da técnica de Bosonização [5, 23, 96–99]; detalhes sobre o mapeamento são apresentados abaixo. Ao final do capítulo os efeitos do acoplamento de uma impureza com o sistema será analisado sob a perspectiva das equações do Grupo de Renormalização (RG) [23, 31, 100, 101].

3.1 Elétrons livres em uma dimensão

Para ganhar intuição acerca da física de elétrons em baixa dimensão é proveitoso se iniciar com um modelo simples de N_e elétrons livres vivendo em uma rede unidimensional formada de $N \gg 1$ sítios espaçados de $a \equiv 1$ (fixando a escala de comprimento do sistema) e com comprimento $L = a(N - 1) \approx aN$. Restringindo-nos a um modelo com *hopping* apenas entre primeiros vizinhos, tal sistema tem sua física descrita pelo seguinte hamiltoniano

$$H_0 = -t \sum_{j,\sigma} c_{j+1,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{H.c} - \mu \sum_j c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}, \quad (3.1)$$

onde t é a amplitude de tunelamento entre primeiros vizinhos (a qual fixa a escala de energia do sistema), $c_{j,\sigma}$ é o operador¹ que aniquila um elétron no sítio j com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e μ é o potencial químico (introduzido apenas para mover a energia do estado fundamental).

Dado o caráter puramente cinético do hamiltoniano acima, podemos diagonalizá-lo na base de momentos $|\mathbf{k}\rangle$. Os operadores fermiônicos assumem a seguinte decomposição:

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k \in \text{BZ}} e^{ika_j} c_{k\sigma}, \quad (3.2)$$

onde, por condições periódicas de contorno, isto é, $c_{j+N,\sigma} = c_{j,\sigma}$, temos que $k = \frac{2\pi}{L}n$, com $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left(\frac{N}{2} - 1\right), \frac{N}{2}$ (para N par). BZ refere-se à primeira zona de Brillouin [1], que para os valores permitidos de n é: $\text{BZ} = \{|k| \leq \frac{\pi}{a}\}$. Com isso o hamiltoniano (3.1) torna-se

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (3.3)$$

¹ Esses operadores satisfazem as relações canônicas de anti-comutação fermiônicas: $\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\} = 0$ e $\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ij}$.

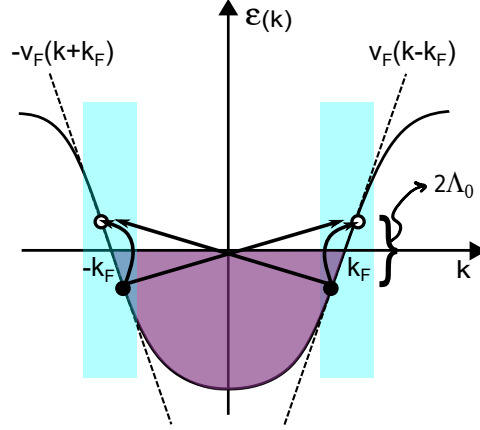


Figura 10 – Dispersão de energia para o gás de elétrons unidimensional. Em baixas energias ($k \approx \pm k_F$) a dispersão se comporta como retas de inclinação $\pm v_F$. As faixas azuis delimitam a região de momentos levados em consideração numa teoria de baixas energias. O comprimento dessas faixas é $2\Lambda_0/v_F$. As setas indicam as excitações (intra e inter-ramo) relevantes em baixas energias.

onde a dispersão de energia de partícula única é $\epsilon(k) = -2t \cos(k) - \mu$ e usamos que $L\delta_{k,0} = \sum_j e^{\pm i k a j}$. O estado fundamental (“mar de Fermi”) é constituído dos N_e elétrons preenchidos, obedecendo ao princípio da exclusão de Pauli, do nível energético mais baixo até o nível de Fermi $\epsilon_F \equiv \epsilon(k_F) = \mu$, isto é,

$$|\text{mar de Fermi}\rangle = \prod_{\sigma, |k| \leq k_F} c_{k\sigma}^\dagger |\mathbf{0}\rangle, \quad (3.4)$$

sendo $|\mathbf{0}\rangle$ o estado com zero férmions. O nível de Fermi é então identificado pela quantidade N_e de elétrons no sistema, $\frac{N_e}{N} = \frac{2k_F a}{\pi}$,² onde o fator 2 vem dos estados de spin $\uparrow, \downarrow$.

As excitações do sistema são elétrons que ganham energia, por meio de algum mecanismo, e saem do mar. Para baixas energias ($T \ll T_F \equiv \epsilon_F$) e longos comprimentos de onda ($|k| \ll k_F$), apenas os elétrons com momento na vizinhança de k_F serão excitados e a dispersão de energia pode ser linearizada em torno de $\pm k_F$ (ver figura 10):

$$\epsilon(k) \approx \begin{cases} v_F(k - k_F) & \Rightarrow \text{movimento para direita (R)}, \\ -v_F(k + k_F) & \Rightarrow \text{movimento para esquerda (L)}, \end{cases} \quad (3.5)$$

sendo $v_F = \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k}|_{k_F}$ a velocidade de Fermi. A condição de $k \approx \pm k_F$ pode ser tomada se introduzirmos um *cutoff* Λ_0/v_F (onde Λ_0 pode ser visto como a largura de banda) de momentos que exclui os estados longe de $\pm k_F$. Logo, o hamiltoniano que descreve o modelo de rede no regime de baixas energias passa a ser:

$$H_0 = \sum_{r,\sigma} \sum_{k=-\Lambda_0/v_F}^{\Lambda_0/v_F} v_F k : c_{kr\sigma}^\dagger c_{kr\sigma} :, \quad (3.6)$$

² O número de elétrons no sistema é igual a duas vezes (devido ao spin) o número de estados ocupados em $T = 0$, isto é: $N_e = 2 \sum_{k=-k_F}^{k_F} \rightarrow 2 \frac{L}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk = \frac{2k_F N a}{\pi}$.

onde introduzimos novos operadores fermiônicos $c_{kr\sigma}$ que indexam os dois ramos independentes $r = R/L$, sendo $c_{k,R/L,\sigma} = c_{\pm(k+k_F)\sigma}$. Também foi usada a operação de ordenamento normal¹, $:\cdots:$, de modo que $H_0|\text{mar de Fermi}\rangle = 0$, refletindo que no estado fundamental não temos excitações.

A versão contínua do modelo de rede (3.6) é obtida fazendo $L \rightarrow \infty$ e, consequentemente, deixando k variar no intervalo $(-\infty, \infty)$ no “mar de Dirac”. A inclusão de estados longe do nível de Fermi não deve afetar o setor de baixas energias do problema definido por (3.1) se mantivermos em mente o *cutoff* Λ_0/v_F . Os operadores fermiônicos de criação/aniquilação no espaço real dão lugar aos operadores de campo $\psi_\sigma(x)$, que no setor de baixas energias são decompostos na forma [5]

$$\psi_\sigma(x) \approx e^{ik_F x} \psi_{R\sigma}(x) + e^{-ik_F x} \psi_{L\sigma}(x), \quad (3.7)$$

sendo $\psi_{R/L,\sigma}(x) \equiv \sum_k e^{\pm ikx} c_{k,R/L,\sigma} / \sqrt{L}$ ($\Leftrightarrow c_{k,R/L,\sigma} = \int dx e^{\mp ikx} \psi_{R/L\sigma}(x)$) campos quirais definidos para cada ramo. Em termos dos campos quirais o hamiltoniano livre (3.6) torna-se

$$H_0 = v_F \sum_\sigma \int_{-L/2}^{L/2} dx \left[: \psi_{R\sigma}^\dagger(x) (-i\partial_x) \psi_{R\sigma}(x) : + : \psi_{L\sigma}^\dagger(x) (i\partial_x) \psi_{L\sigma}(x) : \right], \quad (3.8)$$

onde foi usada a condição de contorno dos campos quirais: $\psi_{R/L,\sigma}(-L/2) = \psi_{R/L,\sigma}(L/2)$.

3.1.1 Bosonização

Um dos principais métodos para tratar sistemas unidimensionais é a Bosonização [5, 23, 96, 102, 103]. O método se baseia primordialmente no fato das excitações no gás de Fermi 1D terem energia e momento bem definidos, uma consequência da superfície de Fermi ser constituída de dois pontos desconectados $\pm k_F$. No processo de construir o mapeamento de um sistema fermiônico para um bosônico, o operador densidade de férmions desempenha um papel essencial (com isso já percebe-se o caráter coletivo do mapeamento). Escrevendo-o de uma maneira mais conveniente

$$\rho_{r\sigma}(q) = \sum_k : c_{k+q,r,\sigma}^\dagger c_{k,r,\sigma} :, \quad (3.9)$$

para todo $q \neq 0$, é possível mostrar que esses operadores obedecem relações de comutação do tipo bosônicas, isto é, que [96]

$$[\rho_{r\sigma}(p), \rho_{r\sigma'}(q)] \propto \delta_{p,-q} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (3.10)$$

Assim, definindo operadores bosônicos de criação/aniquilação da forma

$$d_{q\sigma}^r = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \rho_{r\sigma}(-q) \quad (q > 0), \quad (3.11)$$

¹ Um produto $\mathcal{P}$ de operadores sob este sinal é rearranjado de forma que os operadores que destroem o vácuo $|\rangle_0$ da teoria sejam posicionados mais à direita para que $\mathcal{P}|\rangle_0 = 0$. Para o nosso caso, $|\rangle_0 = |\text{mar de Fermi}\rangle$, e se, por exemplo, $k_1 < 0, k_2 > 0, k_3 > 0$, então $: c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger c_{k_3} : := -c_{k_2}^\dagger c_{k_1}^\dagger c_{k_3}$, onde para cada permutação de dois operadores fermiônicos (bosônicos) ganha-se um fator $-1 (+1)$.

$$d_{q\sigma}^{r\dagger} = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \rho_{r\sigma}(q) \quad (q > 0), \quad (3.12)$$

teremos

$$[d_{q\sigma}^r, d_{q'\sigma'}^{r'}] = [d_{q\sigma}^{r\dagger}, d_{q'\sigma'}^{r'\dagger}] = 0, \quad (3.13)$$

$$[d_{q\sigma}^r, d_{q'\sigma'}^{r'\dagger}] = \delta_{qq'} \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (3.14)$$

A interpretação física dada a esses operadores é a de que eles criam (ou destroem) um par partícula-buraco de momento $q > 0$. O momento q é sempre positivo porque as excitações são criadas sempre acima do mar de Dirac. O termo partícula-buraco refere-se a um elétron que é excitado do mar passando a ocupar um estado com $k > k_F$ e deixando um estado desocupado (buraco) com $k < k_F$.

As excitações bosônicas são vistas como os modos normais do campo bosônico

$$\phi_{R/L,\sigma}(x) = \sum_{q>0} \frac{i}{\sqrt{Lq}} e^{-q\alpha/2} [e^{\pm iqx} d_{q,\sigma}^{R/L} - e^{\mp iqx} d_{q,\sigma}^{R/L\dagger}], \quad (3.15)$$

com $\alpha \sim v_F/\Lambda_0$ sendo um *cutoff* de distâncias curtas. A expressão acima, juntamente com o operador densidade escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação (usando (3.11) e (3.12)), fornecem o seguinte resultado importante

$$\rho_{R/L,\sigma} =: \psi_{R/L,\sigma}^\dagger(x) \psi_{R/L,\sigma}(x) := \frac{N_{R/L,\sigma}}{L} \mp \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi_{R/L,\sigma}(x), \quad (3.16)$$

com $N_{R/L,\sigma}$ sendo o número de férmions acima do mar no ramo R/L . A Eq. (3.16) é uma das equações principais no processo de bosonizar as quantidades fermiônicas e também nos diz que o campo bosônico $\phi_{R/L,\sigma}(x)$ está associado às flutuações da densidade de carga dos férmions. A identidade final que permite-nos associar um sistema bosônico ao original fermiônico é a fórmula de Mattis-Mandelstam [104–106], a saber

$$\psi_{R/L,\sigma}(x) = \frac{F_{R/L,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{\pm i \frac{2\pi}{L} N_{R/L,\sigma} x} \exp[-i\sqrt{2\pi} \phi_{R/L,\sigma}(x)], \quad (3.17)$$

onde $F_{R/L,\sigma}$ são os fatores de Klein² responsáveis por manter as relações de comutação fermiônicas corretas. As expressões (3.16) e (3.17) permitem-nos fazer um mapeamento completo do sistema fermiônico para um bosônico. A existência de tais expressões está atrelada às excitações partícula-buraco, que se comportam como bósons, varrerem totalmente o espectro de baixas energias em um sistema fermiônico unidimensional.

Em termos dos campos bosônicos o hamiltoniano (3.8) torna-se

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{v_F}{2} \sum_{\sigma} \int dx \left\{ : (\partial_x \phi_{\sigma})^2 : + : (\partial_x \theta_{\sigma})^2 : \right\} + v_F \sum_{r,\sigma} \frac{\pi}{L} N_{r\sigma} (N_{r\sigma} + 1), \\ &= v_F \sum_{r,\sigma} \left[\sum_{q>0} q d_{q\sigma}^{r\dagger} d_{q\sigma}^r + \frac{\pi}{L} N_{r\sigma} (N_{r\sigma} + 1) \right], \end{aligned} \quad (3.18)$$

² F_{ν} conecta espaços de Hilbert com diferentes números de férmions. Algumas de suas propriedades são [96]: $F_{\nu} F_{\nu}^{\dagger} = 1$, $F_{\nu} |N\rangle_0 = |N-1\rangle_0$, $F_{\nu}^{\dagger} |N\rangle_0 = |N+1\rangle_0$, sendo $|N\rangle_0$ o estado fundamental de N férmions. Uma outra propriedade importante é que tanto $F_{\nu} |N\rangle$ quanto $|N\rangle$ contêm as mesmas excitações partícula-buraco, apenas criadas em diferentes estados fundamentais.

onde foram definidos os campos duais

$$\phi_\sigma = \frac{\phi_{L\sigma} - \phi_{R\sigma}}{\sqrt{2}}, \quad (3.19)$$

$$\theta_\sigma = \frac{\phi_{L\sigma} + \phi_{R\sigma}}{\sqrt{2}}, \quad (3.20)$$

os quais satisfazem as relações de comutação (no limite termodinâmico)

$$[\phi_\sigma(x), \partial_y \theta_{\sigma'}(y)] = i\delta_{\sigma\sigma'}\delta(x-y), \quad [\phi_\sigma(x), \theta_{\sigma'}(y)] = -\frac{i}{2}\delta_{\sigma\sigma'}\text{sgn}(x-y), \quad (3.21)$$

onde $\text{sgn}(x-y)$ é a função sinal. Podemos ver explicitamente pela Eq. (3.18) (a menos do último termo que pode ser ignorado no limite termodinâmico) que o espectro de energias de um gás de Fermi unidimensional, quando $T \ll T_F$, é equivalente ao espectro de energias de um conjunto de bósons livres [5].

3.2 Elétrons interagentes: líquido de Luttinger

Até então a bosonização dos operadores fermiônicos nos trouxe “apenas” informações de caráter interpretativo, mas nada do ponto de vista prático, pois já tínhamos solucionado o gás de Fermi. Para entender o poder do método vamos considerar agora um sistema de férmions interagentes. As interações possíveis entre os férmions no regime de baixas energias são interações intra e inter-ramos, ver a Fig. 10. O modelo relevante que descreve a física de baixas energias de um sistema na fase *metálica* considera $H_{int} = H_2 + H_4$, sendo [5]

$$H_2 = \sum_{\sigma, \sigma'} \int dx \left[g_{2||} \delta_{\sigma\sigma'} + g_{2\perp} \delta_{\sigma, -\sigma'} \right] : \rho_{R\sigma} \rho_{L\sigma'} :, \quad (3.22)$$

$$H_4 = \frac{1}{2} \sum_{\nu, \sigma, \sigma'} \int dx \left[g_{4||} \delta_{\sigma\sigma'} + g_{4\perp} \delta_{\sigma, -\sigma'} \right] : \rho_{\nu\sigma} \rho_{\nu\sigma'} :, \quad (3.23)$$

onde os g_i dão as intensidades das interações locais e $\nu = R/L$. Os processos listados acima representam interações do tipo “para frente”, pois são intra-ramo, e estão associados com uma pequena transferência de momento $q \sim 0$ entre as partículas. Processos inter-ramo com $q \sim 2k_F$, denotados por g_3 e g_1 , são responsáveis, em geral, por abrir um gap no espectro (voltaremos a esse ponto no contexto do modelo de Hubbard no próximo capítulo). O modelo de *líquido de Luttinger* (LL) consiste do hamiltoniano $H = H_0 + H_{int}$. A solução deste modelo não é simples como no caso do gás de Fermi devido à natureza quártica (quatro operadores fermiônicos) do termo de interação, mas, como veremos abaixo, a bosonização permite-nos diagonalizá-lo.

Antes de passar para as quantidades bosônicas é conveniente definir as seguintes combinações de operadores de carga (c) e spin (s):

$$\rho_\nu^{c/s} = \frac{\rho_{\nu\uparrow} \pm \rho_{\nu\downarrow}}{\sqrt{2}}, \quad (3.24)$$

$$g_{i,c/s} = g_{i||} \pm g_{i\perp}, \quad (3.25)$$

e definições similares para $N_\nu^{c/s}$ e $d_{q,c/s}^\nu$.³ Com essas definições, o termo interagente passa a ser escrito como

$$H_{int} = \int dx \sum_{\lambda=c,s} \left[\frac{g_{4\lambda}}{2} \sum_\nu : \rho_\nu^\lambda \rho_\nu^\lambda : + g_{2\lambda} : \rho_R^\lambda \rho_L^\lambda : \right], \quad (3.26)$$

de forma que o hamiltoniano se desacopla em um setor de carga (c) e outro de spin (s). Utilizando a Eq. (3.16) concluímos que os processos descritos por g_4 apenas renormalizam a velocidade de propagação dos bósons. Definindo também campos bosônicos de carga e spin da forma

$$\phi_{c/s} = \frac{\phi_\uparrow \pm \phi_\downarrow}{\sqrt{2}}, \quad (3.27)$$

$$\theta_{c/s} = \frac{\theta_\uparrow \pm \theta_\downarrow}{\sqrt{2}}, \quad (3.28)$$

os quais satisfazem as relações de comutação bosônicas

$$[\phi_\lambda(x), \partial_y \theta_{\lambda'}(y)] = i \delta_{\lambda\lambda'} \delta(x-y), \quad [\phi_\lambda(x), \theta_{\lambda'}(y)] = -\frac{i}{2} \delta_{\lambda\lambda'} \text{sgn}(x-y), \quad (3.29)$$

o hamiltoniano $H = H_0 + H_{int}$ torna-se:

$$\begin{aligned} H &= \sum_\lambda \frac{u_\lambda}{2} \int dx \left\{ K_\lambda : (\partial_x \theta_\lambda)^2 : + \frac{1}{K_\lambda} : (\partial_x \phi_\lambda)^2 : \right\} + H_N, \\ &= \sum_{\lambda=c,s} \sum_{m=1,2} \sum_{q>0} u_\lambda q b_{q\lambda}^{m\dagger} b_{q\lambda}^m + H_N. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Na equação acima introduzimos o novo grau de liberdade indexado por m que se relaciona com os ramos R/L ,⁴ e o último termo contém apenas o operador número,⁵ o qual pode ser ignorado no limite termodinâmico.

As constantes K_λ são chamadas de parâmetros de Luttinger,

$$K_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi v_F + g_{4\lambda} - g_{2\lambda}}{2\pi v_F + g_{4\lambda} + g_{2\lambda}}}, \quad (3.31)$$

e as novas velocidades de propagação dos bósons são

$$u_\lambda = v_F \sqrt{\left(1 + \frac{g_{4\lambda}}{2\pi v_F}\right)^2 - \left(\frac{g_{2\lambda}}{2\pi v_F}\right)^2}. \quad (3.32)$$

Para um sistema SU(2) simétrico, isto é, que não possui uma ordem de spin, temos $g_{i,s} = 0 \Rightarrow K_s = 1$. No setor de carga, quando os férmions interagem de forma repulsiva

³ A saber: $N_\nu^{c/s} = (N_{\nu\uparrow} \pm N_{\nu\downarrow})/\sqrt{2}$ e $d_{q,c/s}^\nu = (d_{q\uparrow}^\nu \pm d_{q\downarrow}^\nu)/\sqrt{2}$.

⁴ Depois de aplicar uma transformação de Bogoliubov surgem os novos bósons: $b_{q\lambda}^1 = \cosh(\gamma_\lambda) d_{q\lambda}^R + \sinh(\gamma_\lambda) d_{q\lambda}^{L\dagger}$ e $b_{q\lambda}^2 = \cosh(\gamma_\lambda) d_{q\lambda}^L + \sinh(\gamma_\lambda) d_{q\lambda}^{R\dagger}$, onde $\tanh(2\gamma_\lambda) = \frac{g_{2\lambda}}{2\pi v_F + g_{4\lambda}}$ [96].

⁵ Definindo $N_\lambda = N_{R\lambda} + N_{L\lambda}$, $J_\lambda = N_{R\lambda} - N_{L\lambda}$, $v_{N\lambda} = u_\lambda/K_\lambda$ e $v_{J\lambda} = u_\lambda K_\lambda$, temos $H_N = \frac{\pi}{2L} \sum_\lambda u_\lambda (v_{N\lambda} N_\lambda^2 + v_{J\lambda} J_\lambda^2)$. No limite termodinâmico este termo pode ser desprezado.

$g_{i,c} > 0 \Rightarrow K_c < 1$; para interações atrativas $g_{i,c} < 0 \Rightarrow K_c > 1$. Por fim, para um sistema livre $g_{i,\lambda} = 0 \Rightarrow K_\lambda = 1$ e $u_\lambda = v_F$. Assim, controlando K_c é possível transitar entre as regiões atrativa, repulsiva e não interagente. Como já mencionado, a dinâmica de um sistema de elétrons interagentes em uma dimensão é desacoplada em dois setores *independentes*, um contendo as excitações de carga, que se propagam com velocidade u_c , e outro as excitações de spin, que se propagam com velocidade $u_s \neq u_c$. Esse fenômeno ficou conhecido como separação spin-carga. Nos trabalhos [6, 107] os pesquisadores conseguiram medir claras evidências dessa separação entre os graus de liberdade, como já discutido por nós no capítulo 1.

A teoria descrita pelo hamiltoniano (3.30) possui uma simetria de dualidade (equivalência) com respeito às formulações em termos dos pares $[\phi_\lambda, \Pi_\lambda^\phi \equiv \partial_x \theta_\lambda]$ e $[\theta_\lambda, \Pi_\lambda^\theta \equiv \partial_x \phi_\lambda]$. Isto implica que qualquer correlator (valor esperado de um conjunto de campos/operadores calculados em diferentes pontos) $C[\theta_\lambda]$ envolvendo apenas o campo θ_λ pode ser obtido do mesmo correlator para campo ϕ_λ invertendo os parâmetros de Luttinger

$$K_\lambda \rightarrow \frac{1}{K_\lambda}, \quad (3.33)$$

isto é, $C[\theta_\lambda] = C[\phi_\lambda]|_{K_\lambda \rightarrow K_\lambda^{-1}}$ e vice-versa. Uma outra implicação dessa simetria está no cálculo de correlatores no ponto $x = 0$ de um sistema que é definido com uma condição de contorno aberta na origem $\psi_\sigma(0) = 0$ [108]. A expressão bosonizada do campo fermiônico, Eq. (3.17), implica então que:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \psi_\sigma(x) = 0, \quad \Rightarrow \quad e^{i2\sqrt{\pi}\phi_\sigma(0)} = -1, \quad (3.34)$$

logo $\phi_\sigma(0) = (n + 1/2)\sqrt{\pi}$, com $n \in \mathbb{Z}$, enquanto $\theta_\sigma(0)$ fica livre. Assim, apenas os campos $\theta_\sigma(0)$ possuem dinâmica em $x = 0$ [5]. Isto nos mostra que se temos um LL definido apenas no semi-eixo $x > 0$, os correlatores bosônicos em $x = 0$ desse sistema são iguais àqueles $C[\theta_\lambda(0)]$ do sistema *sem* a condição contorno aberta na origem, isto é, definido em todo eixo real. Usaremos este fato ao final deste capítulo como também veremos explicitamente a correspondência dos correlatores na seção 4.2 do capítulo 4.

O modelo de líquido de Luttinger em (3.30) possui a mesma importância para um sistema unidimensional que a teoria de líquido de Fermi de Landau [9] possui para sistemas em altas dimensões ($D > 1$). Isto porque o modelo de LL é o ponto fixo⁶ de baixas energias para teorias (ou modelos) que descrevam sistemas unidimensionais *sem gap*, isto é, metálicos. Em outras palavras, modelos unidimensionais com espectro *sem gap* têm sua física capturada pelo hamiltoniano (3.30) em baixas energias.⁷ Esta afirmação

⁶ Brevemente, no espaço de parâmetros $\vec{\lambda}$ que um modelo, com hamiltoniano $H(\vec{\lambda})$, está definido, um ponto fixo estável de baixas energias é um ponto $\vec{\lambda}^*$ que no limite assintótico de baixas energias descreve o comportamento do sistema, isto é, $H_{\text{efetivo}} = H(\vec{\lambda}^*)$. Para mais detalhes confira a seção 3.3.

⁷ O modelo de Ising em um campo transversal em $D = 1$ é uma exceção. Neste caso o modelo não é descrito em termos de bósons livres mas sim em termos de férmions de Majorana livres [23, 109].

ficou conhecida como conjectura de Haldane [110, 111] e é verificada para o modelo de Hubbard, longe do semi-preenchimento, e para a cadeia XXZ de Heisenberg quando a anisotropia das interações ao longo da direção $\hat{z}$, δ , está no intervalo $-1 < \delta \leq 1$, isto é, na fase desordenada.

3.3 Acoplamento com impureza

O objetivo desta seção é revisar alguns resultados da física resultante do acoplamento de uma impureza, magnética ou não, a um sistema de elétrons em uma dimensão [65–67, 108, 112–114]. Para tal fim usaremos conceitos do Grupo de Renormalização (RG) [31] [100] [101], portanto, uma breve explanação sobre o tema também será feita.

3.3.1 Impureza não-magnética

Como primeiro caso consideraremos uma impureza não-magnética acoplada a um LL - também conhecido como problema de Kane-Fisher [112, 113]. Neste caso a impureza vai ter simplesmente a função de uma barreira de potencial $V(x)$ para os férmions. Para uma barreira de curto alcance, $V(x) = V\delta(x)$, o hamiltoniano do sistema fica

$$H = H_{LL} + H_I, \quad (3.35)$$

em que denotamos o hamiltoniano do líquido de Luttinger por H_{LL} , e

$$\begin{aligned} H_I &= \sum_{\sigma} \int dx V(x) : \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x) :, \\ &\approx V_F \partial_x \phi_c(0) + \frac{V_B}{\alpha} \cos[\sqrt{2\pi} \phi_c(0)] \cos[\sqrt{2\pi} \phi_s(0)], \end{aligned} \quad (3.36)$$

é o hamiltoniano descrevendo o acoplamento com a impureza [112]. No processo de obter a equação acima foram usadas as Eq.'s (3.16) e (3.17) para bosonizar os operadores e os fatores numéricos foram absorvidos nas amplitudes $V_{F,B}$. Os fatores de Klein foram esquecidos pois não afetarão a análise subsequente.⁷ No hamiltoniano (3.36) foi necessário distinguir os dois processos que surgem na aproximação de baixas energias: espalhamento para frente (V_F), em que $q \sim 0$, e espalhamento para trás (V_B) com $q \sim 2k_F$. O primeiro termo pode ser incorporado diretamente ao hamiltoniano de Luttinger por meio da transformação $\phi(x) \rightarrow \phi(x) + \text{cte}$, não produzindo assim efeitos significativos. O segundo termo produz consequências não-triviais e pode ser analisado com o auxílio da teoria do Grupo de Renormalização (RG). A seguir serão expostas ideias que fornecem um panorama geral do que é o RG e de como ler suas equações, de uma maneira muito pragmática, tendo em mente nossa análise posterior. Para um mergulho mais profundo no tema recomendamos conferir as Ref.'s [101, 115].

⁷ Em alguns casos ignorá-los pode levar a um erro de sinal, ver o apêndice D.

3.3.1.1 Um pouco de grupo de renormalização (RG)

Suponhamos a existência de um sistema físico descrito pelo hamiltoniano $\mathcal{H}(\lambda_0)$, sendo $\lambda_0 \equiv \lambda(\Lambda_0)$ um parâmetro sem dimensão (ou um conjunto deles), representando a intensidade de um espalhamento por exemplo, e $\Lambda_0 \gg 1$ um *cutoff* arbitrário que delimita a região de energia do problema; ver a Fig. 10. Uma pergunta que surge, especialmente no contexto de física da matéria condensada, é: qual o comportamento efetivo do sistema no limite de baixas energias? Dada a nossa suposição inicial, podemos reformular esta pergunta como segue: como comporta-se o parâmetro $\lambda(\Lambda)$ à medida que o *cutoff* é continuamente reduzido? A teoria moderna do RG busca responder tal questão.

Existem algumas maneiras de determinar o acoplamento efetivo $\lambda(\Lambda)$ dada a condição inicial $\lambda_0 \equiv \lambda(\Lambda_0)$,⁸ mas por instante consideraremos que temos em mãos $\lambda(\Lambda)$. Três situações podem ocorrer no processo dinâmico de redução de Λ , a saber: $\lambda(\Lambda)$ cresce e se afasta do valor inicial λ_0 , $\lambda(\Lambda)$ diminui e se afasta de λ_0 , ou $\lambda(\Lambda)$ não se modifica. Dizemos que em cada uma dessas situações o acoplamento efetivo λ é *relevante*, *irrelevante*, ou *marginal*, respectivamente. Nas duas primeiras situações as diferentes trajetórias no espaço de parâmetros geradas pela redução de Λ conduzem o sistema a pontos λ^* , nos quais o sistema permanece, isto é, a redução de Λ não produz mais efeitos. Chamamos tais pontos de *pontos fixos* (FP) da teoria. Como já apontado por nós na seção anterior, a teoria de LL é o FP de baixas energias para modelos unidimensionais sem *gap*. Um ponto importante sobre as equações de fluxo do RG, isto é, $\lambda = \lambda(\Lambda)$, é que elas por si só não resolvem um dado problema físico, no sentido de calcular observáveis. O que essas equações fazem é relacionar problemas em diferentes escalas, em que espera-se que o problema na nova escala seja mais simples de tratar [5].

Vejamos agora um exemplo concreto. Nas vizinhanças de um FP podemos escrever um hamiltoniano efetivo da forma

$$H_{\text{eff}} = H_c + \delta H, \quad (3.37)$$

onde H_c é o hamiltoniano no FP e δH representa uma perturbação a este FP. Na situação de $\delta H = 0$, as transformações do RG (redução de Λ) não produzem fluxos, pois, por hipótese, o sistema está em um FP. Consideremos agora uma perturbação genérica da forma $\delta H = \lambda_0 O(x=0)$, sendo λ_0 a intensidade (sem dimensão) da perturbação e $O(x)$ um operador de nosso interesse (por exemplo o segundo termo da Eq. (3.36)); foi tomado $x=0$ pois estamos interessados em problemas de borda. Assim como antes, é suposto que λ_0 representa o acoplamento numa escala de energia Λ_0 . Um resultado importante [100,102] é que para $\lambda \ll 1$

$$\frac{d\lambda}{dl} = (1 - \Delta)\lambda + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (3.38)$$

⁸ Ver o apêndice B para uma derivação baseada no operador de evolução temporal para o problema Kondo.

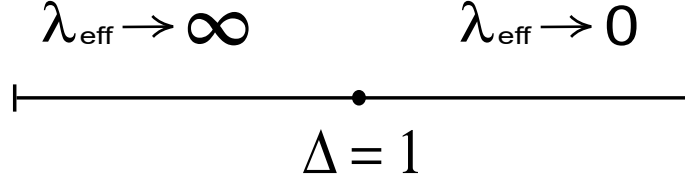


Figura 11 – Renormalização do parâmetro λ descrito pela Eq. (3.38).

onde $dl \equiv -d\Lambda/\Lambda$ controla a redução do *cutoff*. O lado direito da equação acima é, muitas vezes, simplesmente referenciado como $\beta(\lambda)$, isto é, a função *beta* [9].

Um fluxo em direção ao setor de baixas energias é obtido fazendo $\Lambda \rightarrow 0$ ($l \rightarrow \infty$). O parâmetro Δ é a chamada dimensão de escala do operador O , definida como

$$\langle O(\tau)O^\dagger(0) \rangle \sim \frac{1}{\tau^{2\Delta}}, \quad (3.39)$$

sendo τ o tempo real e $|\rangle$ o estado fundamental de H_c . Resolvendo a Eq. (3.38) em ordem linear em λ obtemos que $\lambda(l) = \lambda_0 e^{(1-\Delta)l}$. Vemos assim que assintoticamente ($l \rightarrow \infty$) o acoplamento efetivo $\lambda_{\text{eff}} \equiv \lambda(l \rightarrow \infty)$ é

$$\lambda_{\text{eff}} \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{se } \Delta > 1, \\ \infty & \text{se } \Delta < 1, \end{cases} \quad (3.40)$$

representando uma perturbação irrelevante ($\Delta > 1$) ou relevante ($\Delta < 1$). Portanto, assintoticamente quando $\Delta > 1$ o sistema ainda é descrito por H_c , mas quando $\Delta < 1$ o sistema flui para longe do FP inicial, na direção de outro FP. A Fig. 11 representa esquematicamente estas duas situações. Por fim, quando $\Delta = 1$ o operador O é marginal. Neste caso para analisar os efeitos da perturbação é preciso ir para próxima ordem λ^2 . O coeficiente que multiplica o termo $\mathcal{O}(\lambda^2)$, e que, portanto, determina se o operador cresce ou não durante a trajetória, pode ser obtido da função de correlação de três pontos do operador O [100, 102].

Voltemos agora para o nosso caso de interesse, hamiltoniano da Eq. (3.36). Neste caso o parâmetro que gostaríamos de analisar de acordo com a teoria do RG é a amplitude $V_B \ll 1$ do espalhamento para trás. O operador que perturba o FP de LL (segundo termo da Eq. (3.36)) pode ser reescrito na forma

$$\delta H = \frac{V_B}{4} \sum_{n,n'=\pm} e^{i\beta n \phi_c(0)} e^{i\beta n' \phi_s(0)}, \quad (3.41)$$

onde $\beta = \sqrt{2\pi}$. Precisamos agora determinar a dimensão de escala deste operador. Seguindo o que está desenvolvido no apêndice A, o operador acima é igual ao produto $O_{n0c}O_{n'0s}$, conforme a Eq. (A.1), e, devido à separação spin-carga, podemos usar o resultado geral (A.9). Com isso, é imediato obter que $\Delta_{V_B} = \frac{\beta^2}{4\pi}(K_c + K_s)$. Portanto, no ponto SU(2)-simétrico temos

$$\frac{dV_B}{dl} = \frac{1}{2}(1 - K_c)V_B. \quad (3.42)$$

Para interações atrativas, $K_c > 1$, a amplitude de espalhamento se torna cada vez mais irrelevante ao passo que Λ vai diminuindo. Sendo assim, um LL com interações atrativas não é modificado, no limite assintótico de baixas energias, pela inclusão de uma barreira de potencial local como a dada em (3.36) e a taxa de transmissão pela barreira é 1. Portanto, o sistema possui o mesmo FP, que é o FP de LL. Na situação oposta, interações repulsivas, $K_c < 1$, a amplitude de espalhamento cresce sob o fluxo do RG, tornando-se cada vez mais relevante para a física de baixas energias, até alcançar o limite não-perturbativo $V_B \sim 1$, onde o resultado (3.42) deixa de ser válido. No ponto não interagente, $K_c = 1$, o potencial V_B é marginal. Como já discutido na seção anterior, nesta situação precisamos investigar o termo de ordem V_B^2 . É conhecido que este próximo termo é nulo, como também todos os outros termos da série perturbativa [23]. Assim, o ponto $K_c = 1$ é um ponto estritamente marginal, onde V_B assume um valor finito.

No regime de acoplamento forte a amplitude $V_B \rightarrow \infty$. Fisicamente espera-se que nesta situação o sistema seja quebrado na origem, de forma que passamos a ter um novo FP, constituído de dois LL, um para $x < 0$ e outro para $x > 0$, totalmente desacoplados [23, 114], visto a barreira infinita. Para saber se de fato isso ocorre, devemos analisar a estabilidade desse novo FP com respeito a possíveis perturbações. O operador que perturba o sistema nesse limite é um fraco potencial de tunelamento entre os LL [23]:

$$H_{\text{tun}} = -g \sum_{\sigma} \psi_{2\sigma}^{\dagger}(0^+) \psi_{1\sigma}(0^-) + \text{H.c.}, \quad (3.43)$$

onde $\psi_{2\sigma}$ ($\psi_{1\sigma}$) é o operador fermiônico para a região $x > 0$ ($x < 0$) e $g \ll 1$ a amplitude de tunelamento. O operador fermiônico deve agora satisfazer uma condição de contorno aberta na origem, isto é, $\psi_{\ell\sigma}(0) = 0$. Dada a nossa discussão em torno da Eq. (3.34), sabemos que o campo bosônico que descreve a dinâmica dos LL em $x = 0$ é $\theta_{\sigma}(0)$, visto que $\phi_{\sigma}(0)$ “congela” [5]. Dessa forma podemos bosonizar os operadores de campo segundo: $\psi_{\ell\sigma}(0) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i\sqrt{\pi}\theta_{\ell\sigma}(0)}$.⁹ Assim, quando bosonizada, a Eq. (3.43) torna-se

$$H_{\text{tun}} = -t \cos \left[\sqrt{\pi} \theta_c^-(0) \right] \cos \left[\sqrt{\pi} \theta_s^-(0) \right], \quad (3.44)$$

onde $t = 2g/\pi\alpha$ e definimos as combinações $\theta_{\lambda}^{\pm} = (\theta_{1\lambda} \pm \phi_{2\lambda})\sqrt{2}$. A dimensão de escala do operador acima pode ser obtida colocando-o na forma (A.1) e usando o resultado geral em (A.9); fazendo isso é imediato obter que $\Delta = \frac{1}{2}(K_c^{-1} + K_s^{-1})$.¹⁰ Portanto, a equação para a renormalização do parâmetro t fica

$$\frac{dt}{dl} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{K_c} \right) t, \quad (3.45)$$

onde novamente foi usado $K_s = 1$. A equação acima nos mostra que, para o nosso caso de interesse, $K_c < 1$, o tunelamento entre os fios se torna cada vez mais irrelevante à medida

⁹ Por ora podemos usar essa expressão em $x = 0$. No capítulo 4 trataremos com mais detalhes esse tema.

¹⁰ Notemos que esta dimensão de escala pode ser obtida da dimensão de escala do operador (3.41) fazendo $K_{\lambda} \rightarrow K_{\lambda}^{-1}$, como consequência da simetria de dualidade discutida anteriormente.

que $\Lambda \rightarrow 0$, de forma que assintoticamente teremos $t_{\text{eff}} \rightarrow 0$. Isto implica que o FP de dois LL desacoplados é estável com respeito à perturbação (3.43). Assim, a visão física de que quando $V_B \rightarrow \infty$ o LL é quebrado em dois LL totalmente desacoplados é verdadeira, uma vez que acabamos de mostrar que assintoticamente não há tunelamento entre os LL.

Em resumo, os efeitos do acoplamento entre uma impureza não-magnética e um LL, descrito essencialmente pelo segundo termo de (3.36), dependem diretamente do valor de K_c (assumindo $K_s = 1$). Tendo em mente sempre uma física de baixas energias, para $K_c > 1$ a barreira de potencial torna-se transparente, enquanto que para $K_c < 1$ a barreira torna-se impenetrável, fazendo com que o LL seja quebrado em dois [23, 112, 113].

3.3.2 Impureza magnética: efeito Kondo em um LL

Consideraremos agora uma situação em que uma impureza magnética de spin 1/2 é acoplada à origem de um LL. O acoplamento impureza-LL é dado pelo hamiltoniano Kondo [65, 66, 114]

$$H_K = J_K \mathbf{S}_I \cdot \psi^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi(0), \quad (3.46)$$

onde $\mathbf{S}_I$ é o operador de spin da impureza e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli. Usando a expansão de baixas energias da Eq. (3.7) ficamos com

$$\begin{aligned} H_K = & \frac{J_F}{2} \mathbf{S}_I \cdot \sum_{\alpha\beta} \left[\psi_{R\alpha}^\dagger(0) \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{R\beta}(0) + \psi_{L\alpha}^\dagger(0) \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{L\beta}(0) \right] \\ & + \frac{J_B}{2} \mathbf{S}_I \cdot \sum_{\alpha\beta} \left[\psi_{R\alpha}^\dagger(0) \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{L\beta}(0) + \psi_{L\alpha}^\dagger(0) \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{R\beta}(0) \right], \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde J_F representa o espalhamento para frente e J_B o espalhamento para trás. As equações do RG para esses acoplamentos em segunda ordem ficam¹¹ [66, 68]

$$\frac{dJ_F}{dl} = \frac{1}{2\pi v_F} (J_F^2 + J_B^2), \quad (3.48)$$

$$\frac{dJ_B}{dl} = \frac{1}{2} (1 - K_c) J_B + \frac{1}{\pi v_F} J_F J_B. \quad (3.49)$$

As equações do RG acima nos dizem que os acoplamentos J_F e J_B fluem de maneira distinta, porém um fluxo interfere no outro. Antes de analisarmos o caso interagente, note que para elétrons livres, $K_c = 1$, as equações acima são equivalentes a uma única equação:

$$\frac{d\lambda_K}{dl} = \lambda_K^2, \quad (3.50)$$

sendo $\lambda_K = J_K/(\pi v_F)$ o acoplamento Kondo sem dimensão. Resolvendo esta equação concluímos que o acoplamento Kondo renormaliza da forma:

$$\lambda_K(\Lambda) = \frac{\lambda_0}{1 - \lambda_0 \ln \Lambda_0 / \Lambda}, \quad (3.51)$$

¹¹ Uma derivação para o caso de elétrons livres é dada no apêndice B.

onde $\lambda_0 \equiv \lambda_K(\Lambda_0) \ll 1$ e usamos que $l = -\ln \Lambda/\Lambda_0$. O fluxo em direção ao setor de baixas energias, $\Lambda_0/\Lambda \rightarrow \infty$, mostra que $\lambda_K(\Lambda) \rightarrow \infty$, como discutido no capítulo anterior 2, implicando na formação do estado singlete entre a impureza e um elétron que está na origem do LL [114].

Quando $K_c \neq 1$ devemos olhar para as Eq.'s (3.48) e (3.49). Vemos que o comportamento de J_B vai depender do valor K_c , enquanto J_F sempre cresce. Para $K_c < 1$, J_B apresenta um comportamento monotônico crescente, enquanto para $K_c > 1$ este acoplamento decresce inicialmente, mas devido ao concomitante crescimento de J_F , ambos os acoplamentos fluem para o ponto fixo de acoplamento forte $(J_F, J_B) = (\infty, \infty)$ [65, 66, 68, 114]. Isto nos diz que o efeito Kondo é robusto com respeito às interações elétron-elétron no sistema. Vale ressaltar que o efeito Kondo de 2 canais também podem ocorrer aqui, pois para $K_c \gg 1$ o sistema flui na direção do ponto fixo $(J_F, J_B) = (\infty, 0)$ [114], mostrando, assim, que apenas o canal F acopla de maneira relevante com a impureza em baixas energias.

4 Resultados: Dinâmica da relaxação de um spin acoplado a fios metálicos interagentes

Neste capítulo temos por objetivo estudar as propriedades dinâmicas de uma impureza magnética que está em contato com um ou dois fios metálicos descritos pela teoria de líquido de Luttinger. A maneira que usaremos para investigar a dinâmica desse sistema é considerar que o acoplamento da impureza com o(s) fio(s) é descrito por um protocolo de *quench* [21, 22], isto é, que o sistema é preparado no estado fundamental de um hamiltoniano inicial e repentinamente fica sujeito a evoluir com respeito a outro hamiltoniano. O observável calculado a fim de explorar a dinâmica será a magnetização da impureza em função do tempo. Ao fim também será feita a comparação dos resultados analíticos aqui obtidos com resultados numéricos obtidos via o método do Grupo de Renormalização da Matriz Densidade Dependente do Tempo (tDMRG).

Os resultados expostos neste capítulo foram publicados na revista *Physical Review B* com o título “Quench dynamics and relaxation of a spin coupled to interacting leads” [24]. Este trabalho contou com a colaboração da professora Helena Bragança do Instituto de Física da Universidade de Brasília, ex-aluna do grupo e que foi a responsável pelos resultados de tDMRG, e do professor Rodrigo G. Pereira do Instituto Internacional de Física da UFRN.

4.1 Impureza acoplada a duas cadeias (geometria *embedding*)

Como foi adiantado no capítulo de introdução 2, inicialmente consideraremos um sistema formado por duas cadeias de elétrons interagentes desacopladas e uma impureza magnética embebida entre elas, ver figura 12. Com a finalidade de estudar a evolução temporal dos observáveis da impureza escrevemos o hamiltoniano dependente do tempo do sistema como sendo

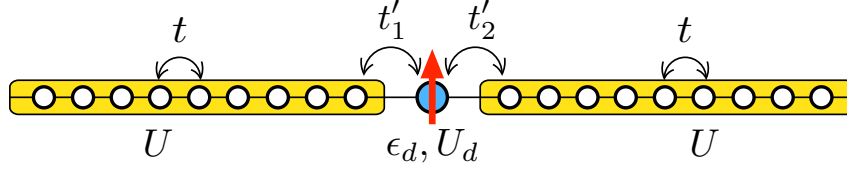
$$H(\tau) = H_0 + H_{\text{imp}} + \theta(\tau)H_{\text{hib}}, \quad (4.1)$$

onde $\theta(\tau)$ é a função de Heaviside¹. O primeiro termo refere-se aos elétrons nas cadeias, $H_0 = \sum_{\ell=1}^2 H_{\ell}$, os quais serão descritos pelo modelo de Hubbard

$$H_1 = -t \sum_{i=-L_1}^{-2} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_{i=-L_1}^{-1} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (4.2)$$

$$H_2 = -t \sum_{i=1}^{L_2-1} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_{i=1}^{L_2} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (4.3)$$

¹ $\theta(\tau) = 0$ para $\tau < 0$ e $\theta(\tau) = 1$ caso contrário.


 Figura 12 – Geometria considerada no protocolo de *quench* descrito pela Eq. (4.1).

sendo $c_{i\sigma}$ o operador que aniquila um elétron no sítio i com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ o operador número, t o *hopping* nas cadeias e $U > 0$ a intensidade da interação para elétrons ocupando o mesmo sítio da cadeia. Na cadeia i se tem N_i elétrons e L_i sítios. Buscando descrever cadeias metálicas⁸ fixaremos o preenchimento de ambas as cadeias em $1/4$, o que significa que $N_1/L_1 = N_2/L_2 = 1/2 \Rightarrow k_F = \pi/4$ (o espaçamento da rede foi tomado como 1).

O segundo termo em (4.1) é o hamiltoniano da impureza, situada no sítio 0,

$$H_{\text{imp}} = \epsilon_d n_0 + U_d n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}, \quad (4.4)$$

onde $n_0 = n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow}$, ϵ_d é o nível energético interno da impureza (considerando o caso de um único orbital) e U_d a interação no sítio da impureza. O último termo em (4.1) é a hibridização (ou acoplamento) entre a impureza e as cadeias

$$H_{\text{hib}} = -t'_1 \sum_{\sigma} c_{-1\sigma}^\dagger c_{0\sigma} - t'_2 \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + \text{H.c.} \quad (4.5)$$

Na equação acima está sendo suposto (logo o porquê ficará claro) que os elétrons experimentam diferentes *hoppings* no tunelamento para as cadeias.

Na situação que desejamos investigar a impureza tem um caráter magnético, $\langle \mathbf{S}_0 \rangle \neq 0$, onde $\mathbf{S}_0$ é o operador de spin da impureza e a média é tomada no estado fundamental do hamiltoniano (4.1) quando $\tau < 0$. Para garantir esta condição, a ocupação única (um elétron) na impureza deve ser favorecida energeticamente em comparação com a impureza desocupada e duplamente ocupada, logo $\epsilon_d < 0$ e $U_d > 0$. Apesar de fixada esta condição, no momento em que o acoplamento com as cadeias é ligado os elétrons podem tunelar para impureza e modificar sua ocupação média. A fim de ter sempre um momento magnético não nulo na impureza, projetamos o hamiltoniano (4.1) no subespaço de $n_0 = 1$ e tomamos $t'_{1,2} \ll -\epsilon_d, U_d$ [18] (similarmente como está descrito na seção 2.1.1 do capítulo anterior). O sistema é mapeado no hamiltoniano efetivo

$$H_{\text{eff}}(\tau) = H_0 + \theta(\tau) H_K, \quad (4.6)$$

⁸ O modelo de Hubbard unidimensional possui uma fase isolante de Mott para qualquer valor de $U > 0$ quando o preenchimento é igual a $1/2$ [5].

sendo [51]

$$H_K = J_K \mathbf{S}_0 \cdot (\kappa_1 c_{-1}^\dagger + \kappa_2 c_1^\dagger) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} (\kappa_1 c_{-1} + \kappa_2 c_1) + W(\kappa_1 c_{-1}^\dagger + \kappa_2 c_1^\dagger)(\kappa_1 c_{-1} + \kappa_2 c_1). \quad (4.7)$$

Aqui $\mathbf{S}_0 = c_0^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_0$ e para simplificar a notação escrevemos $c_i^\dagger = (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)$. O primeiro termo de (4.7) fornece o acoplamento Kondo entre a impureza magnética e os elétrons de condução, com

$$J_K = 2[(t'_1)^2 + (t'_2)^2] \left(\frac{1}{-\epsilon_d} + \frac{1}{\epsilon_d + U_d} \right). \quad (4.8)$$

O segundo termo de (4.7) descreve o espalhamento dos elétrons pela impureza sem flipar spin, com amplitude

$$W = \frac{(t'_1)^2 + (t'_2)^2}{2} \left(\frac{1}{-\epsilon_d} - \frac{1}{\epsilon_d + U_d} \right). \quad (4.9)$$

Os parâmetros $\kappa_{1,2}$ dão a anisotropia dos *hoppings* da impureza para as cadeias,

$$\kappa_1 = \frac{t'_1}{\sqrt{(t'_1)^2 + (t'_2)^2}}, \quad \kappa_2 = \frac{t'_2}{\sqrt{(t'_1)^2 + (t'_2)^2}}. \quad (4.10)$$

Para tratar o hamiltoniano (4.6) do ponto de vista de uma teoria de campos devemos tomar o limite de cadeias semi-infinitas, $L_{1,2} \equiv L \rightarrow \infty$. Como no capítulo anterior, os operadores na rede são promovidos a operadores de campos, $\psi_{\ell\sigma}(x)$, que em baixas energias assumem a expansão

$$c_{j\sigma} \sim \psi_{\ell,\sigma}(x) = e^{ik_F x} \psi_{R,\ell,\sigma}(x) + e^{-ik_F x} \psi_{L,\ell,\sigma}(x). \quad (4.11)$$

O índice ℓ refere-se aos dois fios, $\psi_{1\sigma}(x)$ quando $x < 0$ e $\psi_{2\sigma}(x)$ quando $x > 0$. A condição de contorno aberta na origem, $\psi_{1\sigma}(0^-) = \psi_{2\sigma}(0^+) = 0$, vincula os campos quirais de cada fio a satisfazer [108]

$$\psi_{L,\ell,\sigma}(x) = -\psi_{R,\ell,\sigma}(-x). \quad (4.12)$$

Esta condição permite-nos trabalhar com um único campo quiral redefinido em todo eixo real. Para o fio 2 ($x > 0$) o campo $\psi_{L,\sigma}$ é uma continuação analítica do campo $\psi_{R,\sigma}$ para o semieixo negativo. Isto porque o campo $\psi_{R,\sigma}$ é o campo livre (que não enxerga a condição de contorno) para esse fio. Com um raciocínio idêntico, o fio 1 ($x < 0$) passa a ser descrito apenas por $\psi_{L,\sigma}(x)$ em todo domínio real. Logo, o conjunto de campos para os dois fios é por conveniência escrito como

$$\psi_1(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_{L,1,\uparrow}(-x) \\ \psi_{L,1,\downarrow}(-x) \end{pmatrix}, \quad \psi_2(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_{R,2,\uparrow}(x) \\ \psi_{R,2,\downarrow}(x) \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

O hamiltoniano das cadeias *metálicas* com condições de contorno abertas na origem no limite contínuo torna-se [108]

$$H_\ell = \int dx \left\{ v_F \psi_\ell^\dagger(x) (-i\partial_x) \psi_\ell(x) + U \sum_\sigma \rho_{\ell\sigma}(x) [\rho_{\ell,-\sigma}(x) + \rho_{\ell,-\sigma}(-x)] \right. \\ \left. + U \sum_\sigma : \psi_{\ell,\sigma}^\dagger(x) \psi_{\ell,-\sigma}^\dagger(-x) \psi_{\ell,\sigma}(-x) \psi_{\ell,-\sigma}(x) : \right\}, \quad (4.14)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi e $\rho_{\ell\sigma}(x) = : \psi_{\ell\sigma}^\dagger(x) \psi_{\ell\sigma}(x) :$ o operador densidade. Para obter a equação acima também usamos a Eq. (4.12). Na equação acima nós já desprezamos termos que oscilam espacialmente quando $k_F \neq \pi/2$ (termos *Umklapp*). O sinal negativo no argumento de alguns campos é consequência da representação em termos de um único campo quiral.

Usando a bosonização para condições de contorno abertas [5, 23], o hamiltoniano (4.14) pode ser escrito em termos dos campos bosônicos de carga e spin. O campo fermiônico no fio ℓ tem representação

$$\psi_\ell(x) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \begin{pmatrix} F_{\ell\uparrow} e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{\ell,c}(x)+\phi_{\ell,s}(x)]} \\ F_{\ell\downarrow} e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{\ell,c}(x)-\phi_{\ell,s}(x)]} \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

onde a fase com o operador número foi omitida dado que avaliaremos os campos em $x = 0$. Os campos bosônicos $\phi_{\ell,\lambda}(x)$ neste caso são escritos da forma [108]

$$\phi_{\ell,\lambda}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{q>0} \frac{e^{-\frac{\alpha}{2}q}}{\sqrt{q}} \left[z_{\lambda,q}(x) \eta_{\ell,\lambda,q} + z_{\lambda,q}^*(x) \eta_{\ell,\lambda,q}^\dagger \right], \quad (4.16)$$

onde $\eta_{\ell,\lambda,q}$ aniquila um bóson no fio ℓ , setor $\lambda = c/s$ e com momento q , e $z_{\lambda,q}(x) = (1/\sqrt{K_\lambda}) \cos(qx) + i\sqrt{K_\lambda} \sin(qx)$ expressa a dependência dos campos com os parâmetros de Luttinger $K_{c/s}$. A simetria SU(2) apresentada pelas cadeias de Hubbard fixa $K_s = 1$. Também para o modelo de Hubbard com $U \geq 0$, temos $1/2 < K_c \leq 1$, com $K_c = 1$ no caso não-interagente. No limite $U \ll t \Rightarrow K_c \approx 1 - \frac{U}{\pi v_F}$. A dependência exata de $K_c(U)$ pode ser obtida via *ansatz* de Bethe para o modelo de Hubbard [116, 117].

Quando bosonizada a Eq. (4.14) torna-se

$$H_\ell = H_\ell^{\text{LL}} + H_\ell^{\text{bs}}, \quad (4.17)$$

onde o primeiro termo é o hamiltoniano para o líquido de Luttinger:

$$H_\ell^{\text{LL}} = \sum_{\lambda=c,s} \sum_{q>0} u_{\lambda q} \eta_{\ell,\lambda,q}^\dagger \eta_{\ell,\lambda,q}, \quad (4.18)$$

com u_λ sendo as velocidades dos modos bosônicos de carga (c) e spin (s). O segundo termo na Eq. (4.17) é conhecido como termo de *backscattering* e é proveniente da segunda linha da Eq. (4.14). Este termo envolve apenas o setor de spin², não é diagonal quando escrito em função dos modos normais dos campos $\phi_{c/s}(x)$ e é conhecido [108] por abrir um *gap* no setor de spin quando $K_s < 1$. No nosso caso, isto é, um sistema SU(2)-simétrico e com $U > 0$, tal termo é marginalmente irrelevante, portanto seu efeito pode ser desprezado no limite de cadeias semi-infinitas [5, 108]. Para um estudo mais detalhado do efeito desse termo no efeito Kondo ver a referência [52].

² A expressão bosonizada desse termo fica: $H_\ell^{\text{bs}} \sim \frac{-2U}{(2\pi\alpha)^2} \int dx e^{i\sqrt{2\pi}\phi_{\ell,s}(x)} e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_{\ell,s}(-x)}$.

A solução das cadeias desacopladas da impureza são as excitações bosônicas de carga e spin do modelo de Luttinger, como explicitado na Eq. (4.18) acima. Para entender como a presença da impureza modifica o espectro de baixas energias devemos bosonizar o hamiltoniano (4.7). Para a geometria da Fig. 12, os casos que iremos considerar são: $t'_1 = t'_2 \equiv t'$ (duas cadeias) e $t'_1 = 0$ mas $t'_2 \equiv t'$ (uma cadeia).

Começando pelo primeiro caso, temos $\kappa_1 = \kappa_2 = 1/\sqrt{2}$. Os operadores que acoplam com a impureza no limite contínuo ficam:

$$c_{1\sigma} \sim e^{ik_F} \psi_{R,2,\sigma}(0^+) + e^{-ik_F} \psi_{L,2,\sigma}(0^+) = 2i \sin k_F \psi_{2,\sigma}(0), \quad (4.19)$$

$$c_{-1\sigma} \sim e^{-ik_F} \psi_{R,1,\sigma}(0^-) + e^{ik_F} \psi_{L,1,\sigma}(0^-) = 2i \sin k_F \psi_{1,\sigma}(0), \quad (4.20)$$

onde foram usadas a condição de contorno aberta (4.12) e a definição (4.13). O hamiltoniano Kondo ganha a forma

$$H_K^{(2)} = \pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_0 \cdot \sum_{\ell, \ell'} : \psi_\ell^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_{\ell'}(0) : + W' \sum_{\ell, \ell'} : \psi_\ell^\dagger(0) \psi_{\ell'}(0) :, \quad (4.21)$$

sendo $\lambda_K = 2J_K \sin^2 k_F / (\pi v_F)$ o acoplamento Kondo sem dimensão e $W' = 2W \sin^2 k_F$. O sobrescrito (2) em H_K está indicando que estamos tratando a situação com ambos os *hoppings* não-nulos. O mapeamento em um hamiltoniano que não apresenta flutuação de carga na impureza fornece a mesma amplitude λ_K para os processos $\ell = \ell'$ e $\ell \neq \ell'$ em (4.21). No entanto, uma análise das equações do RG mostra que esses processos renormalizam de maneiras distintas [108]; assim, na hora de calcular as contribuições vindas de cada termo, devemos explicitar essa diferença.

Dado que nosso objetivo é investigar a relaxação da magnetização da impureza, o segundo termo da Eq. (4.21) não contribuirá, visto que tal termo não envolve mudança no estado de spin da impureza. Portanto, na análise que se segue podemos considerar $W' = 0$.

A versão bosonizada de (4.21) pode ser obtida com auxílio da Eq. (4.15). Antes de bosonizar é conveniente reescrever $H_K^{(2)}$ em termos dos operadores [2]

$$S_0^\pm = S_0^x \pm iS_0^y. \quad (4.22)$$

O hamiltoniano Kondo torna-se

$$H_K^{(2)} = \pi v_F \lambda_K \left(S_0^+ F + S_0^- F^\dagger + S_0^z G \right), \quad (4.23)$$

onde F e G contém apenas operadores dos fios e são dados por

$$F = \sum_{\ell, \ell'} : \psi_\ell^\dagger(0) \frac{\sigma^-}{2} \psi_{\ell'}(0) :, \quad (4.24)$$

$$G = \sum_{\ell, \ell'} : \psi_\ell^\dagger(0) \frac{\sigma^z}{2} \psi_{\ell'}(0) :, \quad (4.25)$$

sendo $\sigma^\pm \equiv \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$. A menos dos fatores de Klein (que não afetarão os resultados) e introduzindo uma constante $\mathcal{C}$ que evidencie a renormalização diferente dos termos $\ell = \ell'$ e $\ell \neq \ell'$, F e G tornam-se

$$F = \frac{1}{2\pi\alpha} e^{-i\sqrt{\pi}\phi_s^+(0)} \left\{ \cos[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)] + \mathcal{C} \cos[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0)] \right\}, \quad (4.26)$$

$$G = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \partial_x \phi_s^+(0) - \frac{\mathcal{C}}{\pi\alpha} \sin[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0)] \sin[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)], \quad (4.27)$$

onde $\phi_\lambda^\pm = (\phi_{1\lambda} \pm \phi_{2\lambda})/\sqrt{2}$. Notemos que nas expressões acima o grau de liberdade de carga, descrito pelos campos $\phi_c^\pm$, aparece apenas nos termos que causam tunelamento entre os fios. Isto terá consequências no segundo caso, em que $t'_1 = 0$.

Para o segundo caso de nosso interesse $t'_1 = 0$. Assim, ficamos com $H_0 = H_2^{\text{LL}}$ e o termo Kondo sendo

$$H_K^{(1)} = 2\pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_0 \cdot : \psi_2^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_2(0) :. \quad (4.28)$$

Note o fator 2 extra na definição de λ_K neste caso³. Quando bosonizado o hamiltoniano acima torna-se

$$H_K^{(1)} = \pi v_F \lambda_K \left[S_0^+ \frac{e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_{2s}(0)}}{2\pi\alpha} + S_0^- \frac{e^{i\sqrt{2\pi}\phi_{2s}(0)}}{2\pi\alpha} - S_0^z \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi_{2s}(0) \right]. \quad (4.29)$$

Neste caso o termo Kondo só envolve o grau de liberdade de spin, logo o sistema como um todo, $H_0 + H_K^{(1)}$, apresenta separação spin-carga [52]. Assim, a um primeiro olhar se esperaria que as interações no fio (fixadas por K_c na nossa aproximação de baixas energias) não afetassem a dinâmica na impureza neste caso. No entanto, as interações também podem afetar o sistema por meio da renormalização de quantidades não-universais como o *cutoff* de altas energias $\Lambda_0 \sim v_F/\alpha$. De fato, ao final deste capítulo veremos, por meio dos resultados numéricos, que isto acontece.

Na subseção que se segue calcularemos a magnetização da impureza. Recapitulando, o hamiltoniano efetivo de baixas energias que descreve o(s) fio(s) está dado na Eq. (4.18), enquanto o hamiltoniano Kondo, que dá o acoplamento com a impureza, para o caso de um (dois) fio(s) na Eq. (4.29) ((4.23)).

4.1.1 Relaxação do spin da impureza

Para estudar a dinâmica pós-*quench* de relaxação do spin da impureza adotaremos o seguinte protocolo [73, 81, 118]: para tempos $\tau < 0$ o sistema é preparado no estado

$$|\Psi_0\rangle = |\text{GS}\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle \otimes |\text{GS}\rangle_2, \quad (4.30)$$

³ Como explicado no final do capítulo anterior, seção 3.3.2, o acoplamento Kondo sem dimensão é $\rho(0)J_K$, onde $\rho(0)$ é a densidade de estados no nível de Fermi.

onde $|\text{GS}\rangle_\ell$ é o estado fundamental da cadeia ℓ e $|\uparrow\rangle$ é o estado spin-polarizado da impureza. Para tempos $\tau > 0$ o estado acima não é mais autoestado do hamiltoniano (4.1) devido ao termo de acoplamento, de modo que a sua evolução (unitária) temporal,

$$|\Psi(\tau > 0)\rangle = e^{-i\tau[H_0 + H_K^{(i)}]} |\Psi_0\rangle, \quad (4.31)$$

fornece um resultado não-trivial. O desenvolvimento geral que se segue se aplica tanto ao caso $H_K^{(2)}$ quanto ao $H_K^{(1)}$, pois ambos assumem uma decomposição da forma da Eq. (4.23).

Buscando entender como o spin da impureza evolui temporalmente sob os efeitos das cadeias metálicas é de nosso interesse calcular sua magnetização

$$m_0(\tau) = \langle \Psi(\tau) | S_0^z | \Psi(\tau) \rangle. \quad (4.32)$$

A obtenção do estado evoluído usando a Eq.(4.31) não é factível visto o termo H_K na exponencial. A fim de contornar este problema é útil reescrever a Eq. (4.32) na representação de interação [9, 119]

$$m_0(\tau) = \langle \Psi_I(\tau) | S_0^z(\tau) | \Psi_I(\tau) \rangle. \quad (4.33)$$

Os operadores agora evoluem segundo a dinâmica apenas de H_0 ,

$$O(\tau) \equiv e^{iH_0\tau} O e^{-iH_0\tau}, \quad (4.34)$$

enquanto o estado do sistema

$$|\Psi_I(\tau)\rangle = T \exp \left[-i \int_0^\tau d\tau' H_K(\tau') \right] |\Psi_0\rangle, \quad (4.35)$$

sendo T o operador de ordenamento temporal. A evolução temporal dos operadores em $H_K(\tau)$ é obtida da evolução temporal dos campos bosônicos $\phi_{i\lambda}(x)$ com respeito a H_0 . Dado que este último representa um conjunto de bósons livres, ver Eq. (4.18), a evolução temporal dos operadores de criação/aniquilação é facilmente calculada. A saber

$$\eta_{\ell,\lambda,q}(\tau) = e^{-iu_{\lambda,q}\tau} \eta_{\ell,\lambda,q}, \quad \eta_{\ell,\lambda,q}^\dagger(\tau) = e^{iu_{\lambda,q}\tau} \eta_{\ell,\lambda,q}^\dagger, \quad (4.36)$$

fornecendo de imediato $\phi_{i\lambda}(x, \tau)$.

A exponencial na Eq. (4.35) pode ser expandida em ordens de λ_K , fornecendo uma série perturbativa neste acoplamento. Retendo até o termo de ordem λ_K^2 ficamos com

$$|\Psi_I(\tau)\rangle \approx \left\{ 1 - i \int_0^\tau d\tau' H_K(\tau') - \frac{1}{2} \int_0^\tau d\tau' d\tau'' T[H_K(\tau') H_K(\tau'')] + \mathcal{O}(\lambda_K^3) \right\} |\Psi_0\rangle. \quad (4.37)$$

Quando a expressão acima é substituída na Eq. (4.33) e os termos são reagrupados, obtemos

$$\begin{aligned} m_0(\tau) \approx & \frac{1}{2} - i \int_0^\tau d\tau' \langle [S_0^z(\tau), H_K(\tau')] \rangle_0 - \frac{1}{2} \int_0^\tau d\tau' d\tau'' \left\{ \langle S_0^z(\tau) T H_K(\tau') H_K(\tau'') \rangle_0 \right. \\ & \left. - \langle H_K(\tau') S_0^z(\tau) H_K(\tau'') \rangle_0 \right\} + \text{H.c.} + \mathcal{O}(\lambda_K^3). \end{aligned} \quad (4.38)$$

O termo de ordem zero fornece a condição inicial $m_0(0) = 1/2$. Aqui $|\rangle_0$ denota o valor esperado tomado em $|\Psi_0\rangle$. A evolução temporal dos operadores ditada apenas por H_0 implica que $\mathbf{S}_0(\tau) = \mathbf{S}_0$, logo

$$S_0^+(\tau)|\rangle_0 = 0, \quad S_0^-(\tau)|\rangle_0 = |\text{GS}\rangle_1 \otimes |\Downarrow\rangle \otimes |\text{GS}\rangle_2, \quad S_0^z(\tau)|\rangle_0 = \frac{1}{2}|\rangle_0, \quad (4.39)$$

onde foi usada a álgebra das matrizes de Pauli [2]. Portanto, o termo linear em λ_K é nulo. Nos termos de mais alta ordem em λ_K a dependência com o tempo do operador de spin da impureza é importante devido ao ordenamento temporal.

Os passos seguintes para obtenção de $m_0(\tau)$ envolvem o cálculo dos correlatores presente na Eq. (4.38). Como está detalhado no apêndice C, o único correlator que precisará ser avaliado é

$$m_0(\tau) \approx \frac{1}{2} - (\pi v_F \lambda_K)^2 \int_0^\tau d\tau' d\tau'' \langle F(\tau') F^\dagger(\tau'') \rangle_0 + \mathcal{O}(\lambda_K^3). \quad (4.40)$$

Pela equação acima notamos que, ao menos nesta ordem, apenas os termos que flipam o estado de spin da impureza contribuem para a sua dinâmica, como esperado. Além disso, também é válido mencionar que o resultado da Eq. (4.40) é geral, no sentido que independe da forma do operador F .

O correlator bosônico necessário para o desenvolvimento do cálculo é $\langle e^{ia\phi_{\ell,\lambda}(\tau)} e^{-ib\phi_{\ell',\lambda'}(\tau')} \rangle_0$, onde $a, b \in \mathbb{R}$. Tal correlator tem resultado (ver o apêndice C)

$$\langle e^{ia\phi_{\ell,\lambda}(\tau)} e^{-ib\phi_{\ell',\lambda'}(\tau')} \rangle_0 = \frac{\delta_{ab} \delta_{\ell\ell'} \delta_{\lambda\lambda'}}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')]^{a^2/\pi K_\lambda}}. \quad (4.41)$$

Assim, o resultado para $m_0(\tau)$ no caso em que ambos os *hoppings* para a impureza são não nulos fica

$$m_0^{(2)}(\tau) \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{8} \left(\frac{v_F \lambda_K}{\alpha \Lambda_0} \right)^2 \left\{ \ln[1 + (\Lambda_0 \tau)^2] + \frac{2\mathcal{C}^2 K_c^2}{1 - K_c} \left(1 - [1 + (\Lambda_0 \tau)^2]^{\frac{K_c - 1}{2K_c}} \right) \times \cos \left[(1 - K_c^{-1}) \arctan \Lambda_0 \tau \right] \right\}, \quad (4.42)$$

fixando $K_s = 1$. A expressão acima evidencia a dependência da magnetização da impureza com a interação nos fios, K_c , com a interação local na impureza, $U_d \sim (\lambda_K)^{-1}$, e com o parâmetro não-universal Λ_0 . Vemos pela Eq. (4.42) que o mecanismo de relaxação do spin da impureza acontece de duas maneiras bastante distintas: uma relaxação logarítmica e outra como uma lei de potência com expoente que depende da interação eletrônica. O termo logaritmo é a contribuição vinda do espalhamento pela impureza de um elétron com spin σ , que retorna ao mesmo fio, mas com spin $\sigma' \neq \sigma$, por conservação de spin no processo. O fato deste termo não depender do parâmetro de Luttinger é consequência da dimensão de escala⁴ do operador formado pelos termos $\ell = \ell'$ em F ser igual a 1 (ver

⁴ Relembrando uma definição feita no capítulo anterior: a dimensão de escala, Δ , de um operador de borda O é definida pela expressão $\langle O(\tau) O(0) \rangle \propto \left(\frac{1}{\tau} \right)^{2\Delta}$.

o apêndice C). Por outro lado, o termo $\propto \mathcal{C}^2$, proveniente da contribuição $\ell \neq \ell'$ em F , contém explicitamente uma dependência com K_c , pois a dimensão de escala do operador em questão agora é $(1 + K_c^{-1})/2$. Assim, concluímos que as assinaturas mais claras do efeito da interação elétron-elétron na dinâmica de relaxação do spin da impureza são oriundas do termo que causa tunelamento entre os fios. Na situação de elétrons livres, $K_c = 1$. Tomando este limite na Eq. (4.42) somos levados a

$$m_0^{(2)}(\tau) \approx \frac{1}{2} - \frac{\lambda_K^2}{4} \ln[1 + (\Lambda_0 \tau)^2] + \mathcal{O}(\lambda_K^3), \quad (4.43)$$

onde foi usado que $\alpha \Lambda_0 = v_F$, neste caso. O resultado acima mostra que apenas o mecanismo logarítmico sobrevive no caso de elétrons livres, portanto, deixa claro que a contribuição da física do líquido de Luttinger para $m_0^{(2)}(\tau)$ é uma correção do tipo lei de potência.

Apesar da Eq. (4.42) fornecer uma aparente expressão para o tempo Kondo⁵ τ_K , tal escala de tempo não pode ser alcançada por uma teoria de perturbação que se limita até segunda ordem em λ_K . De fato, um dado instante de tempo τ após o *quench* cumpre a função de uma temperatura efetiva $T_{\text{eff}} \sim 1/\tau$, que corta as singularidades do infravermelho associadas com o efeito Kondo [71]. Portanto, o resultado na Eq. (4.42) é válido apenas no regime $\tau \ll \tau_K$. No capítulo seguinte discutiremos em mais detalhes essa questão. Mesmo com essa limitação de tempos, esse é o intervalo relevante para se fazer comparações com resultados numéricos e possíveis experimentos futuros [85, 94].

Para o segundo caso de nosso interesse a impureza acopla-se a um único fio, então não há o termo de tunelamento entre os fios. Agora o operador F é dado simplesmente por uma exponencial do campo $\phi_{2\sigma}$ (veja a Eq. (4.29)). Como está também detalhado no apêndice C, a magnetização da impureza neste caso fica

$$m_0^{(1)}(\tau) \approx \frac{1}{2} - \left(\frac{v_F \lambda_K}{2\alpha \Lambda_0} \right)^2 \ln[1 + (\Lambda_0 \tau)^2] + \mathcal{O}(\lambda_K^3). \quad (4.44)$$

Como já mencionado, para este caso o parâmetro de Luttinger K_c não afeta a dinâmica do spin da impureza em nenhuma ordem de λ_K devido à Eq. (4.28) só envolver o setor de spin. Entretanto, a interação elétron-elétron no fio ainda pode afetar $m_0^{(1)}(\tau)$ por meio de uma renormalização do parâmetro não-universal Λ_0 ⁶. Infelizmente, dentro da nossa teoria de perturbação de segunda ordem, tal renormalização não pode ser capturada, sendo necessário, ao menos, a consideração da próxima ordem em λ_K (ver o capítulo 5). Como veremos na próxima seção, esta renormalização é capturada com os resultados numéricos obtidos pelo método tDMRG.

Notemos que o resultado de $m_0^{(2)}$ para elétrons livres, Eq. (4.43), torna-se idêntico ao resultado de $m_0^{(1)}$, Eq. (4.44), se considerarmos $\alpha \Lambda_0 \approx v_F$ (válido para um sistema

⁵ O tempo Kondo corresponde à escala de tempo em que o spin da impureza é completamente blindado, $m_0^{(2)}(\tau_K) = 0$, devido à formação do estado singleto com os elétrons de condução dos fios.

⁶ Para um estudo mais detalhado sobre parâmetros não-universais no modelo XXZ, ver a referência [120].

fracamente interagente). Para entender o porquê disso, devemos escrever o hamiltoniano da Eq. (4.6) na base $\psi_{s/a} = (\psi_1 \pm \psi_2)/\sqrt{2}$. A menos do termo proporcional a V' (que não influencia a dinâmica de spin), temos

$$H_{\text{eff}}(\tau > 0) = v_F \sum_{j=s,a} \int dx : \psi_j^\dagger (-i\partial_x) \psi_j : + 2\pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_0 \cdot : \psi_s^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_s(0) : . \quad (4.45)$$

Esta representação mostra que a física Kondo acontece apenas no canal não interagente s (simétrico), enquanto o canal a (anti-simétrico) permanece livre [37, 50, 121]. Uma situação igual a esta acontece para o caso de um único fio, onde o setor de carga permanece livre, isto é, não acopla com a impureza, e apenas o setor de spin contribui para o efeito Kondo, explicando assim a equivalência dos dois resultados.

4.1.2 Comparação com resultados de tDMRG

O sistema estudado nas seções anteriores também pode ser investigado numericamente com auxílio do Grupo de Renormalização da Matriz Densidade Dependente do Tempo (tDMRG). O método DMRG foi desenvolvido por Steven R. White [122–124] e, de maneira bastante resumida, consiste de uma truncagem selecionada do espaço de Hilbert preservando as propriedades do estado fundamental do sistema considerado. Em uma dimensão, onde o método tem uma maior aplicabilidade, inicia-se com uma cadeia com poucos sítios de modo a conseguir diagonalizá-la exatamente; em seguida o número de sítios é aumentado sem que o espaço de Hilbert cresça equivalentemente. Essa ideia é a base para o Grupo de Renormalização Numérico (NRG) introduzido por K. Wilson [31], porém no NRG preserva-se os estados de menor energia enquanto que no DMRG os maiores autovalores da matriz densidade reduzida.

Os dados numéricos aqui expostos fazem parte da tese de doutoramento da professora Helena Bragança, defendida aqui na UFMG [93]. Os resultados foram obtidos usando uma decomposição de segunda ordem de Suzuki-Trotter⁷ com um passo de tempo $d\tau = 0.05$, visando manter um erro da ordem de 10^{-6} . Em ambas as geometrias o número total de sítios (cadeias + impureza) é fixado em 48. Quando a impureza é acoplada a duas cadeias, $L_1 = 23$ e $L_2 = 24$; quando acoplada com apenas uma cadeia, $L_1 = 0$ e $L_2 = 47$. Para simular a dinâmica descrita pelo hamiltoniano na Eq. (4.1), em tempos $\tau > 0$ os parâmetros de *hoppings* foram tomados como $t'_{1,2} = 0.5t$. O parâmetro t fixa a unidade de energia do problema, então os tempos estão em unidade de $1/t$ ($\hbar = 1$).

Quando a impureza é acoplada a uma única cadeia, sua magnetização é apresentada nas Fig.'s 13 (a,c) para dois valores de U e vários valores de U_d . O comportamento oscilatório

⁷ A decomposição de Suzuki-Trotter é uma forma de implementar a evolução temporal no DMRG. Tal decomposição consiste em separar os termos locais que comutam do hamiltoniano (a decomposição se aplica apenas a sistemas com interação entre primeiros vizinhos) de forma que o operador de evolução temporal, $e^{iH\tau}$, possa ser aplicado em um estado considerando pares de sítios [124].

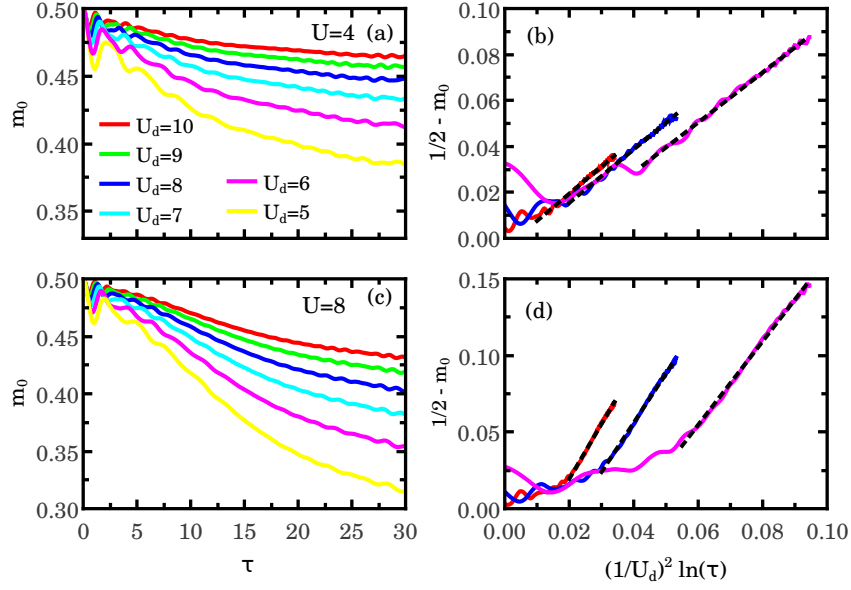


Figura 13 – Decaimento da magnetização da impureza quando esta é acoplada a uma única cadeia. Em (a) e (c) temos o decaimento de $m_0^{(1)}(\tau)$ para $U = 4$ e 8 e vários valores de U_d . Em (b) e (d) a expressão da Eq. (4.44) (linha pontilhada) é comparada com as curvas numéricas para os valores de U em (a) e (c), respectivamente, e com a mesma regra de cores para U_d .

para tempos curtos é consequência da flutuação da ocupação da impureza logo após o *quench*. Essas oscilações não são previstas pela Eq. (4.44), pois esta foi deduzida pelo hamiltoniano efetivo da Eq. (4.6), que desconsidera flutuações de carga na impureza (regime Kondo). Após essas flutuações iniciais, a magnetização apresenta um decaimento suave como indício da formação da nuvem Kondo. Em tempos $\tau \gtrsim 25$ a magnetização apresenta novas flutuações, agora devido ao tamanho finito das cadeias simuladas. Dessa forma, a comparação do resultado analítico com o numérico só faz sentido no intervalo de tempos intermediários $8 \lesssim \tau \lesssim 25$. Ainda sobre as Fig.'s 13 (a,c), percebemos que o aumento da interação nas cadeias acelera o decaimento de $m_0^{(1)}(\tau)$, o que nos leva a concluir que a formação do efeito Kondo é favorecida pelo aumento da interação entre os elétrons das cadeias, em concordância com os resultados de equilíbrio já existentes [70].

No intervalo de tempo $8 \lesssim \tau \lesssim 25$, a Eq. (4.44) pode ser comparada com as curvas numéricas. Para $\tau \gg \Lambda_0^{-1}$ podemos aproximar esta equação por

$$1/2 - m_0^{(1)}(\tau) \approx \frac{A}{U_d^2} \ln(\Lambda_0 \tau) + \text{cte}, \quad (4.46)$$

onde $A \equiv 2/(\pi\alpha\Lambda_0)^2$ como consequência de tomarmos $\epsilon_d = -U_d/2$ (simetria partícula-buraco no sítio da impureza) na Eq (4.8). Nas Fig.'s 13 (b, d) plotamos o lado esquerdo da Eq. (4.46) versus $U_d^{-2} \ln(\Lambda_0 \tau)$ para diferentes valores de U e U_d , fitando A com os dados numéricos (ver tabela 1 para os valores de A). Como esperado, o resultado na Eq. (4.46) concorda bem com as curvas numéricas no intervalo de tempo intermediário. À medida

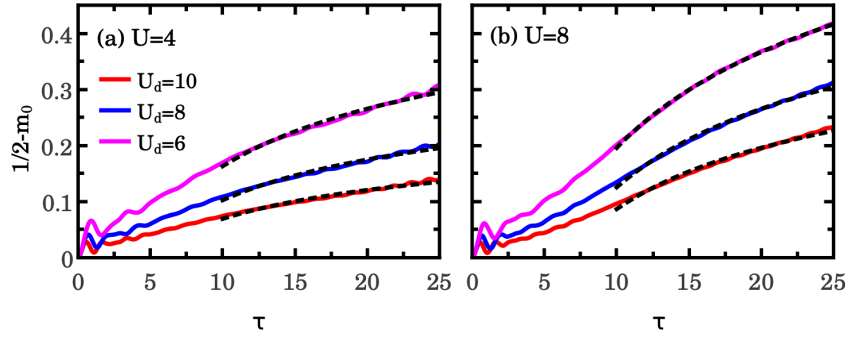


Figura 14 – Decaimento da magnetização da impureza quando esta é acoplada a duas cadeias de elétrons interagentes. As linhas tracejadas representam os *fittings* com a Eq. (4.47) deixando os parâmetros B e C livres.

que o valor de U_d aumenta, a inclinação das curvas praticamente não muda, revelando que a dependência de $m_0^{(1)}(\tau)$ com U_d é de fato como descrita na Eq. (4.46). Notemos ainda que o prefator não-universal A muda com a interação nas cadeias. Esta dependência não é prevista pela teoria de LL e deve ser associada com uma renormalização do *cutoff* Λ_0 pelas interações no fio, como já apontado por nós.

$U = 4$			
U_d	A	B	C
10	1.18 ± 0.03	0.36 ± 0.07	0.15 ± 0.03
8	1.17 ± 0.04	0.48 ± 0.02	0.20 ± 0.01
6	1.10 ± 0.06	0.62 ± 0.04	0.26 ± 0.02

$U = 8$			
U_d	A	B	C
10	3.57 ± 0.08	0.71 ± 0.04	0.09 ± 0.01
8	3.3 ± 0.1	0.80 ± 0.08	0.09 ± 0.01
6	2.7 ± 0.9	0.79 ± 0.01	0.04 ± 0.01

Tabela 1 – Valores dos parâmetros não-universais das Eqs. (4.46) e (4.47) obtidos fitando as curvas numéricas.

Para o caso da impureza acoplada com duas cadeias, o decaimento da magnetização no regime $\tau \gg \Lambda_0^{-1}$ fica (ver a Eq. (4.42)):

$$1/2 - m_0^{(2)}(\tau) \approx \frac{2A}{U_d^2} \ln(\Lambda_0 \tau) - B(\Lambda_0 \tau)^{1-K_c^{-1}} + C. \quad (4.47)$$

Na expressão acima os parâmetros não-universais B e C podem ser determinados fitando as novas curvas numéricas, enquanto que A pode ser considerado o mesmo que fita as curvas para o caso do acoplamento com apenas uma cadeia. A tabela 1 exhibe esses valores para diferentes U e U_d . O parâmetro de Luttinger K_c é determinado pelo *ansatz* de Bethe [116, 117]: $U = 2, 4, 8 \Rightarrow K_c = 0.82, 0.71, 0.68$, respectivamente.

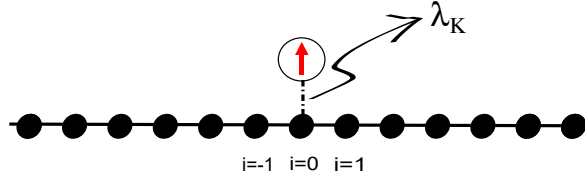


Figura 15 – Impureza acoplada a um único sítio da cadeia de Hubbard homogênea. No limite de baixas energias o problema é equivalente a um spin $1/2$ acoplado à origem de um LL infinito.

Como já discutido, nesta geometria existem dois mecanismos distintos de relaxação do spin da impureza, um que dá origem ao termo logaritmo e outro que dá uma lei de potência, os quais são oriundos do termo que reflete elétrons para a mesma cadeia e do termo que causa tunelamento entre as cadeias, respectivamente. Na Fig. 14 apresentamos o ajuste dos resultados numéricos com a Eq. (4.47), mostrando uma boa concordância no intervalo de tempo esperado. Contudo, dado que a contribuição do termo de tunelamento, $\propto B$, diminui com o tempo, sendo pequenos os valores do parâmetro B , a distinção entre a dependência logarítmica pura e o logaritmo corrigido com uma lei de potência com expoente $1 - K_c^{-1}$ é ambígua. Na seção que se segue estudaremos um outro tipo de geometria, a qual, diferentemente da estudada até então, produz uma lei de potência que cresce com o tempo, possibilitando assim uma melhor comparação com possíveis resultados numéricos.

4.2 Impureza acoplada a um único sítio (geometria *side coupling*)

Um problema que complementa a análise da geometria descrita na Fig. 12 é considerar que a impureza está agora acoplada a um único sítio da cadeia de Hubbard homogênea (sem a condição de contorno aberta na origem), como esquematizado na figura 15. No regime Kondo, o hamiltoniano que descreve este acoplamento é [50, 66]

$$H(\tau) = H_0 + \theta(\tau)H_K, \quad (4.48)$$

onde H_0 é o hamiltoniano da cadeia de Hubbard e

$$H_K = \mathcal{J}_K \mathbf{S}_I \cdot c_0^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_0, \quad (4.49)$$

onde $c_0^\dagger = (c_{0\uparrow}^\dagger, c_{0\downarrow}^\dagger)$ é o operador fermiônico no sítio zero da cadeia e $\mathbf{S}_I$ é o operador de spin da impureza. No limite de uma cadeia infinita o hamiltoniano acima pode ser tratado na sua versão do contínuo. A cadeia metálica em baixas energias é descrita pela teoria de líquido de Luttinger e o hamiltoniano Kondo fica $H_K = \pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_I \cdot \mathbf{s}(0)$, onde $\mathbf{s}(0) = \psi^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi(0)$ é a densidade de spin em torno da origem e λ_K o acoplamento Kondo sem dimensão definido em termos de $\mathcal{J}_K$.

Assim como antes, para estudarmos o sistema interagente devemos bosonizar o hamiltoniano na Eq. (4.48). Como neste caso não há a condição de contorno aberta na origem, a bosonização é feita seguindo o dicionário do capítulo 3. O operador de campo fermiônico $\psi_\sigma(x)$ é dado pela Eq. (3.17) e cadeia é descrita pelo hamiltoniano da Eq. (3.30). O termo Kondo no limite do contínuo e bosonizado torna-se [114]

$$H_K = \frac{\pi v_F \lambda_K^F}{2} \left[\frac{S_I^+}{\pi \alpha} e^{-i\sqrt{2\pi}\theta_s(0)} \cos[\sqrt{2\pi}\phi_s(0)] + \text{H.c.} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} S_I^z \partial_x \phi_s(0) \right] \\ + \frac{\pi v_F \lambda_K^B}{2} \left[\frac{S_I^+}{\pi \alpha} e^{-i\sqrt{2\pi}\theta_s(0)} \cos[\sqrt{2\pi}\phi_c(0)] + \text{H.c.} - \frac{2}{\pi \alpha} S_I^z \sin[\sqrt{2\pi}\phi_s(0)] \sin[\sqrt{2\pi}\phi_c(0)] \right], \quad (4.50)$$

onde explicitamos as diferentes dimensões de escala da parte *forward* (λ_K^F) e *backward* (λ_K^B). Novamente os fatores de Klein podem ser ignorados na hora de bosonizar. No hamiltoniano acima, vemos que o termo de espalhamento *forward* não depende dos campos de carga ϕ_c e θ_c ; portanto, a contribuição vinda desse termo não dependerá das interações no fio, considerando que as interações estão apenas no parâmetro de Luttinger de carga. O hamiltoniano da Eq. (4.50) pode ser colocado na forma da Eq. (4.23) redefinindo os operadores F e G . Logo, a expressão geral para a componente z da magnetização da impureza, que agora denotaremos por $m_I(\tau)$, em ordem λ_K^2 é ainda dada pela Eq. (4.40).

O correlator na Eq. (4.40) pode ser calculado de maneira similar ao que foi feito nas seções anteriores. Deixando os detalhes do cálculo para o apêndice C, concluímos que

$$m_I(\tau) \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\lambda_K^F v_F}{\alpha \Lambda_0} \right)^2 \left(\ln[1 + (\Lambda_0 \tau)^2] + \frac{2\mathcal{C}^2}{K_c(K_c - 1)} \left\{ 1 - [1 + (\Lambda_0 \tau)^2]^{\frac{1-K_c}{2}} \right. \right. \\ \left. \left. \times \cos[(K_c - 1) \arctan(\Lambda_0 \tau)] \right\} \right) + \mathcal{O}(\lambda_K^3). \quad (4.51)$$

Comparando o resultado acima com o resultado na Eq. (4.42), notamos que os dois resultados são duais: um pode ser obtido do outro fazendo $K_c \rightarrow K_c^{-1}$. Isto acontece em virtude da simetria do hamiltoniano da Eq. (3.30) com relação aos pares $[\phi_\lambda, \partial_x \theta_\lambda]$, $[\theta_\lambda, \partial_x \phi_\lambda]$ e da condição de contorno aberta exposta na Eq. (4.12) [5], como apontado por nós no capítulo anterior. Diferentemente da Eq. (4.42), o termo que depende explicitamente de K_c agora tem um crescimento monotônico ($K_c < 1$) devido à dimensão de escala do operador λ_K^B em H_K ser $(1 + K_c)/2$ (veja o final do capítulo 3) [66, 114], possibilitando assim que a correção vinda da lei de potência seja mais facilmente detectável (numericamente).

Para esta geometria ainda não temos resultados numéricos que possam dar força ao resultado na Eq. (4.51). Esperamos em um futuro próximo tê-los.

4.3 Conclusões deste trabalho

Com o objetivo de entender qual o papel da interação elétron-elétron sobre o efeito Kondo, nós investigamos, por meio de uma abordagem analítica e numérica, a dinâmica

pós-*quench* que surge ao conectarmos repentinamente um sistema unidimensional de elétrons interagentes com uma impureza magnética.

No tratamento analítico, as cadeias de elétrons foram descritas pelo modelo de líquido de Luttinger e o acoplamento impureza-cadeias pelo hamiltoniano Kondo, o qual considera apenas flutuações de spin no sítio da impureza. Já do ponto de vista numérico, as cadeias são cadeias de Hubbard e o acoplamento com a impureza é dado em termos do hamiltoniano de uma impureza de Anderson, o qual considera tanto flutuações de carga quanto de spin no sítio da impureza.

Vimos que a relaxação da magnetização da impureza acontece mais rapidamente se diminuirmos a interação U_d no sítio da impureza, aumentando assim o acoplamento Kondo, ou se aumentarmos a interação U nas cadeias. Enquanto a teoria de LL prevê uma dependência com a interação através do parâmetro Luttinger de carga (K_c) quando a impureza está acoplado a duas cadeias, descobrimos, por meio dos resultados numéricos, que a dependência mais importante com a interação vem de uma renormalização dos prefatores não-universais (α e Λ_0). No caso de acoplamento com uma única cadeia, a teoria de campos prevê uma escala logarítmica no regime perturbativo de tempos mais curtos que o tempo Kondo τ_K , o que concorda bem com os nossos resultados de tDMRG.

Mais ao final do capítulo nós também estudamos o acoplamento impureza-cadeia na forma da geometria *side coupling*. Efetuando um cálculo para a magnetização da impureza, nós concluimos que, diferentemente da geometria *embedding*, o termo que depende explicitamente do parâmetro de Luttinger de carga cresce com o tempo, logo seus efeitos devem ser mais fáceis de detectar em um tratamento numérico.

5 Resultados: Transporte através de uma impureza magnética

Ainda buscando compreender melhor como o efeito Kondo se manifesta nas propriedades dinâmicas de uma impureza magnética em contato com cadeias eletrônicas interagentes, olharemos agora para o transporte dependente do tempo através da impureza. Para gerar uma configuração de transporte, conectaremos potenciais químicos de carga (μ) às cadeias dentro do nosso protocolo de *quench*. Como veremos, as propriedades de transporte do sistema nos permitem entender melhor a dinâmica real (isto é, em tempo real) do efeito Kondo como também deixam evidente o papel da interação elétron-elétron sobre o efeito.

Os achados que estão descritos neste capítulo foram publicados na revista *Physical Review B* com o título “Quench dynamics of the Kondo effect: Transport across an impurity coupled to interacting wires” [25]. Este trabalho também contou com a colaboração do professor Rodrigo G. Pereira do Instituto Internacional de Física da UFRN.

5.1 Transporte dependente do tempo

Similar ao que foi feito no capítulo anterior, consideraremos aqui que a dinâmica pós-*quench* origina-se do seguinte protocolo de quench: para tempos $\tau < 0$ o sistema é preparado no estado dado pela Eq. (4.30), em que as cadeias estão desacopladas da impureza, enquanto para tempos $\tau > 0$ o sistema evolui unitariamente de acordo com

$$|\Psi(\tau > 0)\rangle = e^{-i\tau H} |\Psi_0\rangle, \quad (5.1)$$

com

$$H = H_0 + H_K + \delta H, \quad (5.2)$$

onde H_0 descreve as cadeias (fios, na nossa aproximação), H_K é o hamiltoniano Kondo, veja a Eq. (4.21), e δH o termo responsável por gerar a situação de transporte. Após o *quench*, um estado de não-equilíbrio é formado em que os elétrons dos fios são espalhados pela impureza. Quando $\delta H = 0$ não há assimetria entre os fios, então as correntes através da impureza são nulas. Para produzir uma corrente não-nula vamos considerar que os fios suportam uma configuração de não-equilíbrio descrita pelos potenciais químicos [81, 125] $\mu_{1,2}$ (carga), veja a Fig. 16, e $\mathbf{h}_{1,2}$ (spin). Nosso foco aqui será o transporte de carga, mas, por questões de formular um método geral para o transporte, consideraremos também a existência de tais potenciais químicos de spin. Assumiremos também que essas quantidades

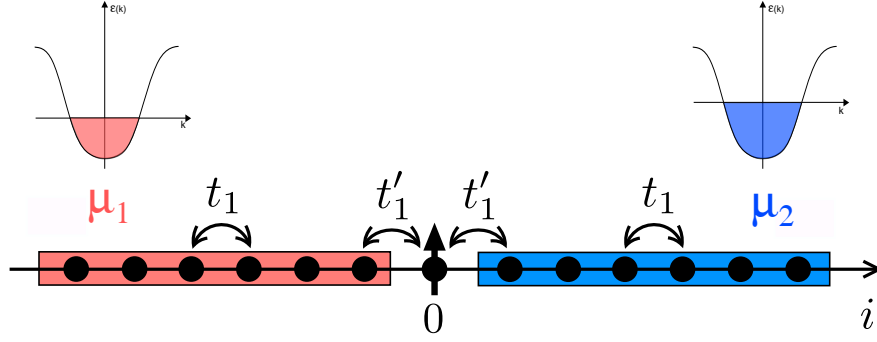


Figura 16 – Sistema físico usado para estudar o transporte dependente do tempo através da impureza magnética. Um fluxo de carga surge entre as cadeias quando assumimos $\mu_1 \neq \mu_2$.

são pequenas de modo que poderemos considerar apenas contribuições lineares em μ e $\mathbf{h}$, produzindo assim resultados para a condutância que serão independentes desses potenciais.

O transporte de carga através da impureza é definido em termos da corrente de carga¹

$$\hat{j}_c = e \frac{d}{d\tau} (N_1 - N_2). \quad (5.3)$$

Aqui N_i é o operador número de elétrons no fio i e e é a carga eletrônica elementar. Como já mencionado, o termo responsável por gerar uma configuração de transporte no sistema é δH . Seguindo as Ref.'s [81,125] tal termo tem a forma

$$\delta H = \sum_{\ell} (\mu_{\ell} N_{\ell} + \mathbf{h}_{\ell} \cdot \mathbf{S}_{\ell}), \quad (5.4)$$

onde $\ell = 1, 2$ indexa os fios e $\mathbf{S}_{\ell}$ é o operador de spin no fio ℓ . O termo acima é a parte da energia dos fios devido aos potenciais químicos $\mu_{1,2}$ e $\mathbf{h}_{1,2}$. Buscando fazer um tratamento perturbativo no acoplamento Kondo λ_K , é interessante efetuar uma transformação que incorpore o termo (5.4) em H_K [81,125]. O preço que se paga por efetuar tal transformação é gerar uma dependência explícita no tempo em H_K e em $\hat{j}_c$ (como em qualquer outro observável). Como está detalhado no apêndice D, nessas quantidades devemos fazer

$$\psi_{\ell} \rightarrow \Upsilon_{\ell}^{\dagger}(\tau) \psi_{\ell}, \quad (5.5)$$

sendo

$$\Upsilon_{\ell}(\tau) = e^{i\mu_{\ell}\tau} e^{i\mathbf{h}_{\ell} \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \tau} \quad (5.6)$$

uma matriz 2×2 com os potenciais químicos. Assim, o termo Kondo transformado fica explicitamente (veja a Eq. (4.21))

$$H_K = \pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_0 \cdot \sum_{\ell, \ell'} : \psi_{\ell}^{\dagger}(0) \Upsilon_{\ell}(\tau) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \Upsilon_{\ell'}^{\dagger}(\tau) \psi_{\ell'}(0) :. \quad (5.7)$$

¹ Similarmente podemos definir uma corrente de spin por $\mathbf{j}_s = \frac{d}{d\tau} (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2)$.

Notemos que o termo proporcional a W na Eq. (4.21) foi omitido da equação acima. O efeito deste termo no transporte será analisado separadamente ao final.

As expressões gerais para os operadores de corrente são obtidos via equação de Heisenberg: $\partial_\tau O = i[H, O]$ [2]. Para a corrente de carga, efetuando o cálculo do comutador somos levados a

$$\hat{j}_c = ie\pi v_F \lambda_K \left[\psi_2^\dagger(0)(\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma})\psi_1(0) - \text{H.c.} \right], \quad (5.8)$$

onde a transformação (5.5) ainda precisa ser efetuada. Notemos pela equação acima que o transporte está intimamente ligado à dinâmica do spin da impureza por meio da matriz $\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Assim, é razoável esperar que o transporte carregue informações sobre o efeito Kondo.

5.2 Transporte de carga

Nos restringiremos a partir de agora ao transporte de carga através da impureza, portanto tomaremos $\mathbf{h}_{1,2} = 0$. Logo, a transformação na Eq. (5.5) torna-se simplesmente

$$\psi_\ell \rightarrow e^{-i\mu_\ell \tau} \psi_\ell. \quad (5.9)$$

O hamiltoniano Kondo em (5.7) e a corrente de carga em (5.8) tornam-se

$$H_K = \pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_0 \cdot \sum_{\ell, \ell'} e^{i(\mu_\ell - \mu_{\ell'})\tau} : \psi_\ell^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_{\ell'}(0) :, \quad (5.10)$$

$$\hat{j}_c = ie\pi v_F \lambda_K \left[e^{ieV\tau} \psi_2^\dagger(0)(\mathbf{S}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma})\psi_1(0) - \text{H.c.} \right], \quad (5.11)$$

onde $V \equiv (\mu_2 - \mu_1)/e$ cumpre a função de uma diferença de potencial entre os fios. A quantidade eV define uma escala de energia para o nosso problema, a qual está associada com a escala de tempo $\tau_{eV} \equiv |eV|^{-1}$. Assim, para os nossos propósitos de estudar o transporte em resposta linear em eV , τ_{eV} representa uma escala de tempos longos para o problema. Isto significa que os nossos resultados serão válidos numa janela de tempo $\tau \ll \tau_{eV}$. Para valores finitos de V , isto é, fora do regime linear, esperamos obter uma contribuição extra para a corrente que oscile com frequência eV . Para mais detalhes ver, por exemplo, o trabalho [126].

A corrente de carga cruzando a impureza no tempo $\tau > 0$ pós-*quench* é dada por

$$\begin{aligned} j_c(\tau) &= \langle \Psi(\tau) | \hat{j}_c | \Psi(\tau) \rangle, \\ &= \langle T \hat{j}_c(\tau) \mathcal{U} \rangle_0, \end{aligned} \quad (5.12)$$

onde T é o operador de ordenamento temporal, $\hat{j}_c(\tau) = e^{iH_0\tau} \hat{j}_c e^{-iH_0\tau}$ é o operador corrente na representação de interação [9, 119] e $\mathcal{U}$ é o operador de evolução temporal, isto é

$$\mathcal{U} = \exp \left[-i \int_0^\tau d\tau' H_K(\tau') \right], \quad (5.13)$$

sendo $H_K(\tau') = e^{iH_0\tau'} H_K e^{-iH_0\tau'}$ também escrito na representação de interação. Dada a discussão feita no capítulo anterior, para tempos $\tau \ll \tau_K$ podemos tratar o acoplamento Kondo perturbativamente. Assim, expandindo a exponencial da Eq. (5.13) em potências de λ_K , os termos de mais baixa ordem que provém dessa expansão são

$$j_c^{(2)}(\tau) = i \int_0^\tau d\tau' \langle [H_K(\tau'), \hat{j}_c(\tau)] \rangle_0, \quad (5.14)$$

$$j_c^{(3)}(\tau) = -\frac{1}{2} \int_0^\tau d\tau' d\tau'' \left[\langle \hat{j}_c(\tau) T H_K(\tau') H_K(\tau'') \rangle_0 - \langle H_K(\tau') \hat{j}_c(\tau) H_K(\tau'') \rangle_0 \right] + \text{H.c.} \quad (5.15)$$

Aqui $j_c^{(n)}(\tau)$ é a contribuição em ordem λ_K^n vindo do termo λ_K^{n-1} da expansão da exponencial na Eq. (5.13), dado que o operador corrente na Eq. (5.11) já contribui com uma potência de λ_K . Como já apontado no capítulo anterior $[H_0, \mathbf{S}_0] = 0$, o que implica que o operador de spin da impureza não evolui temporalmente. Contudo, como também já discutido, a dependência temporal desses operadores é importante devido ao ordenamento temporal.

Agora iniciaremos o cálculo das contribuições nas Eq's. (5.14) e (5.15). Por questão de deixar claro o papel da interação elétron-elétron, será feito primeiro a análise para $U = 0$ e, posteriormente, o caso $U \neq 0$ será tratado.

5.2.1 Elétrons livres

O termo Kondo da Eq. (5.10) admite ser reescrito da forma (4.23), com F e G agora dependendo explicitamente do tempo (ver apêndice D). O operador corrente da Eq. (5.11) também pode ser reescrito de uma forma similar, isto é,

$$\hat{j}_c = ie\pi v_F \lambda_K [S_0^+ f - S_0^- f^\dagger + S_0^z g], \quad (5.16)$$

onde definimos os operadores de borda f e g como

$$f = e^{ieV\tau} \psi_2^\dagger \sigma^- \psi_1 - e^{-ieV\tau} \psi_1^\dagger \sigma^- \psi_2, \quad (5.17)$$

$$g = e^{ieV\tau} \psi_2^\dagger \sigma^z \psi_1 - \text{H.c.}, \quad (5.18)$$

onde usamos novamente que $\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$. Note que o operador f descreve o tunelamento de elétrons entre os fios com spin-*flip*, enquanto o operador g , o qual satisfaz $g = -g^\dagger$, promove tunelamento sem spin-*flip*.

Usando as definições acima, o correlator na Eq. (5.14) torna-se (ver o apêndice D)

$$\begin{aligned} \langle [H_K(\tau'), \hat{j}_c(\tau)] \rangle_0 &= \langle H_K(\tau') \hat{j}_c(\tau) \rangle_0 - \text{H.c.}, \\ &= ie(\pi v_F \lambda_K)^2 \left[-\langle F(\tau') f^\dagger(\tau) \rangle_0 + \frac{1}{4} \langle G(\tau') g(\tau) \rangle_0 \right] - \text{H.c.} \end{aligned} \quad (5.19)$$

Os correlatores nesta equação são facilmente calculados com auxílio da função de Green, para elétrons livres, na borda [5]:

$$\langle T \psi_{\ell,\sigma}^\dagger(\tau) \psi_{\ell',\sigma'}(\tau') \rangle_0 = \begin{cases} \frac{\alpha^{-1}}{2\pi} \frac{\delta_{\ell,\ell'} \delta_{\sigma,\sigma'}}{[1+i\Lambda_0(\tau-\tau')]}, & \text{se } \tau > \tau' \\ \frac{-\alpha^{-1}}{2\pi} \frac{\delta_{\ell,\ell'} \delta_{\sigma,\sigma'}}{[1+i\Lambda_0(\tau'-\tau)]}, & \text{se } \tau < \tau' \end{cases} \quad (5.20)$$

onde $\alpha \rightarrow 0$ é um *cutoff* de pequenas distâncias e $\Lambda_0 = v_F/\alpha$ um *cutoff* de altas energias, consequentemente. Como está detalhado no apêndice D, com isso somos levados a (em ordem linear em V)

$$j_c^{(2)}(\tau) = \frac{3ie^2V\lambda_K^2}{8} \int_0^{\Lambda_0\tau} du \frac{u}{[s(u)]^2} + \text{H.c.}, \quad (5.21)$$

onde $s(u) \equiv 1 + iu$. A integral acima pode ser calculada para todo tempo τ pós-*quench*. No limite $\Lambda_0\tau \gg 1$ somos conduzidos a concluir que

$$j_c^{(2)}(\tau) = \frac{3\pi^2 j_0}{8} \lambda_K^2 \left[1 - \frac{4}{\pi\Lambda_0\tau} + \mathcal{O}(\tau^{-3}) \right], \quad (5.22)$$

onde $j_0 = e^2V/\pi$ é a corrente para um condutor ideal em 1D [5]. O resultado acima nos diz que a corrente de carga pós-*quench* escala como $1/\tau$, até saturar em um pequeno valor $\frac{3\pi^2 j_0}{8} \lambda_K^2$. Este resultado deve ser comparado com o resultado da Ref. [81], em que foi estudada a corrente de tunelamento que surge entre dois LL conectados por uma impureza não-magnética e sujeitos a um protocolo de *quench* similar ao que estamos considerando. Lá foi visto que a corrente se comporta exatamente como na Eq. (5.22) (a menos da constante multiplicativa). Isto nos leva a concluir que o resultado (5.22) não contém informação do efeito Kondo em si e, assim, será preciso analisar termos de mais alta ordem na expansão perturbativa (ver a Eq. (5.15)).

A contribuição em ordem λ_K^3 vem dos correlatores na Eq. (5.15). Dado que estamos escrevendo os operadores H_K e $\hat{j}_c$ em termos de $S_0^\pm$ e S_0^z , os correlatores (ou funções de Green) que podem surgir nesta ordem envolvendo os operadores de spin da impureza são:

$$\langle T S_0^+(\tau) S_0^-(\tau') S_0^z(\tau'') \rangle_0 = \frac{1}{2} \epsilon(\tau, \tau', \tau'') \theta(\tau - \tau'), \quad (5.23)$$

$$\langle T S_0^z(\tau) S_0^z(\tau') S_0^z(\tau'') \rangle_0 = \frac{1}{8}, \quad (5.24)$$

onde $\epsilon(\tau, \tau', \tau'') = 1$ se $\tau > \tau' > \tau''$ e completamente anti-simétrico na permutação de τ, τ', τ'' . O correlator na Eq. (5.23) descreve um processo de espalhamento com spin-*flip*, enquanto em (5.24) não há mudança no estado de spin dos elétrons nos fios. Como está detalhado no apêndice D, este último não contribuirá para a corrente. Com isso, o número de correlatores que precisaremos avaliar diminui. Por exemplo, um correlator que precisará ser calculado, proveniente da primeira linha da Eq. (5.15), é

$$C_1 \equiv \langle f(\tau) F^\dagger(\tau') G(\tau'') \rangle_0. \quad (5.25)$$

Usando o teorema de Wick [9, 119, 127], já que estamos tratando elétrons livres, e o resultado da Eq. (5.20), temos que

$$C_1 = \frac{-i}{(2\pi\alpha)^3} \frac{\sin[eV(\tau - \tau')] + \sin[eV(\tau - \tau'')]}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')][1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')][1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]}, \quad (5.26)$$

como está detalhado no apêndice D. Após avaliar todos os correlatores e efetuar uma das duas integrações da Eq. (5.15) chegaremos que

$$j_c^{(3)}(\tau) = \frac{3e^2V\lambda_K^3}{8} \int_0^{\Lambda_0\tau} du \frac{u \ln s(u)}{s(u)} \left[\frac{1}{u} + \frac{1}{u - 2i} \right] + \text{H.c.} + \dots, \quad (5.27)$$

onde por $+\dots$ queremos dizer que estamos desprezando termos que decaem com ou mais rápido que $1/\tau$. Quando agrupamos este resultado e o resultado na Eq. (5.22), chegamos que, para $\Lambda_0\tau \gg 1$,

$$j_c(\tau) = \frac{3\pi^2 j_0}{8} \lambda_K^2 [1 + 2\lambda_K \ln(\Lambda_0\tau)] + \mathcal{O}(\lambda_K^4). \quad (5.28)$$

O resultado acima mostra que a nossa conclusão inicial de que a corrente iria alcançar um valor constante no limite $\tau \gg \Lambda_0^{-1}$ não se mantém; o que ocorre é que a corrente continuará crescendo de acordo com o $\ln(\Lambda_0\tau)$. Esse crescimento de $j_c(\tau)$ nos revela que o acoplamento da impureza com os fios está se tornando mais relevante à medida que o tempo pós-*quench* passa. Outro ponto que deve ser ressaltado é que a contribuição em ordem λ_K^3 da Eq. (5.28) é diferente do termo correspondente para a situação de uma impureza não-magnética. Isto evidencia que, em ordem λ_K^3 , estamos de fato vendo uma contribuição puramente relacionada com o caráter magnético da impureza, diferentemente da análise prévia feita em ordem λ_K^2 .

Notemos que neste limite perturbativo, $\lambda_K \ll 1$, o resultado na Eq. (5.28) pode ser reescrito na forma $j_c(\tau) = j_c[\lambda_K^{\text{eff}}(\tau)]$, com $j_c[\lambda_K] = \frac{3\pi^2 j_0}{8} \lambda_K^2$, e

$$\lambda_K^{\text{eff}}(\tau) = \lambda_K + \lambda_K^2 \ln(\Lambda_0\tau), \quad (5.29)$$

$$\approx \frac{\lambda_K}{1 - \lambda_K \ln \Lambda_0\tau} \quad (5.30)$$

sendo o acoplamento Kondo efetivo na escala de tempo τ pós-*quench*². Percebemos assim que a dependência temporal da corrente é ditada *exclusivamente* por $\lambda_K^{\text{eff}}(\tau)$, o qual se mostra *independente* dos detalhes de como o *quench* foi feito. Também notamos, com base no resultado acima, que $j_c(\tau \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$, desde que $\lambda_K > 0$. Como esta não representa uma situação física, a teoria de perturbação em λ_K empregada por nós deve deixar de ser válida em algum instante de tempo. Esta escala de tempo é tal que $\lambda_K^{\text{eff}}(\tau_K) \sim \mathcal{O}(1)$, isto é, um número da ordem de 1. Com isso temos $\tau_K \sim \Lambda_0^{-1} e^{1/\lambda_0} \gg \Lambda_0^{-1}$, sendo $\lambda_0 \equiv \lambda_K$ o acoplamento Kondo não renormalizado (o qual não depende do tempo). A escala de

² Visto que $\lambda_K \ll 1$, podemos usar que $\frac{1}{1-x} \approx 1 + x + \mathcal{O}(x^2)$.

tempo τ_K é chamada de tempo Kondo, dado que $\tau_K \sim 1/T_K$, onde T_K é a temperatura Kondo. Escrevendo o acoplamento Kondo efetivo em termos de τ_K temos que

$$j_c(\tau) = \frac{3\pi^2}{8} \frac{j_0}{\ln^2(\tau_K/\tau)}. \quad (5.31)$$

A equação acima nos diz que $j_c(\tau) = j_c(\tau_K/\tau)$, como uma consequência direta de $j_c(\tau) = j_c[\lambda_K^{\text{eff}}(\tau)]$. Além disso, a Eq. (5.31) expõe um fato curioso: os detalhes microscópicos do nosso modelo de rede, fixados por λ_K e Λ_0 , não aparecem explicitamente na expressão para a corrente. Os detalhes microscópicos entram *unicamente* na razão τ_K/τ (ver a expressão de τ_K). Em outras palavras, independente de t , t' , U_d , ϵ_d e α , a corrente será sempre dada como uma função de τ_K/τ .

É importante mencionar que os autores do trabalho [126] também chegaram no resultado da Eq. (5.31). Porém, na referência citada este resultado foi obtido com base em argumentos da teoria do RG, enquanto aqui nós derivamos tal resultado calculando explicitamente a contribuição em ordem λ_K^3 .

5.2.2 Elétrons interagentes

Agora focaremos nossa atenção na situação em que os elétrons nas cadeias interagem. Como descrito no capítulo 4, no setor de baixas energias as cadeias *metálicas* interagentes são descritas pelo modelo de líquido de Luttinger [5]. Assumiremos, assim como antes, que o sistema é preparado no estado descrito pela Eq. (4.30), isto é, que as cadeias estão em seus respectivos estados fundamentais e a impureza em um estado de spin polarizado. Dentro da teoria de baixas energias, o estado fundamental da cadeia de Hubbard ℓ , $|GS\rangle_\ell$, corresponde ao vácuo de bósons de carga e spin [5], ou seja, $\eta_{\ell,\lambda,q} |GS\rangle_\ell = 0$ para $\lambda = c, s$ e todo $q > 0$.

Como discutido no capítulo anterior (veja o texto abaixo da Eq. (4.21)), o hamiltoniano Kondo agora torna-se

$$\begin{aligned} H_K = & \pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_0 \cdot \sum_{\ell} : \psi_{\ell}^{\dagger}(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_{\ell}(0) : \\ & + \pi v_F \Gamma_K \mathbf{S}_0 \cdot \left[: \psi_1^{\dagger}(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_2(0) + \text{H.c.} \right] :, \end{aligned} \quad (5.32)$$

deixando claro que as contribuições $\ell = \ell'$ e $\ell \neq \ell'$ renormalizam de maneiras distintas (veja a subseção 5.2.3). Novamente, não escrevemos o termo $\propto W'$ da Eq. (4.21); o efeito desse termo para o transporte será analisado separadamente também na seção 5.2.3. Visto que o termo responsável pelo transporte na equação acima é o termo $\propto \Gamma_K$, na Eq. (5.8) devemos fazer $\lambda_K \rightarrow \Gamma_K$.

Mais uma vez, para obter como a corrente cruzando a impureza evolui no tempo, devemos avaliar os correladores nas Eq's. (5.14) e (5.15). Devido à interação elétron-elétron,

é preciso bosonizar as expressões de H_K e $\hat{j}_c$. Seguindo o que foi feito no capítulo 4, temos explicitamente

$$H_K = \pi v_F \lambda_K \left\{ S_0^+ \frac{1}{2\pi\alpha} e^{-i\sqrt{\pi}\phi_s^+(0)} \left(\cos[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)] + \mathcal{C} \cos[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0) - eV\tau] \right) + \text{H.c.} \right. \\ \left. - S_0^z \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \partial_x \phi_s^+(0) + \frac{\mathcal{C}}{\pi\alpha} \sin[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0) - eV\tau] \sin[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)] \right) \right\}, \quad (5.33)$$

$$\hat{j}_c = ie\pi v_F \Gamma_K \left\{ S_0^+ \frac{(-i)}{\pi\alpha} e^{-i\sqrt{\pi}\phi_s^+(0)} \sin[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0) - eV\tau] - \text{H.c.} \right. \\ \left. + S_0^z \frac{(-2i)}{\pi\alpha} \sin[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)] \cos[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0) - eV\tau] \right\}, \quad (5.34)$$

onde usamos a definição $\lambda_K \mathcal{C} \equiv \Gamma_K$ e ignoramos os fatores de Klein a fim de deixar as expressões mais simplificadas. Contudo, na hora de avaliar os correlatores em (5.15) não podemos deixar de levar em consideração o sinal negativo trazido pelo produto $\prod_{\ell,\sigma} F_{\ell,\sigma}$ ³. Pela expressão de H_K acima vemos que a versão bosonizada da transformação em (5.9) é fazer com que

$$\begin{aligned} \phi_s^\pm &\rightarrow \phi_s^\pm, \\ \phi_c^+ &\rightarrow \phi_c^+, \\ \phi_c^- &\rightarrow \phi_c^- - \frac{eV\tau}{\sqrt{\pi}}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

As relações acima resumem todo o desenvolvimento feito na seção 5.1 e explicitam o que é essencial para estudar o transporte dependente do tempo em um sistema bosonizado.

Para calcular os correlatores nas Eq's. (5.14) e (5.15) seguiremos os passos que foram feitos na subseção anterior. Em ordem λ_K^2 a contribuição vem da Eq. (5.19) com os novos operadores F , G , f e g bosonizados. Para avaliar os correlatores que surgem nessa ordem devemos usar que

$$\langle e^{ia\phi_{\ell,\lambda}(\tau)} e^{-ib\phi_{\ell',\lambda'}(\tau')} \rangle_0 = \frac{\delta_{ab}\delta_{\ell\ell'}\delta_{\lambda\lambda'}}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')]^{a^2/\pi K_\lambda}}. \quad (5.36)$$

Como está detalhado no apêndice D, nessa ordem temos o resultado

$$j_c^{(2)}(\tau) = \frac{3\pi j_0}{4} \frac{\sin[\nu\frac{\pi}{2}]\Gamma_K^2}{\nu} \frac{1}{(\Lambda_0\tau)^\nu} + \mathcal{O}(\tau^{1-\nu}), \quad (5.37)$$

onde $\nu = K_c^{-1} - 1 \geq 0$ e aproximamos $\alpha\Lambda_0 \approx v_F$. De imediato notamos que neste caso interagente a contribuição dominante para $j_c^{(2)}(\tau)$ não é mais uma constante, ver a Eq. (5.22), mas sim uma lei de potência com expoente que depende da interação. Também

³ Uma boa estratégia para identificar quando o produto dos fatores de Klein resultará em um sinal negativo é ter sempre em mente a correspondente versão refermionizada do correlator bosônico, pois no limite não-interagente podemos comparar os dois resultados. Para mais detalhes ver o apêndice D.

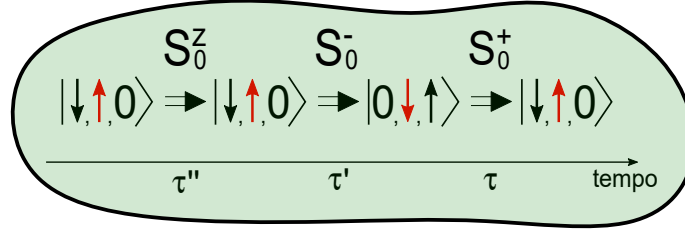


Figura 17 – Representação esquemática de um processo que gera o correlator da Eq. (5.38). As setas vermelhas representam o estado de spin da impureza, enquanto as setas pretas o estado de spin de um elétron na cadeia ℓ . O ket é definido como: |cadeia 1, impureza, cadeia 2⟩.

vemos que quando $\nu \rightarrow 0$, isto é, o limite não interagente, o resultado acima se iguala à Eq. (5.22), como deveria ser. Assim como antes, o resultado na equação acima não contém informação sobre o efeito Kondo, sendo necessário calcular a contribuição em ordem λ_K^3 .

Para a impureza, os correladores relevantes em ordem λ_K^3 são aqueles nas Eq.'s (5.23) e (5.24), sendo que, novamente, apenas (5.23) contribuirá. Para os férmions das cadeias, além do correlator de dois pontos da Eq. (5.36), também precisaremos avaliar a seguinte função de correlação de três pontos⁴

$$z^{(\ell)}(\tau, \tau', \tau'') \equiv \langle T e^{-i\beta\phi_{\ell,s}(\tau)} e^{i\beta\phi_{\ell,s}(\tau')} \partial_x \phi_{\ell,s}(\tau'') \rangle_0, \quad (5.38)$$

sendo $\beta = \sqrt{\pi/2}$. O correlator acima foge do tipo de correlator que surge em uma teoria bosonizada, usualmente nos deparamos com produtos de exponenciais, como em (5.36), mas neste caso também há uma contração com a derivada do campo $\phi_{\ell,s}$. Se refermionizarmos o problema, tal correlator é proveniente de

$$\langle T \psi_{1\downarrow}^\dagger(\tau) \psi_{2\uparrow}(\tau) \psi_{2\uparrow}^\dagger(\tau') \psi_{1\downarrow}(\tau') [\rho_{1s}(\tau'') + \rho_{2s}(\tau'')] \rangle_0, \quad (5.39)$$

sendo $\rho_{\ell s} = (\rho_{\ell\uparrow} - \rho_{\ell\downarrow})/\sqrt{2}$. O elétron é espalhado pela impureza três vezes, sendo que em um dos espalhamentos tanto o elétron proveniente do fio quanto a impureza permanecem nos seus respectivos estados iniciais (antes do espalhamento), isto é, os estados de spin da impureza e dos elétrons não são alterados, como também o elétron permanece no mesmo fio. A Fig. 17 esquematiza um processo desse tipo. Como está descrito do apêndice D, $z^{(\ell)}(\tau > \tau' > \tau'')$ é dada por

$$z^{(\ell)}(\tau > \tau' > \tau'') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\alpha + i\nu_F(\tau' - \tau'')} - \frac{1}{\alpha + i\nu_F(\tau - \tau'')} \right] \frac{1}{[1 + \Lambda_0(\tau - \tau')]^{1/2}}. \quad (5.40)$$

Após calcular as duas contribuições na Eq. (5.15) e efetuar uma das duas integrações, obteremos

$$j_c^{(3)}(\tau) = \frac{ie^2 V \lambda_K \Gamma_K^2}{4} \int_0^{\Lambda_0 \tau} du \frac{u \ln s(u)}{[s(u)]^{\nu+2}} \left\{ 1 - \frac{2[s(u)]^2}{u(u-2i)} \right\} + \text{H.c.} + \dots, \quad (5.41)$$

⁴ O cálculo correto de tal função de correlação nos rendeu bons meses devido à presença de um sinal negativo indesejado. No fim descobrimos que o sinal extra vinha da bosonização dos operadores, como consequência das diferentes convenções adotadas em [96] e [108].

onde por $+\dots$ queremos dizer que estamos desprezando termos que decaem como ou mais rápido que $1/\tau^{\nu-1}$. No limite $\tau \gg \Lambda_0^{-1}$ a integral acima pode ser calculada analiticamente. Agrupando o resultado com a contribuição $j_c^{(2)}(\tau)$ chegamos que a corrente evolui no tempo como

$$j_c(\tau) = \frac{3\pi j_0}{4} \frac{\sin[\nu \frac{\pi}{2}] \Gamma_K^2}{\nu} \frac{1}{(\Lambda_0 \tau)^\nu} \left[1 + 2\lambda_K \ln(\tilde{\Lambda}_0 \tau) \right] + \mathcal{O}(\Gamma_K^4), \quad (5.42)$$

onde $\tilde{\Lambda}_0 = \Lambda_0 \exp \left[\frac{1}{\nu} - \frac{\pi}{2} \cot(\frac{\pi\nu}{2}) \right]$. Vemos que, assim como no caso de elétrons livres, a contribuição em ordem Γ_K^3 apresenta a singularidade (para tempos longos) logarítmica característica do efeito Kondo. Além disso, também obtivemos que o *cutoff* associado com essa dependência logarítmica é afetado pelas interações dos elétrons nas cadeias. Como veremos logo abaixo, esta dependência de Λ_0 com a interação é crucial para entender como o efeito Kondo é afetado pelas interações. Notemos também que no limite não interagente, $\nu \rightarrow 0$, a expressão acima se iguala à Eq. (5.28).

Em analogia com o que foi feito no caso não interagente, podemos reescrever nosso resultado (5.42) como

$$j_c(\tau) = \frac{3\pi j_0}{4} \frac{\sin[\nu \frac{\pi}{2}]}{\nu} [\Gamma_K^{\text{eff}}(\tau)]^2, \quad (5.43)$$

com

$$\Gamma_K^{\text{eff}}(\tau) \approx \frac{1}{(\Lambda_0 \tau)^{\nu/2}} \frac{\Gamma_K}{1 - \lambda_K \ln(\tilde{\Lambda}_0 \tau)}. \quad (5.44)$$

No limite de interação fraca a lei de potência na equação acima deixa $\Gamma_K^{\text{eff}}(\tau)$ finito em um largo intervalo de tempo, o que faz com o termo logaritmo contribua cada vez mais e eventualmente $\lambda_K \ln(\tilde{\Lambda}_0 \tau_K^*) \sim 1$. Esta nova escala de tempo é

$$\tau_K^* \sim \tau_K \left(1 - \frac{\pi U}{12v_F} \right), \quad (5.45)$$

onde usamos que $K_c \approx 1 - U/(\pi v_F)$ no limite de interação fraca. Primeiramente, quando $U = 0$ recuperamos o resultado da seção anterior, $\tau_K \sim \Lambda_0^{-1} e^{1/\lambda_0}$. Uma vez que $U > 0$, o resultado acima nos diz que quando os elétrons interagem a escala de tempo característica do efeito Kondo, diminui. Este resultado é uma consequência direta da renormalização do *cutoff* Λ_0 pela interação U e, como explicitamente mostrado pelo nosso cálculo, só aparece em altas ordens da teoria de perturbação, portando está inteiramente associado com a física Kondo.

A conclusão colocada pela Eq. (5.45) foi também obtida no capítulo 4 com base nos resultados numéricos vindos de tDMRG. Lá obtivemos essa conclusão vendo que as curvas de magnetização decaíam mais rapidamente quando aumentávamos a interação U nas cadeias, fato este que nos diz que o estado singleto, o qual tem $m_0(\tau) = 0$, é alcançado para tempos mais curtos, em comparação com o caso $U = 0$. Além disso, também vimos lá, com base nos resultados analíticos, que o efeito predominante da interação está associado com uma renormalização dos parâmetros não-universais da teoria, como o *cutoff*, algo que

vimos esclarecedoramente aqui. O resultado (5.45) é um dos principais resultados desta primeira parte da tese.

Como exposto na nossa introdução, uma quantidade de extremo interesse, tanto teórico quanto experimental, quando se investiga o efeito Kondo é a nuvem Kondo ξ_K , isto é, a escala de comprimento na qual as correlações antiferromagnéticas são sentidas na cadeia. Dado nosso resultado (5.45) e a definição $\xi_K = \frac{v_F}{T_K}$, chegamos que

$$\xi_K = v_F \Lambda_0^{-1} e^{1/\lambda_0} \left(1 - \frac{\pi U}{12 v_F} \right), \quad (5.46)$$

onde explicitamos a forma de τ_K . Este resultado nos mostra que o comprimento da nuvem Kondo é reduzido por um fator $\mathcal{O}(U)$ para interações fracas. Apesar de ser uma pequena correção, do ponto de vista de simulações numéricas, tal resultado implica que, quando os elétrons estão interagindo entre si, o limite não perturbativo do efeito Kondo, $\xi_K/L \sim 1$, é atingido com cadeias de comprimento menor. Se a conclusão geral de ξ_K diminuir com U se mantiver para valores arbitrários de U , isto representaria uma interessante saída para investigações numéricas, dado o custo computacional alto de simular tais sistemas eletrônicos finitos.

5.2.3 Entendendo os resultados com base no RG

Vamos agora analisar os resultados obtidos até então sob a luz do RG. Segundo a teoria do RG as equações de escala do efeito Kondo para uma impureza na geometria *embedding* são (em ordem quadrática):⁵ [108]

$$\frac{d}{dl} \lambda_K = \frac{1}{2} (\lambda_K^2 + \Gamma_K^2), \quad (5.47)$$

$$\frac{d}{dl} \Gamma_K = \frac{1}{2} (1 - K_c^{-1}) \Gamma_K + \lambda_K \Gamma_K, \quad (5.48)$$

onde $dl \equiv -d\Lambda/\Lambda$ parametriza o fluxo em direção ao setor de baixas energias $\Lambda \rightarrow 0$ ($l \rightarrow \infty$). No caso não-interagente, $K_c = 1$, estas equações se reduzem a

$$\frac{d\lambda_K}{dl} = \lambda_K^2, \quad (5.49)$$

como discutido no capítulo 3, que tem como solução

$$\lambda_K(l) = \frac{\lambda_K}{1 - \lambda_K l}, \quad (5.50)$$

com $l = \ln \frac{\Lambda_0}{\Lambda} > 0$. Essas equações nos dizem como o acoplamento Kondo se comporta, efetivamente, quando diminuimos a escala de energia do sistema, nos permitindo assim fazer uma descrição efetiva do problema.

⁵ Estas equações podem ser diretamente obtidas, por exemplo, aplicando o método descrito no apêndice B para o caso interagente.

O nosso resultado para $U = 0$, Eq. (5.28), nos mostrou que no limite $\Lambda_0\tau \gg 1$ a corrente de carga é dada em termos do que chamamos de acoplamento Kondo tempo-renormalizado, isto é,

$$\lambda_K(\tau) = \frac{\lambda_K}{1 - \lambda_K \ln \Lambda_0\tau}. \quad (5.51)$$

Isso sugere que a dinâmica pós-*quench* no intervalo de tempo $\tau \gg \Lambda_0^{-1}$ é governada pelas equações do RG com o tempo cumprindo a função de uma temperatura efetiva $T_{\text{eff}} \sim 1/\tau$, que corta as singularidades logarítmicas associadas ao efeito Kondo. No trabalho [71] sobre a dinâmica do efeito Kondo, os autores chegaram a esta mesma conclusão, porém por outro caminho. Já no trabalho [50], que não envolve dinâmica, é o tamanho finito do sistema que corta as singularidades logarítmicas do infravermelho.

Na situação de elétrons interagentes obtivemos que a corrente escala no tempo segundo a Eq. (5.42). Neste caso a complexidade das equações do RG, Eq. (5.47) e (5.48), é tamanha que impossibilita obter $\lambda_K(l)$ e $\Gamma_K(l)$, como feito no caso $U = 0$. Porém, pelo nosso resultado em (5.42) podemos visualizar contribuições dessas equações. A primeira é o decaimento como lei de potência com expoente $\nu = K_c^{-1} - 1$. Tal decaimento da corrente está relacionado com o primeiro termo da Eq. (5.48), visto que a teoria de perturbação em ordem mais baixa prevê $j_c(\tau) \sim \Gamma_K^2(\tau)$. A segunda contribuição em (5.42) é a parte que escala como um logaritmo. Associamos essa dependência temporal ao segundo termo de (5.48), o qual mistura os fluxos das duas equações.

Portanto, concluímos que, na região de tempo $\tau \gg \Lambda_0^{-1}$, a dinâmica pós-*quench* é efetivamente guiada pelas equações de fluxo do RG, partindo do ponto fixo de acoplamento fraco ($\lambda_K \ll 1$) até o ponto fixo de acoplamento forte ($\lambda_K \gg 1$). Contudo, vimos também que nem toda informação relevante é capturada pelas equações do RG, como é o caso da renormalização do *cutoff* pelas interações, a qual é crucial para entender o papel da interação elétron-elétron no feito Kondo.

Vejamos agora os efeitos do termo proporcional a W' na Eq. (4.21). Antes de tudo, notemos que esse termo se anula quando consideramos a simetria partícula-buraco (PH): $\epsilon_d = -U_d/2$. Sem essa simetria, W' gera tunelamento entre as cadeias mas sem spin-*flip* no processo, sendo então esperado que tal termo produza correções para a corrente. No caso de elétrons livres, W' tem dimensão de escala igual a 1 (veja a Eq. (3.45)), isto é, é um operador marginal. Logo, dado que a menor contribuição para a corrente é em ordem W'^2 (veja a Eq. (5.14)), o resultado (5.28) é simplesmente corrigido por uma constante $\propto W'^2 \ll 1$. Já quando os elétrons interagem, a dimensão de escala do termo W' é $\frac{K_c^{-1}+1}{2} > 1$ (veja a Eq. (3.45)), fazendo com que a Eq. (5.42) seja corrigida por uma lei de potência da forma $\propto W'^2/\tau^\nu$. Como $W' \ll 1$, em ambas as situações teremos apenas correções subdominantes para $j_c(\tau)$, de forma que os efeitos de tal termo podem ser ignorados quando $\tau \ll \tau_K$.

5.2.4 j_c em tempos $\tau \gg \tau_K$

Dada nossa conclusão na subseção anterior de que a dinâmica pós-*quench* no limite $\Lambda_0\tau \gg 1$ é governada pelo fluxo do RG, podemos obter como a corrente de carga se comporta quando $\tau \gg \tau_K$ considerando resultados do problema estático [18, 48].

Como discutido nos capítulos 2 e 3, para $T \ll T_K$ a física Kondo é governada pelo ponto fixo de acoplamento forte $\lambda_K = \infty$ [18, 48]. Isto significa que a impureza forma um estado singleto com os elétrons de condução e, visto a forte energia de ligação, $\propto \mathcal{O}(\lambda_K)$, isto inibe que qualquer outro elétron vá ao sítio da impureza. Com isso, em temperaturas suficientemente baixas (ou tempos muito longos no nosso caso), a impureza se desacopla do sistema deixando para trás uma nova condição de contorno para os elétrons que não participam da formação do singleto. Para a geometria que estamos tratando, a impureza se ligará a um elétron que está no orbital simétrico s (veja a Eq. (4.7)), definido por

$$c_s = \frac{c_1 + c_{-1}}{\sqrt{2}}. \quad (5.52)$$

Dessa forma teremos a nova condição de contorno para os outros elétrons: $c_s = 0$. Contudo, os elétrons ainda podem se propagar entre os fios pelo orbital antissimétrico a , $c_a = \frac{c_1 - c_{-1}}{\sqrt{2}}$, e, com efeito, conduzir. Assim, na ausência da simetria PH esperamos que

$$j_c(\tau \rightarrow \infty) \rightarrow j_0, \quad (5.53)$$

independente de U ⁶. Os efeitos da ausência da simetria PH serão tratados logo abaixo, veremos que para o caso $U > 0$ seus efeitos são substanciais.

A nova condição de contorno mencionada no parágrafo anterior pode ser vista em termos dos operadores de campo dos fios. Como consequência dos elétrons não poderem acessar o orbital s temos que $c_s = 0$. Para o caso $U = 0$ podemos ver isso como segue. Definindo as novas combinações de campos [50]

$$\psi_{e/o}(x) = \frac{\psi_L(x) \pm \psi_R(x)}{\sqrt{2}}, \quad (5.54)$$

para todo $x \in \mathbb{R}$, como também

$$\psi_{L,e/o}(x) = \psi_{e/o}(x), \quad \psi_{R,e/o}(x) = \psi_{e/o}(-x), \quad (5.55)$$

para $x > 0$,⁷ é imediato ver que, no ponto fixo $\lambda_K = 0$, os elétrons devem satisfazer $\psi_{L,e}(0^+) = -\psi_{R,e}(0^+)$, dado que $\psi(0^\pm) = 0$. Por outro lado, no ponto fixo $\lambda_K = \infty$ temos $c_s \sim \psi_s = (\psi(1) + \psi(-1))/\sqrt{2} = 0$. Assumindo que $k_F = \pi/2$ (simetria PH), isto nos conduz a $\psi_{L,e}(0^+) = \psi_{R,e}(0^+)$. Em resumo, para os elétrons das cadeias, os limites extremos

⁶ Pois até na situação de $U > 0$ ambos os acoplamentos Kondo renormalizam para ∞ , ver as Eq.'s (5.47) e (5.48).

⁷ Em oposição ao que foi feito no capítulo 4, mapeamos agora o problema apenas no semi-eixo real $x > 0$.

do problema Kondo podem ser encarados como simplesmente uma mudança nas condições de contorno:

$$\lambda_K = 0 \Rightarrow \psi_{L,e}(0^+) = -\psi_{R,e}(0^+), \quad (5.56)$$

$$\lambda_K = \infty \Rightarrow \psi_{L,e}(0^+) = \psi_{R,e}(0^+), \quad (5.57)$$

como esperado para um problema de borda [5, 23, 48].

Voltemos agora à questão de determinar $j_c(\tau \gg \tau_K)$. Para entender como a corrente alcançará o limite ideal j_0 , é preciso analisar os operadores que podem perturbar o ponto fixo $\lambda_K = \infty$. Iniciando com o caso $U = 0$, o hamiltoniano efetivo que descreve a física do sistema em tempos longos é:

$$H = v_F \int dx [\psi_R^\dagger(-i\partial_x)\psi_R + \psi_L^\dagger(i\partial_x)\psi_L] + \delta H_{sc}, \quad (5.58)$$

onde δH_{sc} contém os operadores que perturbam o ponto fixo e $\psi_{R/L}(x)$ satisfazem a condição de contorno (5.57). Quando $\delta H_{sc} \neq 0$ temos uma contribuição que reduzirá a corrente do seu valor máximo j_0 . Dado que a impureza desacoplou do sistema, δH_{sc} só pode ser formado pelos operadores de campo $\psi_{R/L}$. O único operador que conserva a simetria PH junto com a simetria de rotação de spin SU(2) é [32, 48, 128, 129]

$$\delta H_{sc} = -g : \mathbf{J}^2(0) :, \quad (5.59)$$

conforme a teoria de líquido de Fermi local de Nozières. Aqui $\mathbf{J}(0) = \psi^\dagger(0)\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\psi(0)$ é a densidade de spin na origem e $g \propto 1/T_K$ a constante de acoplamento. A perturbação acima é efeito de uma interação residual entre os elétrons da cadeia em torno de $x = 0$, gerada na formação do estado singlete. Tal operador possui uma dimensão de escala igual a 2,⁸ mostrando que δH_{sc} é irrelevante, no sentido do RG, de modo que $\lambda_K = \infty$ é um ponto fixo estável da teoria (Kondo de 1-canal) [48].

Seguindo uma abordagem desenvolvida na Ref. [81], podemos obter $j_c(\tau \gg \tau_K)$ fazendo teoria de perturbação em g . Como está detalhado no apêndice D, temos que a corrente escala no tempo como

$$j_c(\tau) \approx j_0 \left[1 - \left(\frac{\tau_K}{\tau} \right)^2 \right]. \quad (5.60)$$

O resultado acima nos mostra que a corrente escala para seu valor ideal como uma lei de potência. Além disso, vemos que o tempo Kondo τ_K pode ser indubitavelmente obtido do coeficiente de $1/\tau^2$ da corrente, o qual não está presente na expressão de $j_c(\tau \ll \tau_K)$ (veja a Eq. (5.22)). Os resultados (5.31) e (5.60) podem ser obtidos do problema estático [46] fazendo $T \rightarrow 1/\tau$, deixando claro o papel do tempo na dinâmica pós-*quench*, como já apontado por nós.

⁸ Esse resultado pois $\Delta_\psi = 1/2$ para elétrons livres; ver a Eq. (5.20).

	Operador	Dimensão de escala
$U = 0$	$\mathbf{J}^2(0)$	2
$U > 0$	$\psi_1^\dagger(0)\psi_2(0) + \text{H.c.}$	$\frac{K_c^{-1}+1}{2}$

Tabela 2 – Operadores que perturbam o ponto fixo de acoplamento forte $\lambda_K = \infty$ com suas respectivas dimensões de escala.

É importante se perguntar qual o papel da quebra da simetria PH no sistema, visto que até agora a considerávamos presente. Para tratar essa situação é suficiente tomar em (5.58):

$$H \rightarrow H + \mathcal{W} : [\psi_R^\dagger(0) + \psi_L^\dagger(0)][\psi_R(0) + \psi_L(0)] :, \quad (5.61)$$

onde $\mathcal{W}$ dá a intensidade do espalhamento. Dada a nossa análise na seção 3.3, vimos que esta perturbação é marginal, neste caso de $U = 0$; logo o resultado em (5.60) é simplesmente corrigido por uma constante $\propto \mathcal{W}^2 \ll 1$.

Vejamos agora o caso $U > 0$. Como já discutido, nesta situação o sistema também flui para o ponto fixo de acoplamento forte $\lambda_K = \Gamma_K = \infty$ (veja as Eq.'s (5.47) e (5.48)). Dada a transmissão entre as cadeias por meio do orbital anti-simétrico o , o hamiltoniano que descreve o sistema é igual ao dado em (5.58), com o primeiro termo substituído por H_{LL} . Contudo, na ausência da simetria PH, essencial para termos um comportamento LL,⁹ precisamos considerar o segundo termo de (5.61). Este termo tem agora dimensão de escala igual a $(1 + K_c)/2 < 1$, logo é relevante no sentido do RG (veja o capítulo 3). Assim, neste caso o ponto fixo estável é constituído por dois LL desacoplados [50, 108], uma situação semelhante ao caso $\lambda_K = \Gamma_K = 0$, com a condição de contorno extra dos elétrons não poderem ir para o orbital s . Portanto, temos que neste caso de elétrons interagentes $j_c(\tau \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, mostrando como a correlação eletrônica afeta drasticamente a física do sistema.

Seguindo a mesma estratégia anterior, para obter $j_c(\tau)$ precisaremos determinar a forma de δH_{sc} . Por simetria $SU(2)$, o operador que perturba o ponto fixo é o *hopping* entre os dois LL. Escrevendo os campos dos fios como em (4.13), temos que agora

$$\delta H_{sc} = \hbar \left[\psi_1^\dagger(0)\psi_2(0) + \text{H.c.} \right], \quad (5.62)$$

com $\hbar \ll 1$. A tabela 2 contém os operadores que perturbam os pontos fixos de acoplamento forte com as respectivas dimensões de escala de cada operador.

O operador (5.62) já foi analisado por nós: vimos que sua dimensão de escala é igual a $(1 + K_c^{-1})/2 > 1$. Fazendo teoria de perturbação em $\hbar$ (veja o apêndice D) concluimos que

$$j_c(\tau) \approx \frac{4\pi^2 j_0 \hbar^2}{(\Lambda_0 \tau)^\nu}, \quad (5.63)$$

⁹ Em semipreenchimento qualquer valor de $U > 0$ abriria um *gap* de carga no sistema [5].

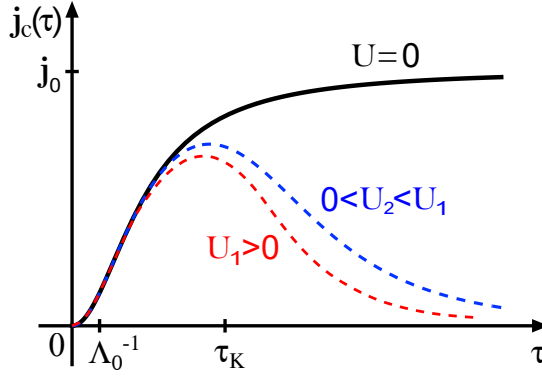


Figura 18 – Comportamento esquemático da corrente de carga $j_c(\tau)$ cruzando a impureza para diferentes valores da interação elétron-elétron U .

com $\nu = K_c^{-1} - 1$, como antes. Vemos que a corrente escala para zero como uma lei de potência com expoente dependente do parâmetro de Luttinger.

Em resumo, nós encontramos que a corrente de carga em um tempo τ pós-*quench* é dada por

$$j_c(\tau) \approx \begin{cases} \frac{3\pi^2}{8} \frac{j_0}{\ln^2\left(\frac{\tau_K}{\tau}\right)}, & \text{se } \tau \ll \tau_K \\ j_0 \left[1 - \left(\frac{\tau_K}{\tau}\right)^2 \right], & \text{se } \tau \gg \tau_K \end{cases} \quad (5.64)$$

para elétrons livres, e

$$j_c(\tau) \approx \begin{cases} \frac{3\pi j_0}{4} \frac{\sin[\nu \frac{\pi}{2}] \Gamma_K^2}{\nu} \frac{1}{(\Lambda_0 \tau)^\nu} \left[1 + 2\lambda_K \ln(\tilde{\Lambda}_0 \tau) \right], & \text{se } \tau \ll \tau_K^* \\ \frac{4\pi^2 j_0 \hbar^2}{(\Lambda_0 \tau)^\nu}, & \text{se } \tau \gg \tau_K^* \end{cases} \quad (5.65)$$

onde $\nu = K_c^{-1} - 1$, para elétrons interagentes. Notemos como a correlação eletrônica afeta o comportamento de $j_c(\tau)$, em especial no limite de tempos longos, depois que a impureza foi blindada pelos elétrons de condução.

Por fim, resta-nos agora saber como $j_c(\tau)$ comporta-se na região de tempo $\tau \sim \tau_K$. Infelizmente a abordagem empregada por nós até agora, fundamentada em teoria de perturbação + argumentos de RG, não se aplica nessa região de tempo, pois $\lambda_K \sim \mathcal{O}(1)$, o que invalida qualquer análise perturbativa. Entretanto, é sabido que o efeito Kondo é caracterizado por um *crossover* e não por uma transição de fases [36]. Logo, $j_c(\tau)$ deve ser uma função suave, de forma que para todo tempo τ pós-*quench* devemos ter um comportamento como esquematizado na Fig. 18.

5.3 Razão Universal

Uma pergunta que surge, dado nossos resultados, em especial aquele na Eq. (5.64), é se a magnetização da impureza também é uma função de escala do acoplamento Kondo

tempo-renormalizado, isto é

$$m_0(\tau) \stackrel{?}{=} m_0(\tau_K/\tau). \quad (5.66)$$

A importância em descobrir observáveis que são funções de λ_K^{eff} reside principalmente em se ter uma definição precisa de τ_K (ou, equivalentemente, de T_K). Por exemplo, nas referências [52, 53] os autores foram capazes de obter numericamente T_K e ξ_K colapsando curvas com diferentes valores de λ_K . Então nos perguntamos se a magnetização da impureza pode ser usada para extrair τ_K com resultados vindo de tDMRG.

Para saber se $m_0(\tau)$ pode ser escrita como uma função da razão τ_K/τ precisaremos calcular esta quantidade até, no mínimo, ordem λ_K^3 . Para os nossos propósitos, consideraremos agora que a impureza está conectada à borda de apenas uma cadeia. No limite Kondo, isto é, quando temos apenas flutuações de spin na impureza, o acoplamento entre a impureza e o fio é dado pela Eq. (4.28). Assim, o hamiltoniano de baixas energias que descreve o sistema (para $\tau > 0$) fica

$$H = H^{\text{LL}} + \pi v_F \lambda_K \left[S_0^+ \frac{e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_s(0)}}{2\pi\alpha} + S_0^- \frac{e^{i\sqrt{2\pi}\phi_s(0)}}{2\pi\alpha} - S_0^z \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi_s(0) \right], \quad (5.67)$$

onde λ_K é o acoplamento Kondo sem dimensão e ϕ_s é o campo bosônico que descreve as flutuações de spin no fio. No hamiltoniano acima também desprezamos o termo de *backscattering* que surge da bosonização da cadeia de Hubbard; para mais detalhes voltar à seção 4.1.

Como detalhado no capítulo anterior, dentro do nosso protocolo de *quench* a magnetização da impureza é obtida de

$$m_0(\tau) = \langle \Psi(\tau) | S_0^z | \Psi(\tau) \rangle, \quad (5.68)$$

onde $|\Psi(\tau)\rangle$ é o estado evoluído do hamiltoniano (5.67) calculado no tempo τ pós-*quench*. Porém, agora adotaremos uma estratégia diferente para calcular $m_0(\tau)$. Procurando empregar uma descrição similar àquela da seção anterior 5.1, consideraremos a seguinte quantidade

$$\hat{j}_s = \frac{d}{d\tau} S^z = \pi v_F \lambda_K : \psi^\dagger(0) (\mathbf{S}_0 \times \boldsymbol{\sigma})_z \psi(0) :, \quad (5.69)$$

onde S^z é a componente z do operador de spin do fio. A quantidade $\hat{j}_s$ representa uma corrente de spin que flui para o fio após efetuarmos o *quench*. Diferentemente da corrente de carga investigada na seção anterior, esta corrente surge não da aplicação de potenciais químicos, mas sim do processo de spin *flip* inerente ao hamiltoniano Kondo; veja a Fig. 19 para um entendimento visual. Contudo, dado que o sistema como um todo, impureza + fio, conserva spin, a magnetização da impureza e a corrente de spin devem satisfazer a

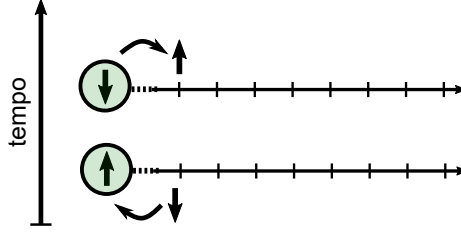


Figura 19 – Mecanismo dinâmico de spin *flip* do hamiltoniano Kondo responsável por gerar uma corrente de spin $\hat{j}_s$ que flui para o fio. Um elétron no estado de spin $|\downarrow\rangle$ é espalhado pela impureza, que está no estado de spin $|\uparrow\rangle$, e, por conservação de spin no processo, o elétron retorna ao fio com spin $|\uparrow\rangle$.

seguinte equação de continuidade para todo $\tau > 0$:¹⁰

$$j_s(\tau) + \frac{d}{d\tau}m_0(\tau) = 0, \quad (5.70)$$

onde $j_s(\tau) = \langle \Psi(\tau) | \hat{j}_s | \Psi(\tau) \rangle$. A equação acima nos permite obter $m_0(\tau)$ por meio da integração de $j_s(\tau)$, impondo a condição inicial $m_0(0) = 1/2$. Isto será feito a seguir.

Notemos que o operador de corrente de spin na Eq. (5.69) é similar ao operador de corrente de carga na Eq. (5.11). Isto nos permite obter $j_s(\tau)$ de uma maneira similar ao que foi feito na seção anterior: no limite $\tau \ll \tau_K$ podemos calcular $j_s(\tau)$ perturbativamente, sabendo que as contribuições em ordem λ_K^2 e λ_K^3 são dadas pelas Eq's. (5.14) e (5.15), respectivamente. Em termos do campo bosônico ϕ_s , $\hat{j}_s$ torna-se

$$\hat{j}_s = i \frac{v_F \lambda_K}{2\alpha} \left[S_0^+ e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_s(0)} - S_0^- e^{i\sqrt{2\pi}\phi_s(0)} \right]. \quad (5.71)$$

Note que o operador acima depende apenas de $S_0^\pm$, deixando claro o processo de spin *flip*. Depois de efetuar o cálculo do correlator envolvido em (5.14) utilizando (5.36), temos o resultado exato em ordem λ_K^2 :

$$\begin{aligned} j_s^{(2)}(\tau) &= \frac{\lambda_K^2 \Lambda_0}{4} \int_0^{\Lambda_0 \tau} du \frac{1}{[s(u)]^2} + \text{H.c.}, \\ &= \frac{\lambda_K^2 \Lambda_0}{2} \frac{\Lambda_0 \tau}{1 + (\Lambda_0 \tau)^2}, \end{aligned} \quad (5.72)$$

onde $s(u) = 1 + iu$ e tomamos $\alpha \Lambda_0 \approx v_F$. É imediato ver que integrando este resultado obteremos o decaimento logarítmico da Eq. (4.44) com o sinal trocado, como consequência da equação da continuidade (5.70). Portanto, este resultado é responsável por descrever as curvas numéricas obtidas pelo tDMRG mostradas na Fig. 13. Logo, como discutido lá, para observarmos a renormalização do acoplamento Kondo devemos calcular a próxima ordem da teoria perturbativa.

¹⁰ Esta equação pode ser obtida derivando a Eq. (5.68) com relação ao tempo.

Em ordem λ_K^3 , a contribuição vem exclusivamente do correlator (5.38). Depois de efetuar uma das duas integrações envolvidas em (5.15), obteremos

$$j_s^{(3)}(\tau) = \frac{\lambda_K^3 \Lambda_0}{2} \int_0^{\Lambda_0 \tau} du \frac{\ln s(u)}{[s(u)]^2} + \text{H.c.} + \dots, \quad (5.73)$$

onde desprezamos termos que decaem como ou mais rápido que $1/\tau^2$ quando $\Lambda_0 \tau \gg 1$. Comparando o resultado acima com aquele na primeira linha da Eq. (5.72), notamos que a contribuição em ordem λ_K^3 é obtida da contribuição em ordem λ_K^2 fazendo o fator extra $\lambda_K \rightarrow 2\lambda_K \ln s(u)$, o que nos dá indícios da renormalização de λ_K . Executando o cálculo da integral em (5.73), concluímos que no limite $\Lambda_0 \tau \gg 1$

$$\begin{aligned} j_s(\tau) &= \frac{\lambda_K^2}{2\tau} [1 + 2\lambda_K \ln \Lambda_0 \tau] + \mathcal{O}(\lambda_K^4), \\ &= \frac{1}{2\tau} [\lambda_K^{\text{eff}}(\tau)]^2 + \mathcal{O}(\lambda_K^4), \end{aligned} \quad (5.74)$$

onde $\lambda_K^{\text{eff}}(\tau)$ é o acoplamento Kondo tempo-renormalizado (veja a Eq. (5.30)). Em primeiro lugar, notemos que o resultado acima, diferentemente da corrente de carga na Eq. (5.28), diminui à medida que o tempo evolui. Este fato é consequência da relaxação do spin da impureza, que fará com que $j_s(\tau \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Vemos também que, assim como (5.28), $j_s(\tau)$ pode ser escrita como uma função apenas de τ_K/τ , a saber,

$$j_s(\tau) = \frac{1}{2\tau} \frac{1}{\ln^2(\tau_K/\tau)}, \quad (5.75)$$

válida quando $\Lambda_0^{-1} \ll \tau \ll \tau_K$. Portanto, assim como a corrente de carga na Eq. (5.28), a corrente de spin que flui para o fio devido à relaxação do spin da impureza na nossa dinâmica pós-*quench* é um observável que pode ser usado para extrair τ_K .

A magnetização da impureza pode ser obtida por meio da equação da continuidade (5.70). Assim, é direto obter que

$$m_0(\tau) = \frac{1}{2} - \frac{\lambda_K^2}{2} \ln(\Lambda_0 \tau) [1 + \lambda_K \ln(\Lambda_0 \tau)] + \mathcal{O}(\lambda_K^4), \quad (5.76)$$

válida para $\Lambda_0^{-1} \ll \tau \ll \tau_K$. Por este resultado notamos que a contribuição em ordem λ_K^3 acelera o decaimento da magnetização da impureza, deixando claro, assim, que a nossa predição inicial na Eq. (4.44) deixa de ser válida dependendo da região de tempo que estamos a tratar. Na Fig. 20 plotamos o resultado acima junto com a Eq. (4.44).

Como podemos notar, nosso resultado (5.76) *não* pode ser reescrito em termos de $\lambda_K^{\text{eff}}(\tau)$ e, à vista disso, não é uma função apenas da razão τ_K/τ , como uma análise prévia baseada em argumentos do RG poderia sugerir. Vejamos agora o porquê disso. Consideremos a seguinte equação da continuidade genérica que associa à carga $\mathcal{Q}$ uma corrente $\mathcal{J}$:

$$\mathcal{J}(\tau) + \frac{d}{d\tau} \mathcal{Q}(\tau) = 0. \quad (5.77)$$

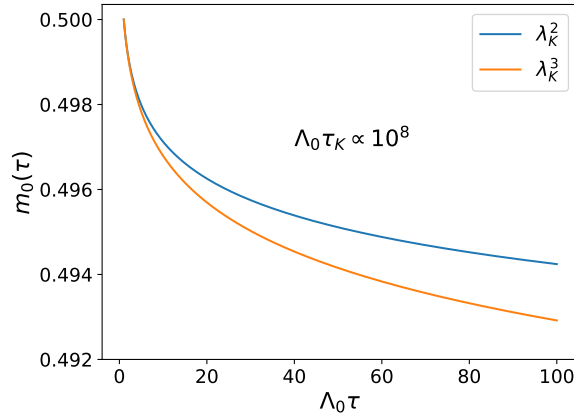


Figura 20 – Relaxação do spin da impureza. A curva azul leva em consideração apenas o termo em ordem λ_K^2 (Eq. (4.44)), enquanto para a curva laranja consideramos a expressão completa (5.76). Vemos que, como esperado, à medida que o tempo cresce o resultado (5.76) se afasta da predição inicial (4.44), mostrando, assim, que altas ordens da teoria de perturbação precisam ser consideradas dependendo do regime de tempo que estamos tratando. Foi considerado $\lambda_K = 0.05$, o qual produz $\Lambda_0 \tau_K \propto 10^8$, e extrapolamos nossos resultados para a região $\tau \sim \Lambda_0^{-1}$.

Isto implica que a corrente terá dimensão de energia (inverso de tempo) quando a carga $\mathcal{Q}$ não tem dimensão. Podemos ver isto explicitamente nos nossos resultados (assumindo a simetria partícula-buraco):

$$j_c(\tau) = \frac{3\pi e^2 V}{4} f(\tau_K/\tau), \quad (5.78)$$

$$j_s(\tau) = \frac{1}{\tau} f(\tau_K/\tau), \quad (5.79)$$

onde $f(x) \equiv \frac{1}{2} \ln^{-2}(x)$. No caso da corrente de carga, a dimensão de energia é proveniente do produto eV , o qual é responsável por produzir uma corrente não-nula, e a dependência temporal principal de $j_c(\tau)$ entra na renormalização do acoplamento Kondo. Por outro lado, a corrente de spin $j_s(\tau)$ indo para o fio surge devido à relaxação do spin da impureza, e não como consequência de uma perturbação externa (como um potencial químico de spin). Isto faz com que a dimensão de energia de $j_s(\tau)$ venha de um fator $1/\tau$, dado que o LL é invariante por transformações de escala e, portanto, não possui uma escala de tempo característica. Assim, este fator $1/\tau$ é o responsável por fazer com que o *cutoff* apareça explicitamente em $m_0(\tau)$, de modo que obtemos $m_0(\tau) \neq m_0(\tau_K/\tau)$. Desta forma concluímos que a magnetização da impureza não representa uma boa quantidade para extrairmos τ_K ; já a sua derivada, isto é, a corrente de spin, sim.

Por fim, notemos que o resultado (5.76) e, com efeito, o (5.75), também descrevem a magnetização e a corrente de spin na geometria *embedding*¹¹ quando os elétrons não

¹¹ Neste caso, obviamente, o operador corrente de spin não é dado pela Eq. (5.69), existem os outros termos $\ell \neq \ell'$ e $\ell = 1$ que contribuem para a relaxação do spin da impureza.

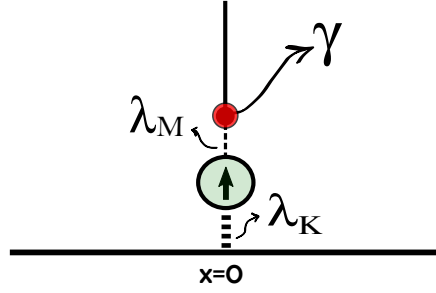


Figura 21 – Uma impureza magnética é acoplada (na geometria *side coupling*) à origem de um líquido de Luttinger e à borda de um supercondutor topológico que suporta um modo zero de Majorana γ .

interagem entre si, como explicado no final da subseção 4.1.1. Com isso, podemos prever que nesta geometria temos

$$\mathcal{R} = \frac{(eV)^{-1} j_c(\tau)}{\tau j_s(\tau)} = \frac{3\pi e}{4}. \quad (5.80)$$

Vemos que tal razão possui um valor universal *independente* dos detalhes microscópicos do nosso modelo, fixados por Λ_0 e λ_K . Este resultado é um tipo de razão de Wilson [31, 37] e exemplifica o limite universal da física Kondo. O resultado da razão acima é previsto por nós no limite $\tau \ll \tau_K$; a questão de saber se esse resultado de mantém para $\tau \gg \tau_K$ ficará para um trabalho futuro, assim como também a verificação numérica, possivelmente utilizando cadeias de spin [53].

5.4 Projeto em andamento: assinaturas na dinâmica *quench* de modos zero de Majorana

Neste projeto nosso objetivo é identificar assinaturas de modos zero de Majorana [130–132] por meio de protocolos de *quench*, algo similar ao que foi feito nos trabalhos [133–136]. Em especial desejamos olhar para o *interplay* entre esses modos zero e o efeito Kondo [137–147]. Para isso consideraremos a junção formada por um líquido de Luttinger, uma impureza magnética e um supercondutor topológico (TSC-QD-LL), veja a Fig. 21, inspirados nos trabalhos [141, 148]. No apêndice E encontram-se alguns dos nossos resultados obtidos até então.

5.5 Conclusões deste trabalho

Nós estudamos a dinâmica pós-*quench* gerada pelo acoplamento repentino entre uma impureza magnética e cadeias metálicas de elétrons interagentes. Focamos na dinâmica em tempo real de dois observáveis locais, a saber, a corrente de carga através da impureza e a magnetização de impureza.

Para elétrons não interagentes, descobrimos que a corrente dependente do tempo é uma função de escala da razão τ_K/τ , sendo τ_K o tempo Kondo. Os regimes $\tau \ll \tau_K$ e $\tau \gg \tau_K$ são governados pelos pontos fixos de acoplamento fraco e forte do modelo Kondo de 1 canal, respectivamente. Para elétrons interagentes, a corrente em tempos $\tau \ll \tau_K$ exibe uma dependência do tipo lei de potência, característica da física de um LL, e uma logarítmica, associada ao efeito Kondo. Analisando a situação de interação elétron-elétron fraca, descobrimos que as interações repulsivas diminuem a escala de tempo Kondo e, conseqüentemente, favorecem a formação da nuvem Kondo, em concordância com nossos resultados numéricos anteriores (veja o capítulo 4).

Com relação à magnetização da impureza, concluímos que este observável não é uma função do acoplamento Kondo tempo-renormalizado, como poderíamos esperar via uma análise baseada apenas em argumentos de RG. Porém, a sua derivada, isto é, a corrente de spin que flui para o(s) fio(s), é uma função do acoplamento Kondo tempo-renormalizado. Isso nos levou a identificar que a razão entre a corrente de carga e a corrente de spin, para o caso de elétrons livres, é uma razão de Wilson, isto é, um número universal que independe dos detalhes microscópicos do modelo.

Parte II: Respostas dinâmicas da fase CDW dos cupratos supercondutores

6 Cupratos supercondutores

Este capítulo de introdução da parte II trata de discutir a física dos cupratos supercondutores [149], focando principalmente em duas fases que surgem ao doparmos esses materiais: a fase com ordenamento de carga (*charge density wave*, CDW) e a fase *pseudogap* (PG). Para isso alguns dos principais resultados experimentais que estabeleceram a existência de tais fases serão revisados. Em especial discutiremos resultados experimentais recentes de resposta Raman eletrônica [17], em que foi medida pela primeira vez a escala de energia, em função da dopagem, da fase CDW. Ao final do capítulo introduziremos o problema que será tratado no capítulo 7.

6.1 Introdução aos cupratos

Os materiais chamados cupratos supercondutores (ou simplesmente cupratos) ganharam notoriedade com a descoberta feita em 1986 por J. G. Bednorz e K. A. Müller [15] de que, ao doparmos, um composto de bário, lantânio, cobre e oxigênio (Ba-La-Cu-O) sofre uma transição para uma fase supercondutora¹. Esta observação consolidou-se como uma quebra de paradigma na física do estado sólido, pois a supercondutividade vista era diferente da supercondutividade conhecida até então, descoberta em 1911 por H. K. Onnes [150] e que era explicada pela teoria BCS². Em especial, a temperatura na qual o material Ba-La-Cu-O entrava na fase supercondutora, 30K, era alta em comparação com a de outros supercondutores conhecidos³ [12].

Logo em seguida à descoberta de Bednorz e Müller, uma crescente investigação, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental, dos compostos à base de cobre e oxigênio (daí o nome cupratos) tomou lugar, sendo descobertos diversos outros materiais que possuíam uma fase supercondutora em temperaturas altas e gerada pelo mecanismo de dopagem de um isolante [151]. Porém, mesmo com intensa pesquisa, até os dias atuais não há uma teoria microscópica que explique a supercondutividade nos cupratos, diferentemente da supercondutividade convencional (descrita pela teoria BCS) [12].

¹ Os portadores de carga fluem pelo material sem dissipar energia, implicando em uma resistividade zero nesta fase [12].

² Formulada em 1957 por Bardeen, Cooper e Schrieffer [14], a teoria que descreve a supercondutividade em materiais como Hg, Pb, Nb, entre outros, tem em seu cerne a formação de um estado ligado de dois elétrons, conhecido posteriormente como um par de Cooper. A interação que mantém o par é mediada por um fônon (*quantum* de vibração da rede) [127]. Os materiais supercondutores que são descritos pela teoria BCS passaram a ser chamados de supercondutores convencionais [12].

³ Com o avanço das pesquisas descobriram-se outras diferenças entre as fases supercondutoras, como a simetria apresentada pelo parâmetro de ordem. Em supercondutores descritos pela teoria BCS, tal parâmetro é esfericamente simétrico no espaço recíproco (*s*-simétrico), enquanto nos cupratos ele possui uma dependência explícita com $\mathbf{k}$, na forma de um orbital *d*.

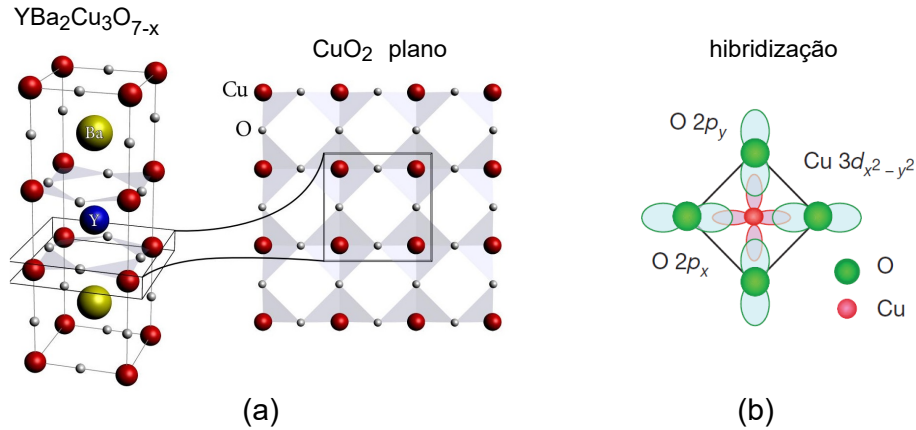


Figura 22 – (a) Estrutura cristalina do cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Mais à direita temos o plano CuO_2 . Figura adaptada da tese de doutoramento de S. Verret [152]. (b) Orbitais atômicos que participam efetivamente das ligações Cu-O no plano. Figura adaptada de [12].

A forma diferente de supercondutividade apresentada pelos cupratos conduziu naturalmente a uma investigação minuciosa de tais compostos. Como está esquematizado na Fig. 22 (a) para o cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO), esses materiais apresentam em sua estrutura química planos de CuO_2 separados por átomos como La, Ba, Y, Sr, Bi, etc., que funcionam como reservatórios de carga [151]. Sabe-se ainda que as ligações interplanos de CuO_2 são fracas, de modo que esses materiais apresentam um comportamento efetivo bidimensional [12].

Um olhar para as ligações químicas envolvidas no plano de CuO_2 revela importantes características dos cupratos. O átomo de cobre isolado tem uma configuração eletrônica $[\text{Ar}] 3d^{10}4s^1$, enquanto o átomo de oxigênio $2s^24p^4$. Uma vez no plano, o cobre cede dois elétrons ao oxigênio, de forma que a camada mais externa do cobre passa a ser $3d^9$ e a do oxigênio $2p^6$, completamente preenchida. A princípio, considerando apenas o plano, os 9 elétrons no íon de cobre estariam no mesmo nível energético (em diferentes estados de momento angular orbital e de spin); porém, devido à presença dos outros oxigênios fora do plano, os níveis que antes eram degenerados se dividem, de forma que o orbital mais energético passa a ser o $d_{x^2-y^2}$, com 1 elétron (semipreenchido) [13]. Sendo assim, os orbitais atômicos que contribuem para a física *do* plano são o $d_{x^2-y^2}$ dos íons de cobre e os $p_{x,y}$ dos íons de oxigênio (veja a Fig. 22 (b)).

Por uma análise sob a luz da teoria de bandas padrão [1], o buraco (ausência de elétron) nos íons de cobre resultaria em um comportamento metálico para os cupratos. Entretanto, nessa configuração de semipreenchimento os cupratos são materiais isolantes com um valor de *gap* de alguns elétron-volts (eV) [13]. Esse comportamento isolante, no semipreenchimento, é consequência da física de Mott [153]. O caráter condutor, em termos do plano, é proveniente do movimento dos elétrons entre os íons de cobre. Mas, devido

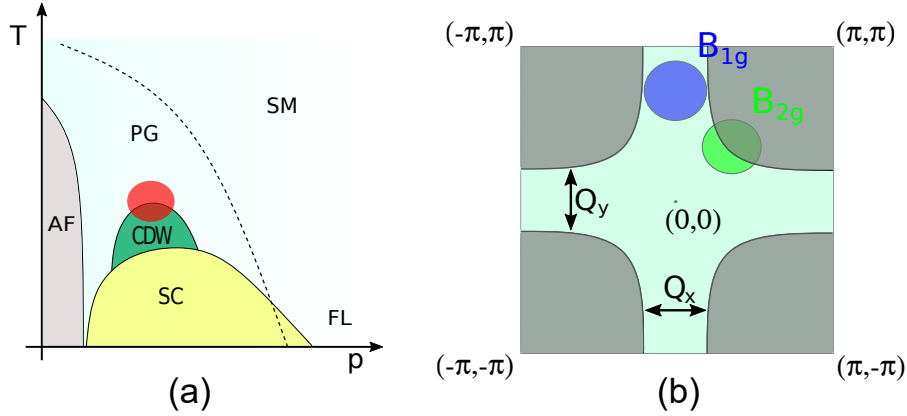


Figura 23 – (a) Esquema geral do diagrama de fases $T \times p$ dos cupratos (com p sendo a dopagem com buracos). As siglas representam as seguintes fases: antiferromagnética (AF), *pseudogap*, onda de densidade de carga (CDW), supercondutora (SC), metal estranho (SM) e líquido de Fermi (FL). Além destas fases, há uma fase isolante de Mott (MI) para $p = 0$, no intervalo de temperatura da fase AF. Nossa região de estudo nesta tese é delimitada pelo círculo em vermelho. (b) Superfície de Fermi (FS) no regime *overdoped* (FL) dos cupratos. Na região azul claro estão os estados ocupados, enquanto na cinza os estados desocupados. O círculo em verde (azul) identifica a região nodal (antinodal), que é explorada pela resposta Raman B_{2g} (B_{1g}). As setas pretas conectam os pontos de *nesting* dos vetores de onda $\mathbf{Q}_x$ e $\mathbf{Q}_y$ da CDW.

à presença de um elétron por cobre, invariavelmente esse deslocamento eletrônico pelo plano implicaria em orbitais $d_{x^2-y^2}$ completamente preenchidos. Para um valor alto da repulsão coulombiana, os elétrons preferem não se mover pelo plano, pois este é o estado de menor energia. O mecanismo descrito acima, da interação elétron-elétron suprimindo a mobilidade eletrônica, exemplifica a transição metal-isolante de Mott.

6.2 Diagrama de fases

Além da fase supercondutora não-convencional, os cupratos possuem outras fases da matéria que continuam sendo alvo de intensa investigação. Na Fig. 23 (a) encontra-se o diagrama de fases⁴ esquematizado $T \times p$, sendo T a temperatura e p a dopagem de buracos (retirando elétrons do sistema), desses materiais. Em dopagem nula o sistema está na fase isolante de Mott. O mecanismo de supressão da mobilidade eletrônica que foi descrito acima também faz com que os elétrons dos cobres tenham spins apontando em direções opostas, resultando em um ordenamento antiferromagnético (AF) no plano. Apesar da dupla ocupação ser energeticamente desfavorável para o sistema, os elétrons ainda podem tunelar entre íons de cobre, especialmente entre os íons mais próximos, implicando assim que os elétrons estejam em estados de spin opostos.

⁴ A Ref. [154] traz o diagrama fases experimental para o composto YBCO.

Ao doparmos o plano com buracos, a ordem AF rapidamente se dissolve e dá lugar a outras fases (veja a Fig. 23 (a)). Caminhando ao longo do eixo da dopagem e mantendo a temperatura baixa, transitamos para a fase supercondutora (SC). A temperatura crítica $T_c(p)$ da fase SC, isto é, a temperatura abaixo da qual o sistema possui resistividade nula, descreve um domo, atingindo o seu máximo na dopagem dita ótima p_{opt} . Quando $p \gg p_{\text{opt}}$ (chamada região *overdoped*), mantendo a temperatura próxima do zero, o sistema sai da fase SC e vai para a fase líquido de Fermi (FL). Nesta fase o sistema apresenta um comportamento metálico usual, descrito pela teoria de líquido de Fermi de Landau⁵, com uma larga superfície de Fermi (veja a Fig. 23 (b)).

Na região $0 < p < p_{\text{opt}}$, conhecida como *underdoped*, aparecem diversas fases metálicas com propriedades não usuais, isto é, que violam a teoria de líquido de Fermi [156]. Uma das fases mais conhecidas, e consequentemente mais bem estudada, nessa região é a fase *pseudogap* (PG). Esta fase é caracterizada por uma perda de peso espectral no nível de Fermi, abaixo da temperatura T^* (indicada pela linha pontilhada na Fig. 23 (a)) [157–159], que leva à observação de uma superfície de Fermi constituída de pequenos arcos, os chamados arcos de Fermi [160–162]. Esses arcos, que serão discutidos na próxima seção, revelam uma dicotomia na distribuição de peso espectral ao longo das direções nodal e anti-nodal (veja a Fig. 23 (b)) do espaço de momentos, como veremos. É importante mencionar que assim como a fase supercondutora nos cupratos, a fase PG ainda não é bem entendida do ponto de vista de uma teoria microscópica [163–167].

Ainda no regime *underdoped* dos cupratos, em temperaturas menores que T^* mas ainda fora do domo supercondutor, há o aparecimento de outras fases exóticas, muitas delas provenientes de uma quebra da simetria translacional no plano de CuO_2 [168]. A fase com ordenamento de carga, ou onda de densidade de carga (CDW), é uma destas. Ao doparmos o isolante de Mott com buracos, abaixo de uma temperatura característica T_{CDW} , os elétrons de valência do plano se rearranjam em uma distribuição periódica de carga. Esta distribuição pode ser na forma de *stripes*, como as vistas em compostos à base de lantânio (La) [169, 170], ou numa forma bidirecional genérica [16, 161, 171–174]. Na última década diversos trabalhos experimentais estabeleceram a existência robusta de tal fase [16]. Como podemos notar pela Fig. 23 (a), essa fase emerge em uma ampla região de dopagem e, semelhante à fase SC, é caracterizada por um domo no diagrama $T \times p$ dos cupratos. Dada a proximidade entre as fases CDW, PG e SC, a questão natural da relação entre essas fases surge.

Por fim, na região de temperaturas e dopagens altas, há uma outra fase metálica

⁵ A teoria de líquido de Fermi de Landau é a base para a teoria de bandas dos sólidos. Segundo Landau, em baixas energias as interações elétron-elétron em um sistema em $D > 1$ são responsáveis por apenas renormalizar algumas quantidades, como a massa eletrônica, por exemplo [9]. Isto permite encarar o sistema eletrônico interagente como um sistema de quasi-partículas (excitações) livres, em boa aproximação, onde a massa de uma quasi-partícula é diferente da massa de um elétron [155].

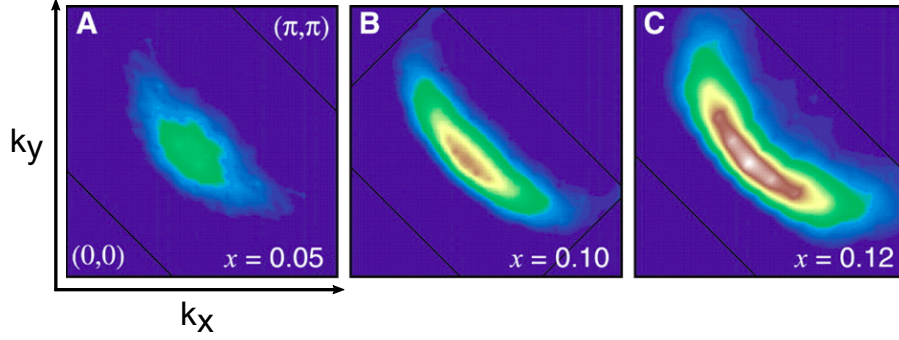


Figura 24 – Evolução do peso espectral no nível de Fermi, no primeiro quadrante da zona de Brillouin (BZ), para diferentes valores da dopagem de buracos (x) para o composto $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ (Na-CCOC) [161]. Os dados foram obtidos por meio da técnica ARPES, considerando uma janela de energia de ± 10 meV em torno da energia de Fermi e a 15 K. O mapa de cores cresce em intensidade do azul (intensidade zero) ao marrom (intensidade máxima). Figura retirada de [161].

com comportamento anômalo, a fase chamada metal estranho (SM) [175]. O nome metal estranho vem do fato de, mesmo nessa região de altas temperaturas, o sistema exibir propriedades não-líquido de Fermi. Uma destas propriedades é o crescimento linear da resistividade elétrica com a temperatura, em oposição ao crescimento quadrático esperado segundo a teoria de líquido de Fermi de Landau [9]. Este comportamento $\propto T$ é visto para temperaturas logo acima de T_c até 10^3K [176, 177] e está relacionado com a ausência de quasipartículas na fase SM [178, 179]. Assim como para as fases metálicas e supercondutora mencionadas até agora (com exceção da fase FL), também há um grande esforço teórico na busca de formular uma descrição para a fase SM, como nos trabalhos recentes envolvendo o modelo SYK [180–182].

Depois dessa discussão geral sobre o diagrama de fases dos cupratos, vamos discutir agora alguns dos principais resultados experimentais relacionados às fases que serão alvo de investigação nesta segunda parte da tese: CDW e *pseudogap*.

6.3 Alguns resultados experimentais

Como apontado por nós na seção anterior, na região *underdoped* e para temperaturas $T < T^*$, emerge a chamada fase *pseudogap* nos cupratos. Na Fig. 24 nós mostramos os resultados obtidos por ARPES para a evolução do peso espectral em torno do nível de Fermi, considerando diferentes valores de dopagem, do composto $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ (Na-CCOC) [161]. Ao aumentar a dopagem, aqui identificada por x , saímos da região isolante AF e caminhamos dentro da região da PG. Vemos que, gradualmente, o tamanho da região com peso espectral diferente de zero cresce, até formar o arco de Fermi em torno de $x = 0.12$. Continuando a aumentar a dopagem, indo para a região *overdoped*,

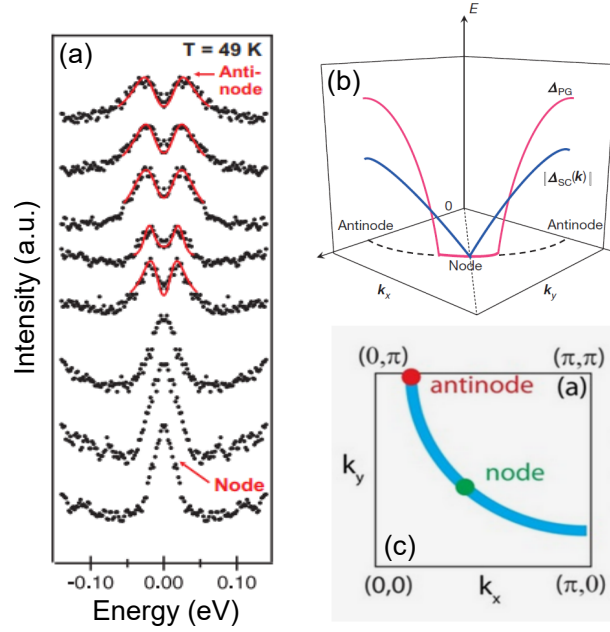


Figura 25 – (a) Espectro obtido por ARPES para o composto La_{1.895}Sr_{0.105}CuO₄ ($T_c = 30\text{K}$) a $T = 49\text{K}$. Os dados foram obtidos ao longo de diferentes caminhos, partindo da região nodal até à antinodal (veja a Fig. (c)). Figura adaptada de [186]. (b) Representação esquemática dos *gaps* das fases SC (azul) e PG (rosa). Figura adaptada de [12]. (c) Primeiro quadrante da BZ, indicando as regiões nodal e antinodal.

eventualmente a FS de um FL será observada [160, 183–185].

A dicotomia entre as regiões nodal e anti-nodal da fase PG, mencionada anteriormente, pode ser vista na ausência de peso espectral na região anti-nodal para todos os valores de dopagem dentro da fase PG (veja a Fig. 24). Isto pode ser visto também por meio de “cortes” ao longo de certas direções do espaço $\mathbf{k}$. Por exemplo, na Fig. 25 (a) apresentamos os resultados vindos de ARPES para o cuprato La_{1.895}Sr_{0.105}CuO₄, que possui $T_c = 30\text{K}$, obtidos a $T = 49\text{K}$. Percebe-se, ao sair da região nodal em direção à anti-nodal (veja a Fig. 25 (c)), o desenvolvimento de um *gap* no nível de Fermi (energia zero), resultando na falta de peso espectral vista na Fig. 24.

Um fato que veio à tona com experimentos de fotoemissão, como os discutidos acima, é a semelhança entre a estrutura de *gap* da fase SC e da fase PG, veja a Fig. 25 (b). A fase SC apresenta um *gap* com simetria d , o que significa que, assim como na PG, não há estados ocupados na região antinodal. Isto sugere que já na fase PG há flutuações supercondutoras, mesmo estando em temperaturas maiores que T_c [12].

A presença de uma fase CDW no diagrama de fases dos cupratos é algo que foi bem estabelecido com auxílio de técnicas experimentais como espalhamento ressonante de raios X (RXS) [16, 173, 187–192], microscopia de tunelamento por varredura (STM) [171, 172, 174, 193–199] e resposta Raman eletrônica [17]. A seguir discutiremos três

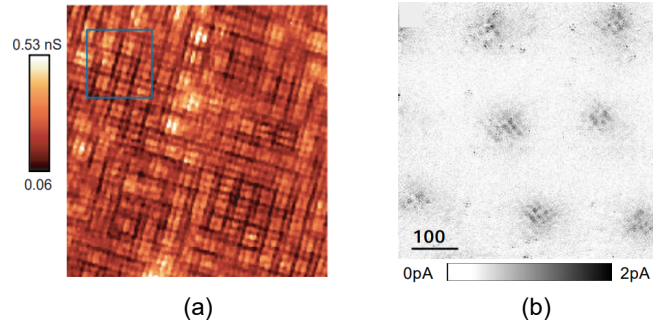


Figura 26 – (a) Mapa de condutância (em siemens) obtido a 24mV para o cuprato Na-CCOC, revelando uma ordem de carga ao longo das ligações Cu-O no plano CuO_2 e com periodicidade de, aproximadamente, 4 células unitárias. Figura adaptada de [172]. (b) Mapa da condutância diferencial, integrada de 1meV até 12meV, para o composto Bi2212. Dentro dos núcleos dos *vortexes* (em preto) magnéticos há o aparecimento de uma ordem de carga com período de 4 células unitárias. Figura adaptada de [171].

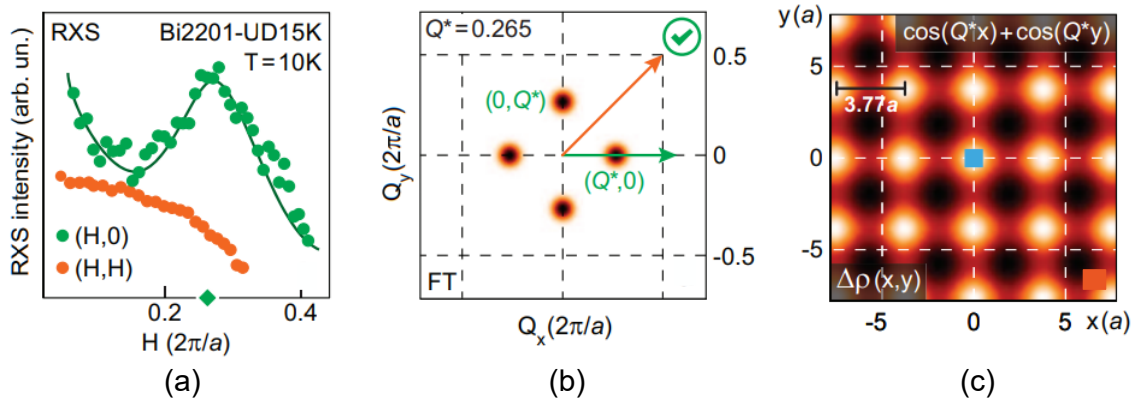


Figura 27 – (a) Medidas usando a técnica RXS ao longo das direções nodal (laranja) e antinodal (verde) do espaço $\mathbf{k}$, mostrado na Fig. (b) ao lado. O pico da intensidade na curva verde revela que a modulação de carga é ao longo da direção antinodal, implicando que o padrão de distribuição de carga está nas ligações Cu-O, com um vetor de onda $Q(2\pi/a) = 0.265$, com $a = 3.77\text{\AA}$ sendo o parâmetro de rede. (c) Ilustração da correspondente modulação de carga encontrada no plano CuO_2 . Figura adaptada de [189].

resultados experimentais para a fase CDW, que foram obtidos usando tais técnicas.

Os grandes avanços experimentados por técnicas de imageamento vêm permitindo obter mapas espaciais resolvidos na escala atômica, que carregam informação direta da densidade de estados local [16] e são de extrema importância para o estudo das propriedades eletrônicas dos cupratos levemente dopados. A Fig. 26 apresenta dois mapas desse tipo. Na Fig. 26 (a) temos um mapa de condutância (a qual reflete a densidade de estados local) para o cuprato Na-CCOC na região *underdoped* [172]. O padrão de intensidade no mapa revela uma ordem de carga com periodicidade de 4 células unitárias, ao longo das

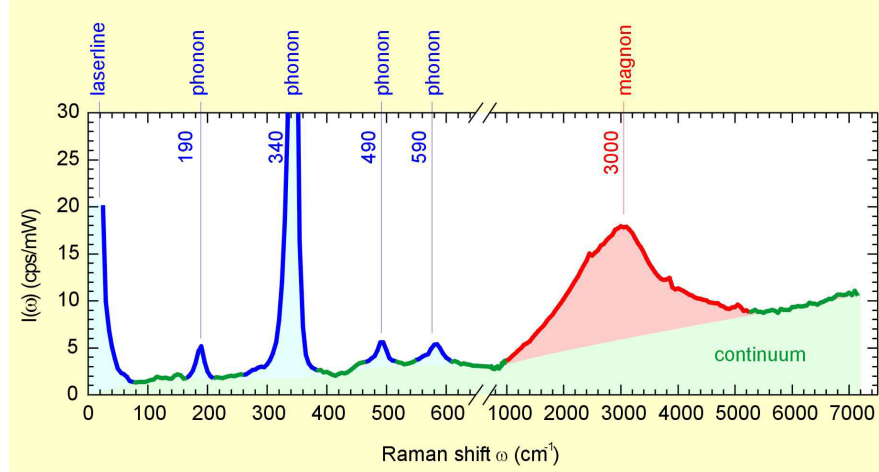


Figura 28 – Espectro de espalhamento Raman para o material $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$, mostrando o espalhamento da luz devido a diferentes excitações. Em azul temos a resposta mais intensa vinda dos fônons (excitação vibracional), em vermelho a contribuição dos magnons (excitação magnética) e por último em verde um contínuo correspondente à parte eletrônica. Figura retirada de [200].

ligações Cu-O no plano CuO_2 . Mais à direita, na Fig. 26 (b), encontra-se outro mapa, desta vez da condutância diferencial, integrada de 1meV até 12meV, para o composto $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (Bi2212), mostrando o aparecimento de modulações de carga com período de 4 células unitárias dentro dos núcleos dos *vortexes* (em preto) magnéticos (para suprimir a supercondutividade foi considerada a aplicação de um campo magnético) [171].

Na Fig. 27 (a) apresentamos resultados obtidos usando a técnica RXS para o cuprato $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ (Bi2201) na região *underdoped* [187, 189]. Esses resultados revelaram que a modulação de carga neste composto é ao longo da direção antinodal (veja a Fig. 27 (b)) do espaço $\mathbf{k}$, com vetor de onda $Q^*(2\pi/a) = 0.265 \approx \frac{1}{4}$ (posição do pico na curva verde) e que, portanto, o padrão da ordem de carga está nas ligações Cu-O, como esquematizado na Fig. 27 (c). Ainda nestes trabalhos, e também em [174], os autores mostraram que a onda de densidade de carga tem uma simetria do tipo d , implicando que as modulações ao longo dos eixos x e y no plano CuO_2 são defasadas de π . No capítulo 7 usaremos tanto o resultado de um $Q \approx \frac{1}{4}$ quanto o de uma CDW com simetria d na nossa descrição teórica.

Avanços recentes também permitiram medir assinaturas de fases como SC, PG e CDW dentro da espectroscopia Raman [17, 199, 201–206], em especial o Raman eletrônico. Apesar de carregar um sinal bem menos intenso que o seu parente vibracional, veja a Fig. 28, esse tipo de técnica se mostra valiosa no estudo de fases eletrônicas da matéria [17].

A espectroscopia Raman é capaz de explorar regiões específicas do espaço $\mathbf{k}$ por meio do controle da polarização do campo elétrico, o que se mostra extremamente oportuno, visto as assimetrias dos *gaps* de fases como SC e PG nesse espaço, como já apontado por

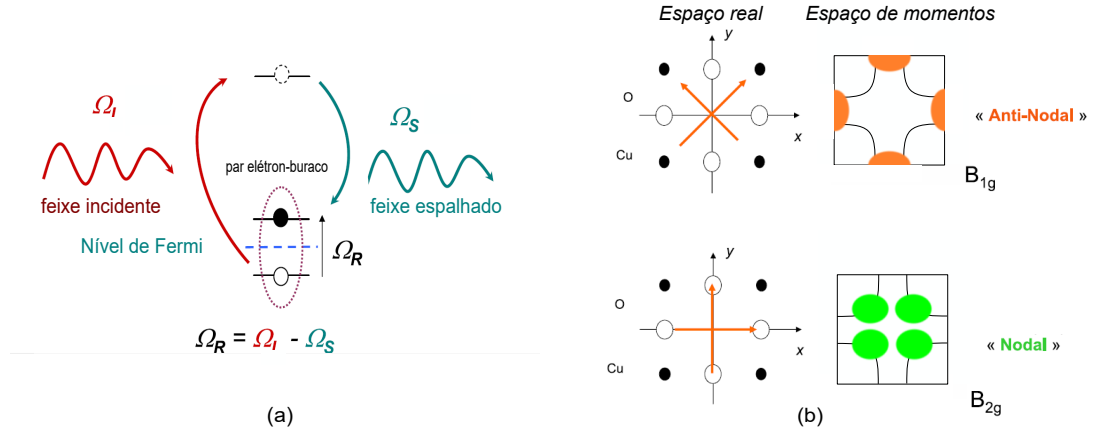


Figura 29 – **(a)** Espalhamento Raman eletrônico. O cristal é irradiado por um feixe monocromático de frequência Ω_I e a luz espalhada, de frequência Ω_S , é coletada. A diferença entre as frequências incidente e espalhada Ω_R é chamada de diferença Raman e corresponde à energia do par elétron-buraco criado em torno do nível de Fermi. **(b)** Regras de seleção para o Raman eletrônico em cupratos. Na parte superior mais à esquerda, vemos os vetores de polarização incidente $\mathbf{e}_i = (1, 1)$ e espalhado $\mathbf{e}_s = (1, -1)$ no plano CuO_2 , com as respectivas regiões que estão sendo exploradas no espaço $\mathbf{k}$ mostradas mais à direita em laranja. Similarmente, na parte inferior, indicamos os vetores de polarização incidente $\mathbf{e}_i = (1, 0)$ e espalhado $\mathbf{e}_s = (0, 1)$ com as respectivas regiões que estão sendo exploradas no espaço $\mathbf{k}$ em verde. Figura adaptada de [202].

nós (veja a Fig. 25 (b)). A Fig.29 coloca de maneira esquemática como o espalhamento Raman eletrônico funciona e como se relacionam as regiões exploradas no espaço de momentos com as polarizações da luz [200]. O canal (ou simetria) B_{1g} varre a região antinodal, enquanto o canal B_{2g} varre a região nodal. É sabido que a fase PG se reflete mais no canal B_{1g} [17], enquanto a SC é aparente em ambos os canais [201, 202, 204]. No trabalho recente [17], que será comentado logo abaixo, foi observado pela primeira vez uma assinatura da fase CDW no canal B_{2g} .

Mais recentemente, essa técnica permitiu, em particular, acessar pela primeira vez a escala de energia da fase CDW em função da dopagem para diversos cupratos [17]. Na Fig. 30 (a) temos resultados de espectroscopia Raman eletrônica para o composto $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ (Hg-1223) obtidos a diferentes temperaturas [17]. A novidade do estudo foi a observação de um novo pico no canal B_{2g} , separado do pico SC [201], o qual foi identificado como sendo da fase CDW. Por meio desse pico foi possível determinar a evolução (em função da dopagem) da escala de energia da fase com ordenamento de carga e comparar com as das fases SC e PG, como está apresentado na Fig. 30 (b). Como pode ser visto, as três escalas possuem a mesma tendência, o que sugere uma mesma origem microscópica para todas [17], na direção das propostas teóricas dos trabalhos [168, 207–213]. Além disso, as escalas das fases CDW e SC são praticamente iguais em um intervalo substancial de dopagem, sugerindo que SC e CDW estão intimamente conectadas.

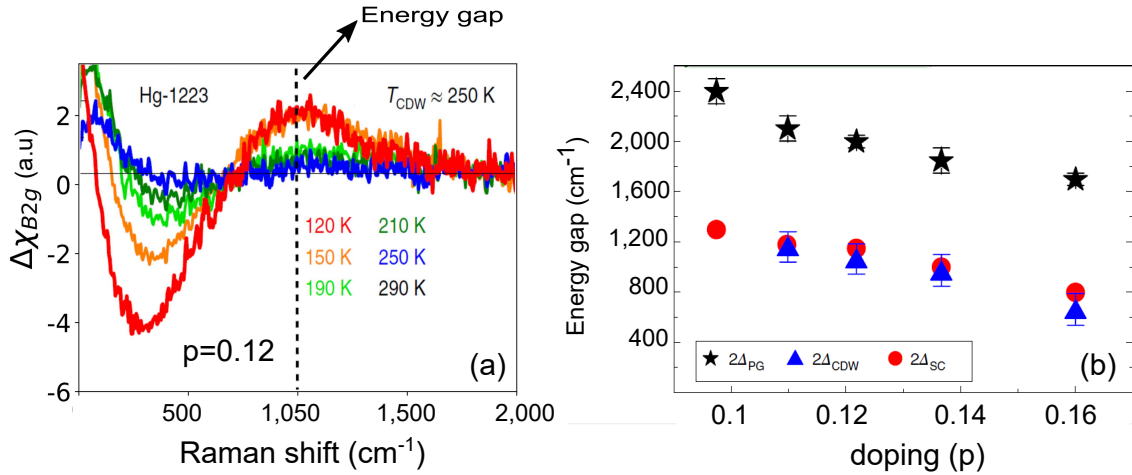


Figura 30 – Resultados experimentais da resposta Raman eletrônica [17]. **(a)** Resposta Raman relativa B_{2g} , $\Delta\chi_{B_{2g}} = \chi_{B_{2g}}(117 \text{ K}, \omega) - \chi_{B_{2g}}(290 \text{ K}, \omega)$, do composto Hg-1223 ($\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$, com uma dopagem de buraco $p = 0.12$), que possui $T_{CDW} = 250 \text{ K}$. A linha vertical tracejada indica a escala de energia da fase CDW, $E_{CDW} \approx 1,050 \text{ cm}^{-1}$. Convencionalmente a resposta Raman é dada em unidade de cm^{-1} . O fator de conversão é $1 \text{ eV} \sim 8.1 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$. Notamos que à medida que entramos na fase CDW reduzindo a temperatura (veja o diagrama de fases na Fig. 23 **(a)**) um pico na resposta se desenvolve. **(b)** Escalas de energia em função da dopagem de buracos para as fases CDW (triângulos azuis), SC (círculos vermelhos) e PG (estrelas pretas). Figura adaptada de [17].

6.4 Modelo de uma banda para cupratos

Após termos discutido o diagrama de fases e alguns resultados experimentais dos cupratos, vamos agora tratar de alguns aspectos teóricos na descrição desses materiais.

Como discutido por nós inicialmente, os orbitais atômicos que participam das ligações eletrônicas no plano são $3d_{x^2-y^2}$ e $2p_{x,y}$, vindos do íon de cobre e do íon de oxigênio, respectivamente (veja a Fig. 22 **(b)**). Como já discutido no início do capítulo, isto é devido à presença dos íons de oxigênio (dentro e fora do plano) que circundam o cobre, fazendo com que a degenerescência dos orbitais d do cobre seja levantada. Assim, um modelo mínimo para descrever os cupratos é um modelo de três bandas, chamado $p-d$, que leva em consideração a hibridização oxigênio-cobre, oxigênio-oxigênio e a repulsão coulombiana oxigênio-oxigênio, cobre-cobre e oxigênio-cobre [13].

No trabalho [214] Zhang e Rice mostraram, baseados no que ficou conhecido como singleto de Zhang-Rice (ZR)⁶, que o modelo de três bandas citado acima tem sua física de baixas energias descrita por um modelo de uma única banda, chamado modelo $t-J$ ⁷. Nesta nova perspectiva teremos efetivamente uma rede quadrada, remanescente

⁶ O singleto de ZR refere-se ao estado singleto entre dois buracos, um que está no cobre e outro que está no oxigênio, sendo este último referente à dopagem do plano CuO_2 por buracos [13].

⁷ No capítulo 7 nós discutiremos esse modelo. Em resumo, há dois ingredientes que esse modelo considera:

dos íons de cobre, com spins $1/2$ (para o caso sem dopagem), com a dopagem de buracos agora correspondendo simplesmente a arrancar esses spins [13], de forma que os íons de oxigênio não aparecem mais (explicitamente) na descrição do problema. No capítulo 7 nos basearemos nessa descrição efetiva de uma banda.

Como vimos nas seções anteriores, a fase CDW numa família de cupratos é bem consolidada do ponto de vista experimental, abrindo, assim, a possibilidade de novos estudos teóricos em cima do tema. Vale ressaltar a importância que tais estudos têm. Mesmo não tratando diretamente da fase SC, um melhor entendimento das fases ditas normais (sinônimo de não-supercondutoras) é capaz de produzir valiosas pistas para uma futura formulação de uma teoria microscópica para a origem da fase SC e, em termos mais gerais, para a região *underdoped* dos cupratos.

No capítulo seguinte 7 nos preocuparemos em descrever os resultados experimentais de resposta Raman para a fase CDW discutidos acima (veja a Fig. 30) por meio de uma abordagem fenomenológica. Isto significa que nosso ponto de partida será um hamiltoniano efetivo com uma fase CDW predefinida, com amplitude J_Q e vetor de onda $\mathbf{Q}$, similarmente ao que foi feito nos trabalhos [207, 215–218]. A natureza de tal hamiltoniano também será debatida. Além das respostas Raman também investigaremos a condutividade óptica da fase CDW. Na segunda parte do trabalho nosso objetivo será formular um modelo, mais geral do ponto de vista de experimentos, que leve em consideração os efeitos da ordem de carga dentro da fase PG, isto é, um modelo que descreva a coexistência CDW-PG. Com esse modelo poderemos analisar como as respostas Raman se comportam na presença da fase PG. Mais para o final do capítulo o problema das escalas de energia também será tratado.

a interação de troca J entre spins localizados e o movimento, representado pelo *hopping* t , das partículas entre os sítios da rede.

7 Resultados: Respostas dinâmicas da fase CDW dos cupratos supercondutores

Na primeira parte deste capítulo temos por objetivo identificar assinaturas da fase CDW dos cupratos supercondutores na resposta Raman. Para isso modelaremos a ordem de carga segundo um hamiltoniano efetivo de campo médio [219], que descreve uma modulação com amplitude J_Q e vetor de onda $\mathbf{Q}$. Na segunda parte nos preocuparemos em investigar os efeitos da coexistência das fases CDW e PG, também olhando para a resposta Raman. Baseados no *ansatz* de Yang-Rice-Zhang para a função de Green de partícula única da fase PG [220], nós propomos uma nova função de Green que descreve a coexistência das fases e é capaz de explicar recentes medidas experimentais [17]. Os resultados expostos neste capítulo foram publicados na revista *Physical Review B* com o título “Raman response of the charge density wave in cuprate superconductors” [26].

Este trabalho, em quase sua totalidade, foi desenvolvido durante meu período sanduíche de 1 ano na Université Paris-Saclay, especificamente no Laboratoire de Physique des Solides (LPS), Orsay, França, sob a supervisão do professor Marcello Civelli. O trabalho ainda contou com a colaboração do pós-doc Soumen Bag¹ e dos professores Indranil Paul e Alain Sacuto².

O ferramental da teoria de muitos corpos utilizado neste capítulo pode ser encontrado no apêndice F.

7.1 Ordem de carga (CDW)

Baseados na discussão feita no final do capítulo anterior 6, iniciaremos considerando o seguinte modelo efetivo de uma banda para a região metálica *underdoped* dos cupratos:

$$H_{tJV} = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \sigma} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma} + J \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{a}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{a}} + V \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{a}} n_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}+\mathbf{a}}. \quad (7.1)$$

No hamiltoniano acima $\mathbf{r}$ descreve a rede quadrada formada pelos íons de cobre com parâmetro de rede $a \equiv 1$, $\mathbf{a} = \pm\hat{x}, \pm\hat{y}$ é um vetor que localiza os primeiros vizinhos de um dado sítio $\mathbf{r}$ dessa rede e $\sigma = \uparrow, \downarrow$ indexa o estado de spin eletrônico. O primeiro termo de (7.1), termo cinético, descreve o movimento livre de elétrons na rede com operador de criação $c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger$. Os termos $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ estão também inclusos na soma, de forma a produzirem um potencial químico $-\mu$ ($t_{\mathbf{r}\mathbf{r}} \equiv -\mu$) responsável por fixar o zero de energia do modelo não interagente no nível de Fermi. O segundo termo em (7.1) é responsável por uma

¹ Na época ele estava no LPS.

² Ambos são do Laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques, Université de Paris.

interação de troca antiferromagnética, $J > 0$, entre os spins $\mathbf{S}_\mathbf{r} = c_\mathbf{r}^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_\mathbf{r}$ que são primeiros vizinhos. E, por fim, o último termo de (7.1) contém os efeitos da forte correlação eletrônica ($n_\mathbf{r} = n_{\mathbf{r}\uparrow} + n_{\mathbf{r}\downarrow}$, com $n_{\mathbf{r}\sigma} = c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma}$).

O modelo (7.1) acima é conhecido como $t - J - V$ e é amplamente utilizado para descrever os efeitos de flutuações antiferromagnéticas, provenientes da fase isolante de Mott AF, e da forte correlação dos elétrons nos íons de cobre [13, 156]. Além do termo $t - J$, discutido por nós no final do capítulo 6, o hamiltoniano acima possui o termo proporcional a V , que dá a energia de repulsão coulombiana entre dos elétrons que estão em sítios mais próximos (primeiros vizinhos). A inclusão de tal termo produz uma ordem de carga no plano de CuO_2 , como é sabido tanto por estudos numéricos [221–223] quanto analíticos [207, 215, 216, 219]. Por fim, notemos que (7.1) não contém o termo de interação *on-site* U característico do modelo de Hubbard. Isto é devido ao fato de excluirmos a ocupação dupla nos sítios da rede de íons de cobre assumindo $U \gg t$, implicando que estaremos sempre trabalhando no subespaço de ocupação única [224, 225].

Dada a dificuldade de tratar o modelo (7.1) exatamente, tanto do ponto de vista numérico quanto analítico, adotaremos aqui uma descrição a nível de campo médio. Os termos de interação podem ser decompostos nos canais partícula-partícula e partícula-buraco [209, 219]. Para o termo de interação spin-spin nós temos [127]:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= \frac{1}{4} \sum_m c_i^\dagger \sigma^m c_i c_j^\dagger \sigma^m c_j = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\eta} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\beta} c_{j\gamma}^\dagger c_{j\eta} \left(\sum_m \sigma_{\alpha\beta}^m \sigma_{\gamma\eta}^m \right), \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta} \left(2c_{i\alpha}^\dagger c_{i\beta} c_{j\beta}^\dagger c_{j\alpha} - n_{i\alpha} n_{j\beta} \right), \\
&\stackrel{\text{MFD}}{\sim} \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \left(\mathcal{P}_{ij} c_{i\beta} c_{j\beta}^\dagger - \mathcal{M}_{ij} \epsilon_{\alpha\beta} c_{i\beta} c_{j\alpha} - \mathcal{P}_{ij}^* c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} - \mathcal{M}_{ij}^* \epsilon_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}^\dagger \right) \\
&\quad - \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta} \left(-\mathcal{P}_{ij}^* \delta_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} - \mathcal{M}_{ij}^* \epsilon_{\beta\alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}^\dagger + \mathcal{P}_{ij} \delta_{\alpha\beta} c_{i\alpha} c_{j\beta}^\dagger - \mathcal{M}_{ij} \epsilon_{\alpha\beta} c_{i\alpha} c_{j\beta} \right), \\
&= -\frac{3}{4} \sum_{\alpha} \left(\mathcal{P}_{ij} c_{j\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + (-1)^\alpha \mathcal{M}_{ij} c_{i\alpha} c_{j,-\alpha} + \text{H.c.} \right), \tag{7.2}
\end{aligned}$$

onde i e j indexam dois primeiros vizinhos na rede quadrada, a operação MFD (*Mean Field Decomposition*) denota uma decomposição de campo médio a la Hartree-Fock [127] e definimos

$$\langle c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} \rangle \equiv \mathcal{P}_{ij} \delta_{\alpha\beta} = \mathcal{P}_{ji}^* \delta_{\alpha\beta}, \tag{7.3}$$

$$\langle c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}^\dagger \rangle \equiv \mathcal{M}_{ij} \epsilon_{\alpha\beta} = \mathcal{M}_{ji} \epsilon_{\alpha\beta}, \tag{7.4}$$

sendo $\epsilon_{\alpha\beta}$ o símbolo de Levi-Civita em duas dimensões³. Aqui $\langle \dots \rangle$ denota o valor esperado no estado fundamental de (7.1), o qual assumimos ter uma ordem de carga. Somando com a decomposição do terceiro termo de (7.1) (calculada de maneira análoga), chegamos que

³ $\epsilon_{+-} = -\epsilon_{-+} = 1$ e $\epsilon_{\alpha\alpha} = 0$.

o termo de interação de (7.1) fica

$$- \sum_{i,j,\alpha} \left(V_+ \mathcal{P}_{ij} c_{j\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + V_- (-1)^\alpha \mathcal{M}_{ij} c_{i\alpha} c_{j,-\alpha} \right) + \text{H.c.}, \quad (7.5)$$

onde $V_\pm \equiv \frac{3J}{4} \pm V$.

Apesar de agora o hamiltoniano ser quadrático, o qual pode facilmente ser diagonalizado por uma transformação de Bogoliubov, a determinação dos $\mathcal{P}_{ij}$ e $\mathcal{M}_{ij}$ requer o conhecimento do estado fundamental do hamiltoniano (7.1). Para contornar este problema, faremos considerações fenomenológicas. Dada a suposição de um estado fundamental com uma ordem de carga, assumiremos que estas duas quantidades podem ser escritas como [219]

$$\mathcal{P}_{ij} \equiv \sum_{\mathbf{Q}} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)/2}, \quad (7.6)$$

$$\mathcal{M}_{ij} \equiv \sum_{\mathbf{Q}} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)/2}, \quad (7.7)$$

onde os $\mathbf{Q}$'s são vetores que modulam estes dois tipos de ordens, com $t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$ e $\Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$ sendo as respectivas amplitudes. A Eq. (7.6) representa uma onda de densidade de carga (CDW) entre primeiros vizinhos na rede quadrada. A Eq. (7.7) descreve uma ordem de pares de Cooper conhecida como *pair density wave* (PDW) [226]. Indícios dessa ordem exótica na região *underdoped* dos cupratos foram vistos nos trabalhos recentes [227, 228], que levou a uma intensa investigação teórica sobre o tema [226]. Aqui nós iremos focar em um estado sem ordem supercondutora, de forma que apenas a ordem de carga, descrita por um $t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \neq 0$, nos interessa.

Depois do desacoplamento de campo médio ficamos com o seguinte hamiltoniano efetivo na fase CDW

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}'} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r},\mathbf{a},\mathbf{Q}} J_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{a}/2)} c_{\mathbf{r}+\mathbf{a}}^\dagger c_{\mathbf{r}} + \text{H.c.}, \\ &= H_0 + H_{\text{CDW}}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Baseados em resultados experimentais [174], nós iremos considerar uma CDW d-simétrica⁴,

$$J_{\mathbf{Q},\pm\hat{x}} = -J_{\mathbf{Q},\pm\hat{y}} \equiv \frac{J_Q}{2}, \quad (7.9)$$

isto é, uma modulação defasada de π entre as direções $\hat{x}$ e $\hat{y}$. Notemos que o índice de spin foi omitido na Eq. (7.8), pois a CDW que estamos tratando não diferencia este grau de liberdade. Portanto, na análise que segue, o spin dos elétrons não terá influência na física do problema.

⁴ Como veremos logo abaixo, esta condição leva a um potencial CDW da forma $(\cos k_x - \cos k_y)$, isto é, d-simétrico.

Parâmetros	Allais	Liechtenstein	Schabel
t'	$-0.33t$	$-0.3t$	$-0.51t$
t''	$0.03t$	$0.2t$	$0.07t$
t'''	0	0	$-0.05t$
t''''	0	0	$-0.06t$
μ	$-0.808t$	$-0.766t$	$-1.069t$

Tabela 3 – Três conjuntos de parâmetros para a estrutura de bandas. Cada potencial químico μ foi calculado considerando uma dopagem de buracos $\rho = 0.12$ e um potencial CDW de amplitude $J_Q/2 = 0.2t$. O primeiro conjunto, *Allais*, foi proposto no contexto de análise das frequências de oscilações quânticas em um sistema com reconstrução de superfície de Fermi devido às ordens BDW e SC [207]. O segundo conjunto, *Liechtenstein*, foi usado em [229] no estudo de cupratos com acoplamento entre planos não desprezível, como também em [230] afim de calcular a estrutura de bandas do cuprato $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$. Por fim, o conjunto *Schabel* foi introduzido em [231] na análise de experimentos de fotoemissão na família YBCO.

O hamiltoniano (7.8) pode ser transportado para o espaço de momentos, onde devido à sua natureza de um corpo, ele tem uma representação diagonal. Os operadores de aniquilação no espaço de momentos são escritos como

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}}. \quad (7.10)$$

Estamos considerando uma rede quadrada com $N^2 \gg 1$ sítios, de forma que o comprimento em cada direção fica $L_{x,y} = (N - 1)a \approx Na$. A primeira zona de Brillouin (BZ) revela a periodicidade da rede no espaço real, isto é, $c_{\mathbf{r}+N} = c_{\mathbf{r}}$ (assumindo um sistema com condições periódicas de contorno). Portanto, BZ corresponde aos vetores: $k_{x,y} = \frac{2\pi}{Na}n_{x,y} \Rightarrow \text{BZ} = \{|k_{x,y}| \leq \frac{\pi}{a}\}$ (veja o apêndice F). Com isso e usando a relação de ortogonalidade

$$\sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} = \sum_{n_x, n_y=1}^N e^{i\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} = N^2 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (7.11)$$

a parte de modulação de carga do hamiltoniano (7.8) torna-se:

$$H_{\text{CDW}} = \sum_{\mathbf{Q}, \mathbf{k} \in \text{BZ}} \lambda_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}/2}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}/2} + \text{H.c.}, \quad (7.12)$$

sendo

$$\lambda_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) = \frac{J_Q}{2} (\cos k_x - \cos k_y) \quad (7.13)$$

o potencial CDW que descreve uma modulação de carga com simetria d [174]. Em todo o trabalho consideraremos $J_Q = 0.4t$, com t sendo o parâmetro de *hopping* entre primeiros vizinhos.

A parte não interagente de (7.8) no espaço $\mathbf{k}$ fica:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}, \quad (7.14)$$

onde

$$\xi_{\mathbf{k}} = -\mu - 2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) + \dots \quad (7.15)$$

é a dispersão de partícula única, com $t \equiv 1$ sendo o *hopping* para primeiros vizinhos (o qual fixa nossa escala de energia), t' o *hopping* para segundos vizinhos e assim por diante. Um dos nossos objetivos neste trabalho é estudar a influência da estrutura eletrônica sobre a resposta Raman; usaremos, portanto, mais de um conjunto de *hoppings* (veja a tabela 3). Com isso estaremos simulando diferentes compostos. O potencial químico μ pode ser determinado para uma dada concentração (dopagem) de partículas (veja o apêndice F).

Para a nossa modulação de carga devemos considerar que $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{x/y} = \frac{2\pi}{an} \hat{x}/\hat{y}$, isto é, uma modulação comensurável de n células unitárias nas direções x e y . Isto muda a invariância translacional do sistema de a para na . Definindo-se a zona de Brillouin reduzida (rBZ) por $\text{rBZ} \equiv \{|k_{x,y}| \leq \frac{\pi}{na}\}$, a qual contempla todos os $\mathbf{k}$'s independentes devido à CDW, e usando a decomposição [217]

$$\sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} g(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{p} \in \text{rBZ}} \sum_{n_x, y=0,1}^{n-1} g(\mathbf{p} + n_x \mathbf{Q}_x + n_y \mathbf{Q}_y), \quad (7.16)$$

para uma função arbitrária $g(\mathbf{k})$, podemos reescrever o hamiltoniano (7.8) como uma matriz $n^2 \times n^2$ (ignorando o spin dos elétrons). Na soma acima $n_{x,y}$ assumem os valores $0, 1, 2, \dots, n-1$. Note a diferença no intervalo das somas do lado direito e esquerdo da Eq. (7.16). Daqui por diante, para evitar confusões, usaremos $\mathbf{k}$ para uma soma sobre toda BZ e $\mathbf{p}$ para uma soma na rBZ. O nosso caso de interesse é investigar uma modulação de quatro células unitárias de periodicidade, isto é, $n = 4$, dado o resultado experimental em [16]. Assim, (7.8) pode ser colocado na forma diagonal

$$H = \sum_{\mathbf{p} \in \text{rBZ}} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \mathcal{H}(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}, \quad (7.17)$$

onde $\Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \equiv (c_{\mathbf{p}}^\dagger, c_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}_x}^\dagger, c_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}_x}^\dagger, \dots, c_{\mathbf{p}+3\mathbf{Q}_x+3\mathbf{Q}_y}^\dagger)^5$ e

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_0 & \mathbf{B}_{\frac{1}{2}} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{\frac{7}{2}} \\ \mathbf{B}_{\frac{1}{2}} & \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_{\frac{3}{2}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_{\frac{3}{2}} & \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_{\frac{5}{2}} \\ \mathbf{B}_{\frac{7}{2}} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{\frac{5}{2}} & \mathbf{A}_3 \end{pmatrix}, \quad (7.18)$$

sendo

$$\mathbf{A}_n = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{p}+n\mathbf{Q}_y} & \lambda_{\frac{1}{2},n} & 0 & \lambda_{\frac{7}{2},n} \\ \lambda_{\frac{1}{2},n} & \xi_{\mathbf{p}+n\mathbf{Q}_y+\mathbf{Q}_x} & \lambda_{\frac{3}{2},n} & 0 \\ 0 & \lambda_{\frac{3}{2},n} & \xi_{\mathbf{p}+n\mathbf{Q}_y+2\mathbf{Q}_x} & \lambda_{\frac{5}{2},n} \\ \lambda_{\frac{7}{2},n} & 0 & \lambda_{\frac{5}{2},n} & \xi_{\mathbf{p}+n\mathbf{Q}_y+3\mathbf{Q}_x} \end{pmatrix}, \quad (7.19)$$

⁵ Ordenamos a base como: para um n_y fixo $(0, 1, 2, 3)$, percorremos todos os n_x $(0, 1, 2, 3)$.

$$\mathbf{B}_n = \begin{pmatrix} \lambda_{0,n} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{1,n} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{2,n} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_{3,n} \end{pmatrix}, \quad (7.20)$$

com $\mathbf{0}$ sendo a matriz nula 4×4 e $\lambda_{m,n} \equiv \lambda_{\mathbf{Q}}(\mathbf{p} + m\mathbf{Q}_x + n\mathbf{Q}_y)$. O hamiltoniano acima está na forma (F.7). A correspondente função de Green que fornece toda informação sobre as propriedades espectrais fica sendo então (para mais detalhes conferir o apêndice F)

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{(\omega + i\eta) \mathbb{1} - \mathcal{H}(\mathbf{p})}, \quad (7.21)$$

onde $\mathbb{1}$ é a matriz identidade 16×16 e η é fisicamente interpretado como o inverso do tempo de vida de uma quasi-partícula do sistema [9, 127, 232]. Durante este trabalho, com objetivo de fazer uma melhor comparação dos nossos resultados teóricos com resultados experimentais, tomaremos $\eta = 0.2t$.

Dado que a função de Green (7.21) é obtida pela inversão de uma matriz 16×16 , isto impossibilita qualquer avanço analítico. Desta forma, a obtenção de $\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega)$ e de qualquer observável relacionado, no nosso caso a resposta Raman, será feita numericamente. Para isto usaremos um código desenvolvido por nós em Python.

7.1.1 Propriedades espectrais da fase CDW

Nesta subseção detalharemos como as propriedades espectrais eletrônicas se modificam devido à ordem de carga CDW. Os resultados expostos aqui, a saber, para a superfície de Fermi (FS), a dispersão ao longo de uma dada direção da BZ e a densidade de estados local (*DOS*), são acessíveis por meio das técnicas experimentais ARPES [233] e STM [234], respectivamente.

De posse de $\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega)$ podemos obter diretamente a função espectral,

$$\mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega), \quad (7.22)$$

que nos fornecerá informação sobre a reconstrução da FS $\mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega = 0)$ devido à modulação de carga. Cada elemento diagonal da matriz $\mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega)$ representa a função espectral em uma região específica da BZ, a qual, como construímos, foi dividida em 16 porções (ver a Eq. (7.16)) de área $\frac{\pi}{2} \times \frac{\pi}{2}$. Porém, se relaxarmos a condição $\mathbf{p} \in \text{rBZ}$, depois da inversão matricial, e tomarmos $\mathbf{p} \in \text{BZ}$, podemos trabalhar apenas com o primeiro elemento $\mathcal{A}_{11}(\mathbf{p}, \omega)$, que corresponde ao primeiro termo, $n_x = n_y = 0$, no lado direito da Eq. (7.16) [217]. Os outros termos $n_{x,y} \neq 0$ simplesmente replicam a função espectral, dado que $\mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega) = \mathcal{A}(p_x + 2\pi/a, p_y + 2\pi/a, \omega)$.

Na Fig. 31 temos a FS (no primeiro quadrante da BZ) calculada considerando um potencial CDW $J_Q/2 = 0.2t$ e para as três estruturas de banda listadas na tabela 3. A

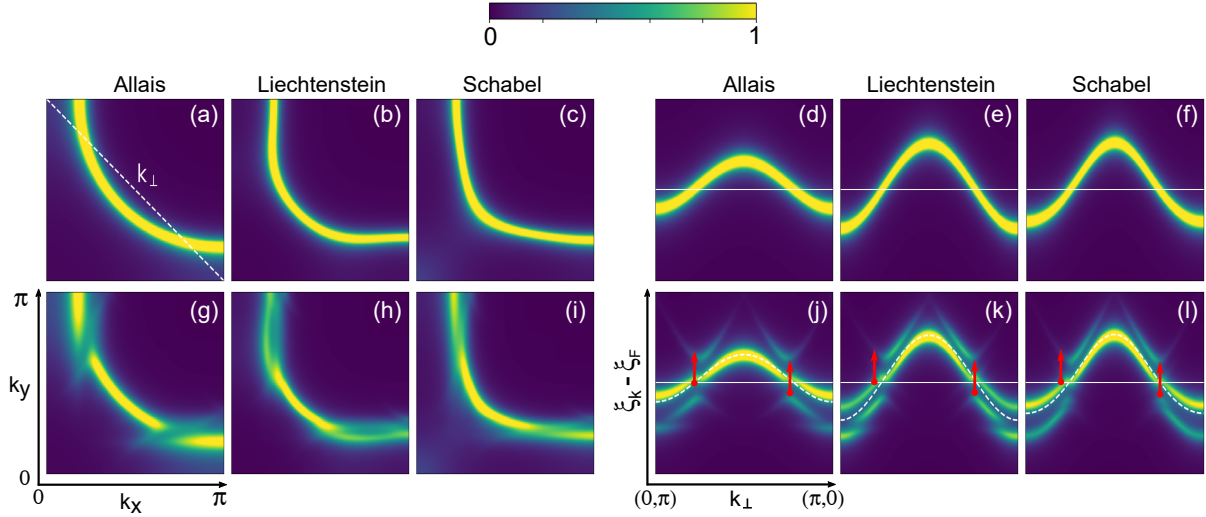


Figura 31 – FS e dispersão ao longo do caminho $k_{\perp}$ (olhar a figura (a)) para os três conjuntos de parâmetros de banda na fase líquido de Fermi ($J_Q = 0$) (a-f) e na fase CDW ($J_Q/2 = 0.2t$) (g-l). Por questão de espaço apenas o primeiro quadrante da BZ está mostrado. As linhas pontilhadas brancas em (j-l) representam a dispersão de partícula única para elétrons livres e as setas vermelhas indicam novas transições energéticas que surgem devido à ordem CDW. A energia de Fermi para cada conjunto de parâmetros foi fixada sendo $\xi_F = 0$ e a dopagem de buracos foi considerada $p = 0.12$, isto é, uma densidade de partículas (partículas/número de estados) $n = 0.88$.

título de comparação e para explicitar os efeitos da ordem de carga, na mesma figura mostramos a FS do sistema na fase FL, isto é, tomando $J_Q = 0$. Nesta fase, Fig. 31 (a-c), vemos uma FS característica da fase FL dos cupratos para os três conjuntos de parâmetros de banda. A única diferença entre os conjuntos reside na curvatura da banda, veja a Fig. 31 (d-f), que por sua vez modifica ligeiramente o formato da FS mas não a sua topologia, isto é, todas as três FS continuam sendo do tipo elétron.

Quando a CDW é ativada seus efeitos ficam evidentes na FS, veja a Fig. 31 (g-i). Vemos que há o surgimento de *gaps* (estados com peso espectral nulo) ao longo de certas direções da BZ. Estas direções são definidas pela equação:

$$\xi_{\mathbf{k}} \equiv \xi_{\mathbf{k} \pm \mathbf{Q}}, \quad (7.23)$$

como consequência da Eq. (7.12), dado que o termo CDW quebra a degenerescência desses estados. Isto implica que dois estados $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ na FS (dois vetores de Fermi portanto) que possam ser conectados pelo vetor de onda $\mathbf{Q}$ (ou $-\mathbf{Q}$) possuam um *gap* de energia associado $\propto J_Q$. Estes pontos são chamados de pontos de *nesting*. Como visto no caso da fase FL, o formato das FS é ligeiramente modificado ao se variar a estrutura de banda; logo, os pontos de *nesting* também mudam de posição, o que explica a variação da posição dos *gaps* vista em Fig. 31 (g-i).

Ao longo do caminho $k_{\perp}$ também percebemos assinaturas claras da quebra de

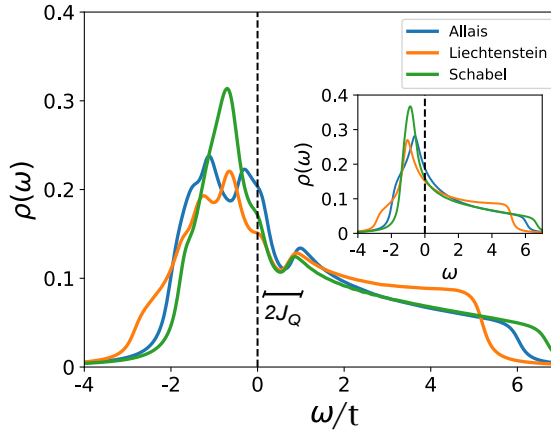


Figura 32 – Gráfico principal (inserido): *DOS* na fase CDW (FL) para os três conjuntos de parâmetros de banda. Nota-se uma perda de peso espectral em torno de J_Q , a qual ocorre *independente* da estrutura de bandas considerada. A linha preta pontilhada em ambas figuras indica o respectivo nível de Fermi.

simetria translacional causada pela CDW, veja a Fig. 31 (j-1). Em especial podemos notar o aparecimento de novas bandas acima e abaixo do nível de Fermi, para todos os conjuntos de parâmetros que foram considerados. Estas bandas possuem uma forte dependência com a estrutura eletrônica perto da região antinodal, $\mathbf{k} \sim \{(0, \pi), (\pi, 0)\}$, para $\xi_{\mathbf{k}} < \xi_F$, e uma fraca dependência perto da nodal $\mathbf{k} \sim (\pi/2, \pi/2)$. As transições energéticas interbanda que surgem, indicadas pelas setas vermelhas na figura, redistribuem peso espectral e, como consequência, modificam as propriedades de baixas energias do sistema. Para ver isto de maneira mais clara é proveitoso analisar a *DOS* do sistema. Por fim, note que a Eq. (7.23) se mantém independente da comensurabilidade de $\mathbf{Q}$; assim, mesmo nos casos em que n (para $\mathbf{Q}_{x/y} = \frac{2\pi}{an} \hat{x}/\hat{y}$) não é um múltiplo inteiro de a , ainda teremos os pontos de *nesting*.

Dada a discussão abaixo da Eq. (7.22), a *DOS* pode ser obtida diretamente de:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \mathcal{A}_{11}(\mathbf{k}, \omega), \quad (7.24)$$

onde $\mathcal{N}$ é o número de estados na BZ. Na Fig. 32 mostramos a correspondente *DOS* na fase CDW para os três conjuntos de parâmetros (gráfico principal), como também a *DOS* na fase FL (gráfico inserido). Podemos notar que as três *DOS* possuem características em comum. No nível de Fermi, $\omega = 0$, vemos pouca mudança nas *DOS* em comparação com o caso $J_Q = 0$, como consequência do aparecimento de *gaps* apenas nos pontos de *nesting* na FS, fazendo com que o valor $\rho(\omega = 0)$ seja ligeiramente reduzido. Concluimos assim que a CDW não abre um *gap* no nível de Fermi, como já havia sido apontado em [217].

Na região $\omega < 0$ ($\xi_{\mathbf{k}} < \xi_F$) percebemos uma modulação nas densidades, especialmente nas curvas laranja (*Liechtenstein*) e azul (*Allais*), que parecem oscilar em torno de $\omega = -J_Q$, junto com uma redução na amplitude das curvas. Visto que essas modulações dependem fortemente da estrutura de bandas considerada, associamos esses comportamen-

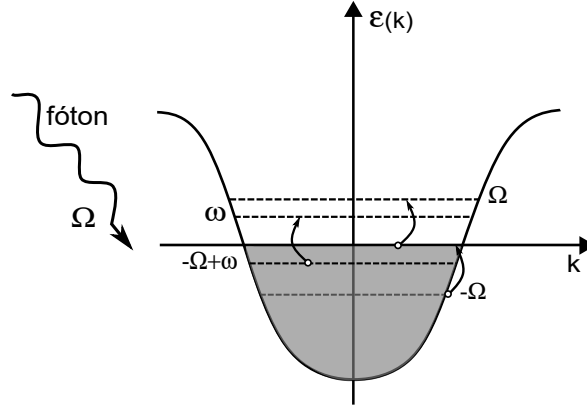


Figura 33 – Representação esquemática do espalhamento Raman eletrônico. Um fóton de energia Ω incide no sistema eletrônico e promove, para estados mais energéticos, os elétrons que estão no intervalo de energia $[-\Omega^+, 0]$. Os elétrons excitados ocupam os estados com energia no intervalo $[0^+, \Omega]$.

tos das *DOS* às novas bandas que surgem próximo da região antinodal $\mathbf{k} \sim \{(0, \pi), (\pi, 0)\}$ para $\xi_{\mathbf{k}} < \xi_F$; veja a Fig. 31 (j-l). Por outro lado, na região $\omega > 0$ ($\xi_{\mathbf{k}} > \xi_F$) há uma perda de peso espectral muito clara que ocorre em torno de $2(J_Q/2) = 0.4t$ e *independe* da estrutura de bandas assumida. Assim, diferentemente das assinaturas da CDW na região $\omega < 0$, neste caso temos algo mais robusto, o que nos leva a acreditar que a CDW se mostra mais claramente, independente do composto, na região $\omega > 0$ da *DOS*. Além disso, associamos esta perda às novas bandas que surgem próximo à região nodal $\mathbf{k} \sim (\pi/2, \pi/2)$, entre os pontos de *nesting* e a diagonal do quadrante, como pode ser verificado na Fig. 31 (j-l) para $\xi_{\mathbf{k}} > \xi_F$, uma vez que nessa região as três dispersões ((j-l)) se comportam da mesma forma.

Nossos achados até então sugerem que uma assinatura clara da fase CDW nos cupratos deve ser vista por uma técnica espectroscópica que explore ao mesmo tempo os estados acima do nível de Fermi e a região nodal da BZ. Isto limita fortemente o intervalo que deve ser explorado no experimento, como também a técnica apropriada.

7.1.2 Respostas Raman da fase CDW

Uma técnica espectroscópica capaz de explorar diferentes escalas de energia, como também diferentes regiões da BZ, é a espectroscopia Raman [200]; para mais detalhes veja o capítulo 6. Para um potencial CDW fraco, $J_Q \ll t$, a resposta Raman para uma dada simetria ν é dada por (veja o apêndice G) [200, 235]:

$$\chi_\nu(\Omega) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p} \in \text{BZ}} \int_{-\Omega}^0 d\omega \text{Tr} \left[\Gamma_{\mathbf{p}}^\nu \mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega) \Gamma_{\mathbf{p}}^\nu \mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega + \Omega) \right]. \quad (7.25)$$

O traço Tr na equação acima é tomado na base $\Psi_{\mathbf{p}}^\dagger$ (veja a Eq.(7.17)) e $\Gamma_{\mathbf{p}}^\nu$ é a matriz (16×16) de vértice não renormalizada para a simetria ν . Os elementos de $\Gamma_{\mathbf{p}}^\nu$ fornecem a

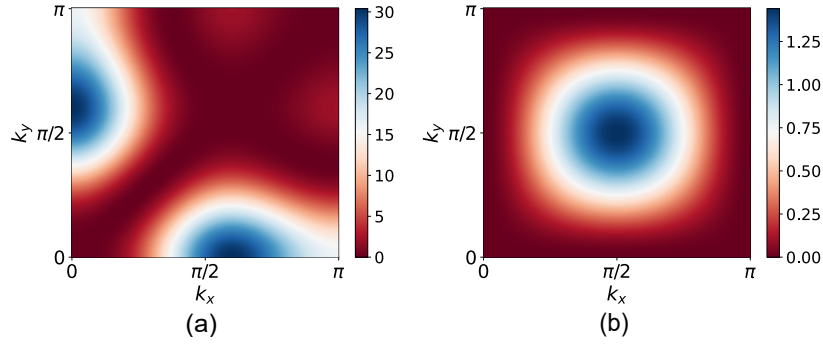


Figura 34 – $\Gamma_{\mathbf{k}}^2$ para diferentes simetrias; (a) B_{1g} e (b) B_{2g} . Foram usados os parâmetros *Liechtenstein*. Note a diferença de intensidade entre os dois vértices.

intensidade do espalhamento Raman. Como está detalhado no apêndice G, a expressão acima é válida para $T = 0$, $\mathbf{q} \rightarrow 0$, sendo $\mathbf{q}$ o momento transferido para um elétron, e ignorando correções de vértice, as quais envolvem mais altas ordens na interação elétron-elétron. Como estamos tratando o problema no regime $J_Q \ll t$, é razoável desconsiderar tais correções.

Na Fig. 33 nós representamos esquematicamente o processo físico que está sendo descrito pela Eq. (7.25). Na situação de temperatura nula um feixe de energia Ω excita elétrons que possuem energia dentro do intervalo $[-\Omega^+, 0]$; os elétrons são promovidos aos estados desocupados que possuem energia no intervalo $[0^+, \Omega]$. Dado que a função espectral $\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega)$ representa a densidade de probabilidade de um elétron com momento $\mathbf{k}$ ocupar o estado energético ω , o processo físico que acabamos de descrever é proporcional a $\sum_{\mathbf{k}} \int_{-\Omega}^0 d\omega \mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega) \mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega + \Omega)$, onde a primeira função espectral, $\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega)$, descreve os elétrons que estão no mar de Fermi, enquanto a segunda, $\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega + \Omega)$, os elétrons que estão nos estados excitados. Sobre a matriz de vértice $\Gamma_{\mathbf{k}}^\nu$, esta é responsável por selecionar certas regiões de interesse da BZ. Abaixo isso ficará claro.

Como já dito, o vértice $\Gamma_{\mathbf{p}}^\nu$ na Eq. (7.25) fornece a intensidade do espalhamento radiação-matéria [200]. Os vértices se relacionam com a estrutura eletrônica via [200]

$$\Gamma_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \rightarrow 0}^\nu = \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} e_i^\alpha e_s^\beta, \quad (7.26)$$

onde $\mathbf{e}_i$ e $\mathbf{e}_s$ são os vetores de polarização do campo elétrico da luz incidente (i) e espalhada (s), os quais selecionam uma dada simetria ν (veja a Fig. 29), e $\xi_{\mathbf{k}}$ é a dispersão de partícula única. A expressão acima não é geral, ela é proveniente de duas considerações sobre o espalhamento, a saber: (i) para luz visível o momento transferido $\mathbf{q} \sim 10^7 \text{m}^{-1}$ para os elétrons é muito menor em comparação com os momentos típicos na BZ, $k \sim 1/a \sim 10^{10} \text{m}^{-1}$ e (ii) a diferença das energias dos fótons incidente e espalhado, $\sim 1/8 \text{eV} \approx 10^3 \text{cm}^{-1}$,⁶

⁶ Convencionalmente a resposta Raman é dada como função da energia em unidade de cm^{-1} . O fator de conversão é $1 \text{eV} \sim 8.1 \times 10^3 \text{cm}^{-1}$.

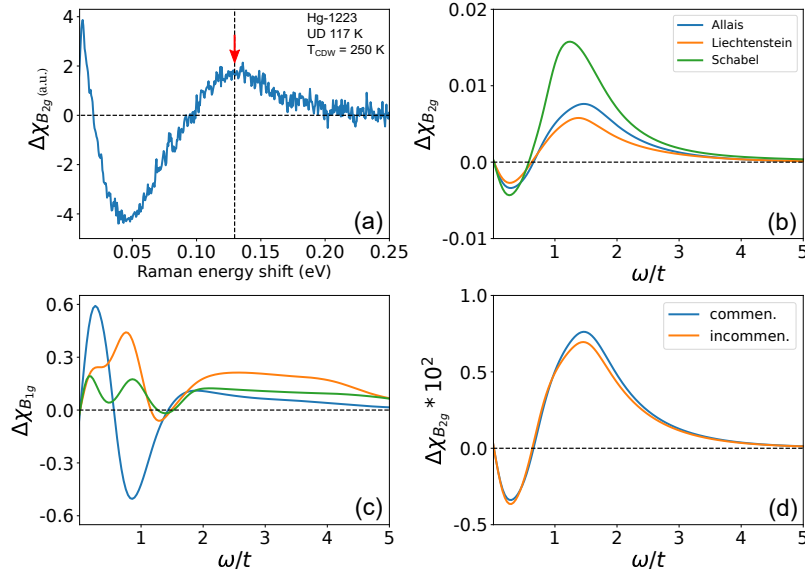


Figura 35 – (a) Resultados experimentais para a resposta Raman relativa B_{2g} , $\Delta\chi_{B_{2g}} = \chi_{B_{2g}}(117\text{K}, \omega) - \chi_{B_{2g}}(290\text{K}, \omega)$, do composto Hg-1223 ($\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$, com uma dopagem de buraco $p = 0.12$), que possui $T_{CDW} = 250\text{ K}$. A linha vertical tracejada indica a escala de energia da fase CDW, $E_{CDW} \approx 0.1295\text{ eV} \propto J_Q$. Figura adaptada de [17]. (b) Resposta Raman relativa B_{2g} para os três conjuntos de parâmetros de banda. (c) Resposta Raman relativa B_{1g} (com a mesma regra de cores de (b)). (d) Incomensurabilidade de $\mathbf{Q}$. A linha azul é a mesma curva *Allais* de (b), enquanto a curva laranja é obtida tomando a média das três respostas Raman calculadas com os vetores de onda $\mathbf{Q}$, $\mathbf{Q} \pm \delta\mathbf{Q}$, com $\delta Q/Q = 0.1$.

é bem menor que a energia típica das transições eletrônicas $\sim 2\text{ eV}$ [202]. Com isso, o significado físico da Eq. (7.26) é claro: a intensidade do espalhamento Raman é o inverso da massa efetiva m^* dos elétrons [200]. Escolhendo as polarizações que nos permitem estudar as regiões nodal e antinodal da BZ (veja a Fig. 29 para mais detalhes) ficamos com

$$\left[\Gamma_{\mathbf{p}}^{B_{2g}}\right]_{n,n'} = \delta_{n,n'} \frac{\partial^2 \xi_n}{\partial p_x \partial p_y}, \quad (7.27)$$

$$\left[\Gamma_{\mathbf{p}}^{B_{1g}}\right]_{n,n'} = \delta_{n,n'} \left(\frac{\partial^2 \xi_n}{\partial p_x^2} - \frac{\partial^2 \xi_n}{\partial p_y^2} \right), \quad (7.28)$$

onde $n, n' = 1, \dots, 16$ indexam os elementos da base $\Psi_{\mathbf{p}}$ e ξ_n são os elementos diagonais da matriz $\mathcal{H}(\mathbf{p})$ na Eq. (7.17). Na Fig. 34 encontra-se um mapa de cores para as duas funções de vértice, ficando assim visualmente claro que a Eq. (7.27) explora a região nodal, enquanto (7.28) a antinodal. Notemos que há uma diferença de um fator de 10 nas intensidades dos vértices. Isto levará, como veremos logo abaixo, a uma resposta Raman B_{1g} 10 vezes mais intensa que a resposta B_{2g} .

Com os vértices explicitados acima e com a função espectral (7.22), podemos obter a resposta Raman (7.25). Na Fig. 35 nós mostramos nossos resultados para a resposta Raman relativa $\Delta\chi_{\nu} = \chi_{\nu} - \chi_{\nu}^{(0)}$, sendo $\chi_{\nu}^{(0)}$ a resposta Raman da fase FL, $J_Q = 0$. Na

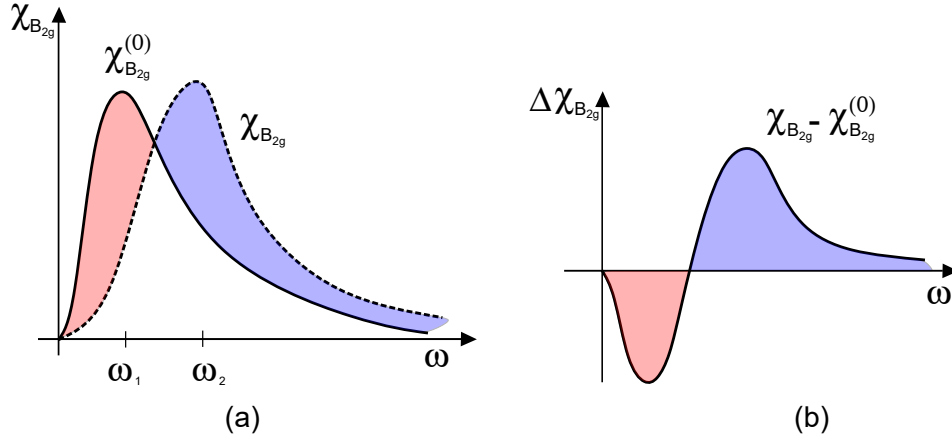


Figura 36 – Comportamento geral da resposta Raman B_{2g} . Em (a) temos as respostas absolutas e em (b) a resposta relativa à fase FL, $\chi_{B_{2g}}^{(0)}$. Transições para as novas bandas que surgem próximo da região nodal $\mathbf{k} \sim (\pi/2, \pi/2)$ e para $\xi_{\mathbf{k}} > \xi_F$, devido à ordem de carga, fazem com que o pico Raman da fase CDW, ω_2 , ocorra em um valor mais alto de energia em comparação com o pico da fase FL ω_1 . De maneira equivalente podemos entender esse deslocamento do pico Raman como consequência da transferência de peso espectral para a região de mais alta energia.

Fig. 35 (b) temos a resposta B_{2g} para os três conjuntos de parâmetros de banda (veja a tabela 3). Vemos que as três respostas apresentam o mesmo comportamento geral, na forma *dip-hump*. Este comportamento surge devido ao deslocamento para valores mais altos de energia do pico Raman da fase CDW em comparação com o pico da fase FL, veja a Fig. 36. Esse deslocamento está associado com as novas bandas que surgem próximo da região nodal $\mathbf{k} \sim (\pi/2, \pi/2)$ e para $\xi_{\mathbf{k}} > \xi_F$, implicando na perda de peso espectral em torno de J_Q (veja a Fig. 32), a qual ocorre independentemente da estrutura de bandas adotada.

O fato das três respostas terem a mesma forma nos leva a uma ideia de universalidade, no sentido que a forma *dip-hump* vista na resposta Raman B_{2g} independe do cuprato considerado para se medir $\Delta\chi_{B_{2g}}$. De fato, como discutido no capítulo anterior 6, recentes medidas experimentais de espectroscopia Raman em diferentes famílias de cupratos [17] apontam nesta direção. Na Fig. 35 (a) apresentamos novamente a resposta Raman relativa B_{2g} , $\Delta\chi_{B_{2g}} = \chi_{B_{2g}}(117 \text{ K}, \omega) - \chi_{B_{2g}}(290 \text{ K}, \omega)$, do composto Hg-1223 [17]. Podemos notar claramente o comportamento *dip-hump* em $\Delta\chi_{B_{2g}}$, com o *hump* tendo seu valor máximo em 0.1295 eV (seta vermelha).

Em contraste com a resposta B_{2g} , a resposta B_{1g} não apresenta um comportamento geral, mostrando-se dependente da estrutura de bandas adotada, veja a Fig. 35 (c). Podemos entender isso com base na discussão feita na subseção 7.1.1. Como já apontado, a dispersão de banda próximo à região antinodal e para $\omega < 0$ tem uma forte dependência com a estrutura eletrônica (bandas) do sistema, o que leva ao comportamento visto na

DOS para $\omega < 0$ (veja a Fig. 32). Logo, dado que a resposta B_{1g} explora justamente a região antinodal, esta quantidade possui uma forte dependência com a estrutura de bandas, tornando-se difícil identificar assinaturas da fase CDW neste canal. Portanto, concluímos que a resposta B_{1g} não é o observável apropriado para investigar a ordem de carga nos cupratos. Isso está de acordo com o fato de experimentalmente as assinaturas da fase CDW nos cupratos serem mais claras na resposta B_{2g} do que na B_{1g} [17], como discutimos no capítulo anterior 6.

Por fim, nós vamos agora olhar para a questão da comensurabilidade e dos efeitos de curto alcance da ordem de carga. Experimentos [236–239] apontam que a CDW nos cupratos é incomensurável, isto é, que a periodicidade da ordem de carga não é um múltiplo da periodicidade original da rede (a). Além disso, na ausência de um campo magnético externo a ordem de carga é de curto alcance [16]. De antemão, fisicamente esperamos que a incomensurabilidade de $\mathbf{Q}$ não afete a forma *dip-hump* vista em $\Delta\chi_{B_{2g}}$. Isto porque essencialmente o *dip* surge como consequência dos pontos de *nesting* e o *hump* devido ao aparecimento de novas bandas longe do nível de Fermi e, como estas duas propriedades independem da comensurabilidade, a forma geral de $\Delta\chi_{B_{2g}}$ não deve ser alterada. Com respeito aos efeitos de uma ordem de carga que não é homogênea espacialmente (espaço real), também é razoável esperar que a resposta Raman, sendo esta uma técnica que tem resolução em energia mas considera uma média nos momentos, não seja drasticamente afetada. Para provar isso, supomos regiões com diferentes vetores de onda, $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{Q} \pm \delta\mathbf{Q}$, com $\delta Q/Q = 0.1$ introduzindo a incomensurabilidade⁷, e tomamos a média das três respostas Raman B_{2g} . O resultado que obtivemos está na Fig. 35 (d). Vemos que a resposta obtida praticamente não se diferencia da resposta para o caso comensurável puro e com um único vetor de onda, como esperado.

7.1.3 Condutividade óptica da fase CDW

Outro observável dinâmico de nosso interesse é a condutividade óptica no plano σ_{xx} [232], que assim como a resposta Raman pode ser obtida de experimentos [241] e, a princípio, revelar assinaturas de uma ordem de carga no regime *underdoped* dos cupratos.

A condutividade óptica é calculada de maneira muito próxima à resposta Raman (ver o apêndice G), de forma que, no limite de temperatura zero, $\mathbf{q} \rightarrow 0$ (sendo $\mathbf{q}$ o momento transferido para um elétron) e desprezando correções de vértices, temos [232]

$$\sigma_{xx}(\Omega) = \frac{1}{\mathcal{N}\Omega} \sum_{\mathbf{p} \in \text{rBZ}} \int_{-\Omega}^0 d\omega \text{Tr} \left[v_{\mathbf{p}} \mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega) v_{\mathbf{p}} \mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega + \Omega) \right], \quad (7.29)$$

onde $[v_{\mathbf{p}}]_{nn'} = \delta_{nn'} \frac{\partial \xi_n}{\partial p_x}$ é a matriz de vértice para a condutividade e por simplicidade omitimos o fator $\frac{e^2 \hbar}{V}$ que fornece a dimensão correta para σ_{xx} [232]. Na Fig. 37 encontram-se nossos resultados para a condutividade óptica da fase CDW (gráfico principal) e da fase

⁷ Para um tratamento mais detalhado do caso incomensurável veja o trabalho [240].

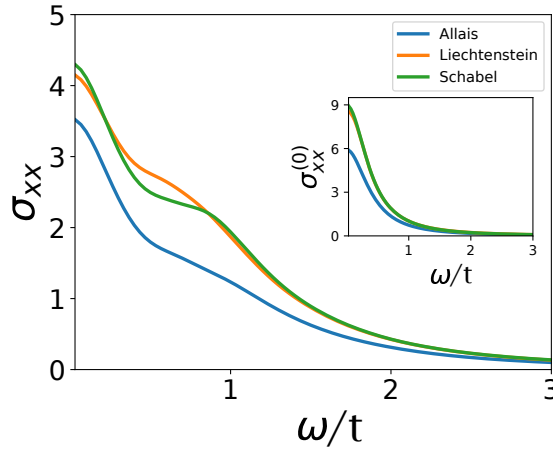


Figura 37 – Gráfico principal (insetado): condutividade óptica na fase CDW (FL) para diferentes parâmetros da estrutura de bandas $\{t, t', t'', t''', \dots\}$. Na fase FL nota-se o esperado comportamento de Drude. Na fase com ordenamento de carga vemos uma condutividade não monótona, como consequência da redistribuição de peso espectral que ocorre em torno de $2J_Q$ (veja a Fig. 32).

FL (gráfico inserido), variando os parâmetros da estrutura da bandas. Vemos que, assim como a resposta Raman B_{2g} , σ_{xx} carrega uma assinatura clara de uma ordem de carga no sistema, que neste caso se manifesta no pequeno *hump* que surge em torno de $2J_Q$, e mais uma vez está presente independentemente dos valores tomados para o conjunto $\{t, t', t'', t''', \dots\}$. Esse comportamento da condutividade em torno de $2J_Q$ é consequência do aparecimento de novas bandas acima e abaixo do nível de Fermi.

7.2 Coexistência das fases CDW e PG

O fato experimental acima mencionado, de que a resposta Raman B_{2g} carrega assinaturas claras da fase CDW enquanto a B_{1g} não, pode ser encarado como consequência da existência de outras fases, ou ordens, que interferem com a fase CDW na região antinodal da BZ, de forma que qualquer característica de uma ordem de carga fique mascarada. A fase PG dos cupratos ocorre numa região do diagrama de fases que é próxima da região onde a CDW é vista (veja a Fig. 23), e os efeitos desta fase são conhecidos por serem mais acentuados na região antinodal e mínimos na nodal [17]. Assim, um modelo mais geral para se entender a resposta Raman do regime *underdoped* dos cupratos deve levar em consideração os efeitos da fase PG. Nosso objetivo nesta seção é construir um modelo fenomenológico que nos permita fazer uma descrição unificada das fases CDW e PG e comparar as previsões deste modelo com os resultados experimentais da resposta Raman.

7.2.1 Ansatz de Yang-Rice-Zhang (YRZ)

Antes de tratarmos do caso da coexistência propriamente dita, é interessante considerarmos apenas o caso com a fase PG. Para tratar esta fase, Yang, Rice e Zhang em [220]⁸ propuseram o seguinte *ansatz* para a função de Green de partícula única⁹:

$$G^{\text{YRZ}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{g_t(p)}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}(p) - \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p)|^2}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}^0(p)}} + G_{\text{inc}}, \quad (7.30)$$

onde o índice de spin foi omitido das quantidades. Notar que $G^{\text{YRZ}}(\mathbf{k}, \omega)$ carrega explicitamente a informação sobre a dopagem (p) no sistema, por meio da dispersão de partícula única

$$\xi_{\mathbf{k}}(p) = -\xi_{\mathbf{k}}^0(p) - 4t'(p) \cos k_x \cos k_y - 2t''(p)(\cos 2k_x + \cos 2k_y) - \mu(p), \quad (7.31)$$

sendo $\xi_{\mathbf{k}}^0(p) = 2t(p)(\cos k_x + \cos k_y)$, e do *gap* d-simétrico PG

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p) = \Delta(p)(\cos k_x - \cos k_y). \quad (7.32)$$

Os parâmetros de banda e a amplitude do *gap* são renormalizados pela dopagem da forma

$$t(p) = g_t(p)t + \frac{0.338t}{8}g_s(p), \quad t'(p) = g_t(p)t', \quad t''(p) = g_t(p)t'', \quad \Delta(p) = \frac{3t}{2}(0.2-p)\theta(0.2-p), \quad (7.33)$$

onde $\{t, t', t''\}$ são os parâmetros de banda não-renormalizados (aqueles dados na tabela 3) e

$$g_t(p) = \frac{2p}{1+p}, \quad g_s(p) = \frac{4}{(1+p)^2}, \quad (7.34)$$

são os fatores de Gutzwiller responsáveis por destruir a metalicidade do sistema à medida que nos aproximamos da transição de Mott em semi-preenchimento $p \rightarrow 0$ [242, 245]. A parte G_{inc} em (7.30) diz respeito à contribuição incoerente da função de Green [127], a qual pode ser desprezada para uma teoria de baixas energias. O *ansatz* (7.30) vem descrevendo com sucesso diversos experimentos em cupratos [242], em especial apontamos os arcos de Fermi obtidos em [161] e a transição em função da dopagem do número Hall [246, 247], como também alguns resultados vindos de *cluster* DMFT [248–251] no contexto do modelo de Hubbard.

Note a similaridade da parte coerente de $G^{\text{YRZ}}(\mathbf{k}, \omega)$ com a função de Green para os férmions c do modelo de duas bandas estudado na seção F.6 do apêndice F. A semelhança

⁸ Para uma revisão veja o trabalho [242] dos mesmos autores.

⁹ A função de Green YRZ pode ser obtida de um modelo microscópico, como feito em [243] ou em certo sentido em [244]. Para tal considera-se que os férmions $c_{i\sigma}^\dagger$ no modelo $t - J$ (tomando $V = 0$ em (7.1)) são fatorados em *spinons* $f_{i\sigma}^\dagger$ e *holons* b_i , via $c_{i\sigma}^\dagger = f_{i\sigma}^\dagger b_i$, sendo que, para satisfazer a ocupação simples em cada sítio i da rede, esses novos graus de liberdade obedecem o vínculo $\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + b_i^\dagger b_i = 1$. Efetuando uma decomposição de campo médio do termo interagente (J) e assumindo que os bósons b_i condensam, $G^{\text{YRZ}}(\mathbf{k}, \omega)$ é dada pela função de Green dos *spinons* $G^f(\mathbf{k}, \omega)$.

se torna clara quando admitimos que (7.30) é coerente e, assim, podemos tomar $g_t(p) = 1$, de forma que podemos escrever

$$H_{\text{YRZ}} = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{\text{YRZ}}(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}, \quad (7.35)$$

onde $\psi_{\mathbf{k}}^\dagger \equiv (c_{\mathbf{k}}^\dagger, f_{\mathbf{k}}^\dagger)$ é um spinor de duas componentes, e

$$\mathcal{H}_{\text{YRZ}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}}(p) & \Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}*}(p) \\ \Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p) & \xi_{\mathbf{k}}^0(p) \end{pmatrix}, \quad (7.36)$$

de modo a obter $G^{\text{YRZ}}(\mathbf{k}, \omega) = \{[\omega - \mathcal{H}_{\text{YRZ}}(\mathbf{k})]^{-1}\}_{11}$. Com isso podemos equivalentemente considerar o hamiltoniano (7.35) no lugar da função de Green (7.30).

7.2.2 Modelando CDW e PG

Baseados no que vimos até agora, propomos o seguinte hamiltoniano fenomenológico para descrever os efeitos de uma ordem de carga dentro da fase PG dos cupratos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \xi_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{Q}, \mathbf{k} \in \text{BZ}} \lambda_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}/2}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}/2} + \text{H.c.} \\ & + \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \xi_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}} c_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (7.37)$$

Em essência introduzimos novos graus de liberdade auxiliares $f_{\mathbf{k}}$ no hamiltoniano CDW (7.8). Os férmions já existentes $c_{\mathbf{k}}$ (férmions físicos, já que estaremos interessados nas suas propriedades) descrevem uma CDW d-simétrica (7.13), com vetor de onda $\mathbf{Q}$ e dispersão de partícula única $\xi_{\mathbf{k}}^c$ (7.15). Os férmions auxiliares possuem uma dispersão de partícula única $\xi_{\mathbf{k}}^f \equiv 2t(\cos k_x + \cos k_y)$ e acoplam com os férmions $c_{\mathbf{k}}$ por meio do potencial PG: $\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}} = \Delta(\cos k_x - \cos k_y)$; veja a figura 38. Aqui, por simplicidade, nós supomos que a estrutura de banda $\{t, t', t'', t''', \dots\}$ não tem dependência com a dopagem, como no *ansatz* YRZ, mas os potenciais CDW, J_Q , e PG, Δ , têm. Mais abaixo nós explicitaremos essas dependências com p .

Para obtermos a função de Green que descreve o sistema procederemos como na seção F.6 do apêndice F, isto é, integraremos os férmions auxiliares $f_{\mathbf{k}}$ dentro de uma formulação de integrais de caminho com o objetivo de obter uma ação efetiva para os férmions físicos $c_{\mathbf{k}}$ ¹⁰. Antes de tratarmos a função de partição é proveitoso reescrever (7.37) na rBZ com o auxílio de (7.16). Fazendo isto obtemos a forma diagonal

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{p} \in \text{rBZ}} \left(\Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \mathcal{H}(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}} + \Upsilon_{\mathbf{p}}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f \Upsilon_{\mathbf{p}} + \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \Lambda_{\mathbf{p}} \Upsilon_{\mathbf{p}} + \text{H.c.} \right), \quad (7.38)$$

¹⁰ Essa não é a única maneira de resolver o problema. Neste caso estamos primeiro integrando os férmions $f_{\mathbf{k}}$ para depois inverter uma matriz 16×16 . A outra forma, como está detalhado no apêndice G, é primeiro inverter uma matriz 32×32 e só após “integrar” os férmions $f_{\mathbf{k}}$. Ambas as maneiras são equivalentes em todos os sentidos.

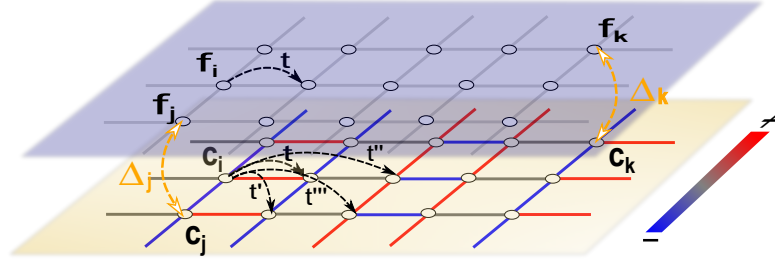


Figura 38 – Representação esquemática do modelo (7.37) no espaço real. Os férmions auxiliares f_i vivem numa rede quadrada abstrata e hibridizam com os férmions físicos c_i por meio do potencial d-simétrico Δ_i . O mapa de cores na rede física representa uma CDW com vetor de onda $\mathbf{Q}_x = \frac{2\pi}{4a} \hat{x}$.

onde $\Upsilon_{\mathbf{p}}^{\dagger} \equiv (f_{\mathbf{p}}^{\dagger}, f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}_x}^{\dagger}, f_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}_x}^{\dagger}, \dots, f_{\mathbf{p}+3\mathbf{Q}_x+3\mathbf{Q}_y}^{\dagger})$ é um spinor que descreve os férmions auxiliares, enquanto $\Psi_{\mathbf{p}}$ descreve os férmions físicos, ver a Eq. (7.17). Ainda sobre a expressão acima, $\mathcal{H}(\mathbf{p})$ é nossa matriz CDW inicial em (7.18), $\Lambda_{\mathbf{p}}$ é uma matriz diagonal 16×16 que dá o acoplamento entre as duas espécies de férmions, a saber,

$$\Lambda_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\mathbf{p}}^{\text{PG}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}_x}^{\text{PG}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \Delta_{\mathbf{p}+3\mathbf{Q}_x+3\mathbf{Q}_y}^{\text{PG}} \end{pmatrix}, \quad (7.39)$$

e $\mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f$, obtido de $\Lambda_{\mathbf{p}}$ fazendo $\Delta_i^{\text{PG}} \rightarrow \xi_i^f$, fornece a energia dos férmions $f_{\mathbf{p}}$ livres. A função de partição em termos das variáveis de Grassmann $\bar{\Psi}_{\alpha\mathbf{p}}, \Psi_{\alpha\mathbf{p}}, \bar{\Upsilon}_{\alpha\mathbf{p}}, \Upsilon_{\alpha\mathbf{p}}$, onde $\alpha = 1, 2, \dots, 16$ é o índice matricial, no eixo de frequências de Matsubara é

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}(\bar{\Psi}, \Psi) \mathcal{D}(\bar{\Upsilon}, \Upsilon) e^{-\mathcal{S}[\bar{\Psi}, \Psi, \bar{\Upsilon}, \Upsilon]}, \quad (7.40)$$

onde $\mathcal{D}(\bar{\Psi}, \Psi) = \prod_{\omega_n} \prod_{\alpha} \prod_{\mathbf{p}} d\bar{\Psi}_{\alpha\mathbf{p}} d\Psi_{\alpha\mathbf{p}}$ (e similarmente para Υ). A ação na equação acima é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\bar{\Psi}, \Psi, \bar{\Upsilon}, \Upsilon] = & \sum_{\omega_n, \mathbf{p}} \left\{ \bar{\Psi}_{n\mathbf{p}} (-i\omega_n \mathbb{1} + \mathcal{H}(\mathbf{p})) \Psi_{n\mathbf{p}} \right. \\ & \left. + \bar{\Upsilon}_{n\mathbf{p}} (-i\omega_n \mathbb{1} + \mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f) \Upsilon_{n\mathbf{p}} + \bar{\Psi}_{n\mathbf{p}} \Lambda_{\mathbf{p}} \Upsilon_{n\mathbf{p}} + \text{H.c.} \right\}. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Definindo novas variáveis por meio de:

$$\bar{\Theta}_{n\mathbf{p}} = \bar{\Psi}_{n\mathbf{p}} \frac{\Lambda_{\mathbf{p}}}{\mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f - i\omega_n \mathbb{1}} + \bar{\Upsilon}_{n\mathbf{p}}, \quad (7.42)$$

$$\Theta_{n\mathbf{p}} = \frac{\Lambda_{\mathbf{p}}^*}{\mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f - i\omega_n \mathbb{1}} \Psi_{n\mathbf{p}} + \Upsilon_{n\mathbf{p}}, \quad (7.43)$$

a ação transformada torna-se¹¹

$$\mathcal{S}[\bar{\Psi}, \Psi, \bar{\Theta}, \Theta] = - \sum_{\omega_n, \mathbf{p}} \left[\bar{\Psi}_{n\mathbf{p}} \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{p}, i\omega_n) \Psi_{n\mathbf{p}} - \bar{\Theta}_{n\mathbf{p}} (-i\omega_n \mathbb{1} + \mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f) \Theta_{n\mathbf{p}} \right], \quad (7.44)$$

¹¹ A função de partição correspondente é $\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}(\bar{\Psi}, \Psi) \mathcal{D}(\bar{\Theta}, \Theta) e^{-\mathcal{S}[\bar{\Psi}, \Psi, \bar{\Theta}, \Theta]}$.

onde

$$\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{p}, i\omega_n) = i\omega_n \mathbb{1} - \mathcal{H}(\mathbf{p}) - \frac{|\Lambda_{\mathbf{p}}|^2}{i\omega_n \mathbb{1} - \mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f} \quad (7.45)$$

é a função de Green para os férmions físicos $c_{\mathbf{k}}$ no eixo de Matsubara. Efetuando a integração sobre as variáveis $\Theta_{\alpha\mathbf{p}}$, visto que trata-se de uma integral gaussiana, veja a seção F.6 para mais detalhes, obtemos uma ação efetiva para os férmions $c_{\mathbf{k}}$, a qual descreve a coexistência CDW-PG.

Notemos como a contribuição vinda de cada fase torna-se evidente na função de Green (7.45); isto representa uma vantagem com relação ao método alternativo de solução do problema (7.37) apresentado no apêndice G. Os efeitos da fase PG são introduzidos apenas no último termo de $\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{p}, i\omega_n)$; quando efetuarmos a inversão matricial teremos um acoplamento não-trivial desse termo com a parte CDW $\mathcal{H}(\mathbf{p})$. Notemos também que, por construção nossa, no caso $J_Q = 0$ a função de Green acima torna-se da forma do *ansatz* YRZ, mostrando que $\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{p}, i\omega_n)|_{J_Q=0}$ descreve a fase PG. Assim como no caso YRZ foi possível obter $G^{\text{YRZ}}(\mathbf{k}, \omega)$ de um modelo microscópico [243, 244], para o nosso caso talvez também seja possível fazer uma derivação similar; deixaremos este tópico para um trabalho futuro.

7.2.3 Propriedades espectrais na região de coexistência

A função espectral do sistema pode ser obtida diretamente de (7.45). Como foi feito no caso com apenas a ordem de carga, depois da inversão matricial relaxaremos a condição $\mathbf{p} \in \text{rBZ}$, de forma a podermos trabalhar apenas com o primeiro elemento da base. Assim, a função espectral que descreve a coexistência CDW-PG é:

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } \mathbf{G}_{11}(\mathbf{k}, \omega), \quad (7.46)$$

onde $\mathbf{k} \in \text{BZ}$ e a continuação analítica, veja a seção F.4, já foi efetuada. A *DOS* é obtida diretamente da equação acima: $\rho(\omega) = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega)$. Na Fig. 39 as propriedades espectrais estão resumidas. Para tal consideramos os valores $J_Q = 0.4t$, $\Delta = 0.8t^{12}$ e uma densidade de buracos $p = 0.12$, que corresponde a $\mu = -0.804t$, calculado usando a função espectral (7.46) e assumindo a estrutura de bandas *Liechtenstein*.

Na Fig. 39 (a) temos a *DOS* do sistema juntamente com a contribuição vinda da fase CDW. Nota-se como a introdução da fase PG reduz consideravelmente o peso espectral em torno do nível de Fermi, levando a uma FS do tipo arco, como pode ser visto na Fig. 39 (b). Com isso, vemos que as assinaturas da fase CDW na FS, isto é,

¹² $J_Q = 0.4t$ corresponde ao valor usado inicialmente para tratar o caso com apenas CDW. $\Delta = 0.8t$, que caracteriza $\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}} = 4\lambda_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k})$, implica que estamos considerando a fase PG quatro vezes mais intensa que a fase CDW. Tal escolha é fundamentada no fato fenomenológico de que os efeitos da fase PG são mais facilmente detectáveis do que os da fase CDW, portanto espera-se que a fase PG seja mais “intensa”. O estabelecimento recente, em comparação com a PG, da fase CDW nos cupratos sustenta isso.

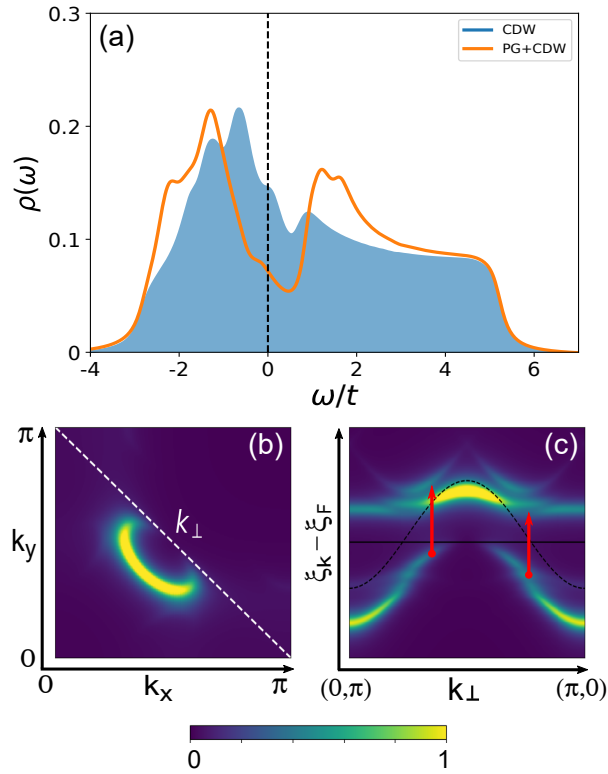


Figura 39 – Propriedades espectrais na região de coexistência das fases CDW e PG segundo (7.45). **(a)** *DOS* na região de coexistência CDW-PG juntamente com a contribuição vinda apenas da CDW. Notar a característica [242] perda de peso espectral introduzida pela PG em torno do nível de Fermi. Esta perda resulta em uma FS constituída apenas de um arco, como mostrado em **(b)** e visto experimentalmente [161] (veja a Fig. 24), portanto sem assinaturas da CDW (compare com a Fig. 31). Em **(c)** temos a dispersão ao longo do caminho $k_{\perp}$, que agora apresenta um *gap* no nível de Fermi e, se comparada com a Fig. 31 **(k)**, mostra que os efeitos da CDW só estão presentes na região de altas energias, com o aparecimento de bandas do tipo cone. A linha tracejada indica a dispersão de partícula única no caso $J_Q = \Delta = 0$ e as setas vermelhas indicam novas transições energéticas. Consideramos o conjunto de parâmetros de banda *Liechtenstein*, uma dopagem $p = 0.12$ e os valores $J_Q = 0.4t$ e $\Delta = 0.8t$.

gaps nos pontos de *nesting*, desaparecem, tornando-se difícil identificar qualquer ordem de carga no sistema. A destruição de peso espectral na região antinodal da FS faz com que a distribuição espectral ao longo do caminho $k_{\perp}$ apresente um *gap* no nível Fermi, Fig. 39 **(c)**, diferentemente do caso com apenas CDW, onde vimos *gaps* nos pontos de *nesting*. Nesta mesma figura podemos notar que a fase PG é responsável por comprimir todas as bandas que apareciam próximo da região antinodal e somente na região de altas energias o sistema herda leves assinaturas da ordem de carga, como o aparecimento de bandas tipo cone (veja a Fig. 31).

Com o que acabamos de ver concluímos que os efeitos da fase CDW são subdominantes quando olhamos para as propriedades espectrais na região de coexistência CDW-PG.

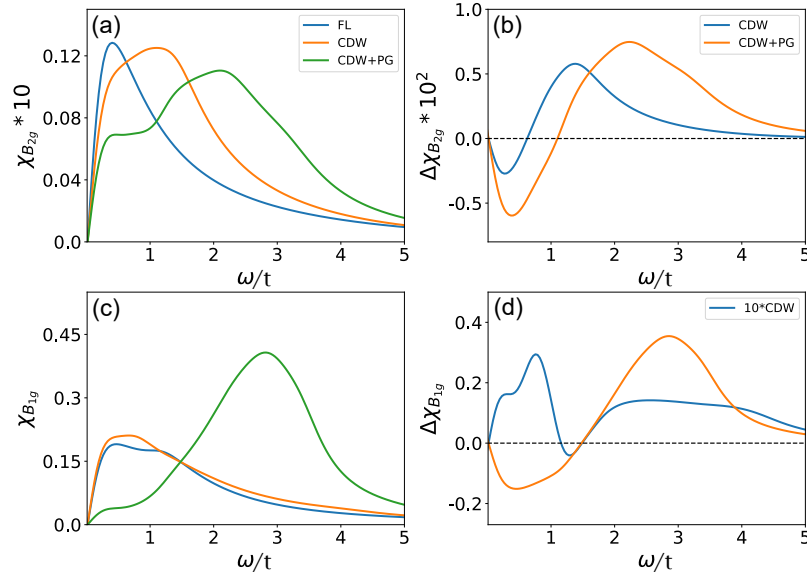


Figura 40 – Respostas Raman na região de coexistência CDW-PG. **(a)** Respostas B_{2g} absolutas para as fases FL (líquido de Fermi), CDW e na coexistência CDW-PG. **(b)** Correspondentes respostas relativas B_{2g} , isto é, $\Delta\chi = \chi - \chi^{(0)}$, sendo $\chi^{(0)}$ a resposta da fase FL. **(c, d)** Equivalentes de **(a, b)** mas agora para o canal B_{1g} . Notar o fator multiplicativo de 10 na resposta $\Delta\chi_{B_{1g}}$ da fase CDW em **(d)**. Os parâmetros usados aqui foram os mesmos usados para obter a Fig. 39.

Nosso resultado sugere uma resposta para a questão do porquê tem sido difícil detectar a fase CDW em medidas de ARPES.

7.2.4 Respostas Raman na região de coexistência

A resposta Raman nos canais B_{2g} e B_{1g} é ainda dada pela Eq. (7.25), onde agora a função espectral que aparece dentro do traço é $-\frac{1}{\pi}\text{Im } \mathbf{G}(\mathbf{p}, \omega)$. A Fig. 40 resume nossos resultados. Na Fig. 40 **(a, c)** temos as respostas absolutas $\chi_{B_{2g}}$ e $\chi_{B_{1g}}$, respectivamente, enquanto na Fig. 40 **(b, d)** as correspondentes respostas relativas à fase FL.

Na Fig. 40 **(b)** percebemos que a introdução da fase PG na resposta B_{2g} não destrói a assinatura característica *dip-hump* vista inicialmente nos nossos resultados (veja a Fig. 35) e nos experimentos [17]; além disso, as respostas com e sem PG possuem uma intensidade comparável. Isto reforça a afirmação feita anteriormente, totalmente fenomenológica, de que no canal B_{2g} os efeitos da CDW são mais importantes do que os da PG. Por outro lado, no canal B_{1g} vemos o comportamento oposto, veja a Fig. 40 **(c, d)**: a resposta Raman B_{1g} é completamente dominada pela PG, de forma que enxergar qualquer assinatura de uma ordem de carga no sistema neste canal é difícil (se comparado com o canal B_{2g}), como indica os experimentos [17].

A concordância do nosso modelo (7.45) com os resultados experimentais vista acima

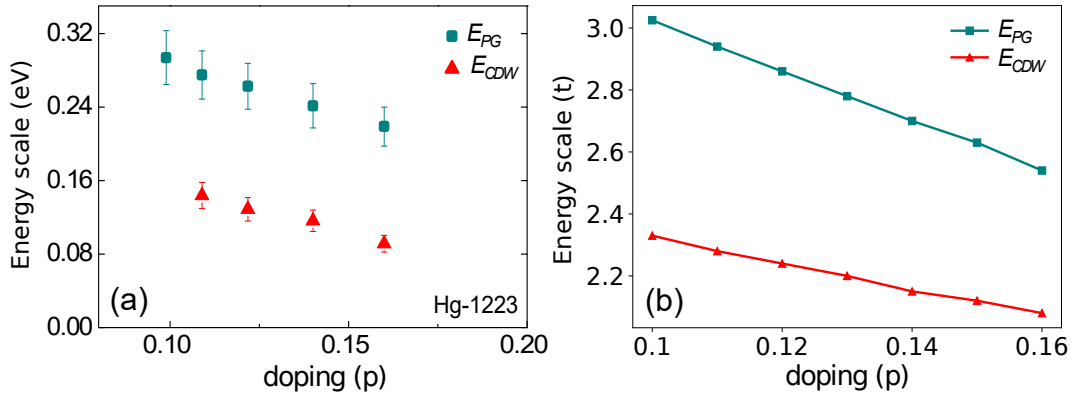


Figura 41 – Escalas de energia das fases CDW (E_{CDW}) e PG (E_{PG}), em função da dopagem, extraídas das respostas Raman B_{2g} e B_{1g} , respectivamente. **(a)** Resultado experimental obtido em [17]. **(b)** Resultado teórico segundo nosso modelo (7.45) e considerando as dependências com p como em (7.47). Vemos que com o nosso modelo somos capazes de capturar as tendências das escalas de energias das fases CDW e PG em função da dopagem p , revelando, ao menos dentro de nossa descrição, que a fase PG é a responsável por guiar a dependência com p da fase CDW.

nos encoraja a investigar um cenário mais geral das fases CDW e PG: suas dependências com a dopagem p .

7.2.5 Escala de energia das fases CDW e PG

Como foi apontado ao longo da introdução do *ansatz* YRZ, tanto os parâmetros da estrutura de bandas quanto o potencial PG possuem uma dependência com a dopagem p de buracos [242]. Em primeira aproximação consideraremos que apenas Δ , isto é, o potencial PG, muda com a dopagem. Já para a fase CDW, nossa descrição de campo médio impossibilita saber como o potencial CDW J_Q varia em função de p . Isto nos impulsiona a conjecturar a seguinte dependência com p para essas quantidades:

$$\begin{aligned}\Delta(p) &= \theta(0.2 - p)(1 - 2p)t, \\ J_Q(p) &\approx \text{cte} = 0.4t,\end{aligned}\tag{7.47}$$

sendo $\theta(x)$ a função Heaviside. Para a fase CDW estamos supondo que esta tem uma fraca dependência com p , de forma que podemos considerar J_Q uma constante (com o mesmo valor $0.4t$). Para a fase PG estamos supondo um comportamento linear, como no *ansatz* YRZ, que abruptamente vai a zero quando $p = 0.2$, como de fato é visto experimentalmente para alguns cupratos [204]. Com isso teremos $\mathbf{G} = \mathbf{G}(\mathbf{k}, \omega, p)$, o que nos permite investigar a evolução das respostas Raman em função de p .

Efetuada o cálculo das respostas Raman para os diferentes níveis de dopagem

teremos acesso à escala de energia $E_\nu(p)$ característica de cada fase, sendo

$$\Delta\chi_\nu(E_\nu) = \text{máx}\{\Delta\chi_\nu\}, \quad (7.48)$$

para cada p . Dado os nossos achados na subseção anterior, podemos identificar $E_{B_{1g}}$ ($E_{B_{2g}}$) como sendo a escala de energia da fase PG (CDW), ou seja, $E_{B_{1g}} = E_{PG}$ e $E_{B_{2g}} = E_{CDW}$. Na Fig. 41 apresentamos nossos resultados juntamente com os resultados experimentais de [17]. Na Fig. 41 **(b)** plotamos $E_\nu(p)$ no intervalo de dopagem de nosso interesse (onde os experimentos são feitos). Vemos que as duas escalas de energia decrescem linearmente à medida que introduzimos buracos no sistema, com $E_{PG}(p) > E_{CDW}(p)$, como é visto experimentalmente [17] (veja a Fig. 41 **(a)** ou a Fig. 30 **(b)**). Esta concordância (em nível qualitativo) dos nossos resultados com os resultados experimentais corrobora a nossa hipótese inicial para as dependências com p , Eq. (7.47), das fases CDW e PG, levando-nos à conclusão mais geral de que a fase PG é a responsável por guiar a dependência com p da fase CDW nos cupratos, como já havia sido cogitado em [17].

Podemos nos perguntar como a escolha dos valores de Δ e J_Q em (7.47) interfere no resultado da Fig. 41 **(b)** e, conseqüentemente, na nossa conclusão geral acima. A fim de testar se o comportamento qualitativo exposto na Fig. 41 **(b)** se mantém, nós repetimos a análise para os casos $\Delta(p) = 1 - p$ e $\Delta(p) = 1 - 3p$, mantendo $J_Q = 0.4t$. Vimos que em ambas as situações $E_{PG}(p) > E_{CDW}(p)$ e as duas funções continuam decrescendo linearmente com o aumento de p (no intervalo de dopagem considerado), indicando que nossa conclusão se mantém robusta.

7.3 Conclusões deste trabalho

Estudamos a fase onda de densidade de carga (CDW) dos cupratos supercondutores, com foco em sua detecção dentro da espectroscopia Raman eletrônica. Para isso adotamos uma abordagem fenomenológica para descrever uma ordem de carga bidirecional, no plano CuO_2 , de período de 4 células unitárias e com simetria d (que imita os experimentos [16]). Mostramos que a CDW produz uma assinatura robusta na forma *dip-hump* na resposta Raman B_{2g} , consistente com o que é observado nos experimentos [17], em nítido contraste com a resposta Raman B_{1g} . Além disso, vimos que esse resultado é universal, independentemente dos detalhes da estrutura de bandas considerada.

Em seguida, consideramos os efeitos de uma ordem de carga na fase PG dentro de uma abordagem inspirada no *ansatz* YRZ [220]. Vimos que a presença da fase PG não destrói a assinatura característica *dip-hump* da fase CDW na resposta Raman B_{2g} e que a resposta Raman B_{1g} é dominada pela PG. Ambos esses resultados estão em completa concordância com os resultados experimentais [17].

Por último, mostramos que a fase PG pode ser a origem do comportamento monotônico decrescente da escala de energia da fase CDW com dopagem, o que é sugestivo

de uma fase PG governando as diferentes escalas de energias na região *underdoped* do complexo diagrama de fases dos cupratos.

8 Conclusões e perspectivas

Nesta tese nós estudamos a física de dois sistemas de elétrons fortemente correlacionados. O primeiro consistiu em uma impureza magnética acoplada a um sistema de elétrons interagentes unidimensional, com intuito de investigar o efeito Kondo. Boa parte dos nossos resultados, com exceção do final do capítulo 4, foram obtidos na situação em que a impureza está no meio de duas cadeias (ou na borda de apenas uma) de elétrons interagentes (cadeias de Hubbard). Para estudar a formação temporal do efeito Kondo, nós consideramos que inicialmente a impureza está desacoplada das cadeias, de forma que não haja efeito Kondo, estando a impureza polarizada e as cadeias nos seus respectivos estados fundamentais. Ao acoplar subitamente a impureza às cadeias, obtivemos indícios da formação temporal do efeito Kondo.

Vimos no capítulo 4 que, para o caso do acoplamento com apenas uma cadeia, a magnetização escala no tempo com uma dependência logarítmica no regime de tempos intermediários. Já no caso do acoplamento com duas cadeias, a dependência logarítmica é corrigida por uma lei de potência, que depende da interação elétron-elétron nas cadeias. Ambos esses resultados analíticos estão de acordo com simulações numéricas realizadas usando o método tDMRG; porém, no caso do acoplamento com duas cadeias, a distinção entre a dependência logarítmica pura e o logaritmo corrigido com uma lei de potência é ambígua. Além disso, com respeito aos efeitos da interação elétron-elétron U nas cadeias, os resultados de tDMRG mostram que o decaimento da magnetização ocorre mais rapidamente quando aumentamos o valor de U , revelando que o efeito Kondo é favorecido por esse aumento. Esses resultados foram publicados na revista Phys. Rev. B [24]. No final do capítulo 4 também discutimos resultados para outra geometria do acoplamento impureza-cadeia, a geometria *side coupling*. Nosso resultado para a magnetização nessa nova geometria se mostra mais apto a distinguir entre dependência logarítmica e o logaritmo corrigido pela lei de potência com expoente dependente da interação, visto que a lei de potência cresce à medida que o tempo passa.

No capítulo 5 nós estudamos o transporte de carga através da impureza e também generalizamos o resultado da magnetização obtido no capítulo 4 para um regime maior de tempo. Na situação em que os elétrons nas cadeias não interagem, calculamos a corrente nos limites de tempos $\tau \ll \tau_K$ e $\tau \gg \tau_K$, onde τ_K é o tempo Kondo, e mostramos que esta quantidade é dada por uma função de escala apenas da razão τ_K/τ . Vimos também que nossos resultados podem ser obtidos dos resultados do problema estático [46] fazendo $T \rightarrow 1/\tau$, deixando claro que o papel do tempo na dinâmica pós-*quench* é o de uma temperatura efetiva que corta as singularidades do infravermelho associadas com o efeito Kondo, como apontado no trabalho [71]. Para o caso de elétrons interagentes, mostramos

que a corrente exibe claras assinaturas do efeito Kondo em um líquido de Luttinger, como o aparecimento de uma dependência do tipo lei de potência com expoente dependente da interação. Em especial, a partir da expressão da corrente no limite de tempos curtos, obtivemos uma expressão para escala de tempo onde a teoria de perturbação deixa de ser válida; esta escala de tempo faz o papel de um tempo Kondo no caso interagente. Por essa expressão vimos que o tempo Kondo no caso fracamente interagente é reduzido em comparação com o caso de elétrons livres, em concordância com os resultados numéricos vindos de tDMRG obtidos em nosso grupo de pesquisa e discutidos no capítulo 4.

Com respeito à magnetização da impureza, vimos que esta quantidade, diferentemente da corrente de carga para o caso $U = 0$, não é dada como função da razão τ_K/τ ; porém, sua derivada, isto é, a corrente de spin que flui para as cadeias, é. Explicamos este resultado com base na natureza distinta entre a corrente de carga e a corrente de spin. Enquanto a corrente de carga surge como consequência de uma diferença de potenciais químicos eV entre as cadeias, a corrente de spin surge apenas do *quench*, não sendo necessária a aplicação de um campo magnético externo, por exemplo. É importante mencionar que no trabalho [49] os autores chegaram a uma conclusão parecida a esta, mas para a magnetização em função do comprimento da cadeia. Os autores desse trabalho não discutiram o que levou a este comportamento; aqui nós explicamos o motivo da magnetização da impureza não ser uma função de escala da razão τ_K/τ . Ainda neste capítulo 5 e com base nos resultados mencionados acima, determinamos que, no caso não interagente, a razão entre as correntes de carga e spin no limite $\tau \ll \tau_K$ é um número universal independente dos detalhes microscópicos do modelo. Os resultados descritos nesses dois últimos parágrafos foram publicados na revista Phys. Rev. B. [25].

Como perspectivas para trabalhos futuros, planejamos finalizar o projeto brevemente discutido no final do capítulo 5 e no apêndice E sobre o *interplay* entre o efeito Kondo e modos zero de Majorana, como também analisar a dinâmica pós-*quench* do efeito Kondo de mais canais, considerando cadeias de spin em vez de cadeias de elétrons.

O segundo projeto desta tese envolveu o estudo das respostas Raman eletrônicas da fase com ordenamento de carga presente nos cupratos supercondutores. Resultados experimentais [17] nos quais se identificou uma assinatura da fase CDW na resposta Raman B_{2g} , o que permitiu a extração da evolução da escala de energia desta fase em função da dopagem, nos motivaram a investigar teoricamente o tema. Para tal consideramos uma descrição fenomenológica em que uma ordem de carga bidirecional de 4 células unitárias d-simétrica está presente no plano de CuO_2 . Visto que os resultados experimentais mencionados acima estabeleceram que a assinatura da ordem de carga está presente em diferentes famílias de cupratos, nós consideramos diferentes conjuntos de parâmetros para a estrutura de bandas, de forma a simular diferentes materiais.

Vimos no capítulo 7 que a fase CDW leva ao aparecimento de *gaps* nos pontos de

nesting da superfície de Fermi. Próximo à região antinodal e para valores negativos de energia, há o aparecimento de novas bandas, que se mostraram fortemente dependentes da estrutura de bandas assumidas, enquanto próximo da região nodal e para valores positivos de energia vimos um comportamento semelhante entre as três estruturas de bandas consideradas. Isto conduziu a uma perda de peso espectral na *DOS* na região de frequências $\omega > 0$ em torno de J_Q (amplitude da onda de densidade de carga), a qual independe da estrutura de bandas. Assim, concluímos que uma assinatura clara da fase CDW deve ser vista da região $\omega > 0$ da *DOS*.

Nossos resultados para a resposta Raman B_{2g} mostraram que ela apresenta uma forma *dip-hump* característica, como de fato é visto nos experimentos, a qual independe da estrutura de bandas considerada. Associamos esta forma com o surgimento de novas bandas próximo da região nodal e para $\omega > 0$. Em oposição, a resposta Raman B_{1g} se mostra bastante dependente da estrutura de bandas, como consequência do aparecimento de novas bandas próximo da região antinodal e para $\omega < 0$. Com esses resultados nós contribuímos para o esclarecimento do porquê a fase CDW se mostra mais claramente no canal B_{2g} e não no canal B_{1g} [17]. O fato do comportamento geral da resposta B_{2g} não depender da estrutura de bandas sugere que a forma *dip-hump* é universal, no sentido de não depender do material, como de fato é visto experimentalmente.

Na segunda parte do trabalho foi proposto um modelo mais geral para a região *underdoped*, baseado no *ansatz* de Yang-Rice-Zhang [220, 242] e que leva em consideração também a fase PG. Vimos com esse modelo que a introdução da fase PG não destrói a assinatura *dip-hump* da fase CDW na resposta B_{2g} e que a resposta no canal B_{1g} é dominada pela fase PG, como é visto nos experimentos [17]. Por fim, mostramos que a fase PG guia a dependência com a dopagem da escala de energia da fase CDW, o que é sugestivo de uma fase PG governando as diferentes escalas de energia de fases exóticas que aparecem na região *underdoped* do complexo diagrama de fases dos cupratos, como a fase *pair density wave* (PDW). É válido mencionar que além de descrever os resultados experimentais (ao menos em nível qualitativo), nossa descrição aponta uma direção para formulações de teorias mais gerais que se proponham a tratar a região *underdoped* dos cupratos. Os resultados desse capítulo 7 foram publicados na revista Phys. Rev. B [26].

Como perspectivas para trabalhos futuros, gostaríamos de confirmar experimentalmente que a condutividade óptica também carrega assinaturas sobre a fase CDW, como apontam nossos resultados na Fig. 37. Além disso, esperamos generalizar o modelo da Eq. (7.45) considerando uma ordem supercondutora descrita por um potencial Δ_{SC} d-simétrico, buscando assim descrever completamente os resultados de Raman para as escalas de energia das fases CDW, PG e SC; veja a Fig. 30. Uma outra direção possível de trabalho é analisar os efeitos, sobre a resposta Raman, de ordens mais exóticas que aparecem na região *underdoped* dos cupratos, como a ordem PDW [226–228]. Com isso

poderíamos fazer previsões sobre se a espectroscopia Raman eletrônica é uma boa técnica para examinar esta fase.

REFERÊNCIAS

- [1] Ashcroft, N.W., N.D. Mermin e N.D. Mermin: *Solid State Physics*. HRW international editions. Holt, Rinehart and Winston, 1976, ISBN 9780030839931. <https://books.google.com.br/books?id=1C9HAQAAIAAJ>.
- [2] Sakurai, J.J. e J. Napolitano: *Modern Quantum Mechanics*. Pearson custom library. Pearson, 2014, ISBN 9781292024103. <https://books.google.com.br/books?id=JBoAngEACAAJ>.
- [3] Pavarini, E., E. Koch, U. Schollwöck e Institute for Advanced Simulation: *Emergent Phenomena in Correlated Matter: Lecture Notes of the Autumn School Correlated Electrons 2013, at Forschungszentrum Jülich, 23 - 27 September 2013*. Schriften des Forschungszentrums Jülich / Reihe Modeling and Simulation: Reihe Modeling and Simulation. Forschungszentrum Jülich, Inst. for Advanced Simulation, 2013, ISBN 9783893368846. <https://books.google.com.br/books?id=YZSz2n6DiFUC>.
- [4] Anderson, P. W.: *More Is Different*. Science, 177(4047):393–396, 1972. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.177.4047.393>.
- [5] Giamarchi, T. e Oxford University Press: *Quantum Physics in One Dimension*. International Series of Monogr. Clarendon Press, 2004, ISBN 9780198525004. <https://books.google.com.br/books?id=1MwTDAAAQBAJ>.
- [6] Vijayan, Jayadev, Pimonpan Sompert, Guillaume Salomon, Joannis Koepsell, Sarah Hirthe, Annabelle Bohrdt, Fabian Grusdt, Immanuel Bloch e Christian Gross: *Time-resolved observation of spin-charge deconfinement in fermionic Hubbard chains*. Science, 367(6474):186–189, jan 2020. <https://doi.org/10.1126%2Fscience.aay2354>.
- [7] Lewenstein, M., A. Sanpera e V. Ahufinger: *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating quantum many-body systems*. OUP Oxford, 2012, ISBN 9780191627439. <https://books.google.com.br/books?id=Wp191RDxV5IC>.
- [8] Dagotto, Elbio: *Complexity in Strongly Correlated Electronic Systems*. Science, 309(5732):257–262, jul 2005. <https://doi.org/10.1126%2Fscience.1107559>.
- [9] Coleman, P.: *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 2015, ISBN 9780521864886. <https://books.google.com.br/books?id=PDg1HQAACAAJ>.
- [10] MOTT, N. F.: *Metal-Insulator Transition*. Rev. Mod. Phys., 40:677–683, Oct 1968. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.40.677>.

- [11] McWhan, D. B., A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman e T. M. Rice: *Metal-Insulator Transitions in Pure and Doped V_2O_3* . Phys. Rev. B, 7:1920–1931, Mar 1973. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.7.1920>.
- [12] Keimer, B, S Kivelson, M Norman, S Uchida e J. Zaanen: *From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides*. Nature, 518:179–86, fevereiro 2015.
- [13] Dagotto, Elbio: *Correlated electrons in high-temperature superconductors*. Rev. Mod. Phys., 66:763–840, Jul 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66.763>.
- [14] Bardeen, J., L. N. Cooper e J. R. Schrieffer: *Microscopic Theory of Superconductivity*. Phys. Rev., 106:162–164, Apr 1957. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.106.162>.
- [15] Bednorz, J. G. e K. A. Müller: *Possible high T_c superconductivity in the $BaLaCuO$ system*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 64(2):189–193, 1986. <https://app.dimensions.ai/details/publication/pub.1036381635>.
- [16] Comin, Riccardo e Andrea Damascelli: *Resonant X-Ray Scattering Studies of Charge Order in Cuprates*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 7(1):369–405, Mar 2016, ISSN 1947-5462. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031115-011401>.
- [17] Loret, B., N. Auvray, Y. Gallais, M. Cazayous, A. Forget, D. Colson, M. H. Julien, I. Paul, M. Civelli e A. Sacuto: *Intimate link between charge density wave, pseudogap and superconducting energy scales in cuprates*. Nature Physics, 15(8):771–775, Apr 2019, ISSN 1745-2481. <http://dx.doi.org/10.1038/s41567-019-0509-5>.
- [18] Hewson, A.C.: *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press, 1997, ISBN 9780521599474. <https://books.google.com.br/books?id=fPzgHneNFDAC>.
- [19] de Haas, W.J., J. de Boer e G.J. van dën Berg: *The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures*. Physica, 1(7):1115–1124, 1934, ISSN 0031-8914. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891434803102>.
- [20] 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>.
- [21] Eisert, J., M. Friesdorf e C. Gogolin: *Quantum many-body systems out of equilibrium*. Nature Physics, 11(2):124–130, feb 2015. <https://doi.org/10.1038%2Fnpphys3215>.

- [22] Mitra, Aditi: *Quantum Quench Dynamics*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 9(1):245–259, mar 2018. <https://doi.org/10.1146/2Fannurev-conmatphys-031016-025451>.
- [23] Gogolin, A.O., A.A. Nersesyan e A.M. Tsvelik: *Bosonization and Strongly Correlated Systems*. Cambridge University Press, 2004, ISBN 9780521617192. <https://books.google.com.br/books?id=BZDfFIpCoaAC>.
- [24] Bragança, Helena, M. F. Cavalcante, R. G. Pereira e Maria C. O. Aguiar: *Quench dynamics and relaxation of a spin coupled to interacting leads*. Phys. Rev. B, 103:125152, Mar 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.125152>.
- [25] Cavalcante, Moallison F., Rodrigo G. Pereira e Maria C. O. Aguiar: *Quench dynamics of the Kondo effect: Transport across an impurity coupled to interacting wires*. Phys. Rev. B, 107:075110, Feb 2023. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.107.075110>.
- [26] Cavalcante, M. F., S. Bag, I. Paul, A. Sacuto, M. C. O. Aguiar e M. Civelli: *Raman response of the charge density wave in cuprate superconductors*. Phys. Rev. B, 108:165111, Oct 2023. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.108.165111>.
- [27] Kouwenhoven, Leo e Leonid Glazman: *Revival of the Kondo effect*, 2001.
- [28] Anderson, P W: *A poor man’s derivation of scaling laws for the Kondo problem*. Journal of Physics C: Solid State Physics, 3(12):2436, dec 1970. <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/3/12/008>.
- [29] Yuval, G. e P. W. Anderson: *Exact Results for the Kondo Problem: One-Body Theory and Extension to Finite Temperature*. Phys. Rev. B, 1:1522–1528, Feb 1970. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.1.1522>.
- [30] Anderson, P. W., G. Yuval e D. R. Hamann: *Exact Results in the Kondo Problem. II. Scaling Theory, Qualitatively Correct Solution, and Some New Results on One-Dimensional Classical Statistical Models*. Phys. Rev. B, 1:4464–4473, Jun 1970. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.1.4464>.
- [31] Wilson, Kenneth G.: *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys., 47:773–840, Oct 1975. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.47.773>.
- [32] Nozières, P.: *A “Fermi-liquid” description of the Kondo problem at low temperatures*. J. Low Temp. Phys., 17(1):31–42, 1974. <https://doi.org/10.1007/BF00654541>.

- [33] Krusius, M. e M. Vuorio: *Proceedings of the 14th International Conference on Low Temperature Physics, Otaniemi, Finland, August 14-20, 1975*. Número v. 1 em *LT-14*. North-Holland Publishing Company, 1975, ISBN 9780720493016. <https://books.google.com.br/books?id=VLp6AAAAIAAJ>.
- [34] Andrei, N.: *Diagonalization of the Kondo Hamiltonian*. Phys. Rev. Lett., 45:379–382, Aug 1980. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.379>.
- [35] Wiegmann, P B: *Exact solution of the s-d exchange model (Kondo problem)*. Journal of Physics C: Solid State Physics, 14(10):1463, apr 1981. <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/14/10/014>.
- [36] Affleck, Ian: *Quantum Impurity Problems in Condensed Matter Physics*, 2009.
- [37] Affleck, Ian: *The Kondo screening cloud: what it is and how to observe it*, 2010.
- [38] Borzenets, Ivan V., Jeongmin Shim, Jason C. H. Chen, Arne Ludwig, Andreas D. Wieck, Seigo Tarucha, H. S. Sim e Michihisa Yamamoto: *Observation of the Kondo screening cloud*. Nature, 579(7798):210–213, mar 2020. <https://doi.org/10.1038/2Fs41586-020-2058-6>.
- [39] Anderson, P. W.: *Localized Magnetic States in Metals*. Phys. Rev., 124:41–53, Oct 1961. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.124.41>.
- [40] Haldane, F. D. M.: *Scaling Theory of the Asymmetric Anderson Model*. Phys. Rev. Lett., 40:416–419, Feb 1978. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.40.416>.
- [41] Cronenwett, Sara M., Tjerk H. Oosterkamp e Leo P. Kouwenhoven: *A Tunable Kondo Effect in Quantum Dots*. Science, 281(5376):540–544, 1998. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.281.5376.540>.
- [42] Goldhaber-Gordon, D., Hadas Shtrikman, D. Mahalu, David Abusch-Magder, U. Meirav e M. A. Kastner: *Kondo effect in a single-electron transistor*. Nature, 391(6663):156–159, January 1998. https://ideas.repec.org/a/nat/nature/v391y1998i6663d10.1038_34373.html.
- [43] Schrieffer, J. R. e P. A. Wolff: *Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians*. Phys. Rev., 149:491–492, Sep 1966. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.149.491>.
- [44] Kouwenhoven, Leo e Charles Marcus: *Quantum dots*. Physics World, 11(6):35, jun 1998. <https://dx.doi.org/10.1088/2058-7058/11/6/26>.

- [45] Martinek, J., Y. Utsumi, H. Imamura, J. Barnaś, S. Maekawa, J. König e G. Schön: *Kondo Effect in Quantum Dots Coupled to Ferromagnetic Leads*. Phys. Rev. Lett., 91:127203, Sep 2003. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.127203>.
- [46] Pustilnik, Michael e Leonid Glazman: *Kondo effect in quantum dots*. Journal of Physics: Condensed Matter, 16(16):R513, apr 2004. <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/16/16/R01>.
- [47] Pouse, Winston, Lucas Peeters, Connie L. Hsueh, Ulf Gennser, Antonella Cavanna, Marc A. Kastner, Andrew K. Mitchell e David Goldhaber-Gordon: *Quantum simulation of an exotic quantum critical point in a two-site charge Kondo circuit*. Nature Physics, 19(4):492–499, jan 2023. <https://doi.org/10.1038/s41567-022-01905-4>.
- [48] Affleck, Ian: *Quantum Impurity Problems in Condensed Matter Physics*. Em Jacobsen, Jesper, Stephane Ouvry, Vincent Pasquier e Didina Serbanand Leticia Cugliandolo (editores): *Exact Methods in Low-Dimensional Statistical Physics and Quantum Computing*. Oxford University Press, Oxford, 2010.
- [49] Sørensen, Erik S. e Ian Affleck: *Scaling theory of the Kondo screening cloud*. Phys. Rev. B, 53:9153–9167, Apr 1996. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.53.9153>.
- [50] Simon, Pascal e Ian Affleck: *Persistent currents through a quantum dot*. Phys. Rev. B, 64:085308, Aug 2001. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.64.085308>.
- [51] Simon, Pascal e Ian Affleck: *Kondo screening cloud effects in mesoscopic devices*. Phys. Rev. B, 68:115304, Sep 2003. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.115304>.
- [52] Pereira, Rodrigo G., Nicolas Laflorencie, Ian Affleck e Bertrand I. Halperin: *Kondo screening cloud and charge staircase in one-dimensional mesoscopic devices*. Phys. Rev. B, 77:125327, Mar 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.125327>.
- [53] Laflorencie, Nicolas, Erik S Sørensen e Ian Affleck: *The Kondo effect in spin chains*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2008(02):P02007, feb 2008. <https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2008/02/P02007>.
- [54] Eggert, Sebastian e Ian Affleck: *Magnetic impurities in half-integer-spin Heisenberg antiferromagnetic chains*. Phys. Rev. B, 46:10866–10883, Nov 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.10866>.

- [55] Frahm, Holger e Andrei A Zvyagin: *The open spin chain with impurity: an exact solution*. Journal of Physics: Condensed Matter, 9(45):9939, nov 1997. <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/9/45/021>.
- [56] Furusaki, A. e T. Hikihara: *Kondo effect in XXZ spin chains*. Phys. Rev. B, 58:5529–5538, Sep 1998. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.5529>.
- [57] Giuliano, Domenico, Pasquale Sodano e Andrea Trombettoni: *Kondo length in bosonic lattices*. Phys. Rev. A, 96:033603, Sep 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.033603>.
- [58] Nozières, Ph. e Blandin, A.: *Kondo effect in real metals*. J. Phys. France, 41(3):193–211, 1980. <https://doi.org/10.1051/jphys:01980004103019300>.
- [59] Affleck, Ian e Andreas W.W. Ludwig: *Critical theory of overscreened Kondo fixed points*. Nuclear Physics B, 360(2):641–696, 1991, ISSN 0550-3213. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/055032139190419X>.
- [60] Emery, V. J. e S. Kivelson: *Mapping of the two-channel Kondo problem to a resonant-level model*. Phys. Rev. B, 46:10812–10817, Nov 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.10812>.
- [61] Parcollet, Olivier, Antoine Georges, Gabriel Kotliar e Anirvan Sengupta: *Overscreened multichannel $SU(N)$ Kondo model: Large- N solution and conformal field theory*. Phys. Rev. B, 58:3794–3813, Aug 1998. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.3794>.
- [62] Affleck, Ian: *Non-Fermi Liquid Behavior in Kondo Models*. Journal of the Physical Society of Japan, 74(1):59–66, jan 2005. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.59>.
- [63] Affleck, Ian e Andreas W.W. Ludwig: *Critical theory of overscreened Kondo fixed points*. Nuclear Physics B, 360(2):641–696, 1991, ISSN 0550-3213. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/055032139190419X>.
- [64] Potok, R. M., I. G. Rau, Hadas Shtrikman, Yuval Oreg e D. Goldhaber-Gordon: *Observation of the two-channel Kondo effect*. Nature, 446(7132):167–171, Mar 2007, ISSN 1476-4687. <https://doi.org/10.1038/nature05556>.
- [65] Lee, Dung Hai e John Toner: *Kondo effect in a Luttinger liquid*. Phys. Rev. Lett., 69:3378–3381, Dec 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.3378>.
- [66] Furusaki, Akira e Naoto Nagaosa: *Kondo effect in a Tomonaga-Luttinger liquid*. Phys. Rev. Lett., 72:892–895, Feb 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.72.892>.

- [67] Kim, Eugene: *Kondo Effect in Quantum Dots Coupled to Luttinger Liquid Leads*. julho 2001.
- [68] Kim, Mun Dae, Chul Koo Kim, Kyun Nahm e Chang Mo Ryu: *Ferromagnetic fixed point of the Kondo model in a Luttinger liquid*. Journal of Physics: Condensed Matter, 13(14):3271–3281, mar 2001. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/13/14/304>.
- [69] Durganandini, P. e Pascal Simon: *Underscreened Kondo impurities in a Luttinger liquid*. Phys. Rev. B, 74:205304, Nov 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.205304>.
- [70] Costamagna, S., C. J. Gazza, M. E. Torio e J. A. Riera: *Anderson impurity in the one-dimensional Hubbard model for finite-size systems*. Phys. Rev. B, 74:195103, Nov 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.195103>.
- [71] Nordlander, Peter, Michael Pustilnik, Yigal Meir, Ned S. Wingreen e David C. Langreth: *How Long Does It Take for the Kondo Effect to Develop?* Phys. Rev. Lett., 83:808–811, Jul 1999. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.808>.
- [72] Greiner, Markus, Olaf Mandel, Theodor W. Hänsch e Immanuel Bloch: *Collapse and revival of the matter wave field of a Bose–Einstein condensate*. Nature, 419(6902):51–54, sep 2002. <https://doi.org/10.1038%2Fnature00968>.
- [73] Lancaster, Jarrett e Aditi Mitra: *Quantum quenches in an XXZ spin chain from a spatially inhomogeneous initial state*. Phys. Rev. E, 81:061134, Jun 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.81.061134>.
- [74] Cazalilla, M. A.: *Effect of Suddenly Turning on Interactions in the Luttinger Model*. Phys. Rev. Lett., 97:156403, Oct 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.156403>.
- [75] Strohmaier, Niels, Daniel Greif, Robert Jördens, Leticia Tarruell, Henning Moritz, Tilman Esslinger, Rajdeep Sensarma, David Pekker, Ehud Altman e Eugene Demler: *Observation of Elastic Doublon Decay in the Fermi-Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett., 104:080401, Feb 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.080401>.
- [76] Sommer, Ariel, Mark Ku, Giacomo Roati e Martin W. Zwierlein: *Universal spin transport in a strongly interacting Fermi gas*. Nature, 472(7342):201–204, apr 2011. <https://doi.org/10.1038%2Fnature09989>.
- [77] Schneider, Ulrich, Lucia Hackermüller, Jens Philipp Ronzheimer, Sebastian Will, Simon Braun, Thorsten Best, Immanuel Bloch, Eugene Demler, Stephan Mandt,

- David Rasch e Achim Rosch: *Fermionic transport and out-of-equilibrium dynamics in a homogeneous Hubbard model with ultracold atoms*. Nature Physics, 8(3):213–218, jan 2012. <https://doi.org/10.1038%2Fnphys2205>.
- [78] Cheneau, Marc, Peter Barmettler, Dario Poletti, Manuel Endres, Peter Schauß, Takeshi Fukuhara, Christian Gross, Immanuel Bloch, Corinna Kollath e Stefan Kuhr: *Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*. Nature, 481(7382):484–487, jan 2012. <https://doi.org/10.1038%2Fnature10748>.
- [79] Pertot, D., A. Sheikhan, E. Cocchi, L. A. Miller, J. E. Bohn, M. Koschorreck, M. Köhl e C. Kollath: *Relaxation Dynamics of a Fermi Gas in an Optical Superlattice*. Physical Review Letters, 113(17), oct 2014. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.113.170403>.
- [80] Kennes, D. M., V. Meden e R. Vasseur: *Universal quench dynamics of interacting quantum impurity systems*. Physical Review B, 90(11), sep 2014. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.90.115101>.
- [81] Schiró, Marco e Aditi Mitra: *Transport across an impurity in one-dimensional quantum liquids far from equilibrium*. Phys. Rev. B, 91:235126, Jun 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.235126>.
- [82] Iyer, Deepak, Rubem Mondaini, Sebastian Will e Marcos Rigol: *Coherent quench dynamics in the one-dimensional Fermi-Hubbard model*. Phys. Rev. A, 90:031602, Sep 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.031602>.
- [83] Will, Sebastian, Deepak Iyer e Marcos Rigol: *Observation of coherent quench dynamics in a metallic many-body state of fermionic atoms*. Nature Communications, 6(1), jan 2015. <https://doi.org/10.1038%2Fncomms7009>.
- [84] Riegger, L., G. Orso e F. Heidrich-Meisner: *Interaction quantum quenches in the one-dimensional Fermi-Hubbard model with spin imbalance*. Phys. Rev. A, 91:043623, Apr 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.043623>.
- [85] Riegger, L., N. Darkwah Oppong, M. Höfer, D. R. Fernandes, I. Bloch e S. Fölling: *Localized Magnetic Moments with Tunable Spin Exchange in a Gas of Ultracold Fermions*. Phys. Rev. Lett., 120:143601, Apr 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.143601>.
- [86] Pletyukhov, Mikhail e Herbert Schoeller: *Nonequilibrium Kondo model: Crossover from weak to strong coupling*. Phys. Rev. Lett., 108:260601, Jun 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.260601>.

- [87] Nuss, Martin, Martin Ganahl, Enrico Arrigoni, Wolfgang von der Linden e Hans Gerd Evertz: *Nonequilibrium spatiotemporal formation of the Kondo screening cloud on a lattice*. Phys. Rev. B, 91:085127, Feb 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.085127>.
- [88] Medvedyeva, M., A. Hoffmann e S. Kehrein: *Spatiotemporal buildup of the Kondo screening cloud*. Phys. Rev. B, 88:094306, Sep 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.094306>.
- [89] Wauters, Matteo M., Chia Min Chung, Lorenzo Maffi e Michele Burrello: *Simulations of the dynamics of quantum impurity problems with matrix product states*, 2023.
- [90] Calabrese, Pasquale e John Cardy: *Time Dependence of Correlation Functions Following a Quantum Quench*. Phys. Rev. Lett., 96:136801, Apr 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.136801>.
- [91] Calabrese, Pasquale e John Cardy. 2016(6):064003, jun 2016. <https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2016/06/064003>.
- [92] Schollwöck, U.: *The density-matrix renormalization group*. Rev. Mod. Phys., 77:259–315, Apr 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.77.259>.
- [93] Bragança, Helena: *Emaranhamento, dinâmica de não-equilíbrio e supercondutividade em sistemas de elétrons fortemente interagentes*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2017. <http://hdl.handle.net/1843/SMRA-BBTH4P>.
- [94] Kanász-Nagy, Márton, Yuto Ashida, Tao Shi, C ă t ă lin Pa şcu Moca, Tatsuhiko N. Ikeda, Simon Fölling, J. Ignacio Cirac, Gergely Zaránd e Eugene A. Demler: *Exploring the anisotropic Kondo model in and out of equilibrium with alkaline-earth atoms*. Phys. Rev. B, 97:155156, Apr 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.155156>.
- [95] Cappellini, G., M. Mancini, G. Pagano, P. Lombardi, L. Liv, M. Siciliani de Cumis, P. Cancio, M. Pizzocaro, D. Calonico, F. Levi, C. Sias, J. Catani, M. Inguscio e L. Fallani: *Direct Observation of Coherent Interorbital Spin-Exchange Dynamics*. Phys. Rev. Lett., 113:120402, Sep 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.120402>.
- [96] Miranda, E.: *Introduction to bosonization*. Brazilian Journal of Physics, 33:3 – 35, março 2003, ISSN 0103-9733. <https://doi.org/10.1590/S0103-97332003000100002>.
- [97] Rao, Sumathi e Diptiman Sen: *An introduction to bosonization and some of its applications*, 2001.

- [98] Delft, Jan von e Herbert Schoeller: *Bosonization for beginners — refermionization for experts*. Annalen der Physik, 510(4):225–305, nov 1998. <https://doi.org/10.1002%2Fandp.19985100401>.
- [99] Sénéchal, D.: *An introduction to bosonization*, 1999.
- [100] Cardy, J., P. Goddard e J. Yeomans: *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge Lecture Notes in Physics. Cambridge University Press, 1996, ISBN 9780521499590. <https://books.google.com.br/books?id=Wt804S9FjyAC>.
- [101] 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>.
- [102] Sénéchal, D.: *An introduction to bosonization*. arXiv e-prints, páginas cond-mat/9908262, agosto 1999.
- [103] Delft, Jan von e Herbert Schoeller: *Bosonization for beginners - refermionization for experts*. Annalen der Physik, 7(4):225–305, Nov 1998, ISSN 0003-3804. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3889\(199811\)7:4<225::AID-ANDP225>3.0.CO;2-L](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1521-3889(199811)7:4<225::AID-ANDP225>3.0.CO;2-L).
- [104] Mattis, Daniel C.: *New wave-operator identity applied to the study of persistent currents in 1D*. Journal of Mathematical Physics, 15(5):609–612, 1974. <https://doi.org/10.1063/1.1666693>.
- [105] Coleman, Sidney: *Quantum sine-Gordon equation as the massive Thirring model*. Phys. Rev. D, 11:2088–2097, Apr 1975. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.11.2088>.
- [106] Mandelstam, S.: *Soliton operators for the quantized sine-Gordon equation*. Phys. Rev. D, 11:3026–3030, May 1975. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.11.3026>.
- [107] Senaratne, Ruwan, Danyel Cavazos-Cavazos, Sheng Wang, Feng He, Ya Ting Chang, Aashish Kafle, Han Pu, Xi Wen Guan e Randall G. Hulet: *Spin-charge separation in a one-dimensional Fermi gas with tunable interactions*. Science, 376(6599):1305–1308, jun 2022. <https://doi.org/10.1126%2Fscience.abn1719>.
- [108] Fabrizio, M. e Alexander O. Gogolin: *Interacting one-dimensional electron gas with open boundaries*. Phys. Rev. B, 51:17827–17841, Jun 1995. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.17827>.

- [109] Di Francesco, P., P. Mathieu e D. Sénéchal: *Conformal Field Theory*. Graduate texts in contemporary physics. Island Press, 1996, ISBN 9781461222576. <https://books.google.com.br/books?id=mcMbswEACAAJ>.
- [110] Haldane, F. D. M.: *General Relation of Correlation Exponents and Spectral Properties of One-Dimensional Fermi Systems: Application to the Anisotropic $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg Chain*. Phys. Rev. Lett., 45:1358–1362, Oct 1980. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.1358>.
- [111] Haldane, F D M: '*Luttinger liquid theory*' of one-dimensional quantum fluids. I. Properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas. Journal of Physics C: Solid State Physics, 14(19):2585–2609, jul 1981. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/14/19/010>.
- [112] Kane, C. L. e Matthew P. A. Fisher: *Transport in a one-channel Luttinger liquid*. Phys. Rev. Lett., 68:1220–1223, Feb 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.68.1220>.
- [113] Kane, C. L. e Matthew P. A. Fisher: *Transmission through barriers and resonant tunneling in an interacting one-dimensional electron gas*. Phys. Rev. B, 46:15233–15262, Dec 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.15233>.
- [114] Furusaki, Akira: *Kondo Problems in Tomonaga–Luttinger Liquids*. Journal of the Physical Society of Japan, 74(1):73–79, 2005. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.73>.
- [115] Altland, A. e B.D. Simons: *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge books online. Cambridge University Press, 2010, ISBN 9780521769754. <https://books.google.com.br/books?id=GpF0Pgo8CqAC>.
- [116] Lieb, Elliott H. e F. Y. Wu: *Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension*. Phys. Rev. Lett., 20:1445–1448, Jun 1968. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.20.1445>.
- [117] Essler, F.H.L., H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper e V.E. Korepin: *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, 2005, ISBN 9781139441582. <https://books.google.com.br/books?id=wo0VPXt1K6oC>.
- [118] Mitra, Aditi: *Quantum Quench Dynamics*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 9(1):245–259, 2018. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031016-025451>.
- [119] Mahan, G.D.: *Many-Particle Physics*. Physics of Solids and Liquids. Springer US, 2000, ISBN 9780306463389. <https://books.google.com.br/books?id=xzSgZ4-yyMEC>.

- [120] Lukyanov, Sergei e Véronique Terras: *Long-distance asymptotics of spin–spin correlation functions for the XXZ spin chain*. Nuclear Physics B, 654(3):323–356, mar 2003.
- [121] Durganandini, P. e Pascal Simon: *Underscreened Kondo impurities in a Luttinger liquid*. Phys. Rev. B, 74:205304, Nov 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.205304>.
- [122] White, Steven R.: *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. B, 48:10345–10356, Oct 1993. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.10345>.
- [123] White, Steven R.: *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett., 69:2863–2866, Nov 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.2863>.
- [124] White, Steven R. e Adrian E. Feiguin: *Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group*. Phys. Rev. Lett., 93:076401, Aug 2004. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.076401>.
- [125] Balents, L. e R. Egger: *Spin-dependent transport in a Luttinger liquid*. Phys. Rev. B, 64:035310, Jun 2001. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.64.035310>.
- [126] Pletyukhov, Mikhail, Dirk Schuricht e Herbert Schoeller: *Relaxation versus Decoherence: Spin and Current Dynamics in the Anisotropic Kondo Model at Finite Bias and Magnetic Field*. Phys. Rev. Lett., 104:106801, Mar 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.106801>.
- [127] Bruus, H., K. Flensberg e Ø.R.L.N.B.I.K. Flensberg: *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford Graduate Texts. OUP Oxford, 2004, ISBN 9780198566335. <https://books.google.fr/books?id=v5vhg1tYLC8C>.
- [128] Affleck, Ian e Andreas W. W. Ludwig: *Exact conformal-field-theory results on the multichannel Kondo effect: Single-fermion Green’s function, self-energy, and resistivity*. Phys. Rev. B, 48:7297–7321, Sep 1993. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.7297>.
- [129] Affleck, Ian: *Conformal Field Theory Approach to the Kondo Effect*, 1995.
- [130] Kitaev, A Yu: *Unpaired Majorana fermions in quantum wires*. Physics-Uspekhi, 44(10S):131–136, oct 2001. <https://doi.org/10.1070%2F1063-7869%2F44%2F10s%2Fs29>.
- [131] Read, N. e Dmitry Green: *Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum Hall effect*. Phys. Rev.

- B, 61:10267–10297, Apr 2000. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.10267>.
- [132] Alicea, Jason: *New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems*. Reports on Progress in Physics, 75(7):076501, jun 2012. <https://doi.org/10.1088%2F0034-4885%2F75%2F7%2F076501>.
- [133] Vasseur, R., J. P. Dahlhaus e J. E. Moore: *Universal Nonequilibrium Signatures of Majorana Zero Modes in Quench Dynamics*. Phys. Rev. X, 4:041007, Oct 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.4.041007>.
- [134] Bondyopadhyaya, Nilanjan e Dibyendu Roy: *Dynamics of hybrid junctions of Majorana wires*. Phys. Rev. B, 99:214514, Jun 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.214514>.
- [135] Dahan, D., E. Grosfeld e B. Seradjeh: *Dynamically induced topology and quantum monodromies in a proximity quenched gapless wire*. Phys. Rev. B, 102:125142, Sep 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.125142>.
- [136] śniewski, Kacper Wrze e Ireneusz Weymann: *Magnetization dynamics in a Majorana-wire-quantum-dot setup*. Phys. Rev. B, 103:125413, Mar 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.125413>.
- [137] Lee, Minchul, Jong Soo Lim e Rosa López: *Kondo effect in a quantum dot side-coupled to a topological superconductor*. Phys. Rev. B, 87:241402, Jun 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.241402>.
- [138] Pillet, J. D., P. Joyez, Rok Žitko e M. F. Goffman: *Tunneling spectroscopy of a single quantum dot coupled to a superconductor: From Kondo ridge to Andreev bound states*. Phys. Rev. B, 88:045101, Jul 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.045101>.
- [139] Chirla, Razvan, I. V. Dinu, V. Moldoveanu e C ă t ă lin Pa şcu Moca: *Transport in a hybrid normal metal/topological superconductor Kondo model*. Phys. Rev. B, 90:195108, Nov 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.195108>.
- [140] Vernek, E., P. H. Penteado, A. C. Seridonio e J. C. Egues: *Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot*. Phys. Rev. B, 89:165314, Apr 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.165314>.
- [141] Cheng, Meng, Michael Becker, Bela Bauer e Roman M. Lutchyn: *Interplay between Kondo and Majorana Interactions in Quantum Dots*. Phys. Rev. X, 4:031051, Sep 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.4.031051>.

- [142] Liu, Dong E., Meng Cheng e Roman M. Lutchyn: *Probing Majorana physics in quantum-dot shot-noise experiments*. Phys. Rev. B, 91:081405, Feb 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.081405>.
- [143] Ruiz-Tijerina, David A., E. Vernek, Luis G. G. V. Dias da Silva e J. C. Egues: *Interaction effects on a Majorana zero mode leaking into a quantum dot*. Phys. Rev. B, 91:115435, Mar 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.115435>.
- [144] Weymann, I. e K. P. Wójcik: *Transport properties of a hybrid Majorana wire-quantum dot system with ferromagnetic contacts*. Phys. Rev. B, 95:155427, Apr 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.155427>.
- [145] Cifuentes, Jesus D. e Luis G. G. V. Dias da Silva: *Manipulating Majorana zero modes in double quantum dots*. Phys. Rev. B, 100:085429, Aug 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.085429>.
- [146] Silva, Joelson F., Luis G. G. V. Dias da Silva e E. Vernek: *Robustness of the Kondo effect in a quantum dot coupled to Majorana zero modes*. Phys. Rev. B, 101:075428, Feb 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.075428>.
- [147] Weymann, I., K. P. Wójcik e P. Majek: *Majorana-Kondo interplay in T-shaped double quantum dots*. Phys. Rev. B, 101:235404, Jun 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.235404>.
- [148] Affleck, Ian e Domenico Giuliano: *Topological superconductor–Luttinger liquid junctions*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2013(06):P06011, jun 2013. <https://doi.org/10.1088%2F1742-5468%2F2013%2F06%2Fp06011>.
- [149] Stewart, G. R.: *Unconventional superconductivity*. Advances in Physics, 66(2):75–196, Apr 2017, ISSN 1460-6976. <http://dx.doi.org/10.1080/00018732.2017.1331615>.
- [150] 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*, páginas 261–263. Springer Netherlands, Dordrecht, 1991, ISBN 978-94-009-2079-8. https://doi.org/10.1007/978-94-009-2079-8_15.
- [151] Plakida, N.: *High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Berlin Heidelberg, 2010, ISBN 9783642126338. <https://books.google.com.br/books?id=6h253TfrKYUC>.
- [152] Verret, Simon: *Role des Ondes de densite dans les modeles theoriques pour cuprates supraconducteurs*. Tese de Doutorado, Universite de Sherbrooke, 2018.

- [153] Mott, N F: *The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals*. Proceedings of the Physical Society. Section A, 62(7):416, jul 1949. <https://dx.doi.org/10.1088/0370-1298/62/7/303>.
- [154] Sato, Y., S. Kasahara, H. Murayama, Y. Kasahara, E. G. Moon, T. Nishizaki, T. Loew, J. Porras, B. Keimer, T. Shibauchi e Y. Matsuda: *Thermodynamic evidence for a nematic phase transition at the onset of the pseudogap in YBa₂Cu₃O_y*. Nature Physics, 13(11):1074–1078, jul 2017. <https://doi.org/10.1038%2Fnphys4205>.
- [155] Chalker, John: *Quantum theory of condensed matter*. Lecture Notes, Physics Department, Oxford University, página 2, 2013.
- [156] 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>.
- [157] Warren, W. W., R. E. Walstedt, G. F. Brennert, R. J. Cava, R. Tycko, R. F. Bell e G. Dabbagh: *Cu spin dynamics and superconducting precursor effects in planes above T_c in YBa₂Cu₃O_{6.7}*. Phys. Rev. Lett., 62:1193–1196, Mar 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.1193>.
- [158] Alloul, H., T. Ohno e P. Mendels: ⁸⁹Y NMR evidence for a fermi-liquid behavior in YBa₂Cu₃O_{6+x}. Phys. Rev. Lett., 63:1700–1703, Oct 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.63.1700>.
- [159] Norman, M. R., D. Pines e C. Kallin: *The pseudogap: friend or foe of highT_isubc/sub/i?* Advances in Physics, 54(8):715–733, dec 2005. <https://doi.org/10.1080%2F00018730500459906>.
- [160] Damascelli, Andrea, Zahid Hussain e Zhi Xun Shen: *Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors*. Rev. Mod. Phys., 75:473–541, Apr 2003. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.473>.
- [161] Shen, Kyle M., F. Ronning, D. H. Lu, F. Baumberger, N. J. C. Ingle, W. S. Lee, W. Meevasana, Y. Kohsaka, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi e Z. X. Shen: *Nodal Quasiparticles and Antinodal Charge Ordering in Ca_{2-x}Na_xCuO₂Cl₂*. Science, 307(5711):901–904, 2005. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1103627>.
- [162] Fournier, D., G. Levy, Y. Pennec, J. L. McChesney, A. Bostwick, E. Rotenberg, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, I. S. Elfimov e A. Damascelli: *Loss of nodal quasiparticle integrity in underdoped YBa₂Cu₃O_{6x}*. Nature Physics, 6(11):905–911, oct 2010. <https://doi.org/10.1038%2Fnphys1763>.

- [163] Zhang, Ya Hui e Subir Sachdev: *From the pseudogap metal to the Fermi liquid using ancilla qubits*. Physical Review Research, 2(2), may 2020. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevresearch.2.023172>.
- [164] Zhang, Ya Hui e Subir Sachdev: *Deconfined criticality and ghost Fermi surfaces at the onset of antiferromagnetism in a metal*. Physical Review B, 102(15), oct 2020. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.102.155124>.
- [165] Nikolaenko, Alexander, Maria Tikhanovskaya, Subir Sachdev e Ya Hui Zhang: *Small to large Fermi surface transition in a single-band model using randomly coupled ancillas*. Physical Review B, 103(23), jun 2021. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.103.235138>.
- [166] Pépin, C. e H. Freire: *Charge order and emergent symmetries in cuprate superconductors*, 2022.
- [167] Christos, Maine, Zhu Xi Luo, Henry Shackleton, Ya Hui Zhang, Mathias S. Scheurer e Subir Sachdev: *A model of d -wave superconductivity, antiferromagnetism, and charge order on the square lattice*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 120(21), may 2023. <https://doi.org/10.1073%2Fpnas.2302701120>.
- [168] Fradkin, Eduardo, Steven A. Kivelson e John M. Tranquada: *iColloquium/i: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors*. Reviews of Modern Physics, 87(2):457–482, may 2015. <https://doi.org/10.1103%2Frevmodphys.87.457>.
- [169] Cheong, S W., G. Aeppli, T. E. Mason, H. Mook, S. M. Hayden, P. C. Canfield, Z. Fisk, K. N. Clausen e J. L. Martinez: *Incommensurate magnetic fluctuations in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$* . Phys. Rev. Lett., 67:1791–1794, Sep 1991. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.67.1791>.
- [170] Tranquada, J. M., D. J. Buttrey, V. Sachan e J. E. Lorenzo: *Simultaneous Ordering of Holes and Spins in $\text{La}_2\text{NiO}_{4.125}$* . Phys. Rev. Lett., 73:1003–1006, Aug 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.1003>.
- [171] Hoffman, J. E., E. W. Hudson, K. M. Lang, V. Madhavan, H. Eisaki, S. Uchida e J. C. Davis: *A Four Unit Cell Periodic Pattern of Quasi-Particle States Surrounding Vortex Cores in $\text{Bi}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CaCu}_2\text{O}_{8-x}$* . Science, 295(5554):466–469, jan 2002. <https://doi.org/10.1126%2Fscience.1066974>.
- [172] Hanaguri, T.: *A ‘checkerboard’ electronic crystal state in lightly hole-doped $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$* . Nature, 430(7003):1001–1005, Aug 2004, ISSN 1476-4687. <https://doi.org/10.1038/nature02861>.

- [173] Ghiringhelli, G., M. Le Tacon, M. Minola, S. Blanco-Canosa, C. Mazzoli, N. B. Brookes, G. M. De Luca, A. Frano, D. G. Hawthorn, F. He, T. Loew, M. Moretti Sala, D. C. Peets, M. Salluzzo, E. Schierle, R. Sutarto, G. A. Sawatzky, E. Weschke, B. Keimer e L. Braicovich: *Long-Range Incommensurate Charge Fluctuations in (Y,Nd)Ba₂/sub Cu₃/sub O₆/sub i_{subx}/sub /i*. Science, 337(6096):821–825, aug 2012. <https://doi.org/10.1126%2Fscience.1223532>.
- [174] Fujita, K., M. H. Hamidian, S. D. Edkins, C. K. Kim, Y. Kohsaka, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, H. Eisaki, S. i. Uchida e et al.: *Direct phase-sensitive identification of a d-form factor density wave in underdoped cuprates*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 111(30):E3026–E3032, Jul 2014, ISSN 1091-6490. <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1406297111>.
- [175] Greene, Richard L., Pampa R. Mandal, Nicholas R. Poniatowski e Tarapada Sarkar: *The Strange Metal State of the Electron-Doped Cuprates*, 2020. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050558>.
- [176] Gurvitch, M. e A. T. Fiory: *Resistivity of La_{1.825}Sr_{0.175}CuO₄ and YBa₂Cu₃O₇ to 1100 K: Absence of saturation and its implications*. Phys. Rev. Lett., 59:1337–1340, Sep 1987. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.1337>.
- [177] Martin, S., A. T. Fiory, R. M. Fleming, L. F. Schneemeyer e J. V. Waszczak: *Normal-state transport properties of Bi_{2+x}Sr_{2-y}CuO_{6+δ} crystals*. Phys. Rev. B, 41:846–849, Jan 1990. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.846>.
- [178] Emery, V. J. e S. A. Kivelson: *Superconductivity in Bad Metals*. Phys. Rev. Lett., 74:3253–3256, Apr 1995. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.74.3253>.
- [179] ||, N. E. Hussey, K. Takenaka e H. Takagi: *Universality of the Mott–Ioffe–Regel limit in metals*. Philosophical Magazine, 84(27):2847–2864, sep 2004. <https://doi.org/10.1080%2F14786430410001716944>.
- [180] Li, Chenyuan, Subir Sachdev e Darshan G. Joshi: *Superconductivity of non-Fermi liquids described by Sachdev-Ye-Kitaev models*. Physical Review Research, 5(1), jan 2023. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevresearch.5.013045>.
- [181] Chowdhury, Debanjan, Antoine Georges, Olivier Parcollet e Subir Sachdev: *Sachdev-Ye-Kitaev models and beyond: Window into non-Fermi liquids*. Reviews of Modern Physics, 94(3), sep 2022. <https://doi.org/10.1103%2Frevmodphys.94.035004>.
- [182] Sachdev, Subir: *Statistical mechanics of strange metals and black holes*, 2022.

- [183] Campuzano, J. C., G. Jennings, M. Faiz, L. Beaulaigue, B. W. Veal, J. Z. Liu, A. P. Paulikas, K. Vandervoort, H. Claus, R. S. List, A. J. Arko e R. J. Bartlett: *Fermi surfaces of YBa₂Cu₃O_{6.9} as seen by angle-resolved photoemission*. Phys. Rev. Lett., 64:2308–2311, May 1990. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.64.2308>.
- [184] Norman, M. R., H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Yokoya, T. Takeuchi, T. Takahashi, T. Mochiku, K. Kadowaki, P. Guptasarma e D. G. Hinks: *Destruction of the Fermi surface in underdoped high-T_c superconductors*. Nature, 392(6672):157–160, mar 1998. <https://doi.org/10.1038%2F32366>.
- [185] Platé, M., J. D. F. Mottershead, I. S. Elfimov, D. C. Peets, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, S. Chiuzbaian, M. Falub, M. Shi, L. Patthey e A. Damascelli: *Fermi Surface and Quasiparticle Excitations of Overdoped Tl₂Ba₂CuO_{6+δ}*. Phys. Rev. Lett., 95:077001, Aug 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.077001>.
- [186] Shi, M., A. Bendounan, E. Razzoli, S. Rosenkranz, M. R. Norman, J. C. Campuzano, J. Chang, M. Månsson, Y. Sassa, T. Claesson, O. Tjernberg, L. Patthey, N. Momono, M. Oda, M. Ido, S. Guerrero, C. Mudry e J. Mesot: *Spectroscopic evidence for preformed Cooper pairs in the pseudogap phase of cuprates*. EPL (Europhysics Letters), 88(2):27008, oct 2009. <https://doi.org/10.1209%2F0295-5075%2F88%2F27008>.
- [187] Comin, R., A. Frano, M. M. Yee, Y. Yoshida, H. Eisaki, E. Schierle, E. Weschke, R. Sutarto, F. He, A. Soumyanarayanan e et al.: *Charge Order Driven by Fermi-Arc Instability in Bi₂Sr_{2-x}La_xCuO₆₊*. Science, 343(6169):390–392, Dec 2013, ISSN 1095-9203. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1242996>.
- [188] Blanco-Canosa, S., A. Frano, E. Schierle, J. Porras, T. Loew, M. Minola, M. Bluschke, E. Weschke, B. Keimer e M. Le Tacon: *Resonant x-ray scattering study of charge-density wave correlations in YBa₂Cu₃O_{6+x}*. Phys. Rev. B, 90:054513, Aug 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.054513>.
- [189] Comin, R., R. Sutarto, F. He, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, A. Fraño, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, Y. Yoshida e et al.: *Symmetry of charge order in cuprates*. Nature Materials, 14(8):796–800, May 2015, ISSN 1476-4660. <http://dx.doi.org/10.1038/nmat4295>.
- [190] McMahon, Christopher, A. J. Achkar, E. H. da Silva Neto, I. Djianto, J. Menard, F. He, R. Sutarto, R. Comin, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, A. Damascelli e D. G. Hawthorn: *Orbital symmetries of charge density wave order in YBa₂Cu₃O_{6+x}*.

- Science Advances, 6(45), 2020. <https://advances.sciencemag.org/content/6/45/eaay0345>.
- [191] Tabis, W., B. Yu, I. Bialo, M. Bluschke, T. Kolodziej, A. Kozłowski, E. Blackburn, K. Sen, E. M. Forgan, M. v. Zimmermann, Y. Tang, E. Weschke, B. Vignolle, M. Hepting, H. Gretarsson, R. Sutarto, F. He, M. Le Tacon, N. Barišić, G. Yu e M. Greven: *Synchrotron x-ray scattering study of charge-density-wave order in $\text{mml:math xmlns:mml="http://www.w3.org/1998/Math/MathML" mml:mrow mml:msub mml:miHgBa/mml:m$* Physical Review B, 96(13), oct 2017. <https://doi.org/10.1103/2Fphysrevb.96.134510>.
- [192] Arpaia, R., S. Caprara, R. Fumagalli, G. De Vecchi, Y. Y. Peng, E. Andersson, D. Betto, G. M. De Luca, N. B. Brookes, F. Lombardi, M. Salluzzo, L. Braicovich, C. Di Castro, M. Grilli e G. Ghiringhelli: *Dynamical charge density fluctuations pervading the phase diagram of a Cu-based high- iT/i subc/sub superconductor*. Science, 365(6456):906–910, aug 2019. <https://doi.org/10.1126/2Fscience.aav1315>.
- [193] Vershinin, Michael, Shashank Misra, S. Ono, Y. Abe, Yoichi Ando e Ali Yazdani: *Local Ordering in the Pseudogap State of the High- iT/i subc/sub Superconductor $\text{Bi sub2/sub Sr sub2/sub CaCu sub2/sub O sub8/sub}$* . Science, 303(5666):1995–1998, mar 2004. <https://doi.org/10.1126/2Fscience.1093384>.
- [194] McElroy, K., D. H. Lee, J. E. Hoffman, K. M. Lang, J. Lee, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida e J. C. Davis: *Coincidence of Checkerboard Charge Order and Antinodal State Decoherence in Strongly Underdoped Superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* . Phys. Rev. Lett., 94:197005, May 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.197005>.
- [195] Kohsaka, Y., C. Taylor, K. Fujita, A. Schmidt, C. Lupien, T. Hanaguri, M. Azuma, M. Takano, H. Eisaki, H. Takagi, S. Uchida e J. C. Davis: *An Intrinsic Bond-Centered Electronic Glass with Unidirectional Domains in Underdoped Cuprates*. Science, 315(5817):1380–1385, 2007. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1138584>.
- [196] Fischer, Øystein, Martin Kugler, Ivan Maggio-Aprile, Christophe Berthod e Christoph Renner: *Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors*. Rev. Mod. Phys., 79:353–419, Mar 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.79.353>.
- [197] Fujita, Kazuhiro, Mohammad Hamidian, Inês Firmo, Sourin Mukhopadhyay, Chung Koo Kim, Hiroshi Eisaki, Shin ichi Uchida e J. C. Davis: *Spectroscopic Imaging STM: Atomic-Scale Visualization of Electronic Structure and Symmetry in Underdoped*

- Cuprates*, páginas 73–109. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2015, ISBN 978-3-662-44133-6. https://doi.org/10.1007/978-3-662-44133-6_3.
- [198] Yazdani, Ali, Eduardo H. da Silva Neto e Pegor Aynajian: *Spectroscopic Imaging of Strongly Correlated Electronic States*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 7(1):11–33, 2016. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031214-014529>.
- [199] Ralević, U., N. Lazarević, A. Baum, H. M. Eiter, R. Hackl, P. Giraldo-Gallo, I. R. Fisher, C. Petrovic, R. Gajić e Z. V. Popović: *Charge density wave modulation and gap measurements in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ Cuprate Superconductor*. Physical Review B, 94(16), oct 2016. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.165132>.
- [200] Devereaux, Thomas P. e Rudi Hackl: *Inelastic light scattering from correlated electrons*. Rev. Mod. Phys., 79:175–233, Jan 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.79.175>.
- [201] Tacon, M. Le, A. Sacuto, A. Georges, G. Kotliar, Y. Gallais, D. Colson e A. Forget: *Two energy scales and two distinct quasiparticle dynamics in the superconducting state of underdoped cuprates*. Nature Physics, 2(8):537–543, jul 2006. <https://doi.org/10.1038/nphys362>.
- [202] Sacuto, Alain, Yann Gallais, Maximilien Cazayous, Sébastien Blanc, Marie Aude Méasson, Jinsheng Wen, Zhijin Xu, Genda Gu e Dorothée Colson: *Electronic Raman scattering in copper oxide superconductors: Understanding the phase diagram*. Comptes Rendus Physique, 12(5):480–501, 2011, ISSN 1631-0705. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631070511000831>, Superconductivity of strongly correlated systems.
- [203] Sacuto, A, Y Gallais, M Cazayous, M A Méasson, G D Gu e D Colson: *New insights into the phase diagram of the copper oxide superconductors from electronic Raman scattering*. Reports on Progress in Physics, 76(2):022502, feb 2013. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/76/2/022502>.
- [204] Benhabib, S., A. Sacuto, M. Civelli, I. Paul, M. Cazayous, Y. Gallais, M. A. Méasson, R. D. Zhong, J. Schneeloch, G. D. Gu, D. Colson e A. Forget: *Collapse of the Normal-State Pseudogap at a Lifshitz Transition in the $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ Cuprate Superconductor*. Phys. Rev. Lett., 114:147001, Apr 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.147001>.
- [205] Loret, B., S. Sakai, Y. Gallais, M. Cazayous, M. A. Méasson, A. Forget, D. Colson, M. Civelli e A. Sacuto: *Unconventional High-Energy-State Contribution to the*

- Cooper Pairing in the Underdoped Copper-Oxide Superconductor* $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$. Phys. Rev. Lett., 116:197001, May 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.197001>.
- [206] Loret, B., S. Sakai, S. Benhabib, Y. Gallais, M. Cazayous, M. A. Méasson, R. D. Zhong, J. Schneeloch, G. D. Gu, A. Forget, D. Colson, I. Paul, M. Civelli e A. Sacuto: *Vertical temperature boundary of the pseudogap under the superconducting dome in the phase diagram of* $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. Phys. Rev. B, 96:094525, Sep 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.094525>.
- [207] Allais, Andrea, Debanjan Chowdhury e Subir Sachdev: *Connecting high-field quantum oscillations to zero-field electron spectral functions in the underdoped cuprates*. Nature Communications, 5(1), Dec 2014, ISSN 2041-1723. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms6771>.
- [208] Davis, J. C. Séamus e Dung Hai Lee: *Concepts relating magnetic interactions, intertwined electronic orders, and strongly correlated superconductivity*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 110(44):17623–17630, oct 2013. <https://doi.org/10.1073%2Fpnas.1316512110>.
- [209] Sachdev, Subir e Rolando La Placa: *Bond Order in Two-Dimensional Metals with Antiferromagnetic Exchange Interactions*. Physical Review Letters, 111(2), jul 2013. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.027202>.
- [210] Efetov, K. B., H. Meier e C. Pépin: *Pseudogap state near a quantum critical point*. Nature Physics, 9(7):442–446, jun 2013. <https://doi.org/10.1038%2Fnphys2641>.
- [211] Wang, Yuxuan, Daniel F. Agterberg e Andrey Chubukov: *Coexistence of Charge-Density-Wave and Pair-Density-Wave Orders in Underdoped Cuprates*. Physical Review Letters, 114(19), may 2015. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.114.197001>.
- [212] Wang, Xiaoyu, Yuxuan Wang, Yoni Schattner, Erez Berg e Rafael M. Fernandes: *Fragility of Charge Order Near an Antiferromagnetic Quantum Critical Point*. Phys. Rev. Lett., 120:247002, Jun 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.247002>.
- [213] Chakraborty, D., M. Grandadam, M. H. Hamidian, J. C. S. Davis, Y. Sidis e C. Pépin: *Fractionalized pair density wave in the pseudogap phase of cuprate superconductors*. Physical Review B, 100(22), dec 2019. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.100.224511>.

- [214] Zhang, F. C. e T. M. Rice: *Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides*. Phys. Rev. B, 37:3759–3761, Mar 1988. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.37.3759>.
- [215] Allais, Andrea, Johannes Bauer e Subir Sachdev: *Density wave instabilities in a correlated two-dimensional metal*. Phys. Rev. B, 90:155114, Oct 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.155114>.
- [216] Sau, Jay D. e Subir Sachdev: *Mean-field theory of competing orders in metals with antiferromagnetic exchange interactions*. Phys. Rev. B, 89:075129, Feb 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.075129>.
- [217] Verret, S., M. Charlebois, D. Sénéchal e A. M. S. Tremblay: *Subgap structures and pseudogap in cuprate superconductors: Role of density waves*. Phys. Rev. B, 95:054518, Feb 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.054518>.
- [218] Dash, S. S. e D. Sénéchal: *Charge- and pair-density-wave orders in the one-band Hubbard model from dynamical mean field theory*. Phys. Rev. B, 103:045142, Jan 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.045142>.
- [219] Sau, Jay D. e Subir Sachdev: *Mean-field theory of competing orders in metals with antiferromagnetic exchange interactions*. Physical Review B, 89(7), feb 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.075129>.
- [220] Yang, Kai Yu, T. M. Rice e Fu Chun Zhang: *Phenomenological theory of the pseudogap state*. Phys. Rev. B, 73:174501, May 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.174501>.
- [221] Pietig, R., R. Bulla e S. Blawid: *Reentrant Charge Order Transition in the Extended Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett., 82:4046–4049, May 1999. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.4046>.
- [222] Tong, Ning Hua, Shun Qing Shen e Ralf Bulla: *Charge ordering and phase separation in the infinite dimensional extended Hubbard model*. Phys. Rev. B, 70:085118, Aug 2004. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.085118>.
- [223] Amaricci, A., A. Camjayi, K. Haule, G. Kotliar, D. Tanasković e V. Dobrosavljević: *Extended Hubbard model: Charge ordering and Wigner-Mott transition*. Phys. Rev. B, 82:155102, Oct 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.155102>.
- [224] Takahashi, M: *Half-filled Hubbard model at low temperature*. Journal of Physics C: Solid State Physics, 10(8):1289, apr 1977. <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/10/8/031>.

- [225] MacDonald, A. H., S. M. Girvin e D. Yoshioka: $\frac{t}{U}$ expansion for the Hubbard model. Phys. Rev. B, 37:9753–9756, Jun 1988. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.37.9753>.
- [226] Agterberg, Daniel F., J.C. Séamus Davis, Stephen D. Edkins, Eduardo Fradkin, Dale J. Van Harlingen, Steven A. Kivelson, Patrick A. Lee, Leo Radzihovsky, John M. Tranquada e Yuxuan Wang: *The Physics of Pair-Density Waves: Cuprate Superconductors and Beyond*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 11(1):231–270, 2020. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050711>.
- [227] Hamidian, M. H., S. D. Edkins, Sang Hyun Joo, A. Kostin, H. Eisaki, S. Uchida, M. J. Lawler, E. A. Kim, A. P. Mackenzie, K. Fujita, Jinho Lee e J. C. Séamus Davis: *Detection of a Cooper-pair density wave in Bi2Sr2CaCu2O8x*. Nature, 532(7599):343–347, apr 2016. <https://doi.org/10.1038%2Fnature17411>.
- [228] Ruan, Wei, Xintong Li, Cheng Hu, Zhenqi Hao, Haiwei Li, Peng Cai, Xingjiang Zhou, Dung Hai Lee e Yayu Wang: *Visualization of the periodic modulation of Cooper pairing in a cuprate superconductor*. Nature Physics, 14(12):1178–1182, sep 2018. <https://doi.org/10.1038%2Fs41567-018-0276-8>.
- [229] Liechtenstein, A. I., O. Gunnarsson, O. K. Andersen e R. M. Martin: *Quasiparticle bands and superconductivity in bilayer cuprates*. Phys. Rev. B, 54:12505–12508, Nov 1996. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.12505>.
- [230] Mattheiss, L. F.: *Electronic properties of Ca₂CuO₂Cl₂ and Ca₂CuO₂Br₂*. Phys. Rev. B, 42:354–358, Jul 1990. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.42.354>.
- [231] Schabel, Matthias C., C. H. Park, A. Matsuura, Z. X. Shen, D. A. Bonn, Ruixing Liang e W. N. Hardy: *Angle-resolved photoemission on untwinned YBa₂Cu₃O_{6.95}. I. Electronic structure and dispersion relations of surface and bulk bands*. Phys. Rev. B, 57:6090–6106, Mar 1998. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.57.6090>.
- [232] Mahan, G.D.: *Many-Particle Physics*. Physics of Solids and Liquids. Springer US, 1990, ISBN 9780306434235. <https://books.google.fr/books?id=v8du6cp0vUAC>.
- [233] Reber, T. J., N. C. Plumb, Z. Sun, Y. Cao, Q. Wang, K. McElroy, H. Iwasawa, M. Arita, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, Y. Yoshida, H. Eisaki, Y. Aiura e D. S. Dessau: *The origin and non-quasiparticle nature of Fermi arcs in Bi2Sr2CaCu2O8*. Nature Physics, 8(8):606–610, jul 2012. <https://doi.org/10.1038%2Fnpphys2352>.
- [234] Fischer, Øystein, Martin Kugler, Ivan Maggio-Aprile, Christophe Berthod e Christoph Renner: *Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors*.

- Rev. Mod. Phys., 79:353–419, Mar 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.79.353>.
- [235] 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>.
- [236] Chang, J., E. Blackburn, A. T. Holmes, N. B. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, A. Watenphul, M. v. Zimmermann, E. M. Forgan e S. M. Hayden: *Direct observation of competition between superconductivity and charge density wave order in YBa₂Cu₃O_{6.67}*. Nature Physics, 8(12):871–876, oct 2012.
- [237] Hücker, M., N. B. Christensen, A. T. Holmes, E. Blackburn, E. M. Forgan, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, O. Gutowski, M. v. Zimmermann, S. M. Hayden e J. Chang: *Competing charge, spin, and superconducting orders in underdoped YBa₂Cu₃O_y*. Phys. Rev. B, 90:054514, Aug 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.054514>.
- [238] Blanco-Canosa, S., A. Frano, E. Schierle, J. Porras, T. Loew, M. Minola, M. Bluschke, E. Weschke, B. Keimer e M. Le Tacon: *Resonant x-ray scattering study of charge-density wave correlations in YBa₂Cu₃O_{6+x}*. Phys. Rev. B, 90:054513, Aug 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.054513>.
- [239] Ghiringhelli, G., M. Le Tacon, M. Minola, S. Blanco-Canosa, C. Mazzoli, N. B. Brookes, G. M. De Luca, A. Frano, D. G. Hawthorn, F. He, T. Loew, M. Moretti Sala, D. C. Peets, M. Salluzzo, E. Schierle, R. Sutarto, G. A. Sawatzky, E. Weschke, B. Keimer e L. Braicovich: *Long-Range Incommensurate Charge Fluctuations in (Y,Nd)Ba₂Cu₃O_{6+x}*. Science, 337(6096):821–825, 2012. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1223532>.
- [240] Harrison, N.: *Near Doping-Independent Pocket Area from an Antinodal Fermi Surface Instability in Underdoped High Temperature Superconductors*. Phys. Rev. Lett., 107:186408, Oct 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.186408>.
- [241] Kumar, C. M. N., A. Akrap, C. C. Homes, E. Martino, B. Klebel-Knobloch, W. Tabis, O. S. Barišić, D. K. Sunko e N. Barišić: *Characterization of two electronic subsystems in cuprates through optical conductivity*. Phys. Rev. B, 107:144515, Apr 2023. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.107.144515>.

- [242] Rice, T M, Kai Yu Yang e F C Zhang: *A phenomenological theory of the anomalous pseudogap phase in underdoped cuprates*. Reports on Progress in Physics, 75(1):016502, dec 2011. <https://doi.org/10.1088%2F0034-4885%2F75%2F1%2F016502>.
- [243] James, A. J. A., R. M. Konik e T. M. Rice: *Magnetic response in the underdoped cuprates*. Physical Review B, 86(10), sep 2012. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.86.100508>.
- [244] Brinckmann, Jan e Patrick A. Lee: *Renormalized mean-field theory of neutron scattering in cuprate superconductors*. Phys. Rev. B, 65:014502, Nov 2001. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.014502>.
- [245] LeBlanc, J P F: *Signatures of a momentum independent pseudogap in the electronic density of states and Raman spectroscopy of the underdoped cuprates*. New Journal of Physics, 16(11):113034, nov 2014. <https://doi.org/10.1088%2F1367-2630%2F16%2F11%2F113034>.
- [246] Badoux, S., W. Tabis, F. Laliberté, G. Grissonnanche, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Béard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, Louis Taillefer e Cyril Proust: *Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor*. Nature, 531(7593):210–214, feb 2016. <https://doi.org/10.1038%2Fnature16983>.
- [247] Verret, S., O. Simard, M. Charlebois, D. Sé néchal e A. M. S. Tremblay: *Phenomenological theories of the low-temperature pseudogap: Hall number, specific heat, and Seebeck coefficient*. Physical Review B, 96(12), sep 2017. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.96.125139>.
- [248] Kyung, B., S. S. Kancharla, D. Sénéchal, A. M. S. Tremblay, M. Civelli e G. Kotliar: *Pseudogap induced by short-range spin correlations in a doped Mott insulator*. Phys. Rev. B, 73:165114, Apr 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.165114>.
- [249] Stanescu, Tudor D. e Gabriel Kotliar: *Fermi arcs and hidden zeros of the Green function in the pseudogap state*. Phys. Rev. B, 74:125110, Sep 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.125110>.
- [250] Sakai, Shiro, Yukitoshi Motome e Masatoshi Imada: *Evolution of Electronic Structure of Doped Mott Insulators: Reconstruction of Poles and Zeros of Green's Function*. Phys. Rev. Lett., 102:056404, Feb 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.056404>.

- [251] Sakai, Shiro, Marcello Civelli e Masatoshi Imada: *Hidden-fermion representation of self-energy in pseudogap and superconducting states of the two-dimensional Hubbard model*. Phys. Rev. B, 94:115130, Sep 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.115130>.
- [252] Stefanucci, G. e R. van Leeuwen: *Nonequilibrium Many-Body Theory of Quantum Systems: A Modern Introduction*. Cambridge University Press, 2013, ISBN 9780521766173.
- [253] Tavora, Marco e Aditi Mitra: *Quench dynamics of one-dimensional bosons in a commensurate periodic potential: A quantum kinetic equation approach*. Phys. Rev. B, 88:115144, Sep 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.115144>.
- [254] Salinas, S.R.A.: *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, 1997, ISBN 9788531403866. <https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>.

APÊNDICE A – Correlator bosônico

Neste apêndice calcularemos explicitamente o correlator bosônico mais simples que surge da bosonização dos operadores fermiônicos.

Dado que agora o operador fermiônico é escrito como a exponencial de um campo bosônico, ver a Eq. (3.17), surge a necessidade de avaliar o seguinte operador

$$O_{mn\lambda} \equiv e^{i\beta(m\phi_\lambda + n\theta_\lambda)}, \quad (\text{A.1})$$

sendo m, n inteiros, β um número real e $\lambda = c/s$. Nosso objetivo nesta sub-seção é calcular o correlator de dois pontos do operador acima, isto é, $\langle TO_{mn\lambda}(0, \tau) O_{m'n'\lambda}^\dagger(0, \tau') \rangle$, onde $|\rangle$ é o vácuo bosônico do hamiltoniano (3.30): $|\rangle = |\text{vácuo de carga}\rangle \otimes |\text{vácuo de spin}\rangle$. A razão por optarmos a fazer o cálculo no mesmo ponto espacial $x = 0$ é que, como ficará mais claro na próxima seção, nós estamos interessados em problemas de borda.

Os campos bosônicos em (A.1) podem ser decompostos na forma $\phi_\lambda = \varphi_\lambda^\dagger + \varphi_\lambda$ e $\theta_\lambda = o_\lambda^\dagger + o_\lambda$, onde

$$\varphi_\lambda(\tau) = -i\sqrt{\frac{K_\lambda}{2L}} \sum_{q>0} \frac{e^{-\alpha q/2}}{\sqrt{q}} \left[e^{-iu_\lambda q\tau} b_{q\lambda}^1 - e^{-iu_\lambda q\tau} b_{q\lambda}^2 \right], \quad (\text{A.2})$$

$$o_\lambda(\tau) = i\sqrt{\frac{1}{2K_\lambda L}} \sum_{q>0} \frac{e^{-\alpha q/2}}{\sqrt{q}} \left[e^{-iu_\lambda q\tau} b_{q\lambda}^1 + e^{-iu_\lambda q\tau} b_{q\lambda}^2 \right]. \quad (\text{A.3})$$

Usando as relações canônicas de comutação dos bósons $b_{q\lambda}^m$, temos que no limite termodinâmico

$$[\varphi_\lambda(\tau), \varphi_\lambda^\dagger(\tau')] = -\frac{K_\lambda}{2\pi} \ln \frac{2\pi}{L} [\alpha + iu_\lambda(\tau - \tau')], \quad (\text{A.4})$$

$$[o_\lambda(\tau), o_\lambda^\dagger(\tau')] = -\frac{1}{2\pi K_\lambda} \ln \frac{2\pi}{L} [\alpha + iu_\lambda(\tau - \tau')], \quad (\text{A.5})$$

e $[\varphi_\lambda(\tau), o_\lambda^\dagger(\tau')] = [o_\lambda(\tau), \varphi_\lambda^\dagger(\tau')] = 0$.

Com auxílio das relações de Baker-Hausdorff⁶ podemos escrever

$$\begin{aligned}
O_{mn\lambda}(\tau)O_{m'n'\lambda}^\dagger(\tau') &= e^{i\beta[m\varphi_\lambda^\dagger(\tau)+m\varphi_\lambda(\tau)+no_\lambda^\dagger(\tau)+no_\lambda(\tau)]}e^{-i\beta[m'\varphi_\lambda^\dagger(\tau')+m'\varphi_\lambda(\tau')+n'o_\lambda^\dagger(\tau')+n'o_\lambda(\tau)]}, \\
&= \frac{1}{\sqrt{C_{mn}^{mn}(0)C_{m'n'}^{m'n'}(0)}}e^{i\beta[m\varphi_\lambda^\dagger(\tau)+no_\lambda^\dagger(\tau)]}e^{i\beta[m\varphi_\lambda(\tau)+no_\lambda(\tau)]}e^{-i\beta[m'\varphi_\lambda^\dagger(\tau')+n'o_\lambda^\dagger(\tau')]} \\
&\quad \times e^{-i\beta[m'\varphi_\lambda(\tau')+n'o_\lambda(\tau')]}, \\
&= \frac{C_{m'n'}^{mn}(\tau-\tau')}{\sqrt{C_{mn}^{mn}(0)C_{m'n'}^{m'n'}(0)}}e^{i\beta[m\varphi_\lambda^\dagger(\tau)+no_\lambda^\dagger(\tau)]}e^{-i\beta[m'\varphi_\lambda^\dagger(\tau')+n'o_\lambda^\dagger(\tau')]}e^{i\beta[m\varphi_\lambda(\tau)+no_\lambda(\tau)]} \\
&\quad \times e^{-i\beta[m'\varphi_\lambda(\tau')+n'o_\lambda(\tau')]}, \\
&= \frac{C_{m'n'}^{mn}(\tau-\tau')}{\sqrt{C_{mn}^{mn}(0)C_{m'n'}^{m'n'}(0)}} : O_{mn\lambda}(\tau)O_{mn\lambda}^\dagger(\tau') :, \tag{A.6}
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
C_{m'n'}^{mn}(\tau-\tau') &\equiv \exp\left(\beta^2[m\varphi_\lambda(\tau)+no_\lambda(\tau), m'\varphi_\lambda^\dagger(\tau')+n'o_\lambda^\dagger(\tau')]\right), \\
&= \left[\frac{1}{\frac{2\pi}{L}[\alpha+iu_\lambda(\tau-\tau')]} \right]^{\frac{\beta^2}{2\pi}(mm'K_\lambda+nn'K_\lambda^{-1})}. \tag{A.7}
\end{aligned}$$

Para obter a função de correlação de dois pontos desejada precisamos por fim calcular $\langle : O_{mn\lambda}(\tau)O_{m'n'\lambda}^\dagger(\tau') : \rangle$. Dado que o produto de operadores está ordenado normalmente, teremos algo da forma

$$\begin{aligned}
\langle : O_{mn\lambda}(\tau)O_{m'n'\lambda}^\dagger(\tau') : \rangle &\sim \langle \dots e^b \rangle, \\
&= \sum_{n=0} \langle \dots b^n \rangle, \\
&= \begin{cases} 0, & n > 0 \\ \langle \dots \rangle, & n = 0. \end{cases} \tag{A.8}
\end{aligned}$$

Portanto, repetindo o processo para todas as exponencias obteremos diretamente que $\langle : O_{mn\lambda}(\tau)O_{m'n'\lambda}^\dagger(\tau') : \rangle = 1$. Com este resultado concluímos que

$$\begin{aligned}
\langle O_{mn\lambda}(\tau)O_{m'n'\lambda}^\dagger(\tau') \rangle &= \frac{C_{m'n'}^{mn}(\tau-\tau')}{\sqrt{C_{mn}^{mn}(0)C_{m'n'}^{m'n'}(0)}}, \\
&= \delta_{mm'}\delta_{nn'}z^\nu \left[\frac{1}{1+i\Lambda_0(\tau-\tau')} \right]^{\frac{\beta^2}{2\pi}(mm'K_\lambda+nn'K_\lambda^{-1})}, \tag{A.9}
\end{aligned}$$

onde $\Lambda_0 \equiv u_\lambda/\alpha$ fazendo o papel de um *cutoff* de altas energias, $z \equiv \frac{L}{2\pi\alpha}$ e $\nu \equiv \frac{-\beta^2}{4\pi}[(m-m')^2K_\lambda+(n-n')^2K_\lambda^{-1}]$. As deltas $\delta_{mm'}\delta_{nn'}$ surgem após tomarmos o limite termodinâmico $L/\alpha \rightarrow \infty$. O procedimento feito acima, de primeiro ordenar normalmente o produto de operadores e só então calcular o valor esperado, é geral e pode ser aplicado ao cálculo de uma função de correlação arbitrária (ver o apêndice D).

⁶ Segundo essas relações, $e^A e^B = e^{A+B} e^{C/2}$ e $e^A e^B = e^B e^A e^C$, se $C = [A, B] \in \mathbb{C}$.

APÊNDICE B – Equação de escala do hamiltoniano Kondo e mapa em 1D.

Neste apêndice apresentamos alguns detalhes do efeito Kondo discutidos ao longo desta tese.

B.1 Mapeamento em 1D

Mostraremos a seguir a natureza unidimensional do efeito Kondo. Para tal seguiremos o apêndice A da referência [63].

Suponhamos a existência de uma impureza que está embebida em um metal 3D e localizada em $\mathbf{r} = 0$. Temos que

$$H = \int d^3\mathbf{r} \left[\psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} - \epsilon_F \right) \psi(\mathbf{r}) + J_K \delta^3(\mathbf{r}) \mathbf{S} \cdot \psi^\dagger(\mathbf{r}) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi(\mathbf{r}) \right], \quad (\text{B.1})$$

onde $\psi(\mathbf{r})$ é o operador de campo fermiônico que destrói um elétron na posição $\mathbf{r}$ e $\mathbf{S}$ é o operador de spin da impureza. No espaço $\mathbf{k}$ podemos reescrever $\psi(\mathbf{r})$ usando a expansão de ondas planas¹, de modo que

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{k}), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}r} \int_0^\infty dk \sin(kr) \psi_0(k) + (\text{altos harmônicos}), \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

por + (altos harmônicos) designamos os termos com $l \neq 0$. Visto que $J_K \ll \epsilon_F$, podemos tomar uma aproximação de baixas energias e efetuar a integração acima no intervalo $[k_F - \Lambda_0, k_F + \Lambda_0]$, o que nos leva a concluir que

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2^{3/2}\pi r} \left[e^{ik_F r} \psi_R(r) - e^{-ik_F r} \psi_L(r) \right] + (\text{altos harmônicos}), \quad (\text{B.3})$$

onde

$$\psi_{R/L}(r) \equiv \int_{-\Lambda_0}^{\Lambda_0} dk e^{\pm ikr} \psi_0(k + k_F), \quad (\text{B.4})$$

descrevem os movimentos para a direita (R) e esquerda (L). Notemos também que esses campos obedecem a condição de contorno $\psi_R(0) = \psi_L(0)$. O termo de interação Kondo envolve avaliar o campo $\psi(\mathbf{r})$ com $\mathbf{r} \rightarrow 0$. Efetuando este limite com atenção (notar o fator $1/r$ em (B.3)) e usando que $k_F \gg \Lambda_0$ concluimos que

$$\psi(\mathbf{r} \rightarrow 0) \approx k_F (\psi_R(0) + \psi_L(0)), \quad (\text{B.5})$$

¹ A saber: $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} i^l J_l(kr) Y_l^m(\hat{k}) Y_l^{m*}(\hat{r})$, onde J_l são as funções de Bessel esféricas, e Y_l^m os harmônicos esféricos.

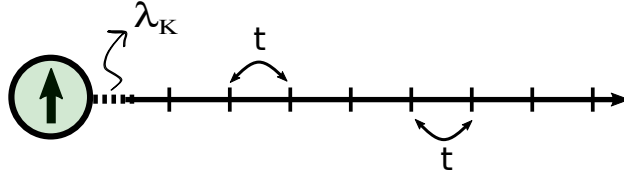


Figura 42 – Impureza magnética acoplada antiferromagneticamente à extremidade de um fio metálico.

uma vez que todos os harmônicos com $l \neq 0$ desaparecem, pois $J_l(0) = 0$. Assim, o termo Kondo torna-se simplesmente

$$H_K = v_F \lambda_K \mathbf{S} \cdot \psi_R^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_R(0), \quad (\text{B.6})$$

onde $\lambda_K = k_F^2 J_K / (2\pi^2 v_F)$, sendo $k_F^2 / (2\pi^2 v_F)$ a densidade de estados no nível de Fermi (por spin), e usamos também a condição de contorno $\psi_R(0) = \psi_L(0)$. Por fim, reescrevendo o hamiltoniano (B.1) com o auxílio de (B.4) chegamos em

$$H = -\frac{iv_F}{2\pi} \int dr \left[: \psi_R^\dagger(r) \frac{d}{dr} \psi_R(r) : - : \psi_L^\dagger(r) \frac{d}{dr} \psi_L(r) : \right] + (\text{altos harmônicos}) + v_F \lambda_K \mathbf{S} \cdot \psi_R^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi_R(0), \quad (\text{B.7})$$

onde o fator $1/L$, vindo da integração em r , pode ser colocado na definição de $\psi_{R/L}(r)$ e usamos que dentro da nossa aproximação de baixas energias $\epsilon(k) \approx v_F(k - k_F)$. Vemos que o efeito Kondo acontece apenas no canal s ($l = 0$), o que torna o problema essencialmente unidimensional.

B.2 Equação de escala de λ_K

Nesta seção será deduzida a equação de fluxo do hamiltoniano Kondo usando o método de Expansão de produto de operadores [100, 109]. A abordagem seguida aqui é idêntica a que foi feita no apêndice B da referência [63].

Dada a conclusão da seção anterior, consideraremos que a impureza magnética está acoplada à extremidade de um único fio, ver Fig. 42. Para um acoplamento anisotrópico o hamiltoniano Kondo fica

$$H_K = 2\pi v_F \lambda_{xy} (S_x J_x + S_y J_y) + 2\pi v_F \lambda_z S_z J_z, \quad (\text{B.8})$$

onde $\mathbf{S}$ é o operador de spin da impureza, $\mathbf{J} = : \psi^\dagger(0) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \psi(0) :$ a densidade de spin na origem e λ_i o acoplamento Kondo sem dimensão. Bosonizando o hamiltoniano acima ficamos com

$$H_K = \frac{v_F \lambda_{xy}}{\alpha} (S_x \cos \beta \phi + S_y \sin \beta \phi) - \sqrt{\frac{\pi}{2}} v_F \lambda_z S_z \partial_x \phi, \quad (\text{B.9})$$

onde $\phi \equiv \phi_s$ é o campo bosônico no setor de spin e $\beta \equiv \sqrt{2\pi}$. O operador $\mathbf{J}$ satisfaz a seguinte propriedade (uma espécie de série de Laurent) [63, 109]:

$$J_\alpha(\tau)J_\beta(\tau') = -\frac{\delta_{\alpha\beta}}{8\pi^2v_F^2(\tau-\tau')^2} + \frac{\epsilon_{\alpha\beta\gamma}}{2\pi v_F(\tau-\tau')}J_\gamma(\tau) + \tilde{\text{n-div.}}, \quad (\text{B.10})$$

onde a contribuição $\tilde{\text{n-div.}}$ significa que os próximos termos não divergente quando $\tau \rightarrow \tau'$ e estão ordenados normalmente. A Eq. (B.10) é um exemplo da chamada Expansão de Produto de Operadores (OPE), muito comum em teoria quântica de campos e que serve para extrair a divergência de um produto de operadores que não está ordenado normalmente. A grande vantagem em trabalhar com OPE's como (B.10) é que se a diferença de tempos que estamos tratando é muito menor que a escala de tempo característica do sistema em questão, L/v_F para um sistema de tamanho L , podemos desprezar os termos não-divergentes. Por (B.10) também fica claro que o acoplamento Kondo é uma perturbação marginal (para esta geometria), pois $\Delta = 1$. A seguir darei uma dedução parcial desta OPE.

Iniciando com o produto $J_z(\tau)J_z(\tau')$ na forma bosonizada, temos

$$\begin{aligned} J_z(\tau)J_z(\tau') &= \frac{1}{8\pi}\partial_x\phi(\tau)\partial_x\phi(\tau') = \frac{1}{8\pi}\partial_x[\varphi^\dagger(\tau) + \varphi(\tau)]\partial_x[\varphi^\dagger(\tau') + \varphi(\tau')], \\ &= \frac{1}{8\pi}\partial_x\varphi(\tau)\partial_x\varphi^\dagger(\tau') + \tilde{\text{n-div.}}, \\ &= \frac{1}{8L\pi} \sum_{q,q'>0} \sqrt{qq'}e^{-\alpha(q+q')/2}e^{-iv_F(q\tau-q'\tau')}\eta_q\eta_{q'}^\dagger + \tilde{\text{n-div.}}, \\ &= \frac{1}{8\pi}\partial_x\varphi^\dagger(\tau')\partial_x\varphi(\tau) + \frac{1}{8\pi} \underbrace{\frac{1}{L} \sum_{q>0} qe^{-\alpha q}e^{-iqv_F(\tau-\tau')}}_{\xrightarrow{T.L., \alpha \rightarrow 0} -\frac{1}{\pi v_F^2(\tau-\tau')^2}} + \tilde{\text{n-div.}}, \\ &= -\frac{1}{8\pi^2v_F^2(\tau-\tau')^2} + \tilde{\text{n-div.}}, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

onde a abreviação T.L na penúltima linha acima significa tomar o limite termodinâmico. Considerando agora o produto $J_x(\tau)J_x(\tau')$:

$$\begin{aligned} (2\pi\alpha)^2 J_x(\tau)J_x(\tau') &= \frac{1}{4} \sum_{n,n'=\pm} e^{i\beta n\phi(\tau)}e^{i\beta n'\phi(\tau')} = \frac{1}{4} \sum_{n,n'} e^{i\beta n\varphi^\dagger(\tau)}e^{i\beta n\varphi(\tau)}e^{i\beta n'\varphi^\dagger(\tau')}e^{i\beta n'\varphi(\tau')} \\ &\quad \times e^{\beta^2[\varphi^\dagger(\tau),\varphi(\tau)]/2}e^{\beta^2[\varphi^\dagger(\tau'),\varphi(\tau')]/2}, \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\pi\alpha}{L}\right)^{\beta^2/\pi} \sum_{n,n'} e^{i\beta n\varphi^\dagger(\tau)}e^{i\beta n'\varphi^\dagger(\tau')}e^{i\beta n\varphi(\tau)}e^{i\beta n'\varphi(\tau')}e^{\beta^2 nn'[\varphi^\dagger(\tau'),\varphi(\tau)]}, \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\pi\alpha}{L}\right)^{\beta^2/\pi} \sum_{n,n'} \left(\frac{i\pi v_F}{L}[\tau-\tau']\right)^{\beta^2 nn'/\pi} e^{i\beta n\varphi^\dagger(\tau)}e^{i\beta n'\varphi^\dagger(\tau')}e^{i\beta n\varphi(\tau)}e^{i\beta n'\varphi(\tau')}, \\ &= -\frac{1}{4} \left(\frac{\pi\alpha}{L}\right)^{\beta^2/\pi} \left(\frac{L}{\pi v_F[\tau-\tau']}\right)^{\beta^2/\pi} \sum_n : e^{i\beta n[\varphi^\dagger(\tau)-\varphi^\dagger(\tau')]}e^{i\beta n[\varphi(\tau)-\varphi(\tau')]} : \\ &\quad + \tilde{\text{n-div.}}, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

onde foram usadas as relações de Baker-Hausdorff $e^{A+B} = e^A e^B e^{-C/2}$, $e^A e^B = e^B e^A e^C$, se $C = [A, B] \in \mathbb{C}$, e o comutador bosônico

$$[\varphi^\dagger(\tau), \varphi(\tau')] = \frac{1}{\pi} \ln \frac{\pi\alpha}{L} [1 + \Lambda_0(\tau' - \tau)], \quad (\text{B.13})$$

sendo $\Lambda_0 \equiv \alpha/v_F$. Considerando que a diferença de tempos $\tau - \tau'$ é próxima (comparada com a escala de tempo característica L/v_F) temos

$$\begin{aligned} : e^{i\beta n[\varphi^\dagger(\tau) - \varphi^\dagger(\tau')]} e^{i\beta n[\varphi(\tau) - \varphi(\tau')]} : &= : e^{i\beta n[\varphi^\dagger(\tau) - \varphi^\dagger(\tau') - \partial_\tau \varphi^\dagger(\tau)(\tau' - \tau) + \dots]} e^{i\beta n[\varphi(\tau) - \varphi(\tau) - \partial_\tau \varphi(\tau)(\tau' - \tau) + \dots]} : , \\ &= : \left(1 + i\beta n \partial_\tau \varphi_s^\dagger(\tau)(\tau - \tau') + \dots\right) \left(1 + i\beta n \partial_\tau \varphi(\tau)(\tau - \tau') + \dots\right) : , \\ &= 1 + i\beta n \partial_\tau \phi(\tau)(\tau - \tau') + \mathcal{O}[(\tau - \tau')^2]. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Assim, temos

$$\begin{aligned} J_x(\tau) J_x(\tau') &\stackrel{\beta=\sqrt{2}\pi}{=} -\frac{1}{(4\pi v_F)^2} \frac{1}{(\tau - \tau')^2} \sum_{n=\pm} \left(1 + i\sqrt{2}\pi n \partial_\tau \phi(\tau)(\tau - \tau') + \mathcal{O}[(\tau - \tau')^2]\right) + \tilde{n}\text{-div.}, \\ &= -\frac{1}{8\pi^2 v_F^2 (\tau - \tau')^2} + \tilde{n}\text{-div.} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Por último vamos calcular $J_y(\tau) J_z(\tau')$. Para efetuar este cálculo precisaremos do seguinte resultado:

$$\begin{aligned} e^{i\beta n \varphi(\tau)} \partial_x \varphi^\dagger(\tau') &= \partial_x \varphi^\dagger(\tau') e^{i\beta n \varphi(\tau)} - i\beta n [\partial_x \varphi^\dagger(\tau'), \varphi(\tau)] e^{i\beta n \varphi(\tau)}, \\ &= \partial_x \varphi^\dagger(\tau') e^{i\beta n \varphi(\tau)} - \frac{i\beta n}{\pi v_F (\tau - \tau')} e^{i\beta n \varphi(\tau)}, \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

onde foi usada outra relação de Baker-Hausdorff, $e^{-B} A = (A + C) e^{-B}$, e o comutador bosônico

$$[\partial_x \varphi^\dagger(\tau'), \varphi(\tau)] = -\frac{1}{\pi v_F (\tau' - \tau)}. \quad (\text{B.17})$$

Portanto

$$\begin{aligned} J_y(\tau) J_z(\tau') &= \frac{-1}{8i\pi\alpha\sqrt{2\pi}} \sum_{n=\pm} n e^{i\beta n \phi(\tau)} \partial_x \phi(\tau'), \\ &= \frac{-1}{8i\pi\alpha\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\pi\alpha}{L}\right)^{\beta^2/2\pi} \sum_n n e^{i\beta n \varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta n \varphi(\tau)} \partial_x \phi(\tau') \\ &= \frac{-1}{8i\pi\alpha\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\pi\alpha}{L}\right)^{\beta^2/2\pi} \sum_n n e^{i\beta n \varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta n \varphi(\tau)} \partial_x \varphi^\dagger(\tau') + \tilde{n}\text{-div.}, \\ &\stackrel{\text{Eq. (B.16)}}{=} \frac{1}{8L\pi v_F (\tau - \tau')} \sum_n e^{i\beta n \varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta n \varphi(\tau)} + \tilde{n}\text{-div.}, \\ &= \frac{1}{8\pi^2 v_F \alpha (\tau - \tau')} \sum_n e^{i\beta n \phi(\tau)} + \tilde{n}\text{-div.}, \\ &= \frac{1}{2\pi v_F (\tau - \tau')} J_x(\tau) + \tilde{n}\text{-div.} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

De forma similar os outros produtos podem ser calculados sem grandes problemas.

Agora retornemos ao efeito Kondo. Seguindo uma abordagem perturbativa, o operador de evolução temporal na representação de interação fica

$$\begin{aligned} \mathcal{U} &= T \exp \left[-i \int d\tau H_K(\tau) \right], \\ &= 1 - i \int d\tau H_K(\tau) - \frac{1}{2!} \int dt dt' T H_K(\tau) H_K(\tau') + \dots, \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

onde T é o operador de ordenamento temporal. Se definirmos $\tilde{J}_i \equiv 2\pi v_F \lambda_i J_i$, onde $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_{xy}$, o termo de ordem quadrada fica

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\lambda^2) &= \int d\tau d\tau' T \tilde{J}_i(\tau) S_i(\tau) \tilde{J}_j(\tau') S_j(\tau'), \\ &= \int d\tau d\tau' \left[\theta(\tau - \tau') \tilde{J}_i(\tau) \tilde{J}_j(\tau') S_i S_j + \theta(\tau' - \tau) \tilde{J}_j(\tau') \tilde{J}_i(\tau) S_j S_i \right], \\ &= (2\pi v_F)^2 \int d\tau d\tau' \lambda_i \lambda_j \left\{ \theta(\tau - \tau') \left[\frac{\epsilon_{ijk}}{2\pi v_F(\tau - \tau')} J_k(\tau) - \frac{\delta_{ij}}{8\pi^2 v_F^2 (\tau - \tau')^2} \right] S_i S_j \right. \\ &\quad \left. + \theta(\tau' - \tau) \left[\frac{\epsilon_{ijk}}{2\pi v_F(\tau' - \tau)} J_k(\tau') - \frac{\delta_{ij}}{8\pi^2 v_F^2 (\tau' - \tau)^2} \right] S_j S_i \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

onde estamos assumindo que índices repetidos estão sendo somados. Efetuando uma permutação $\tau \leftrightarrow \tau'$ na segunda linha da equação acima ficamos com

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\lambda^2) &= (2\pi v_F)^2 \int d\tau d\tau' \lambda_i \lambda_j \theta(\tau - \tau') \left[\frac{\epsilon_{ijk}}{2\pi v_F(\tau - \tau')} J_k(\tau) - \frac{\delta_{ij}}{8\pi^2 v_F^2 (\tau - \tau')^2} \right] \underbrace{(S_i S_j - S_j S_i)}_{= i\epsilon_{ijl} S_l}, \\ &= i(2\pi v_F)^2 \int d\tau d\tau' \lambda_i \lambda_j \theta(\tau - \tau') \left[\frac{\epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl}}{2\pi v_F(\tau - \tau')} J_k(\tau) - \underbrace{\frac{\delta_{ij} \epsilon_{ijl}}{8\pi^2 v_F^2 (\tau - \tau')^2}}_{=0} \right] S_l, \\ &= i(2\pi v_F)^2 \int d\tau d\tau' \lambda_i \lambda_j \theta(\tau - \tau') \left[\frac{\epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl}}{2\pi v_F(\tau - \tau')} J_k(\tau) \right] S_l. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Usando que $\lambda_i \lambda_j \epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl} (\lambda_{xy}^2 \delta_{k3} + \lambda_{xy} \lambda_z \delta_{k1} + \lambda_{xy} \lambda_z \delta_{k2})$, obtemos

$$\mathcal{O}(\lambda^2) = i(2\pi v_F)^2 \int d\tau d\tau' \frac{\theta(\tau - \tau')}{\pi v_F(\tau - \tau')} \left[\lambda_{xy} \lambda_z J_x(\tau) S_x(\tau) + \lambda_{xy} \lambda_z J_y(\tau) S_y(\tau) + \lambda_{xy}^2 J_z(\tau) S_z(\tau) \right]. \quad (\text{B.22})$$

Assim, o operador de evolução temporal fica

$$\mathcal{U} = \mathbb{1} - i2\pi v_F \int d\tau \left[\lambda_{xy}^{\text{eff}} J_x(\tau) S_x(\tau) + \lambda_{xy}^{\text{eff}} J_y(\tau) S_y(\tau) + \lambda_z^{\text{eff}} J_z(\tau) S_z(\tau) \right] + \dots, \quad (\text{B.23})$$

onde os acoplamentos efetivos satisfazem

$$\lambda_{xy}^{\text{eff}} = \lambda_{xy} + \lambda_{xy} \lambda_z \int_{\tau > \tau'} d\tau' \frac{1}{\tau - \tau'}, \quad (\text{B.24})$$

$$\lambda_z^{\text{eff}} = \lambda_z + \lambda_{xy}^2 \int_{\tau > \tau'} d\tau' \frac{1}{\tau - \tau'}. \quad (\text{B.25})$$

As integrações nas Eq's. acima divergem se efetuarmos a operação considerando $\tau' \in (-\infty, \tau)$. Porém, a divergência em t é fictícia, surgiu como consequência do tratamento no contínuo, portanto deve ser substituída por uma escala arbitrária de tempo curto Λ_0^{-1} . Por outro lado, a divergência no limite $\tau' \rightarrow -\infty$ reflete que o acoplamento Kondo se torna não-perturbativo na região de baixas energias, assim, devemos limitar a integral por um *cutoff* $\Lambda^{-1} > \Lambda_0^{-1}$. Desta forma

$$\int_{\tau > \tau'} d\tau' \frac{1}{\tau - \tau'} \sim \int_{1/\Lambda_0}^{1/\Lambda} du \frac{1}{u} = \ln \frac{\Lambda_0}{\Lambda}. \quad (\text{B.26})$$

Notemos que no limite de baixas energias, $\Lambda/\Lambda_0 \rightarrow 0$, a integral acima diverge, como esperado. Com o resultado (B.26) obtemos seguintes Eq's de escala para os acoplamentos Kondo

$$\frac{d\lambda_{xy}(\Lambda)}{d \ln \Lambda} = -\lambda_{xy}\lambda_z, \quad (\text{B.27})$$

$$\frac{d\lambda_z(\Lambda)}{d \ln \Lambda} = -\lambda_{xy}^2, \quad (\text{B.28})$$

onde $\lambda_i^{\text{eff}} \equiv \lambda_i(\Lambda)$. As Eq's. (B.27) e (B.28) nos mostram como o acoplamento Kondo comporta-se à medida que reduzimos a janela de energia considerada. No ponto isotrópico $\lambda_{xy} = \lambda_z = \lambda_K$, ficamos com apenas uma equação, cuja solução é

$$\lambda_K(\Lambda) = \frac{\lambda_K}{1 - \lambda_K \ln \frac{\Lambda_0}{\Lambda}}, \quad (\text{B.29})$$

mostrando que $\lambda_K(\Lambda \rightarrow 0) \rightarrow \infty$ para $\lambda_K > 0$ e $\lambda_K(\Lambda \rightarrow 0) \rightarrow 0$ para $\lambda_K < 0$. Isto mostra que o ponto fixo de acoplamento fraco é instável (estável) para um acoplamento antiferromagnético (ferromagnético).

APÊNDICE C – Detalhes do cálculo da magnetização da impureza

Neste apêndice derivamos os resultados nas Eq.'s. (4.42), (4.44) e Eq. (4.51).

C.1 *Embedding*

Mesmo os operadores de spin da impureza não evoluindo temporalmente, pois a evolução é guiada apenas por H_0 e $[H_0, S_0^j] = 0$, o ordenamento temporal desses operadores é importante visto que:

$$\begin{aligned}\langle TS_0^+(\tau')S_0^-(\tau'')\rangle_0 &= \theta(\tau' - \tau''), \\ \langle TS_0^-(\tau')S_0^+(\tau'')\rangle_0 &= \theta(\tau'' - \tau').\end{aligned}\quad (\text{C.1})$$

Nos dois casos em que estamos interessados $H_K(\tau)$ possui a forma genérica da Eq. (4.23). Os correlatores na Eq. (4.38) podem ser calculados usando as equações acima. Em ordem λ_K é imediato concluir que não há contribuição. Por outro lado, em ordem λ_K^2 é preciso avaliar, por exemplo, o seguinte correlator

$$\begin{aligned}\langle S_0^z(\tau)TH_K(\tau')H_K(\tau'')\rangle_0 &= \frac{(\pi v_F \lambda_K)^2}{2} \left\{ \frac{1}{4} \langle TG(\tau')G(\tau'')\rangle_0 + \theta(\tau' - \tau'') \langle F(\tau')F^\dagger(\tau'')\rangle_0 \right. \\ &\quad \left. + \theta(\tau'' - \tau') \langle F(\tau'')F^\dagger(\tau')\rangle_0 \right\},\end{aligned}\quad (\text{C.2})$$

$$= \frac{(\pi v_F \lambda_K)^2}{2} \left\{ \frac{1}{4} \langle TG(\tau')G(\tau'')\rangle_0 + 2\theta(\tau' - \tau'') \langle F(\tau')F^\dagger(\tau'')\rangle_0 \right\},\quad (\text{C.3})$$

onde foi efetuada uma permutação $\tau' \leftrightarrow \tau''$. De maneira similar temos

$$\langle H_K(\tau')S_0^z(\tau)H_K(\tau'')\rangle_0 = \frac{(\pi v_F \lambda_K)^2}{2} \left\{ \frac{1}{4} \langle G(\tau')G(\tau'')\rangle_0 - \langle F(\tau')F^\dagger(\tau'')\rangle_0 \right\}.\quad (\text{C.4})$$

Esses resultados nos conduzem a

$$m_0(\tau) \approx \frac{1}{2} - (\pi v_F \lambda_K)^2 \int_0^\tau d\tau' d\tau'' \langle F(\tau')F^\dagger(\tau'')\rangle_0 + \mathcal{O}(\lambda_K^3).\quad (\text{C.5})$$

Neste ponto é preciso diferenciar os nossos dois casos de interesse de modo a explicitar o operador F . Primeiro será tratado a situação em que ambos os *hoppings* para as cadeias são não-nulos. Neste caso o operador F é dado por

$$F^{(2)} = \frac{1}{2\pi\alpha} e^{-i\sqrt{\pi}\phi_s^+(0)} \left\{ \cos[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)] + \mathcal{C} \cos[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0)] \right\},\quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned}&= \frac{1}{4\pi\alpha} \left\{ e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_{1s}(\tau)} + e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_{2s}(\tau)} + \mathcal{C} e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}+\phi_{2s}]} e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}-\phi_{2c}]} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{C} e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}+\phi_{2s}]} e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}-\phi_{2c}]} \right\}.\end{aligned}\quad (\text{C.7})$$

onde o sobrescrito (2) indica a situação que estamos tratando. Dada a separação spin-carga e que $|0\rangle = |\text{GS}\rangle_1 \otimes |\text{GS}\rangle_2$, o único correlator bosônico não-nulo será

$$\langle e^{ia\phi_{\ell,\lambda}(\tau)} e^{-ib\phi_{\ell',\lambda'}(\tau')} \rangle_0 = \frac{\delta_{ab}\delta_{\ell\ell'}\delta_{\lambda\lambda'}}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')]^{a^2/\pi K_\lambda}}, \quad (\text{C.8})$$

para intervalos de tempos $|\tau - \tau'| \ll \frac{L}{u_\lambda}$. O correlator acima é o correlator bosônico mais simples (não-nulo) que pode surgir do produto de operadores fermiônicos [5, 23]. O resultado acima é facilmente obtido seguindo o mesmo raciocínio que foi desenvolvido na seção A. Portanto

$$\begin{aligned} \langle F^{(2)}(\tau') F^{(2)\dagger}(\tau'') \rangle_0 &= \frac{1}{(4\pi\alpha)^2} \left\{ \langle e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_{1s}(\tau')} e^{i\sqrt{2\pi}\phi_{1s}(\tau'')} \rangle_0 + (1 \rightarrow 2) \right. \\ &\quad + \mathcal{C} \langle e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}(\tau') + \phi_{2s}(\tau')]} e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}(\tau'') + \phi_{2s}(\tau'')]} \rangle_0 \\ &\quad \times \langle e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}(\tau') - \phi_{2c}(\tau')]} e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}(\tau'') - \phi_{2c}(\tau'')]} \rangle_0 \\ &\quad + \mathcal{C} \langle e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}(\tau') + \phi_{2s}(\tau')]} e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}(\tau'') + \phi_{2s}(\tau'')]} \rangle_0 \\ &\quad \times \langle e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}(\tau') - \phi_{2c}(\tau')]} e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}(\tau'') - \phi_{2c}(\tau'')]} \rangle_0 \left. \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

$$+ \mathcal{C} \langle e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}(\tau') + \phi_{2s}(\tau')]} e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1s}(\tau'') + \phi_{2s}(\tau'')]} \rangle_0 \quad (\text{C.10})$$

$$\times \langle e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}(\tau') - \phi_{2c}(\tau')]} e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}[\phi_{1c}(\tau'') - \phi_{2c}(\tau'')]} \rangle_0 \left. \right\}, \quad (\text{C.11})$$

$$= \frac{2}{(4\pi\alpha)^2} \left\{ \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]^2} + \frac{\mathcal{C}^2}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]^{1+K_c^{-1}}} \right\}, \quad (\text{C.12})$$

onde tomamos $K_s = 1$ e $\Lambda_0\alpha$ como o único parâmetro não-universal. O fator 2 no numerador reflete que os fios são simétricos, isto é, possuem os mesmos parâmetros de Luttinger. De posse desse resultado e usando que

$$\int_0^\tau d\tau' d\tau'' \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]^\beta} = \frac{1}{\Lambda_0^2(\beta - 2)(\beta - 1)} \left(1 - \frac{1}{[1 + i\Lambda_0\tau]^{\beta-2}} \right) + \text{H.c.}, \quad (\text{C.13})$$

concluimos que

$$\begin{aligned} m_0^{(2)}(\tau) &\approx \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_F \lambda_K}{2\alpha \Lambda_0} \right)^2 \left(\ln[1 + (\Lambda_0\tau)^2] + \frac{2\mathcal{C}^2 K_c^2}{1 - K_c} \left\{ 1 - [1 + (\Lambda_0\tau)^2]^{\frac{K_c-1}{2K_c}} \right. \right. \\ &\quad \times \cos \left[\frac{1 - K_c}{K_c} \arctan \Lambda_0\tau \right] \left. \right\} \Bigg) + \mathcal{O}(\lambda_K^3). \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Na segunda situação, $t'_1 = 0$, o operador $F^{(1)}$ tem a forma:

$$F^{(1)} = \frac{1}{2\pi\alpha} e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_s}, \quad (\text{C.15})$$

onde foi omitido o índice do fio. Dado o desenvolvimento feito acima é imediato concluir que

$$\langle F^{(1)}(\tau') F^{(1)\dagger}(\tau'') \rangle_0 = \frac{(2\pi\alpha)^{-2}}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]^2}, \quad (\text{C.16})$$

logo

$$m_0^{(1)}(\tau) \approx \frac{1}{2} - \left(\frac{v_F \lambda_K}{2\alpha \Lambda_0} \right)^2 \ln[1 + (\Lambda_0\tau)^2] + \mathcal{O}(\lambda_K^3). \quad (\text{C.17})$$

C.2 Side coupling

Devido ao aparecimento do campo ϕ_c na contribuição vinda de λ_K^B no hamiltoniano da Eq. (4.50), os termos cruzados $\lambda_K^F \lambda_K^B$ não vão contribuir. Para a parte vinda de $\lambda_K^{F^2}$, teremos que avaliar, por exemplo,

$$\langle e^{i\sqrt{2\pi}[\phi_s(\tau') - \theta_s(\tau')]} e^{-i\sqrt{2\pi}[\phi_s(\tau'') - \theta_s(\tau'')]} \rangle_0. \quad (\text{C.18})$$

Dado o desenvolvimento no apêndice A, concluímos que

$$\langle e^{i\sqrt{2\pi}[\phi_s(\tau')-\theta_s(\tau')]} e^{-i\sqrt{2\pi}[\phi_s(\tau'')-\theta_s(\tau'')]} \rangle_0 = \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]^2}, \quad (\text{C.19})$$

para o nosso sistema SU(2)-simétrico. Os termos proporcionais a $\lambda_K^{B^2}$ que contribuirão podem ser obtidos da contribuição de $\lambda_K^{F^2}$ fazendo $\phi_s \rightarrow \phi_c$ (olhar a Eq. (4.50)). Sendo assim, somos levados a

$$\langle F(\tau') F^\dagger(\tau'') \rangle_0 = \frac{2}{(4\pi\alpha)^2} \left[\frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]^2} + \frac{\mathcal{C}^2}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]^{K_c+1}} \right], \quad (\text{C.20})$$

onde $\lambda_K^B \equiv \lambda_K^F \mathcal{C}$. Usando o resultado na Eq. (C.13) podemos efetuar as integrais envolvidas na Eq. (4.40) e obter o resultado (4.51).

APÊNDICE D – Detalhes do cálculo da corrente

Neste apêndice dou detalhes do cálculo da corrente de carga apresentado no capítulo 5.

D.1 Transformação

Em um caso geral, seja O um observável de nosso interesse e $|\Psi(\tau)\rangle$ o estado evoluído do hamiltoniano $H_0 + H_K + \delta H$, ver a Eq. (5.1). O valor esperado de O nesse estado pode ser reescrito da seguinte forma

$$\begin{aligned}\langle O \rangle &= \langle \Psi(\tau) | O | \Psi(\tau) \rangle, \\ &= \langle \Psi(\tau) | \Omega(\tau) \Omega^\dagger(\tau) O \Omega(\tau) \Omega^\dagger(\tau) | \Psi(\tau) \rangle, \\ &\equiv \langle \tilde{\Psi}(\tau) | \tilde{O}(\tau) | \tilde{\Psi}(\tau) \rangle,\end{aligned}\tag{D.1}$$

com $\Omega(\tau)$ sendo um operador unitário, isto é, $\Omega(\tau) \Omega^\dagger(\tau) = 1$. Como consequência, o operador O passa a depender explicitamente do tempo, $\tilde{O}(\tau) = \Omega^\dagger(\tau) O \Omega(\tau)$, e o estado evoluído fica sendo dado por $|\tilde{\Psi}(\tau)\rangle = \Omega^\dagger(\tau) |\Psi(\tau)\rangle$. Para descrever a dinâmica imposta por (5.2), esse novo estado deve satisfazer a equação de Schrödinger; isso só será possível se o hamiltoniano (5.2) for transformado para

$$H \rightarrow \tilde{H} = \Omega^\dagger(\tau) H \Omega(\tau) + i \partial_\tau (\Omega^\dagger(\tau)) \Omega(\tau).\tag{D.2}$$

É imediato mostrar que $i \partial_\tau |\tilde{\Psi}(\tau)\rangle = \tilde{H} |\tilde{\Psi}(\tau)\rangle$.

O operador unitário no nosso caso de interesse [81, 125] é

$$\Omega(\tau) = \exp \left[-i \sum_{\ell} (\mu_{\ell} N_{\ell} + \mathbf{h}_{\ell} \cdot \mathbf{S}_{\ell}) \tau \right].\tag{D.3}$$

Dado que operadores fermiônicos em fios distintos anti-comutam sempre, podemos escrever $\Omega = \Omega_1 \Omega_2$. Usando o operador acima, o hamiltoniano transformado é dado por

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= H_0 + \Omega^\dagger H_K \Omega, \\ &\equiv H_0 + \tilde{H}_K.\end{aligned}\tag{D.4}$$

Vemos que, com essa transformação, o hamiltoniano torna-se separável em uma parte “livre”, cuja solução é conhecida, e outra que carrega a interação com a impureza junto com a informação do transporte. Esta forma é apropriada para aplicarmos uma teoria perturbativa em λ_K , como feito no capítulo anterior.

Para calcular o termo Kondo transformado em (D.4), usaremos dois resultados importantes que saem diretamente das relações de anti-comutação fermiônicas¹,

$$N_{\ell}^n \psi_{\ell, \alpha}^\dagger = \psi_{\ell, \alpha}^\dagger (N_{\ell} + 1)^n,\tag{D.5}$$

¹ Explicitamente: $\{\psi_{\ell a}^\dagger(x), \psi_{\ell' b}(y)\} = \delta_{\ell \ell'} \delta_{ab} \delta(x - y)$, $\{\psi_{\ell a}(x), \psi_{\ell' b}(y)\} = \{\psi_{\ell a}^\dagger(x), \psi_{\ell' b}^\dagger(y)\} = 0$.

$$(\mathbf{h}_\ell \cdot \mathbf{S}_\ell)^n \psi_{\ell,\alpha}^\dagger = \sum_\beta \psi_{\ell,\beta}^\dagger \left\{ \left[\mathbf{h}_\ell \cdot \left(\mathbf{S}_\ell \mathbb{1}_{2 \times 2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \right) \right]^n \right\}_{\beta\alpha}, \quad (\text{D.6})$$

onde α, β são índices de spin e $\mathbb{1}_{2 \times 2}$ é a matriz identidade de dimensão 2. Com essas expressões concluímos que

$$\Omega_\ell^\dagger \psi_\ell^\dagger = \psi_\ell^\dagger \Upsilon_\ell(\tau) \Omega_\ell^\dagger, \quad (\text{D.7})$$

sendo

$$\Upsilon_\ell(\tau) = e^{i\mu_\ell \tau} e^{i\mathbf{h}_\ell \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \tau} \quad (\text{D.8})$$

uma matriz 2×2 com os potenciais químicos. Assim, o termo Kondo transformado fica explicitamente (ver a Eq. (4.21))

$$\tilde{H}_K = \pi v_F \lambda_K \mathbf{S}_0 \cdot \sum_{\ell, \ell'} : \psi_\ell^\dagger(0) \Upsilon_\ell(\tau) \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \Upsilon_{\ell'}^\dagger(\tau) \psi_{\ell'}(0) :. \quad (\text{D.9})$$

Comparando a expressão transformada com a não-transformada de H_K , nota-se que toda informação do transporte se resume a fazer

$$\psi_\ell \rightarrow \Upsilon_\ell^\dagger(\tau) \psi_\ell. \quad (\text{D.10})$$

A seguir calcularemos as correntes (para $U = 0$ e $U \neq 0$) nos diferentes intervalos de tempo.

D.2 $\tau \ll \tau_K$

D.2.1 $U = 0$

Quando reescrito em termos de $S_0^\pm$ e S_0^z o hamiltoniano Kondo torna-se

$$H_K = \pi v_F \lambda_K \left(S_0^+ F + S_0^- F^\dagger + S_0^z G \right), \quad (\text{D.11})$$

onde agora

$$F = \sum_{\ell, \ell'} e^{i(\mu_\ell - \mu_{\ell'})\tau} : \psi_\ell^\dagger(0) \frac{\sigma^-}{2} \psi_{\ell'}(0) :, \quad (\text{D.12})$$

$$G = \sum_{\ell, \ell'} e^{i(\mu_\ell - \mu_{\ell'})\tau} : \psi_\ell^\dagger(0) \frac{\sigma^z}{2} \psi_{\ell'}(0) :, \quad (\text{D.13})$$

com $\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$. Abaixo analisaremos os correlatores que surgem da expansão perturbativa em λ_K .

Em ordem λ_K^2 precisaremos avaliar o correlator $\langle [H_K(\tau'), \hat{j}_c(\tau)] \rangle_0$ (ver a Eq. (5.14)). Usando os resultados da Eq. (C.1) é direto chegar que

$$\langle [H_K(\tau'), \hat{j}_c(\tau)] \rangle_0 = ie(\pi v_F \lambda_K)^2 \left[-\langle F(\tau') f^\dagger(\tau) \rangle_0 + \frac{1}{4} \langle G(\tau') g(\tau) \rangle_0 \right] - \text{H.c.} \quad (\text{D.14})$$

Usando as expressões dos operadores f e g , fornecidas no texto principal, como também o resultado na Eq. (5.20) é imediato concluir que

$$\langle F(\tau') f^\dagger(\tau) \rangle_0 = \frac{i}{(2\pi\alpha)^2} \frac{\sin[eV(\tau' - \tau)]}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau)]^2}, \quad (\text{D.15})$$

$$\langle G(\tau') g(\tau) \rangle_0 = \frac{-2i}{(2\pi\alpha)^2} \frac{\sin[eV(\tau' - \tau)]}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau)]^2}, \quad (\text{D.16})$$

onde $\Lambda_0 = v_F/\alpha$. Com isso temos que

$$\langle [H_K(\tau'), \hat{j}_c(\tau)] \rangle_0 = \frac{3ie(v_F\lambda_K)^2}{2\alpha^2} \frac{\sin[eV(\tau' - \tau)] \Lambda_0(\tau' - \tau)}{[1 + \Lambda_0^2(\tau' - \tau)^2]^2}. \quad (\text{D.17})$$

Depois de substituir este resultado na Eq. (5.14) e efetuar a integral concluímos que em ordem $\mathcal{O}(V)$

$$j_c^{(2)}(\tau) = \frac{3j_0\pi\lambda_K^2}{4} \left[\arctan \Lambda_0\tau - \frac{\Lambda_0\tau}{1 + \Lambda_0^2\tau^2} \right], \quad (\text{D.18})$$

onde $j_0 = e^2V/\pi$. Na região de tempo que estamos interessados, $\Lambda_0\tau \gg 1$, este resultado se reduz a

$$j_c^{(2)}(\tau) \approx \frac{3\pi^2 j_0}{8} \lambda_K^2 \left[1 - \frac{4}{\pi\Lambda_0\tau} \right] + \mathcal{O}(\tau^{-3}), \quad (\text{D.19})$$

mostrando que a corrente escala para um valor constante da forma $1/\tau$. Como discutido no texto principal, este resultado não carrega assinaturas do efeito Kondo, visto que para uma impureza não-magnética teremos o mesmo resultado [81]. Assim, é preciso considerar termos de maior ordem na expansão perturbativa em λ_K .

Como apontado no texto principal, em ordem λ_K^3 os correlatores que irão contribuir para a corrente são aqueles que estão na Eq. (5.15). Para a impureza temos os seguintes correlatores

$$\begin{aligned} \langle TS_0^+(\tau) S_0^-(\tau') S_0^z(\tau'') \rangle_0 &= \frac{1}{2} \epsilon(\tau, \tau', \tau'') \theta(\tau - \tau'), \\ \langle TS_0^z(\tau) S_0^z(\tau') S_0^z(\tau'') \rangle_0 &= \frac{1}{8}, \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

onde $\epsilon(\tau, \tau', \tau'')$ está definido no texto. Mostraremos agora que apenas o correlator que envolve spin-*flip*, isto é, o primeiro, irá contribuir para a corrente. A correspondente contribuição fermiônica deste correlator é

$$I = \sigma_{\alpha\alpha}^z \sigma_{\beta\beta}^z \sigma_{\gamma\gamma}^z \langle T \psi_{\ell\alpha}^\dagger(\tau) \psi_{\ell'\alpha}(\tau) \psi_{r\beta}^\dagger(\tau') \psi_{r'\beta}(\tau') \psi_{s\gamma}^\dagger(\tau'') \psi_{s'\gamma}(\tau'') \rangle_0. \quad (\text{D.21})$$

Aqui ℓ (ℓ'), r (r') e s (s') indexam os fios, enquanto que α , β e γ os estados de spin $1, 2 \equiv \uparrow, \downarrow$, e estamos assumindo que índices repetidos estão sendo somados. Note que não escrevemos as exponenciais com os potenciais químicos, visto que para a análise que se segue eles são contribuem. Utilizando a expressão de σ^z chegamos a

$$I = (-1)^{\alpha+1} (-1)^{\beta+1} (-1)^{\gamma+1} \langle T \psi_{\ell\alpha}^\dagger(\tau) \psi_{\ell'\alpha}(\tau) \psi_{r\beta}^\dagger(\tau') \psi_{r'\beta}(\tau') \psi_{s\gamma}^\dagger(\tau'') \psi_{s'\gamma}(\tau'') \rangle_0, \quad (\text{D.22})$$

$$= -(-1)^{\alpha+\beta+\gamma} \langle T \psi_{\ell\alpha}^\dagger(\tau) \psi_{\ell'\alpha}(\tau) \psi_{r\beta}^\dagger(\tau') \psi_{r'\beta}(\tau') \psi_{s\gamma}^\dagger(\tau'') \psi_{s'\gamma}(\tau'') \rangle_0. \quad (\text{D.23})$$

Com relação aos índices de spin, apenas duas situações podem ocorrer com o correlator acima, são estas: todos os índices de spin são iguais, $\alpha = \beta = \gamma$, ou dois índices iguais e o terceiro restante diferente, por exemplo, $\alpha = \beta \neq \gamma$. No entanto, dado que os operadores fermiônicos estão ordenados normalmente, isto é, $\langle \psi_{\ell\sigma}^\dagger(\tau) \psi_{\ell\sigma}(\tau) \rangle_0 = \langle : \psi_{\ell\sigma}^\dagger(\tau) \psi_{\ell\sigma}(\tau) : \rangle_0 = 0$, apenas a situação com $\alpha = \beta = \gamma$ contribuirá. Assim

$$I = -(-1)^\alpha \langle T \psi_{\ell\alpha}^\dagger(\tau) \psi_{\ell'\alpha}(\tau) \psi_{r\alpha}^\dagger(\tau') \psi_{r'\alpha}(\tau') \psi_{s\alpha}^\dagger(\tau'') \psi_{s'\alpha}(\tau'') \rangle_0, \quad (\text{D.24})$$

$$= 0, \quad (\text{D.25})$$

dado que o sistema não favorecer qualquer espécie de spin $\uparrow$ e $\downarrow$. Portanto, mostramos assim que apenas o correlator que flipa o spin da impureza contribuirá. A mesma conclusão é válida para o caso interagente.

Assim, a contribuição em ordem λ_K^3 para a corrente de carga fica sendo

$$\begin{aligned} j_c^{(3)}(\tau) = & -\frac{ie}{2} (\pi v_F \lambda_K)^3 \int d\tau' d\tau'' \left\{ \theta(\tau' - \tau'') \left[\langle f(\tau) F^\dagger(\tau') G(\tau'') \rangle_0 - \langle f(\tau) G(\tau') F^\dagger(\tau'') \rangle_0 \right. \right. \\ & \left. \left. + \langle g(\tau) F(\tau') F^\dagger(\tau'') \rangle_0 \right] - \langle G(\tau') f(\tau) F^\dagger(\tau'') \rangle_0 + \frac{1}{2} \langle F(\tau') g(\tau) F^\dagger(\tau'') \rangle_0 \right\} + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (\text{D.26})$$

Vejamos, por exemplo, o correlator $\langle f(\tau) F^\dagger(\tau') G(\tau'') \rangle_0 \equiv C_1$. Usando as definições prévias temos

$$\begin{aligned} C_1 = & \frac{1}{4} \sum_{\ell\ell'mm'} e^{i(\mu_\ell - \mu_{\ell'})\tau'} e^{i(\mu_m - \mu_{m'})\tau''} \langle [e^{ieV\tau} \psi_{2\downarrow}^\dagger(\tau) \psi_{1\uparrow}(\tau) - e^{-ieV\tau} \psi_{1\downarrow}^\dagger(\tau) \psi_{2\uparrow}(\tau)] \times \\ & \psi_{\ell\uparrow}^\dagger(\tau') \psi_{\ell'\downarrow}(\tau') \psi_m^\dagger(\tau'') \sigma^z \psi_{m'}(\tau'') \rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.27})$$

$$\equiv \frac{1}{4} \sum_{\ell\ell'mm'} e^{i(\mu_\ell - \mu_{\ell'})\tau'} e^{i(\mu_m - \mu_{m'})\tau''} (e^{ieV\tau} c_1 - e^{-ieV\tau} c_1'). \quad (\text{D.28})$$

Usando o teorema de Wick [119] para avaliar os correlatores c_1 e c_1' junto com o resultado para a função de Green na borda, Eq. (5.20), concluímos

$$c_1 = -\frac{1}{(2\pi\alpha)^3} \frac{\delta_{m1} \delta_{m'\ell} \delta_{\ell'2} + \delta_{m'2} \delta_{m\ell'} \delta_{\ell1}}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')][1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')][1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]}, \quad (\text{D.29})$$

$$c_1' = -\frac{1}{(2\pi\alpha)^3} \frac{\delta_{m2} \delta_{m'\ell} \delta_{\ell'1} + \delta_{m'1} \delta_{m\ell'} \delta_{\ell2}}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')][1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')][1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]} \quad (\text{D.30})$$

Assim

$$C_1 = \frac{-i}{(2\pi\alpha)^3} \frac{\sin[eV(\tau - \tau')] + \sin[eV(\tau - \tau'')]}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')][1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')][1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]} \quad (\text{D.31})$$

Os outros correlatores que aparecem na Eq. (D.26) podem ser calculados de maneira similar. Depois de efetuar esses cálculos chegaremos que

$$\langle f(\tau) G(\tau') F^\dagger(\tau'') \rangle_0 = -\langle g(\tau) F(\tau') F^\dagger(\tau'') \rangle_0 = -C_1, \quad (\text{D.32})$$

e

$$\begin{aligned} \langle G(\tau') f(\tau) F^\dagger(\tau'') \rangle_0 &= \frac{-i}{(2\pi\alpha)^3} \frac{\sin[eV(\tau - \tau')] + \sin[eV(\tau - \tau'')]}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau)][1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')][1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]} \\ &= -\langle F(\tau') g(\tau) F^\dagger(\tau'') \rangle_0. \end{aligned} \quad (\text{D.33})$$

Portanto

$$j_c^{(3)}(\tau) = -\frac{3ie}{2}(\pi v_F \lambda_K)^3 \int d\tau' d\tau'' \left\{ \theta(\tau' - \tau'') \langle f(\tau) F^\dagger(\tau') G(\tau'') \rangle_0 + \frac{1}{2} \langle F(\tau') g(\tau) F^\dagger(\tau'') \rangle_0 \right\} + \text{H.c.} \quad (\text{D.34})$$

Uma das duas integrações envolvidas na equação acima são calculadas facilmente, pois

$$\int_0^{\tau'} d\tau'' \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')] } \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')] } = \frac{-1}{\Lambda_0^2(\tau - \tau')} \left[\ln s(\tau - \tau') + \ln \frac{s(\tau')}{s(\tau)} \right], \quad (\text{D.35})$$

$$\int_{\tau''}^{\tau} d\tau' \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')] } \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')] } = \frac{-2}{\Lambda_0[\Lambda_0(\tau - \tau'') - 2i]} \ln s(\tau - \tau''), \quad (\text{D.36})$$

$$\int_0^{\tau} d\tau'' \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')] } \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')] } = \frac{1}{\Lambda_0^2(\tau - \tau')} \left[\ln s(\tau' - \tau) - \ln \frac{s(\tau')}{s(\tau)} \right], \quad (\text{D.37})$$

$$\int_0^{\tau} d\tau' \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau)] } \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')] } = \frac{1}{\Lambda_0^2(\tau - \tau'')} \left[\ln s(\tau - \tau'') - \ln \frac{s(-\tau'')}{s(-\tau)} \right], \quad (\text{D.38})$$

onde $s(x) \equiv 1 + ix$. Depois de agrupar esses resultados na equação de $j_c^{(3)}(\tau)$ seremos levados ao resultado (em ordem $\mathcal{O}(V)$)

$$j_c^{(3)}(\tau) = \frac{3e^2 V \lambda_K^3}{8} \int_0^{\Lambda_0 \tau} du \frac{u \ln s(u)}{s(u)} \left[\frac{1}{u} + \frac{1}{u - 2i} \right] + \text{H.c.} + \dots, \quad (\text{D.39})$$

onde por $+\dots$ queremos dizer que estamos desprezando termos que decaem igual ou mais rápido que $1/\tau$. Efetuando a integral acima no intervalo de tempo $\Lambda_0 \tau \gg 1$ concluiremos que

$$j_c^{(3)}(\tau \gg \Lambda_0^{-1}) \approx \frac{3\pi e^2 V \lambda_K^3}{4} \ln \Lambda_0 \tau. \quad (\text{D.40})$$

Quando o resultado acima é colocado junto do resultado para $j_c^{(2)}$ obteremos a Eq. (5.28) do texto principal.

D.2.2 $U > 0$

Neste limite de elétrons interagentes o problema é tratado usando a técnica Bosonização (ver o capítulo 4).

Em ordem λ_K^2 teremos a contribuição da Eq. (D.14). Usando o resultado (5.36) temos

$$\langle F(\tau') f^\dagger(\tau) \rangle_0 = \frac{i\mathcal{C}}{(2\pi\alpha)^2} \frac{\sin[eV(\tau' - \tau)]}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau)]^{\nu+2}}, \quad (\text{D.41})$$

$$\langle G(\tau') g(\tau) \rangle_0 = \frac{-2i\mathcal{C}}{(2\pi\alpha)^2} \frac{\sin[eV(\tau' - \tau)]}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau)]^{\nu+2}}, \quad (\text{D.42})$$

com $\nu = K_c^{-1} - 1$ e $\Gamma_K \equiv \lambda_K \mathcal{C}$. Calculando a integral envolvida na Eq. (5.14) chegaremos no resultado (5.37).

Em ordem λ_K^3 o resultado (D.25) ainda é válido, de forma que a contribuição nesta ordem é dada pela Eq. (D.34). Os correlatores que precisaremos avaliar agora são da forma:

$$C_2 = \langle e^{-i\sqrt{\pi}[\phi_s^+(\tau) - \phi_c^-(\tau)]} e^{i\sqrt{\pi}[\phi_s^-(\tau') + \phi_s^+(\tau')] } e^{-i\sqrt{\pi}[\phi_s^-(\tau'') + \phi_c^-(\tau'')] } \rangle_0, \quad (\text{D.43})$$

$$C_3 = \langle e^{-i\sqrt{\pi}\phi_s^+(\tau)} e^{i\sqrt{\pi}\phi_s^+(\tau')} \partial_x \phi_s^+(\tau'') \rangle_0. \quad (D.44)$$

O correlator C_2 é facilmente calculado usando o resultado (5.36). Porém, existe um sinal negativo proveniente do produto dos fatores de Klein que não pode ser ignorado:

$$C_2 = \langle e^{-i\sqrt{\pi}[\phi_s^+(\tau)-\phi_c^-(\tau)]} e^{i\sqrt{\pi}[\phi_s^-(\tau')+\phi_s^+(\tau')] } e^{-i\sqrt{\pi}[\phi_s^-(\tau'')+\phi_c^-(\tau'')] } \rangle_0, \quad (D.45)$$

$$= \langle e^{-i\sqrt{\pi}[\phi_{2\uparrow}(\tau)-\phi_{1\downarrow}(\tau)]} e^{i\sqrt{\pi}[\phi_{1\uparrow}(\tau')-\phi_{1\downarrow}(\tau')] } e^{-i\sqrt{\pi}[\phi_{1\uparrow}(\tau'')-\phi_{2\uparrow}(\tau'')] } \rangle_0, \quad (D.46)$$

$$\sim \underbrace{\langle \psi_{1\downarrow}^\dagger(\tau) \psi_{2\uparrow}(\tau) \psi_{1\uparrow}^\dagger(\tau') \psi_{1\downarrow}(\tau') \psi_{2\uparrow}^\dagger(\tau'') \psi_{1\uparrow}(\tau'') \rangle_0}_{\prod_{\ell,\sigma} F_{\ell,\sigma} = -1}, \quad (D.47)$$

$$= - \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau')]} \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau - \tau'')]} \frac{1}{[1 + i\Lambda_0(\tau' - \tau'')]}. \quad (D.48)$$

O sinal negativo na equação acima é de extrema importância para o desenvolvimento do nosso cálculo. O correlator C_3 será tratado separadamente na próxima seção.

D.2.3 Cálculo da função de correlação Bruxa

Como está detalhado no texto principal (e também na seção anterior), é preciso avaliar a seguinte função de correlação de três pontos:

$$\mathcal{B}_s^{(\ell)}(\tau, \tau', \tau'') \equiv \langle T e^{-i\beta\phi_{\ell,s}(\tau)} e^{i\beta\phi_{\ell,s}(\tau')} \partial_x \phi_{\ell,s}(\tau'') \rangle_0, \quad (D.49)$$

onde $\beta \in \mathbb{R}$. Efetuaremos tal cálculo usando a mesma estratégia que foi empregada na seção A, isto é, ordenar manualmente o produto de operadores bosônicos de forma a obter $\langle : \dots : \rangle_0$. Para isso, as seguintes identidades de Baker-Hausdorff serão necessárias:

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{C/2}, \quad (D.50)$$

$$e^A e^B = e^B e^A e^C, \quad (D.51)$$

$$e^{-B} A = (A + C) e^{-B}, \quad (D.52)$$

apenas se $C = [A, B] \in \mathbb{C}$. Os campos bosônicos $\phi_{\ell,s}$ admitem a seguinte decomposição (veja a Eq. (4.16))

$$\phi_{\ell,s}(\tau, x) = \varphi_{\ell,s}^\dagger(\tau, x) + \varphi_{\ell,s}(\tau, x), \quad (D.53)$$

onde

$$\varphi_{\ell,s}(\tau, x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{q>0} \frac{e^{-\frac{\alpha}{2}q}}{\sqrt{q}} z_{s,q}(x) e^{-iu_s q \tau} \eta_{\ell,s,q}, \quad (D.54)$$

com $z_{\lambda,q}(x) = (1/\sqrt{K_\lambda}) \cos(qx) + i\sqrt{K_\lambda} \sin(qx)$. Visto que estamos trabalhando com um único campo bosônico e que os dois fios são simétricos, daqui por diante escreverei $\varphi_{\ell,s} \equiv \varphi$. Utilizando as relações canônicas de comutação $[\eta_{\ell,\lambda,q}, \eta_{\ell',\lambda',q'}^\dagger] = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{q,q'}$, $[\eta_{\ell,\lambda,q}, \eta_{\ell',\lambda',q'}] = [\eta_{\ell,\lambda,q}^\dagger, \eta_{\ell',\lambda',q'}^\dagger] = 0$, é imediato obter que no ponto SU(2)-simétrico

$$[\varphi(\tau), \varphi^\dagger(\tau')] = -\frac{1}{\pi} \ln \left[\frac{\pi}{L} (\alpha + iv_F(\tau - \tau')) \right], \quad (D.55)$$

$$[\varphi(\tau), \partial_x \varphi^\dagger(\tau')] = \frac{-i/\pi}{\alpha + iv_F(\tau - \tau')}, \quad (D.56)$$

sendo $\partial_x \varphi^\dagger(\tau') \equiv \partial_x \varphi^\dagger(x, \tau')|_{x=0}$. Assim

$$e^{-i\beta\phi(\tau)} e^{i\beta\phi(\tau')} \partial_x \phi(\tau'') = e^{-i\beta[\varphi^\dagger(\tau)+\varphi(\tau)]} e^{i\beta[\varphi(\tau')+\varphi^\dagger(\tau')]} \partial_x \phi(\tau''), \quad (\text{D.57})$$

$$= \left(\frac{\pi\alpha}{L} \right)^{\frac{\beta^2}{\pi}} e^{-i\beta\varphi^\dagger(\tau)} e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi^\dagger(\tau')} e^{i\beta\varphi(\tau')} \partial_x \phi(\tau''), \quad (\text{D.58})$$

$$= \left(\frac{\pi\alpha}{L} \right)^{\frac{\beta^2}{\pi}} \left(\frac{\pi\alpha}{L} [1 + \Lambda_0(\tau - \tau')] \right)^{-\frac{\beta^2}{\pi}} e^{-i\beta\varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta\varphi^\dagger(\tau')} e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} \partial_x \phi(\tau''),$$

$$= [1 + \Lambda_0(\tau - \tau')]^{-\frac{\beta^2}{\pi}} \left\{ : \mathcal{A} : + e^{-i\beta\varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta\varphi^\dagger(\tau')} e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} \partial_x \varphi^\dagger(\tau'') \right\}, \quad (\text{D.59})$$

onde $: \mathcal{A} := e^{-i\beta\varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta\varphi^\dagger(\tau')} e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} \partial_x \varphi(\tau'')$. Ordenando a última parte da equação acima

$$e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} \partial_x \varphi^\dagger(\tau'') = e^{-i\beta\varphi(\tau)} \left(\partial_x \varphi^\dagger(\tau'') + i\beta[\varphi(\tau'), \partial_x \varphi^\dagger(\tau'')] \right) e^{i\beta\varphi(\tau')}, \quad (\text{D.60})$$

$$= i\beta \left([\varphi(\tau'), \partial_x \varphi^\dagger(\tau'')] - [\varphi(\tau), \partial_x \varphi^\dagger(\tau'')] \right) e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} \\ + \partial_x \varphi^\dagger(\tau'') e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')}, \quad (\text{D.61})$$

$$= \frac{\beta}{\pi} \left[\frac{1}{\alpha + iv_F(\tau' - \tau'')} - \frac{1}{\alpha + iv_F(\tau - \tau'')} \right] e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} \\ + \partial_x \varphi^\dagger(\tau'') e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')}. \quad (\text{D.62})$$

Com isso temos

$$e^{-i\beta\phi(\tau)} e^{i\beta\phi(\tau')} \partial_x \phi(\tau'') = [1 + \Lambda_0(\tau - \tau')]^{-\frac{\beta^2}{\pi}} \left\{ : \mathcal{A} : + : \mathcal{B} : + e^{-i\beta\varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta\varphi^\dagger(\tau')} e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} : \right. \\ \left. \times \frac{\beta}{\pi} \left[\frac{1}{\alpha + iv_F(\tau' - \tau'')} - \frac{1}{\alpha + iv_F(\tau - \tau'')} \right] \right\}, \quad (\text{D.63})$$

onde $: \mathcal{B} := e^{-i\beta\varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta\varphi^\dagger(\tau')} \partial_x \varphi^\dagger(\tau'') e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')}$. Para obter $\xi_\ell(\tau, \tau', \tau'')$ devemos tomar o valor esperado da expressão acima. Devido à presença do termo de derivada em $: \mathcal{A} :$ e $: \mathcal{B} :$ temos

$$\langle : \mathcal{A} : \rangle_0 = \langle : \mathcal{B} : \rangle_0 = 0, \quad (\text{D.64})$$

e para as exponenciais (ver a subseção A)

$$\langle : e^{-i\beta\varphi^\dagger(\tau)} e^{i\beta\varphi^\dagger(\tau')} e^{-i\beta\varphi(\tau)} e^{i\beta\varphi(\tau')} : \rangle_0 = 1. \quad (\text{D.65})$$

Portanto concluímos que

$$\mathcal{A}_\ell^{(\ell)}(\tau > \tau' > \tau'') = \frac{\beta}{\pi} \left[\frac{1}{\alpha + iv_F(\tau' - \tau'')} - \frac{1}{\alpha + iv_F(\tau - \tau'')} \right] [1 + \Lambda_0(\tau - \tau')]^{-\frac{\beta^2}{\pi}}. \quad (\text{D.66})$$

De maneira similar chegaremos que

$$\mathcal{A}_\ell^{(\ell)}(\tau, \tau', \tau'') = \frac{-\beta}{\pi} \left[\frac{(-1)^{\theta(\tau' - \tau'')}}{\alpha + iv_F|\tau' - \tau''|} - \frac{(-1)^{\theta(\tau - \tau'')}}{\alpha + iv_F|\tau - \tau''|} \right] [1 + \Lambda_0|\tau - \tau'|]^{-\frac{\beta^2}{\pi}}. \quad (\text{D.67})$$

Utilizando o resultado acima, junto com o da Eq. (D.48), e efetuando uma das duas integrações envolvidas na Eq. (5.15) chegaremos na Eq. (5.41).

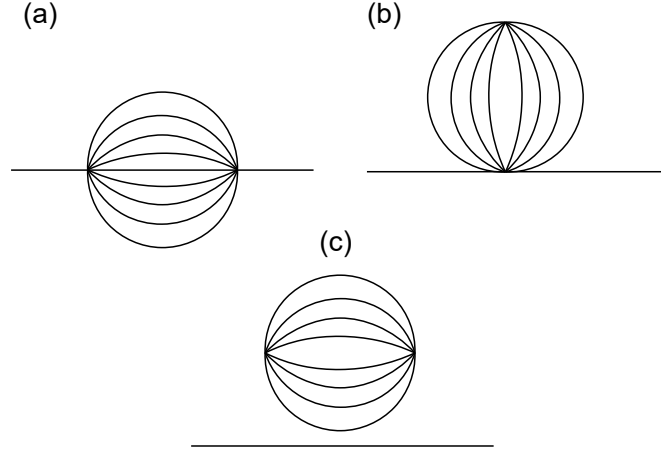


Figura 43 – Três tipos de diagramas que aparecem na expansão de $G_{ab}(\tau, \tau')$, veja a Eq. (D.73). As linhas horizontais representam a função de Green não interagente g_{ab} . Dada a soma sobre os índices c, d , apenas os diagramas (a) e (b) contribuirão. Olhar a Eq. (D.75).

D.3 $\tau \gg \tau_K$

D.3.1 $U = 0$

Neste caso devemos perturbar o ponto fixo de condutância ideal j_0 . Mesmo $U = 0$, optamos por analisar o problema dentro do *framework* da bosonização. Seguindo a Ref. [81], a corrente de carga no tempo $\tau \gg \tau_K$ é dada por:

$$j_c(\tau) = -2 \frac{e^2 V}{\pi} \int_0^\tau d\tau' \partial_\tau G^R(\tau, \tau'), \quad (\text{D.68})$$

onde G^R é a função de Green retardada do campo bosônico de carga ϕ_c (dado pela Eq. (3.27)), isto é,

$$G^R(\tau, \tau') = -i\theta(\tau - \tau') \langle [\phi_c(\tau), \phi_c(\tau')] \rangle, \quad (\text{D.69})$$

onde o valor esperado $\langle \rangle$ é tomado no estado fundamental do hamiltoniano (5.58) e os campos bosônicos evoluem de acordo com esse mesmo hamiltoniano. Então, para obtermos $j_c(\tau)$ devemos calcular G^R . Reescrevendo G^R no contorno de Keldysh [252], temos

$$G^R(\tau, \tau') = -\frac{1}{2} \sum_{a,b=\pm} b G_{ab}(\tau, \tau'), \quad (\text{D.70})$$

onde $G_{ab}(\tau, \tau')$ é a função de Green ordenada no contorno

$$G_{ab}(\tau, \tau') = -i \langle \mathcal{T}_K \phi_{c,a}(\tau) \phi_{c,b}(\tau') \rangle, \quad (\text{D.71})$$

com $\mathcal{T}_K$ sendo o operador de ordenamento temporal no contorno. Adotamos a mesma convenção de [253] para os índices de Keldysh a, b : $G_{--}(\tau, \tau') = -i \langle \mathcal{T} \phi_c(\tau) \phi_c(\tau') \rangle$, $G_{++}(\tau, \tau') = -i \langle \mathcal{T}' \phi_c(\tau) \phi_c(\tau') \rangle$, $G_{-+}(\tau, \tau') = -i \langle \phi_c(\tau') \phi_c(\tau) \rangle$, para $\tau' > \tau$ e finalmente $G_{+-}(\tau, \tau') = -i \langle \phi_c(\tau) \phi_c(\tau') \rangle$ para $\tau > \tau'$. $\mathcal{T}'$ é o operador de anti-ordenamento temporal.

Seguindo o dicionário do capítulo 3 para bosonizar um operador, temos

$$\begin{aligned}
 : \mathbf{J}^2(0) : &= -\frac{3}{2} : \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} : , \\
 &= \frac{1}{2\pi} (\partial_x \phi_c^2 - \partial_x \phi_s^2) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\pi\alpha} \right)^2 [\cos(2\beta\phi_c) + \cos(2\beta\phi_s)] \\
 &\quad + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\pi\alpha} [\partial_x \phi_c \cos(\beta\phi_c) \cos(\beta\phi_s) + \partial_x \phi_s \sin(\beta\phi_c) \sin(\beta\phi_s)], \quad (D.72)
 \end{aligned}$$

onde $\beta = \sqrt{2\pi}$ e ϕ_s é o campo bosônico de spin. Notar que os fatores de Klein foram omitidos da expressão acima; neste caso eles não interferirão. Como já mencionado, dado que estamos considerando férmions livres, ao final do cálculo devemos tomar $K_c = K_s = 1$.

Quando reescrevemos (D.71) na representação de interação [232] é imediato ver que a contribuição em ordem g é nula, de forma que

$$G_{ab}(\tau, \tau') = g_{ab}(\tau, \tau') + \frac{i}{2} \sum_{c,d=\pm} cd \int_0^{\tau} du_c du'_d \langle \mathcal{T}_K \phi_a(\tau) \phi_b(\tau') \delta H_{sc}(u_c) \delta H_{sc}(u'_d) \rangle_0 + \dots, \quad (D.73)$$

onde $g_{ab}(\tau, \tau')$ é a função de Green não interagente ($g = 0$) e $|\rangle_0$ representa o vácuo bosônico. Para não saturar a notação omitimos o índice c de carga nos campos bosônicos. Analisando os correlatores, usando que $\langle \partial_x \phi(\tau) \phi(\tau') \rangle = 0^2$ (tanto pra carga quanto pra spin), e levando em consideração a soma sobre c, d , temos

$$\begin{aligned}
 g^{-2} \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(\tau') \delta H_{sc}(u) \delta H_{sc}(u') \rangle_0 &= \left(\frac{3}{2\pi^2 \alpha^2} \right)^2 \left\{ \frac{1}{8} \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(\tau') e^{2i\beta\phi(u)} e^{-2i\beta\phi(u')} \rangle_0 \right. \\
 &\quad + \pi \alpha^2 \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(\tau') e^{i\beta\phi(u)} e^{-i\beta\phi(u')} \rangle_0 \\
 &\quad \left. \times \langle \mathcal{T}_K \partial_x \phi(u) \partial_x \phi(u') \rangle_0 \langle T e^{i\beta\phi(u)} e^{-i\beta\phi(u')} \rangle_0 \right\}, \quad (D.74)
 \end{aligned}$$

onde os índices de Keldysh foram omitidos. O correlator de 4 pontos na equação acima é mostrado na forma de diagrama na Fig. (43). Dada a soma sobre c, d , apenas os diagramas (a) e (b) contribuirão para $G_{ab}(\tau, \tau')$. Explicitamente

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(\tau') e^{2i\beta\phi(u)} e^{-2i\beta\phi(u')} \rangle_0 &= \sum_{n,m} \frac{(2i\beta)^n (-2i\beta)^m}{n!m!} \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(\tau') \phi^n(u) \phi^m(u') \rangle_0, \\
 &= \sum_{n,m} \frac{(2i\beta)^n (-2i\beta)^m}{n!m!} \left\{ \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(\tau') \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi^n(u) \phi^m(u') \rangle_0 \right. \\
 &\quad + n(n-1) \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(u) \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau') \phi(u) \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi^{n-2}(u) \phi^m(u') \rangle_0 \\
 &\quad + nm \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(u) \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau') \phi(u') \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi^{n-1}(u) \phi^{m-1}(u') \rangle_0 \\
 &\quad + nm \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(u') \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau') \phi(u) \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi^{n-1}(u) \phi^{m-1}(u') \rangle_0 \\
 &\quad \left. + m(m-1) \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(u') \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau') \phi(u') \rangle_0 \langle \mathcal{T}_K \phi^n(u) \phi^{m-2}(u') \rangle_0 \right\}, \quad (D.75)
 \end{aligned}$$

onde usamos o teorema de Wick. Na segunda linha da equação acima temos o diagrama (c), na terceira e na sexta o diagrama (b), e na quarta e quinta o diagrama (a) da Fig. 43. Depois de

² Este resultado pode ser obtido diretamente escrevendo $\phi_{c/s}(\tau)$ em termos dos modos $b_{q\lambda}^m$, ver a Eq. (3.15).

efetuar a soma sobre n, m concluímos que

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{T}_K \phi(\tau) \phi(\tau') e^{2i\beta\phi(u)} e^{-2i\beta\phi(u')} \rangle_0 &= \langle \mathcal{T}_K e^{2i\beta\phi(u)} e^{-2i\beta\phi(u')} \rangle_0 \left\{ ig(\tau, \tau') + (2\beta)^2 [g(\tau, u) - g(\tau, u')] \right. \\ &\quad \left. \times [g(\tau', u) - g(\tau', u')] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{D.76})$$

Assim, depois de considerável manipulação algébrica:

$$\sum_{a,b} bG_{ab}(\tau, \tau') = \sum_{a,b} bg_{ab}(\tau, \tau') + \frac{16(3\beta g)^2}{(2\pi\alpha)^4} \int dud u' f(u > u') g^R(\tau, u) [g^R(u', \tau') - g^R(u, \tau')], \quad (\text{D.77})$$

em que

$$f(u - u') = \frac{\sin(4 \arctan[\Lambda_0(u - u')])}{[1 + \Lambda_0^2(u - u')^2]^2}, \quad (\text{D.78})$$

e

$$g^R(\tau, \tau') = -i\theta(\tau - \tau') \langle [\phi(\tau), \phi(\tau')] \rangle = -\frac{\theta(\tau - \tau')}{\pi} \arctan[\Lambda_0(\tau - \tau')]. \quad (\text{D.79})$$

Levando o resultado acima à Eq. (D.68), e depois efetuando a integração sobre τ' , concluímos

$$j_c(\tau) \approx j_0(\tau) + \frac{e^2 V}{\pi^2 \Lambda_0} \frac{16(3\beta g)^2}{(2\pi\alpha)^4} \int dud u' f(u > u') \partial_\tau g^R(\tau, u) \Sigma(u, u'), \quad (\text{D.80})$$

sendo $j_0(\tau) = \frac{2j_0}{\pi} \arctan \Lambda_0 \tau$ a contribuição quando $g = 0$, e

$$\Sigma(u, u') \equiv \Lambda_0 u \arctan \Lambda_0 u - \Lambda_0 u' \arctan \Lambda_0 u' + \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \Lambda_0^2 u'}{1 + \Lambda_0^2 u}. \quad (\text{D.81})$$

Pela Eq. (D.80) é preciso calcular a derivada de G^R . Isto nos leva à seguinte aproximação:

$$\partial_\tau g^R(\tau, u) = -\frac{\Lambda_0}{\pi} \frac{1}{1 + \Lambda_0^2(\tau - u)^2} = -\frac{v_F}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + v_F^2(\tau - u)^2} \stackrel{\alpha \rightarrow 0}{\approx} -\delta(\tau - u). \quad (\text{D.82})$$

Com isso, uma das integrações em (D.80) é avaliada imediatamente. A integração que resta pode ser feita analiticamente, de modo que no limite $\Lambda_0 \tau \gg 1$ chegamos a

$$j_c(\tau) \approx j_0 - \frac{3j_0}{(\pi v_F)^4} \left(\frac{g}{\tau} \right)^2 + \mathcal{O}(1/\tau^3). \quad (\text{D.83})$$

Como discutido no texto principal, $g \propto 1/T_K \sim \tau_K$. A forma exata da constante de proporcionalidade não é conhecida [48], então aqui nós escolheremos tal constante de forma que o coeficiente do segundo termo da equação acima seja exatamente j_0 . Assim

$$j_c(\tau) \approx j_0 \left[1 - \left(\frac{\tau_K}{\tau} \right)^2 \right] + \mathcal{O}(1/\tau^3). \quad (\text{D.84})$$

D.3.2 $U > 0$

Neste caso chegamos à conclusão que o ponto fixo $\lambda_K = \infty$ é constituído de dois LL desacoplados. O operador que perturba este ponto fixo é aquela na Eq. (5.62), isto é, o *hopping* entre os dois LL. Quando bosonizado (seguindo o dicionário do capítulo 4) esse termo torna-se

$$\delta H_{sc} = \frac{2\hbar}{\pi\alpha} \cos[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)] \cos[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0)]. \quad (\text{D.85})$$

Analogamente ao que foi feito no texto principal para o caso $\tau \ll \tau_K$, o operador corrente neste caso fica

$$\begin{aligned}
 \hat{j}_c &= e \frac{d}{d\tau} (N_1 - N_2), \\
 &= 2ie\hbar \left[\psi_2^\dagger(0)\psi_1(0) - \text{H.c.} \right], \\
 &= \frac{4e\hbar}{\pi\alpha} \cos[\sqrt{\pi}\phi_s^-(0)] \cos[\sqrt{\pi}\phi_c^-(0)].
 \end{aligned} \tag{D.86}$$

Para estudar o transporte devemos efetuar a transformação (5.35) nos campos $\phi_{c/s}$. Dado que $\hbar \ll 1$, podemos tratar o problema perturbativamente. As contribuições em ordem $\hbar^2$ e $\hbar^3$ são dadas pelas Eq's. (5.14) e (5.15), respectivamente, com agora $H_K \rightarrow \delta H_{sc}$. Porém, visto que a dimensão de escala de δH_{sc} é $(1 + K_c^{-1})/2 > 1$, este operador é irrelevante no sentido do RG, de forma que a contribuição principal aparece na ordem mais baixa $\hbar^2$. Efetuando o cálculo do correlator em (5.14) usando o resultado (5.36), e em seguida avaliando a integral, concluiremos que

$$j_c(\tau) \approx \frac{4\pi^2 j_0 \hbar^2}{(\Lambda_0 \tau)^\nu}, \tag{D.87}$$

com $\nu = K_c^{-1} - 1$.

APÊNDICE E – Resultados: Assinaturas de modos zero de Majorana na dinâmica *quench*

Neste apêndice apresentamos resultados parciais para a junção TSC-QD-LL esquematizada na Fig. 21.

E.1 Modelo de baixas energias

Para a geometria *side coupled* da Fig. 21 temos o seguinte hamiltoniano

$$H = H_{\text{chain}} + H_{\text{dot}} + H_{\text{coupl}}, \quad (\text{E.1})$$

sendo H_{chain} o hamiltoniano da cadeia (uma cadeia de Hubbard), H_{dot} o hamiltoniano da impureza (Eq. (4.4)), e H_{coupl} o acoplamento TSC-QD-LL, a saber

$$H_{\text{coupl}} = -t' \sum_{\sigma} \left(d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + \text{H.c.} \right) + iV \gamma_{\uparrow} (d_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\uparrow}), \quad (\text{E.2})$$

onde $c_{i\sigma}$ indexa os operadores fermiônicos na cadeia, d_{σ} no sítio da impureza (QD), e $\gamma_{\uparrow} = \gamma_{\uparrow}^{\dagger}$ o férmion de Majorana na borda do supercondutor topológico (TSC) [130]. O primeiro termo na equação acima representa o acoplamento entre o sítio zero da cadeia com a impureza, enquanto o segundo termo é o acoplamento entre o modo zero de Majorana com a impureza. Escrever o termo de acoplamento TSC-QD como acima equivale a dizer que integramos os graus de liberdade gapeados do *bulk* do TSC, de forma que em baixas energias apenas o modo zero de Majorana $\gamma_{\uparrow}$ na borda contribuirá [141]¹. Notar que no termo de acoplamento TSC-QD apenas os férmions com spin $\uparrow$ são acoplados com a impureza, isto como consequência da natureza *spinless* da cadeia de Kitaev [130].

Aqui nós também estamos interessados no limite Kondo do problema, de forma que podemos integrar os graus de liberdade mais energéticos da impureza, isto é, $n_d = 0, 2$ (ver o capítulo 4). Assim, o acoplamento TSC-QD-LL fica

$$H_b = J_K \mathbf{S}_d \cdot c_0^{\dagger} \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_0 + iJ_M \gamma_{\uparrow} \left[c_{0\downarrow}^{\dagger} S_d^+ + c_{0\downarrow} S_d^- + (c_{0\uparrow}^{\dagger} + c_{0\uparrow}) S_d^z \right], \quad (\text{E.3})$$

onde $J_K = \frac{-2}{|\epsilon_d|} t'^2$ é o acoplamento Kondo usual, $J_M = \frac{2}{|\epsilon_d|} t' V$ é o acoplamento com o modo zero (sendo $|\epsilon_d|$ o nível energético da impureza), e $\mathbf{S}_d$ o operador de spin da impureza. Para obter a forma acima foi assumido a simetria partícula-buraco no sistema. Por fim, considerando também uma aproximação de baixas energias para a cadeia de Hubbard, o hamiltoniano efetivo que descreve a junção TSC-QD-LL torna-se:

$$H = H_{\text{LL}} + H_b, \quad (\text{E.4})$$

onde H_{LL} é o hamiltoniano para o líquido de Luttinger; estamos supondo que a cadeia está longe do semi-preenchimento.

¹ Rigorosamente, sendo Δ o *gap* supercondutor, nossa descrição se restringe à região de energias $E \ll \Delta$.

E.2 Magnetização da impureza

Como um primeiro caso gostaríamos de analisar o mecanismo de relaxação do spin da impureza depois de um *quench* simultâneo dos acoplamentos $J_{K,M}$, na linha do que foi feito no capítulo 4. Notemos que o hamiltoniano H_b pode ser reescrito da forma (4.23), logo sabemos que a magnetização da impureza será dada por:

$$\begin{aligned} m(\tau) &= \frac{1}{2} - \int_0^\tau d\tau' d\tau'' \langle F(\tau') F^\dagger(\tau'') \rangle_0 + \mathcal{O}(J_i^3), \\ &= \frac{1}{2} - \int_0^\tau d\tau' d\tau'' \left[\langle F_K(\tau') F_K^\dagger(\tau'') \rangle_0 + \langle F_M(\tau') F_M^\dagger(\tau'') \rangle_0 \right] + \mathcal{O}(J_i^3) \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

onde agora o operador fermiônico $F = F_K + F_M$ contém uma parte com J_K e outra com J_M , e $i = K, M$. Na equação acima os termos cruzados não contribuem devido à presença do operador $\gamma_\uparrow$ em F_M . A contribuição Kondo na equação acima já foi calculada por nós no final do capítulo 4, ver a Eq. (4.51), de forma que precisaremos calcular apenas o segundo termo. Bosonizando o hamiltoniano e efetuando o calculado do correlator, chegaremos que a parte com o Majorana produz uma contribuição

$$m(\tau) = \frac{1}{2} - \frac{2J_M^2}{\pi\alpha\Lambda_0^2} \frac{1}{(z-2)(z-1)} \left[1 - \frac{\cos[(z-2)\frac{\pi}{2}]}{(\Lambda_0\tau)^{z-2}} \right] + (\text{termo Kondo}), \quad (\text{E.6})$$

onde $z = (2 + K_c + K_c^{-1})/4$ e foi tomado o limite $\Lambda_0\tau \gg 1$. Vemos que o termo $\propto J_M$ introduz uma correção à (4.51) do tipo lei de potência com um expoente novo z , o qual, diferentemente da lei de potência já existente em (4.51), não se anula no limite não-interagente.

E.3 Equações do RG

A fim de entender melhor o expoente que vem do termo de Majorana em (E.3) na expressão da magnetização (E.6), é proveitoso analisarmos as equações do RG para os acoplamentos $J_{K,M}$. No caso $J_M = 0$ teremos as equações usuais para o efeito Kondo em um LL [114], porém quando $J_M \neq 0$ teremos uma equação adicional que envolve todos os acoplamentos.

Dentro do formalismo de integrais de caminho (ver o capítulo F) a função de partição do nosso modelo pode ser escrita da forma²

$$\mathcal{Z} = \prod_{\lambda=c,s} \int \mathcal{D}\phi_\lambda \mathcal{D}\theta_\lambda e^{-(S_0+S_b)}, \quad (\text{E.7})$$

onde S_0 corresponde à ação livre do modelo de LL enquanto S_b à “ação” da parte interagente (E.3). Como S_b contém apenas campos na origem, podemos imediatamente efetuar a integração dos campos em $x \neq 0$. Depois de um longo e interessante cálculo³ chegaremos que no ponto

² Notar que agora estamos lidando com um sistema de campos bosônicos, logo os autovalores dos estados coerentes são números complexos e não mais variáveis de Grassmann [115].

³ Para um cálculo similar ver o apêndice B de [141].

SU(2)-simétrico:

$$\frac{d\lambda_K^F}{dl} = \frac{1}{2} \left(\lambda_K^{F^2} + \lambda_K^{B^2} \right) + \dots, \quad (\text{E.8})$$

$$\frac{d\lambda_K^B}{dl} = \frac{1}{2} (1 - K_c) \lambda_K^B + \lambda_K^F \lambda_K^B + \dots, \quad (\text{E.9})$$

$$\frac{d\lambda_M}{dl} = (1 - z/2) \lambda_M + \frac{1}{2} \left(\lambda_K^F + \frac{1 + K_c}{2} \lambda_K^B \right) \lambda_M + \dots. \quad (\text{E.10})$$

Na equação acima definimos os acoplamentos sem dimensão $\lambda_i \equiv J_i/\pi v_F$. Vemos que a parte puramente Kondo, as duas primeiras equações, não apresenta alterações, ao menos até segunda ordem em J_K . A equação para λ_M é extremamente complexa dado o termo de ordem quadrática que mistura os diferentes acoplamentos. Porém, podemos ver que o acoplamento TSC-QD cresce sob o fluxo do RG, revelando que no ponto fixo de baixas energias da junção λ_M exerce um papel central. Visto que em última instância $\lambda_K^{F,B} \rightarrow \infty$, a física Kondo ainda é presente no sistema, contudo a interação Majorana-impureza não deixa claro se a formação do estado singleto entre o spin da impureza e um elétron no sítio zero da cadeia ocorrerá. A investigação do ponto fixo de acoplamento forte $\lambda_i \rightarrow \infty$ será um dos pontos que pretendemos analisar na continuidade desse projeto.

Ainda sobre a Eq. (E.10), podemos entender agora o porquê da lei de potência em (E.6) com expoente $z - 2$. Isto ocorreu pois a dimensão de escala do termo $\propto J_M$ em (E.3) é $z/2$, isto é, $(2 + K_c + K_c^{-1})/8$, dada a presença de um único campo fermiônico na parte TSC-QD de (E.3).

APÊNDICE F – Metodologia da parte II

Neste apêndice revisaremos brevemente o ferramental de muitos corpos utilizado no capítulo 7 para o estudo da fase com ordenamento de carga nos cupratos. Para um estudo mais detalhado indicamos as Ref.'s [9, 127, 232].

F.1 Modelando elétrons livres

Consideremos um sistema de N elétrons que vivem em uma rede quadrada com M^2 sítios, sendo M sítios na direção x e M sítios na direção y . Se $M \gg N$, esperamos que os elétrons não se enxerguem e, se não há perturbações externas sobre o sistema, o hamiltoniano que descreve os elétrons é simplesmente:

$$H_0 = - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \nu, \nu'} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{\nu\nu'} c_{\mathbf{r}\nu}^\dagger c_{\mathbf{r}'\nu'}. \quad (\text{F.1})$$

Aqui $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ são vetores que localizam os sítios da nossa rede e ν , ν' representam algum outro (ou vários) grau(s) de liberdade interno(s) do sistema, como, por exemplo, orbitais atômicos. Considerando que a é o tamanho do espaçamento entre os sítios:

$$\mathbf{r} = a(n_x, n_y), \quad n_{x,y} \in \mathbb{Z} \quad (\text{F.2})$$

como também para $\mathbf{r}'$. Os operadores fermiônicos de criação e aniquilação, $c_{\mathbf{r}\nu}^\dagger \equiv (c_{\mathbf{r}\nu\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{r}\nu\downarrow}^\dagger)$ e $c_{\mathbf{r}'\nu'} \equiv (c_{\mathbf{r}'\nu'\uparrow}, c_{\mathbf{r}'\nu'\downarrow})^T$, satisfazem as relações canônicas de anti-comutação (no mesmo tempo)

$$\{c_{\mathbf{r}\nu\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{r}'\nu'\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{c_{\mathbf{r}\nu\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{r}'\nu'\sigma'}\} = 0, \quad \{c_{\mathbf{r}\nu\sigma}, c_{\mathbf{r}'\nu'\sigma'}\} = 0. \quad (\text{F.3})$$

O termo genérico $t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{\nu\nu'} c_{\mathbf{r}\nu}^\dagger c_{\mathbf{r}'\nu'}$ em (F.1) descreve a propagação de um elétron do sítio $\mathbf{r}'$ e orbital ν' para o sítio $\mathbf{r}$ e orbital ν com amplitude de probabilidade $\propto t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{\nu\nu'}$. Vejamos agora em detalhes como resolver, ao menos formalmente, um hamiltoniano genérico da forma (F.1). Sem perda de generalidade omitiremos o índice de spin σ daqui por diante, de forma que estaremos sempre trabalhando com uma dada espécie de spin.

O hamiltoniano em (F.1) nada mais é do que um termo cinético. Portanto, no espaço de momentos $\mathbf{k}$ tal hamiltoniano é diagonal. A transformada de Fourier para os operadores fermiônicos é definida por:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{r}\nu} &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\nu}, \\ c_{\mathbf{r}\nu}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\nu}^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

sendo $\mathcal{V}$ o volume (área) da rede e $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. $c_{\mathbf{k}\nu}$ e $c_{\mathbf{k}\nu}^\dagger$ satisfazem as mesmas relações de anti-comutação (F.3) com $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{k}$. Como a rede possui M sítios em cada direção, $\mathcal{V} = a^2(M-1)^2 \approx a^2 M^2$, para $M \gg 1$. Além disso, assumindo condições periódicas de contorno, $c_{r+aM} = c_r$, os

vetores $\mathbf{k}$ devem satisfazer $e^{ik_j a M} = 1$, para $j = x, y$. Isto restringe o intervalo de momentos permitidos a ser

$$k_j = \frac{2\pi}{aM} m_j, \quad m_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left(\frac{M}{2} - 1 \right), \frac{M}{2} \quad (\text{F.5})$$

onde assumimos, por simplicidade, que M é par. Note que $-\frac{M}{2}$ é equivalente a $\frac{M}{2}$. De maneira equivalente

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_{x,y} \leq \frac{\pi}{a}. \quad (\text{F.6})$$

O conjunto de pontos $\mathbf{k}$ acima define a chamada primeira zona de Brillouin (BZ).

Levando a transformação (F.4) em (F.1) é imediato obter que

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \nu, \nu'} c_{\mathbf{k}\nu}^\dagger \xi_{\mathbf{k}}^{\nu\nu'} c_{\mathbf{k}\nu'}, \quad (\text{F.7})$$

onde tomamos que $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n\mathbf{a}$, sendo n um inteiro e $\mathbf{a} = a(1, 1)$, $t_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+n\mathbf{a}}^{\nu\nu'} \equiv t_n^{\nu\nu'}$ não depende de $\mathbf{r}$, isto é, que a rede é homogênea e usamos que $\sum_{\mathbf{r}} e^{\mp i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = M^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$. A dispersão de partícula única $\xi_{\mathbf{k}}^{\nu\nu'}$ é dada por

$$\xi_{\mathbf{k}}^{\nu\nu'} \equiv -\frac{1}{a^2} \sum_n t_n^{\nu\nu'} e^{i\mathbf{k}\cdot n\mathbf{a}}. \quad (\text{F.8})$$

O hamiltoniano (F.7) ainda não está na forma diagonal devido ao grau de liberdade orbital ν . Prosseguindo, H_0 pode ser reescrito em uma forma matricial:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (\text{F.9})$$

com $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\nu_1}^\dagger, c_{\mathbf{k}\nu_2}^\dagger, \dots)$ e

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}}^{\nu_1\nu_1} & \xi_{\mathbf{k}}^{\nu_1\nu_2} & \dots \\ \xi_{\mathbf{k}}^{\nu_2\nu_1} & \xi_{\mathbf{k}}^{\nu_2\nu_2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (\text{F.10})$$

Sendo Λ a matriz que diagonaliza $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$, isto é, $\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \Lambda \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \Lambda^\dagger$, onde $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$ é uma matriz diagonal, com elementos $\epsilon_{\mathbf{k}n}$, e Λ uma matriz unitária, temos que

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, n} \epsilon_{\mathbf{k}n} \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger \phi_{\mathbf{k}n}, \quad (\text{F.11})$$

com $\phi_{\mathbf{k}} = \Lambda^\dagger \Psi_{\mathbf{k}}$. A expressão acima nos mostra que as excitações fermiônicas do nosso sistema são descritas pelos operadores $\phi_{\mathbf{k}n}^\dagger$ e que estas possuem energia $\epsilon_{\mathbf{k}n}$. O índice n pode ser interpretado aqui como sendo um índice de banda. Vejamos abaixo outra forma de resolver o problema, baseado na função de Green.

F.2 Função de Green

O método de função de Green é amplamente usado para tratar problemas de muitos corpos, pois tem a grande vantagem de nos fornecer uma maneira direta de calcular observáveis [9].

Definimos a chamada função de Green retardada associada com as excitações fermiônicas $\phi_{\mathbf{k}n}$ (para uma dada polarização de spin) por¹ [127]:

$$G_{nn'}^R(\mathbf{k}, t) = -i\theta(t)\langle\{\phi_{\mathbf{k}n}(t), \phi_{\mathbf{k}n'}^\dagger(0)\}\rangle. \quad (\text{F.12})$$

Aqui estamos representando a variável temporal por t e o valor esperado $\langle|\dots|\rangle$ na equação acima está sendo tomado em um apropriado ensemble termodinâmico. Vejamos agora explicitamente a importância de se definir tal correlator. Os operadores $\phi_{\mathbf{k}n}$ têm sua evolução temporal calculada facilmente pela equação de Heisenberg: $\frac{d\phi_{\mathbf{k}n}}{dt} = i[H_0, \phi_{\mathbf{k}n}] = -i\epsilon_{\mathbf{k}n}\phi_{\mathbf{k}n} \Rightarrow \phi_{\mathbf{k}n}(t) = \phi_{\mathbf{k}n}(0)e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}n}t}$. Assim

$$G_{nn'}^R(\mathbf{k}, t) = -i\theta(t)\delta_{nn'}e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}n}t}. \quad (\text{F.13})$$

Tomando uma transformada de Fourier para o espaço de frequências ω :

$$\begin{aligned} G_{nn'}^R(\mathbf{k}, \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} e^{-0^+t} G_{nn'}^R(\mathbf{k}, t), \\ &= \frac{\delta_{nn'}}{\omega + i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}n}}. \end{aligned} \quad (\text{F.14})$$

A notação 0^+ significa tomar o limite $\lim_{\eta \rightarrow 0^+}$, necessário para regularizar a integral no ultravioleta. Vemos que a informação das autoenergias do sistema está contida nos pólos da função de Green no espaço de frequências. Isto nos mostra que se conseguirmos calcular $G_{nn'}^R$, obviamente não pelo procedimento descrito acima, pois já partimos das autoenergias, teremos toda informação do espectro do sistema.

Em uma notação matricial podemos reescrever (F.14) como

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(\omega + i\eta)\mathbb{1} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}, \quad (\text{F.15})$$

onde $\mathbb{1}$ é a matriz identidade e $\eta = 0^+$. $G^R(\mathbf{k}, \omega)$ acima está escrita na base que diagonaliza H_0 e na qual, conseqüentemente, $G^R(\mathbf{k}, \omega)$ também é diagonal. Em um caso mais geral nós podemos escrever

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(\omega + i\eta)\mathbb{1} - \mathcal{H}_{\mathbf{k}}}, \quad (\text{F.16})$$

onde, em suma, apenas efetuamos uma mudança de base. Como a expressão acima é mais geral, e também pelo fato desta poder ser obtida diretamente de H_0 , será ela que usaremos para tratar o nosso sistema no próximo capítulo.

Vejamos agora outra propriedade de G^R que a torna tão importante na investigação de sistemas de muitos corpos. Inserindo a relação de completeza $\mathbf{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$ em (F.12), onde $\{|n\rangle \equiv |\mathbf{k}n\rangle\}$ são os autoestados de H_0 , e calculando o valor esperado no ensemble grande

¹ $\phi_{\mathbf{k}n}(t)$ está na representação de Heisenberg.

canônico², temos

$$\begin{aligned}
G_{nn}^R(\mathbf{k}, \omega) &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} e^{-0^+ t} \langle \{ \phi_{\mathbf{k}n}(t), \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger(0) \} \rangle, \\
&= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} e^{-0^+ t} \left[\langle \phi_{\mathbf{k}n}(t) \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger(0) \rangle + (\text{perm.}) \right], \\
&= \frac{-i}{\mathcal{Z}} \sum_{m, m', m''} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} e^{-0^+ t} \left[\langle m | e^{-\beta H_0} | m' \rangle \langle m' | \phi_{\mathbf{k}n}(t) | m'' \rangle \langle m'' | \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger(0) | m \rangle + (\text{perm.}) \right], \\
&= \frac{-i}{\mathcal{Z}} \sum_{m, m'} e^{-\beta \epsilon_m} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + \epsilon_m - \epsilon_{m'}) t} e^{-0^+ t} \left[\langle m | \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle \langle m' | \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger | m \rangle + (\text{perm.}) \right], \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m, m'} \frac{\langle m | \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle \langle m' | \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger | m \rangle}{\omega + i0^+ + \epsilon_m - \epsilon_{m'}} \left(e^{-\beta \epsilon_m} + e^{-\beta \epsilon_{m'}} \right), \tag{F.17}
\end{aligned}$$

onde usamos que $\phi_{\mathbf{k}n}(t) = e^{iH_0 t} \phi_{\mathbf{k}n} e^{-iH_0 t}$, dado que H_0 não contém nenhum termo explicitamente dependente do tempo, e $+(\text{perm.})$ refere-se à permutação do primeiro termo $\langle \phi_{\mathbf{k}n}(t) \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger(0) \rangle$. A representação acima de G^R é conhecida como representação de Lehmann [127]. Pela expressão acima vemos que $-\text{Im} G_{nn}^R(\mathbf{k}, \omega) \geq 0$, sendo Im a parte imaginária, pois $\langle m | \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle \langle m' | \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger | m \rangle = |\langle m | \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle|^2$. É importante notar que apesar da derivação acima ter sido feita para H_0 , que não leva em consideração interações entre as partículas, o mesmo desenvolvimento (e consequentemente (F.17)) se mantém para o caso de partículas interagentes, na condição de sabermos o espectro do sistema. Prosseguindo com nossa análise, vejamos agora a seguinte operação:

$$\begin{aligned}
-\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \text{Im} G_{nn}^R(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{m, m'} \langle m | \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle \langle m' | \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger | m \rangle \left(e^{-\beta \epsilon_m} + e^{-\beta \epsilon_{m'}} \right), \\
&= \frac{\pi}{\mathcal{Z}} \left[\sum_m \langle m | e^{-\beta H_0} \phi_{\mathbf{k}n} \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger | m \rangle + \sum_{m'} \langle m' | e^{-\beta H_0} \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle \right], \\
&= \pi \langle \{ \phi_{\mathbf{k}n}, \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger \} \rangle = \pi, \tag{F.18}
\end{aligned}$$

para todo $\mathbf{k}, n$ e usamos que $\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\frac{\eta}{x^2 + \eta^2} \right) = \pi \delta(x)$. Assim, em resumo vimos que

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{nn}^R(\mathbf{k}, \omega) \geq 0, \quad -\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{nn}^R(\mathbf{k}, \omega) = 1. \tag{F.19}$$

Isto nos permite identificar a quantidade

$$A_{nn}(\mathbf{k}, \omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{nn}^R(\mathbf{k}, \omega), \tag{F.20}$$

como sendo a densidade de probabilidade de uma excitação eletrônica com momento $\mathbf{k}$ ter energia no intervalo $[\omega, \omega + d\omega]$. Tal função é chamada de função espectral, dada a conexão direta de G^R com o espectro de energias do sistema. Com o já mencionamos, a derivação feita para chegar nos resultados em (F.19) *independe* de se as partículas do sistema interagem ou não, de forma que (F.20) se mantém para sistemas interagentes. Usando o resultado em (F.14) nós vemos que

$$A_{nn}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega + i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}n}} = \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}n}). \tag{F.21}$$

² Relembrando, o valor esperado $\langle O \rangle$ no ensemble grande canônico é calculado da forma: $\langle O \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} O e^{-\beta(H - \mu N)}$, sendo $\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N)}$ a função de partição do sistema, μ o potencial químico, e $\beta = 1/T$. Por simplicidade podemos efetuar a transformação $H - \mu N \rightarrow H$, de forma que as autoenergias de H são funções de μ .

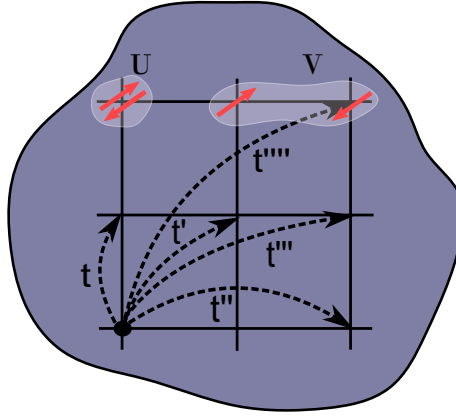


Figura 44 – Figura esquemática de um recorte da rede quadrada. Os primeiros *hoppings* para os vizinhos mais próximos são mostrados, como também dois mecanismos de interação elétron-elétron. U é o custo energético para dois elétrons ocuparem o mesmo sítio, e V o custo para eles ocuparem sítios que são vizinhos mais próximos.

Com efeito concluímos que, para um sistema de partículas livres, a função espectral é sempre dada pela delta de Dirac, visto que uma excitação com momento $\mathbf{k}$ tem exatamente uma energia $\epsilon_{\mathbf{k}n}$, neste caso. Como apontado por nós no capítulo anterior, a função espectral $A_{nn}(\mathbf{k}, \omega)$ pode ser obtida por meio de medidas experimentais de fotoemissão tipo ARPES [233].

Dada a interpretação física da função espectral $A_{nn}(\mathbf{k}, \omega)$, outra quantidade de interesse físico que podemos definir é a densidade de estados (DOS) [9, 127]:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}, n} A_{nn}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr } A(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{F.22})$$

onde $\mathcal{N}$ é o número de estados do sistema (introduzido apenas para normalizar $\rho(\omega)$) e a segunda igualdade na equação acima surge de escrevermos $A_{nn}(\mathbf{k}, \omega)$ na forma matricial, que segue da Eq. (F.16). $d\omega \rho(\omega)$ mede o número de estados do sistema no intervalo de energia $[\omega, \omega + d\omega]$. Do ponto de vista experimental, $\rho(\omega)$ pode ser extraída diretamente por meio de medidas de microscopia de tunelamento por varredura, STM (do inglês, *scanning tunnelling microscopy*) [234].

Vejamos agora um exemplo concreto para o qual podemos calcular as quantidades listadas até então. Consideremos novamente nosso modelo protótipo em (F.1), mas agora, por simplicidade, sem o grau de liberdade orbital ν . Isto implica que a matriz de Green em (F.16) é 1×1 , de forma que $A(\mathbf{k}, \omega) = \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}})$, com $\xi_{\mathbf{k}}$ escrito na Eq. (F.8). Considerando os primeiros *hoppings* na rede quadrada (ver a Fig. 44) obtemos que ($a \equiv 1$)

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{k}} = & -\mu - 2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y \\ & - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) + \dots, \end{aligned} \quad (\text{F.23})$$

onde t é o *hopping* (não confundir com a variável temporal t !) entre primeiros vizinhos, t' entre segundos vizinhos e assim por diante. Aqui, e também em todo o restante deste trabalho, assumiremos que t fixa a escala de energia do sistema e por simplicidade $t \equiv 1$. Introduzimos o potencial químico μ na equação acima ($H_0 \rightarrow H_0 - \mu N$) de forma que o nível de Fermi esteja

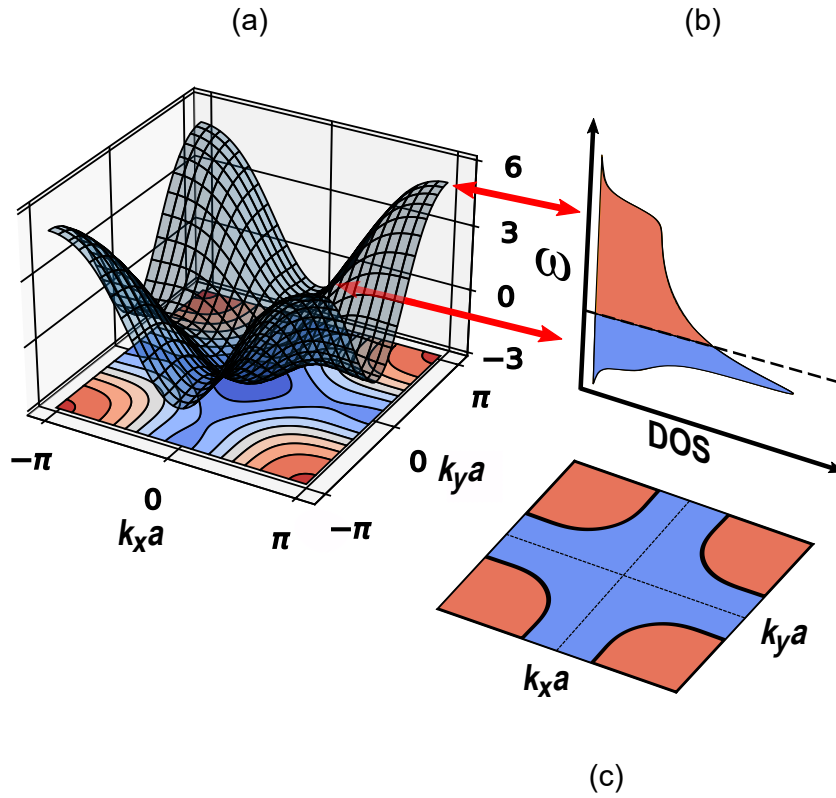


Figura 45 – **(a)** Dispersão de partícula única da Eq. (F.23), $\omega \equiv \xi_{\mathbf{k}}$. **(b)** Correspondente densidade de estados (DOS) e **(c)** superfície de Fermi (FS). Adotamos a seguinte regra de cores para ajudar na interpretação dessas quantidades: na região em azul estão os estados ocupados, enquanto na marrom os estados desocupados, em $T = 0$. O pico na DOS é proveniente da singularidade de van Hove $\vec{\nabla} \xi_{\mathbf{k}} = 0$, como indicado pela seta maior conectando as figuras **(a)** e **(b)**. Os parâmetros usados para determinar a estrutura de banda foram: $\mu = -0.737t$ (correspondente a uma densidade $n = 0.88$), $t' = -0.3t$, $t'' = 0.2t$ [229] e $\eta = 0.1$.

em $\xi_{\mathbf{k}} = 0$. O potencial químico para uma densidade de partículas $n = N/\mathcal{N}$ é obtido invertendo numericamente a equação

$$\begin{aligned} n &= \frac{2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\omega A(\mathbf{k}, \omega, \mu), \\ &= \frac{2}{\mathcal{N}} (\text{núm. de estados abaixo do nível de Fermi}). \end{aligned} \quad (\text{F.24})$$

A função espectral é função do potencial químico por meio de $\xi_{\mathbf{k}}$. Usaremos a equação acima inúmeras vezes quando formos calcular quantidades em função da dopagem do sistema no capítulo 6. Aqui, para os valores da estrutura de banda que consideramos, ver a Fig. 45, e fixando uma densidade de elétrons de $n = 0.88$, obtivemos $\mu = -0.737t$.

Na Fig. 45 nós mostramos **(a)** a dispersão (F.23), retendo os *hoppings* até terceiros vizinhos, **(b)** a densidade de estados (DOS) e **(c)** a superfície de Fermi $\xi(k_x, k_y) = 0$. Vemos que, mesmo com esse modelo simples, nós conseguimos reproduzir a superfície de Fermi (FS) da fase FL dos cupratos (veja o capítulo 6). Pela figura **(a)** é possível perceber como a topologia da FS

muda quando reduzimos o número de partículas do sistema (equivalente a aumentar $|\mu|$). Na DOS é possível identificar as regiões de energia que possuem a maior densidade de estados. Pela correspondência feita com a dispersão $\xi_{\mathbf{k}}$ em (a), vemos que o pico da DOS é proveniente dos pontos $\mathbf{k}$ que satisfazem $\vec{\nabla}\xi_{\mathbf{k}} = 0$, conhecidos como singularidades de van Hove [1].

F.3 Modelo interagente

Até agora foi suposto que a interação elétron-elétron no sistema pode ser desprezada, de forma que apenas o termo cinético (F.1) nos é suficiente. Em diversos sistemas metálicos é permitido “desprezar” essas interações quando se quer descrever uma física de baixas energias. Tais sistemas são descritos pela teoria de líquido de Fermi de Landau, segundo a qual as interações elétron-elétron são responsáveis por renormalizar algumas quantidades, como a massa eletrônica, por exemplo [9, 101]. Na perspectiva do grupo de renormalização, ver o capítulo 3, o comportamento líquido de Fermi representa o ponto fixo de baixas energias para um metal em $D > 1$ [101].

Para o tipo de sistema que estamos interessados aqui, os cupratos supercondutores, é sabido que a teoria de líquido de Fermi se aplica apenas num regime de dopagem alta, veja a Fig. 23, de forma que na região das fases CDW e PG essa teoria não se aplica. Então para descrever estas fases devemos considerar um termo de interação H_{int} em (F.1). Em um caso geral teremos agora um hamiltoniano do tipo

$$H = \sum_{ij} \epsilon_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{ijkl} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l, \quad (\text{F.25})$$

onde os índices i, j, k, l capturam todos os graus de liberdade relevantes do sistema e W_{ijkl} fornece a intensidade da interação elétron-elétron. Uma simplificação do modelo acima vem de considerar que os efeitos da interação são de curto alcance, o que nos permite escrever $W_{ijkl} = U \delta_{ij} \delta_{jk} \delta_{kl}$, isto é, uma interação puramente local. Assim, na notação da rede quadrada o termo interagente torna-se

$$H_{int} = U \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}\uparrow} n_{\mathbf{r}\downarrow}, \quad (\text{F.26})$$

onde $n_{\mathbf{r}\sigma} = c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma}$ é o operador número para um elétron no sítio $\mathbf{r}$ e com spin σ . Na Fig. 44 mostramos esquematicamente a interação levada em conta por H_{int} e também a interação entre primeiros vizinhos. Mesmo com essa simplificação, o tratamento do modelo $H_0 + H_{int}$ é um problema extremamente desafiador, passando longe de ter solução analítica³. Os métodos que mais obtiveram sucesso na resolução do problema foram abordagens numéricas. Destacamos aqui a teoria do campo médio dinâmico (DMFT) [235], a qual consegue resolver aproximadamente o problema e explicar, entre outros efeitos, a transição metal-isolante gerada por U (a transição de Mott) vista nos cupratos supercondutores. Aqui nós trataremos o termo H_{int} por meio de um desacoplamento de campo médio a la Hartree-Fock [127]. Com esse tipo de abordagem nós não estamos nos propondo a descrever toda a física do problema, mas sim ter uma descrição efetiva do que acontece numa região específica do diagrama de fases.

³ Infelizmente não podemos bosonizar H_{int} como fizemos em $D = 1$!

F.4 Função de Green-Matsubara

Vimos que o tratamento do correlator em (F.12) é razoavelmente simples para sistemas não interagentes e/ou sem alguma fonte de perturbação (aplicação de um campo elétrico para se estudar o transporte, por exemplo). Para tratar o último caso podemos pensar em aplicar uma teoria perturbativa. Contudo, na formulação de uma teoria perturbativa nos deparamos com o seguinte problema: o termo de perturbação, W , está presente tanto no operador de evolução temporal $\mathcal{T} \exp[-i \int dt W(t)]^4$ quanto no operador densidade $\exp[-\beta(H_0 + W)]$. Para contornar este problema podemos efetuar a seguinte transformação

$$it \rightarrow \tau, \quad (\text{F.27})$$

onde $\tau \in \mathbb{R}$, e trabalhar com uma única variável real. É imediato ver que a convergência da série em (F.17) exige que

$$-\beta < \tau < \beta. \quad (\text{F.28})$$

A conexão entre o problema definido em termos de τ e aquele definido em termos de t (tempo físico) é feita pela função de Green-Matsubara [127]:

$$\begin{aligned} G_{nn'}^M(\mathbf{k}, \tau, \tau') &= -\langle \mathcal{T} \phi_{\mathbf{k}n}(\tau) \phi_{\mathbf{k}n'}^\dagger(\tau') \rangle, \\ &\stackrel{\tau \geq \tau'}{=} -\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m, m'} e^{[-\beta \epsilon_m + (\epsilon_m - \epsilon_{m'})(\tau - \tau')]} \langle m | \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle \langle m' | \phi_{\mathbf{k}n'}^\dagger | m \rangle \end{aligned} \quad (\text{F.29})$$

onde, similarmente ao que foi feito para se chegar na representação de Lehmann, Eq. (F.17), supomos que o espectro do sistema é conhecido e usamos a relação de completeza $\mathbf{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$. Duas propriedades de G^M saem diretamente da definição acima, a saber:

$$\begin{cases} \text{(i)} & G^M(\tau, \tau') = G^M(\tau - \tau'), \\ \text{(ii)} & G^M(\tau + \beta) = -G^M(\tau), \end{cases} \quad (\text{F.30})$$

onde, para simplificar a notação, omitimos os outros índices de G^M . Assim como no caso de tempo real, podemos também aqui definir a transformada de Fourier de G^M ,

$$G^M(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i\pi\nu}{\beta}\tau} G_\nu^M, \quad (\text{F.31})$$

$$G_\nu^M = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{+\beta} d\tau e^{\frac{i\pi\nu}{\beta}\tau} G^M(\tau). \quad (\text{F.32})$$

Contudo,

$$\begin{aligned} G_\nu^M &= \frac{1}{2} \int_0^{+\beta} d\tau e^{\frac{i\pi\nu}{\beta}\tau} G^M(\tau) + \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 d\tau e^{\frac{i\pi\nu}{\beta}\tau} G^M(\tau), \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{+\beta} d\tau e^{\frac{i\pi\nu}{\beta}\tau} G^M(\tau) - \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 d\tau e^{\frac{i\pi\nu}{\beta}\tau} G^M(\tau + \beta), \\ &= \frac{1}{2} (1 - e^{-i\pi\nu}) \int_0^{+\beta} d\tau e^{\frac{i\pi\nu}{\beta}\tau} G^M(\tau). \end{aligned} \quad (\text{F.33})$$

⁴ Consideramos a representação de interação, sendo $\mathcal{T}$ o operador de ordenamento temporal. Ver [127].

Assim, escrevendo

$$G^M(i\omega_\nu) \equiv G_\nu^M = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\nu \tau} G^M(\tau), \quad (\text{F.34})$$

teremos⁵

$$\omega_\nu = \frac{(2\nu + 1)\pi}{\beta}, \quad \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{F.35})$$

As frequências acima são chamadas de frequências de Matsubara [105, 127, 232]. Por fim, usando (F.29) concluímos que

$$\begin{aligned} G_{nn'}^M(\mathbf{k}, i\omega_\nu) &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m, m'} \frac{\langle m | \phi_{\mathbf{k}n} | m' \rangle \langle m' | \phi_{\mathbf{k}n}^\dagger | m \rangle}{i\omega_\nu + \epsilon_m - \epsilon_{m'}} (e^{-\beta\epsilon_m} + e^{-\beta\epsilon_{m'}}), \\ &= G_{nn'}^R(\mathbf{k}, \omega + i0^+ \rightarrow i\omega_\nu), \end{aligned} \quad (\text{F.36})$$

por (F.17). Vemos, assim, que a conexão entre a função de Green retardada, Eq. (F.12), e a função de Green-Matsubara em tempo complexo, Eq. (F.29), é feita através da continuação analítica [127]

$$i\omega_\nu \rightarrow \omega + i\eta. \quad (\text{F.37})$$

Em um caso geral, para um correlator definido em tempo real

$$C_{AB}^R(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = -i\theta(\mathbf{t} - \mathbf{t}') \langle [A(\mathbf{t}), B(\mathbf{t}')]_{\pm} \rangle, \quad (\text{F.38})$$

onde $[\cdot]_{\pm} = \{\cdot, \cdot\}$ se A e B são formados por um número ímpar de operadores fermiônicos e $[\cdot]_{\pm} = [\cdot, \cdot]$ por um número par, associamos o correlator $C_{AB}^M(\tau, \tau') = -\langle \mathcal{T} A(\tau) B(\tau') \rangle$ definido em tempo imaginário, de forma que $C_{AB}^M(i\omega_\nu \rightarrow \omega + i\eta) = C_{AB}^R(\omega)$ [127, 232]. No apêndice G usamos o ferramental desenvolvido nesta seção para deduzir uma expressão para a resposta Raman.

F.5 Integrais de caminho

Nesta seção apresentaremos brevemente como o problema de muitos corpos pode ser tratado dentro de uma formulação baseada em integrais de caminho, seguindo de perto o que está desenvolvido nas Ref's [9, 115].

A função de partição do ensemble grande canônico para o nosso sistema é

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N)}, \quad (\text{F.39})$$

onde $N = \sum_i c_i^\dagger c_i$ é o operador número e H é dado pela forma geral em (F.25). O traço na equação acima é tomado numa base $\{|n\rangle\}$ do espaço de Fock. Para formular o problema em termos de uma integral funcional devemos reescrever o traço com auxílio dos estados coerentes, isto é, os autovetores dos operadores de criação e aniquilação, $c^\dagger$ e c . Porém, devido à anti-comutação dos operadores fermiônicos, os autovalores associados com esses autovetores não são números reais, mas sim números de Grassmann⁶. Em termos dos estados coerentes, (F.39) fica sendo dada

⁵ Para bósons temos que $\omega_\nu = \frac{2\nu\pi}{\beta}$ [127].

⁶ Sendo c_i um operador fermiônico que satisfaz $c_i|\gamma\rangle = \gamma_i|\gamma\rangle$, a anti-comutação dos $c_{i's}$ exige que $\{\gamma_i, \gamma_j\} = 0$, para $i \neq j$ e, consequentemente, $\gamma_i^2 = 0$. Assim, se $f = f(\gamma)$, uma expansão em série de Taylor releva $f(\gamma) = f(0) + \partial_\gamma f(0)\gamma$, exatamente. A álgebra definida pelos $\gamma_{i's}$ que satisfazem essas condições é chamada de álgebra de Grassmann.

por [115]

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) e^{-\mathcal{S}[\bar{\psi}, \psi]}, \quad (\text{F.40})$$

onde $\bar{\psi} = \{\bar{\psi}_i\}$ e $\psi = \{\psi_i\}$ são variáveis de Grassmann, $\mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N d(\bar{\psi}^n, \psi^n)$, com $d(\bar{\psi}^n, \psi^n) = \prod_i d\bar{\psi}_i^n d\psi_i^n$, e $\mathcal{S}[\bar{\psi}, \psi]$ é a ação escrita no formalismo de tempo imaginário (veja a seção anterior),

$$\mathcal{S}[\bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau \left[\bar{\psi} \partial_\tau \psi + H(\bar{\psi}, \psi) - \mu N(\bar{\psi}, \psi) \right], \quad (\text{F.41})$$

com as condições de contorno $\psi(0) = -\psi(\beta)$ e $\bar{\psi}(0) = -\bar{\psi}(\beta)$. A função de partição fica sendo dada agora como uma integral funcional⁷ sobre as variáveis $\bar{\psi}(\tau)$ e $\psi(\tau)$. Apesar de parecer ser bem mais árdua a tarefa de efetuar tal integração do que a soma em (F.39), esta representação de $\mathcal{Z}$ é bastante útil (como veremos no capítulo 6), como, por exemplo, no emprego do grupo de renormalização [101]. Indo para a representação em frequências Matsubara

$$\psi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega_n} \psi_n e^{-i\omega_n \tau}, \quad (\text{F.42})$$

$$\bar{\psi}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega_n} \bar{\psi}_n e^{i\omega_n \tau}, \quad (\text{F.43})$$

(notar a diferente normalização com respeito a (F.32)), ficamos com

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\bar{\psi}, \psi] &= \sum_{i,j,\omega_n} \bar{\psi}_{in} [(-i\omega_n - \mu)\delta_{ij} + \epsilon_{ij}] \psi_{jn} \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\{\omega\}} W_{ijkl} \bar{\psi}_{in} \bar{\psi}_{jn'} \psi_{km} \psi_{lm'} \delta_{n+n', m+m'}, \end{aligned} \quad (\text{F.44})$$

onde usamos que $\int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - \omega'_n)\tau} = \beta \delta_{nn'}$, H da forma geral em (F.25) e $\mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) = \prod_{\omega_n} d(\bar{\psi}_n, \psi_n)$, com $d(\bar{\psi}_n, \psi_n) = \prod_i d\bar{\psi}_{in} d\psi_{in}$.

Vejamos agora um simples exemplo da aplicação do ferramental desenvolvido acima. Consideremos novamente o modelo em (F.11) sem o grau de liberdade orbital. Neste caso, a ação

$$\mathcal{S}_0[\bar{\phi}, \phi] = \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \bar{\phi}_{\mathbf{k}n} [-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}] \phi_{\mathbf{k}n}. \quad (\text{F.45})$$

A função de partição torna-se

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_0 &= \int \mathcal{D}(\bar{\phi}, \phi) \exp \left[- \sum_{\mathbf{k}n} \bar{\phi}_{\mathbf{k}n} (-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}n} \right], \\ &= \prod_{\mathbf{k}} \mathcal{Z}_{0\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (\text{F.46})$$

com

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{0\mathbf{k}} &= \int \prod_n d\bar{\phi}_{\mathbf{k}n} d\phi_{\mathbf{k}n} \exp \left[- \sum_n \bar{\phi}_{\mathbf{k}n} (-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}n} \right], \\ &= \prod_n [\beta(-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}})], \end{aligned} \quad (\text{F.47})$$

⁷ A integração de variáveis Grassmanianas deve ser encarada como algo puramente formal, e não como uma soma de Riemann. Define-se $\partial_\gamma \equiv \int d\gamma$ (sim!), com a diferenciação seguindo as regras usuais. Dessa forma teremos que $\int d\gamma = 0$ e $\int d\gamma \gamma = 1$.

onde usamos resultados da integração gaussiana de variáveis Grassmanianas⁸ [115]. O produtório na equação acima pode ser calculado quando convertido em uma soma sobre frequências de Matsubara, ou seja,

$$\begin{aligned}\ln \mathcal{Z}_0 &= \sum_{\mathbf{k},n} \ln [\beta(-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}})], \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}],\end{aligned}\quad (\text{F.48})$$

onde a soma $\sum_n$ foi efetuada da mesma forma como feito no apêndice G. O resultado na equação acima nada mais é do que a energia livre para um gás de férmions livres multiplicada por $(-\beta)$ [254]. Por fim, para calcularmos a função de Green devemos usar a definição de valor esperado nesse novo formalismo [9, 115]:

$$\begin{aligned}\langle \phi_n \phi_{n'}^\dagger \rangle &\equiv \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}(\bar{\phi}, \phi) e^{-\mathcal{S}[\bar{\phi}, \phi]} \phi_n \bar{\phi}_{n'}, \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \lim_{\bar{\eta}, \eta \rightarrow 0} \frac{\delta^2}{\delta \bar{\eta}_n \delta \eta_{n'}} \int \mathcal{D}(\bar{\phi}, \phi) e^{-\mathcal{S}[\bar{\phi}, \phi] + \bar{\eta} \phi + \bar{\phi} \eta}.\end{aligned}\quad (\text{F.49})$$

Na equação acima o lado esquerdo contém operadores fermiônicos, enquanto o lado direito variáveis de Grassmann e $\frac{\delta}{\delta \eta_n}$ denota a derivada funcional. Para o caso de partículas livres, podemos calcular a integral acima utilizando o resultado (ii) na nota de rodapé 8. Assim, é direto obter que

$$(-1) \langle \phi_{\mathbf{k}n} \phi_{\mathbf{k}'n'}^\dagger \rangle = \frac{\delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (\text{F.50})$$

que, após efetuada a continuação analítica, torna-se igual ao nosso resultado inicial em (F.14). De maneira geral concluímos que o coeficiente gaussiano da ação multiplicado por (-1) nos fornece a função de Green (no formalismo de tempo imaginário) para um sistema de partículas livres.

F.6 Modelo de duas bandas

Para finalizar, consideraremos agora um modelo de duas bandas. Tomando como base nosso modelo em (F.7), podemos escrever

$$\begin{aligned}H &= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^\dagger & f_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}}^c & \Delta_{\mathbf{k}}^* \\ \Delta_{\mathbf{k}} & \xi_{\mathbf{k}}^f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + \text{H.c.},\end{aligned}\quad (\text{F.51})$$

onde associamos aos índices $\nu = 1, 2$ os operadores $c_{\mathbf{k}}$ e $f_{\mathbf{k}}$, respectivamente, e $\Delta_{\mathbf{k}}$ representa a hibridização desses orbitais. Por enquanto não abordaremos a questão da origem física dessas duas excitações. A função de Green retardada⁹ associada com H pode ser obtida efetuando a

⁸ Sendo γ e $\bar{\gamma}$ duas variáveis de Grassmann, temos que $\int d\bar{\gamma} d\gamma e^{-\bar{\gamma} a \gamma} = \int d\bar{\gamma} d\gamma (1 - \bar{\gamma} a \gamma) = a$, onde usamos as regras de integração estabelecidas na nota de rodapé anterior. Podemos generalizar esse resultado diretamente e obter que (i) $\int \prod_i d\bar{\gamma}_i d\gamma_i e^{-\bar{\Gamma} \mathbf{A} \Gamma} = \det \mathbf{A}$ e (ii) $\int \prod_i d\bar{\gamma}_i d\gamma_i e^{-\bar{\Gamma} \mathbf{A} \Gamma + \bar{\Theta} \Gamma + \bar{\Gamma} \Theta'} = e^{\bar{\Theta} \mathbf{A}^{-1} \Theta'} \det \mathbf{A}$, com $\Gamma = \{\gamma_i\}$ e $\bar{\Gamma} = \{\bar{\gamma}_i\}$ e similarmente para Θ e Θ' .

⁹ Dado o número alto de vezes que nos referiremos à função de Green retardada G^R , a partir de agora convencionaremos a chama-lá simplesmente de função de Green e também abandonaremos o superíndice R .

inversão matricial da Eq. (F.16). É imediato obter que

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(\omega - \xi_{\mathbf{k}}^c)(\omega - \xi_{\mathbf{k}}^f) - |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} \begin{pmatrix} \omega - \xi_{\mathbf{k}}^f & \Delta_{\mathbf{k}}^* \\ \Delta_{\mathbf{k}} & \omega - \xi_{\mathbf{k}}^c \end{pmatrix}, \quad (\text{F.52})$$

$$\equiv \begin{pmatrix} G_{cc}(\mathbf{k}, \omega) & G_{cf}(\mathbf{k}, \omega) \\ G_{fc}(\mathbf{k}, \omega) & G_{ff}(\mathbf{k}, \omega) \end{pmatrix}, \quad (\text{F.53})$$

onde o fator $+i0^+$ fica subentendido em ω . Com a função de Green acima podemos obter toda informação espectral do sistema. Em especial, para os férmions c 's temos

$$G_{cc}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}^c - \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}^f}}. \quad (\text{F.54})$$

Notemos o seguinte fato que surge da estrutura geral de $G_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$: diferentemente da função de Green em (F.14), a função de Green acima admite zeros, os quais ocorrem sempre que $\omega = \xi_{\mathbf{k}}^f$. Como descrito no capítulo 6, tal estrutura é essencial para descrição da fase PG.

A função de Green (F.54) também pode ser obtida dentro de uma formulação de integrais de caminho. No eixo de frequências de Matsubara ω_n , temos que

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}(\bar{c}, c) \mathcal{D}(\bar{f}, f) e^{-\mathcal{S}[\bar{c}, c, \bar{f}, f]}, \quad (\text{F.55})$$

onde $\mathcal{D}(\bar{c}, c) = \prod_{\omega_n} d(\bar{c}_n, c_n)$, com $d(\bar{c}_n, c_n) = \prod_{\mathbf{k}} d\bar{c}_{\mathbf{k}n} dc_{\mathbf{k}n}$ (e similarmente para f). A ação fica

$$\mathcal{S}[\bar{c}, c, \bar{f}, f] = \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \begin{pmatrix} \bar{c}_{\mathbf{k}n} & \bar{f}_{\mathbf{k}n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^c & \Delta_{\mathbf{k}}^* \\ \Delta_{\mathbf{k}} & -i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}n} \\ f_{\mathbf{k}n} \end{pmatrix}. \quad (\text{F.56})$$

O próximo passo é obter uma ação efetiva $\mathcal{S}_{\text{eff}}$ para os férmions c 's integrando os férmions f 's. Não podemos efetuar tal integração imediatamente, visto que temos o termo de hibridização $\Delta_{\mathbf{k}}$ em $\mathcal{S}$. Para contornar isso, faremos a seguinte mudança de variáveis¹⁰

$$\bar{f}'_{\mathbf{k}n} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{-i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^f} \bar{c}_{\mathbf{k}n} + \bar{f}_{\mathbf{k}n}, \quad (\text{F.57})$$

$$f'_{\mathbf{k}n} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{-i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^f} c_{\mathbf{k}n} + f_{\mathbf{k}n}. \quad (\text{F.58})$$

Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\bar{c}, c, \bar{f}', f'] &= \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \left[\bar{c}_{\mathbf{k}n} \left(-i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^c - \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{-i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^f} \right) c_{\mathbf{k}n} + \bar{f}'_{\mathbf{k}n} (-i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^f) f'_{\mathbf{k}n} \right], \\ &\equiv \mathcal{S}[\bar{c}, c] + \mathcal{S}[\bar{f}', f']. \end{aligned} \quad (\text{F.59})$$

Notemos que a parte da ação com os férmions f' corresponde a uma ação livre (veja a Eq. (F.45)), logo podemos efetuar a integração sobre as variáveis $\bar{f}'$ e f' . Assim, podemos escrever que

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}(\bar{c}, c) e^{-\mathcal{S}_{\text{eff}}[\bar{c}, c]}, \quad (\text{F.60})$$

¹⁰ Essa transformação é obtida exigindo que a ação fique da forma $\mathcal{S} = \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} [\bar{c}_{\mathbf{k}n} (-i\omega_n + E_{\mathbf{k}n}) c_{\mathbf{k}n} + \bar{f}'_{\mathbf{k}n} (-i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}}^f) f'_{\mathbf{k}n}]$, com $\bar{f}'_{\mathbf{k}n} = A\bar{c}_{\mathbf{k}n} + \bar{f}_{\mathbf{k}n}$ e $f'_{\mathbf{k}n} = Bc_{\mathbf{k}n} + f_{\mathbf{k}n}$. $E_{\mathbf{k}n}$, A e B são quantidades a serem determinadas.

com

$$\mathcal{S}_{\text{eff}}[\bar{c}, c] = \mathcal{S}[\bar{c}, c] - \ln \mathcal{Z}_0^f, \quad (\text{F.61})$$

onde $\mathcal{Z}_0^f$ é a função de partição não interagente para os férmions f' (ver a Eq. (F.48)). A função de Green para os férmions c pode ser obtida diretamente de (F.49). Efetuando a integração obtemos:

$$G_{cc}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}^c - \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}^f}}, \quad (\text{F.62})$$

que depois da continuação analítica, $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$, se torna o resultado em (F.54).

Comparar neste estágio o método de integrais de caminho com a simples inversão matricial feita inicialmente pode passar a ideia de que estamos “complicando o problema”. Porém, o método baseado em integrais de caminho fornece uma expressão formal para a função de Green, mesmo nos casos onde temos muitas “espécies” de férmions e não conseguimos inverter a matriz $(\omega - H)$.

APÊNDICE G – Derivação da resposta Raman eletrônica

Neste apêndice deduzido a expressão da resposta Raman na Eq. (7.25).

No eixo de frequências de Matsubara temos a seguinte expressão para uma função resposta geral [9]

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}, i\Omega_m) = \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_m \tau} \tilde{\chi}(\mathbf{q}, \tau), \quad (\text{G.1})$$

onde $\tilde{\chi}(\mathbf{q}, \tau) = -\langle T_\tau \mathcal{O}(\mathbf{q}, \tau) \mathcal{O}(-\mathbf{q}, 0) \rangle$, com T_τ sendo o operador de ordenamento temporal (tempo imaginário), é o operador que contém informação sobre a perturbação fonte; no caso da condutividade óptica trata-se do operador corrente [9]. Na expressão acima tanto $\mathbf{q}$ quanto Ω_m são quantidades bosônicas, isto é, $\Omega_m = \frac{2m\pi}{\beta}$. De maneira geral o operador $\mathcal{O}$ pode ser escrito da seguinte forma [200, 235]

$$\mathcal{O}(\mathbf{q}) \equiv \sum_{n, \mathbf{p}} \Gamma_{n\mathbf{p}} \Psi_{n\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger \Psi_{n\mathbf{p}}, \quad (\text{G.2})$$

onde n indexa os elementos de uma dada base, por exemplo, a base onde o Hamiltoniano (7.17) é escrito, e $\Gamma_{n\mathbf{p}}$ são os elementos da matriz de vértice (para o caso da resposta Raman veja as Eq's. (7.28) e (7.27)). Note que o índice de spin foi omitido na Eq. (G.2); porém sem perda de generalidade no cálculo que se segue.

Dado que estamos interessados em sistemas de elétrons interagentes, o cálculo do correlator em (G.1) não é uma tarefa fácil. Para contornar esse problema lançamos mão de uma abordagem perturbativa. Considerando a expansão perturbativa da Fig. 46, a Eq. (G.1) torna-se [119]

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}(\mathbf{q}, i\Omega_m) = & - \sum_{n, n', \mathbf{p}} \Gamma_{n\mathbf{p}} \Gamma_{n'\mathbf{p}+\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_m \tau} \mathcal{G}_{n'n}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, -\tau) \mathcal{G}_{nn'}(\mathbf{p}, \tau) \\ & + (\text{vértice correc.}), \end{aligned} \quad (\text{G.3})$$

onde $\mathcal{G}_{nn'}(\mathbf{p}, \tau) = -\langle T_\tau \Psi_{n\mathbf{p}}(\tau) \Psi_{n'\mathbf{p}}^\dagger(0) \rangle$ é a função de Green interagente. Tomando a transformada de Fourier do produto de duas funções calculadas em pontos opostos,

$$\begin{aligned} \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_m \tau} \mathcal{G}_{n'n}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, -\tau) \mathcal{G}_{nn'}(\mathbf{p}, \tau) &= \frac{1}{\beta^2} \sum_{i\nu, i\nu'} \mathcal{G}_{n'n}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\nu) \mathcal{G}_{nn'}(\mathbf{p}, i\nu') \\ &\quad \times \underbrace{\int_0^\beta d\tau e^{i(\Omega_m + \nu - \nu')\tau}}_{=\beta \delta_{\nu', \nu + \Omega_m}} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu} \mathcal{G}_{n'n}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\nu) \mathcal{G}_{nn'}(\mathbf{p}, i\Omega_m + i\nu), \end{aligned} \quad (\text{G.4})$$

e usando a relação padrão [9, 232]

$$\mathcal{G}_{nn'}(\mathbf{p}, i\Omega_m) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\mathcal{A}_{nn'}(\mathbf{p}, \omega')}{i\Omega_m - \omega'}, \quad (\text{G.5})$$

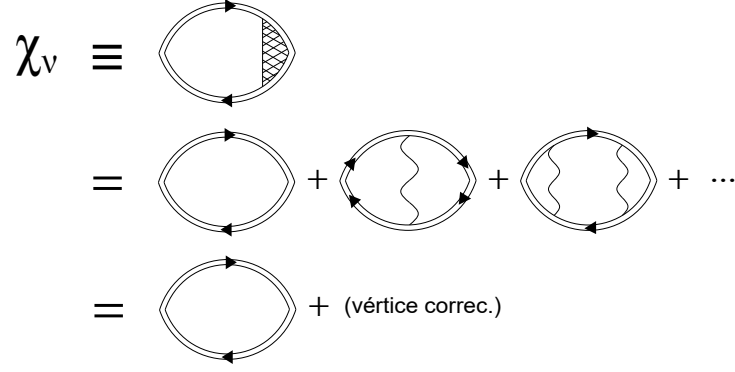


Figura 46 – Decomposição diagramática de *ladder* para a resposta Raman [119, 200, 235]. Nos diagramas a linha dupla representa a função de Green eletrônica interagente e a linha ondulada a interação elétron-elétron.

sendo $\mathcal{A}_{nn'}(\mathbf{p}, \omega')$ a função espectral, ficamos com

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q} \rightarrow 0, i\Omega_m) = - \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu} \sum_{n, n', \mathbf{p}} \Gamma_{n\mathbf{p}} \Gamma_{n'\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' d\omega'' \frac{\mathcal{A}_{nn'}(\mathbf{p}, \omega')}{i(\nu + \Omega_m) - \omega'} \frac{\mathcal{A}_{n'n}(\mathbf{p}, \omega'')}{i\nu - \omega''}, \quad (\text{G.6})$$

onde ν é a frequência de Matsubara fermiônica. Agora é preciso calcular a soma de Matsubara acima. Mesmo este tipo de cálculo sendo padrão, opto por na seção abaixo fazer uma pequena revisão de como lidar com este tipo de soma.

G.1 Soma de Matsubara

Consideremos a seguinte soma (logo se mostrará útil)

$$S(\tau) \equiv \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_m} g(i\omega_m) e^{i\omega_m \tau}, \quad (\text{G.7})$$

onde $\omega_m = \frac{(2m+1)\pi}{\beta}$ (férmions) e $g(i\omega_m)$ é uma função de interesse. Consideremos agora a seguinte integral no plano complexo

$$\oint_C dz \frac{g(z) e^{z\tau}}{e^{\beta z} + 1}. \quad (\text{G.8})$$

Se a função $g(z)$ é analítica no caminho C os pólos do integrando acima são os pólos da função $\frac{1}{e^{\beta z} + 1}$, isto é, $z_n = i \frac{(2n+1)\pi}{\beta} = i\omega_n$. Assim, o teorema dos resíduos aplicado a um caminho C que engloba todos os pólos garante que

$$\begin{aligned} \oint_C dz \frac{g(z) e^{z\tau}}{e^{\beta z} + 1} &= 2\pi i \sum_{\text{pólos}} \text{Resíduo}(\text{polo}), \\ &= 2\pi i \sum_{i\omega_n} \text{Resíduo}(i\omega_n), \\ &= -\frac{2\pi i}{\beta} \sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau}, \\ &= -2\pi i S(\tau), \end{aligned} \quad (\text{G.9})$$

onde foi usado que $\text{Resíduo}(i\omega_n) = -\frac{g(i\omega_n)}{\beta} e^{i\omega_n \tau}$ visto que $\{i\omega_n\}$ são pólos simples.

Admitiremos agora a seguinte forma para a função $g(z)$

$$g(z) = \prod_j \frac{1}{z - z_j}, \quad (\text{G.10})$$

onde os pólos $\{z_j\}$ são pólos simples e finitos. Escolhendo o caminho $C_\infty = \lim_{R \rightarrow \infty} R e^{i\theta}$ temos

$$\begin{aligned} \frac{g(z)e^{z\tau}}{e^{\beta z} + 1} \Big|_{C_\infty} &= \lim_{R \rightarrow \infty} g(R e^{i\theta}) \frac{e^{R\tau \cos \theta} e^{iR\tau \sin \theta}}{1 + e^{R\beta \cos \theta} e^{iR\beta \sin \theta}}, \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \prod_j \frac{1}{R \cos \theta - \underbrace{\text{Re}(z_j)}_{\text{finito}} + i(\underbrace{R \sin \theta - \text{Im}(z_j)}_{\text{finito}})} e^{R(\tau - \beta) \cos \theta} e^{iR(\tau - \beta) \sin \theta}, \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \prod_j \frac{1}{R e^{i\theta}} e^{R(\tau - \beta) \cos \theta} e^{iR(\tau - \beta) \sin \theta}, \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{G.11})$$

Assim,

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_C dz \frac{g(z)e^{z\tau}}{e^{\beta z} + 1} = 2\pi i \sum_{\text{pólos}} \text{Resíduo}(\text{polo}), \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} + \sum_j \frac{e^{z_j \tau}}{e^{z_j \beta} + 1} \prod_{i \neq j} \frac{1}{z_j - z_i}. \end{aligned} \quad (\text{G.12})$$

Agora usaremos o resultado acima para efetuar a soma na Eq. (G.6). A soma pode ser reescrita da forma

$$\sum_{i\nu} \frac{1}{i(\nu + \Omega_m) - \omega'} \frac{1}{i\nu - \omega''} = \sum_{i\nu} \frac{1}{i\nu - y_1} \frac{1}{i\nu - y_2}, \quad (\text{G.13})$$

com $y_1 \equiv -i\Omega_m + \omega'$ e $y_2 \equiv \omega''$. A soma acima é da mesma forma que a soma na Eq. (G.12) mas com $\tau \rightarrow 0$. Portanto

$$\begin{aligned} \sum_{i\nu} \frac{1}{i\nu - y_1} \frac{1}{i\nu - y_2} &= \frac{\beta}{y_1 - y_2} \left[\frac{1}{e^{\beta y_1} + 1} - \frac{1}{e^{\beta y_2} + 1} \right], \\ &= \frac{\beta}{-i\Omega_m + \omega' - \omega''} \left[\frac{1}{\underbrace{e^{-i\beta\Omega_m}}_{=+1} e^{\beta\omega'} + 1} - \frac{1}{e^{\beta\omega''} + 1} \right], \\ &= \frac{\beta}{-i\Omega_m + \omega' - \omega''} [n_F(\omega') - n_F(\omega'')]. \end{aligned} \quad (\text{G.14})$$

Usando o resultado acima e fazendo a continuação analítica, $i\Omega_m \rightarrow \Omega + i0^+$, a Eq.(G.6) torna-se

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \Omega) = - \sum_{n, n', \mathbf{p}} \Gamma_{n\mathbf{p}} \Gamma_{n'\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' d\omega'' \frac{[n_F(\omega'') - n_F(\omega')]}{\Omega + \omega'' - \omega' + i0^+} \mathcal{A}_{nn'}(\mathbf{p}, \omega') \mathcal{A}_{n'n}(\mathbf{p}, \omega''). \quad (\text{G.15})$$

Tomando a parte imaginária da equação acima e em seguida usando que $\pi\delta(\Omega + \omega'' - \omega') = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{\eta^2 + (\Omega + \omega'' - \omega')^2}$, obteremos no limite de temperatura nula, $n_F(\omega) = \theta(-\omega)$,

$$\chi(\Omega) \equiv \text{Im} \tilde{\chi}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \Omega) = \sum_{n, n', \mathbf{p}} \Gamma_{n\mathbf{p}} \Gamma_{n'\mathbf{p}} \int_{-\Omega}^0 d\omega' \mathcal{A}_{nn'}(\mathbf{p}, \omega') \mathcal{A}_{n'n}(\mathbf{p}, \omega' + \Omega) \quad (\text{G.16})$$

$$= \sum_{\mathbf{p} \in \text{BZ}} \int_{-\Omega}^0 d\omega' \text{Tr}[\Gamma_{\mathbf{p}} \mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega') \Gamma_{\mathbf{p}} \mathcal{A}(\mathbf{p}, \omega' + \Omega)]. \quad (\text{G.17})$$

Por fim, após normalizar a expressão acima com respeito ao número de estados $\mathcal{N}$ na BZ, obteremos o resultado na Eq. (7.25).

G.2 Resolvendo (alternativamente) o modelo (7.37)

Usando a Eq. (7.16) podemos reescrever o hamiltoniano (7.37) como

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{p} \in \text{rBZ}} \Phi_{\mathbf{p}}^{\dagger} \mathbf{H}(\mathbf{p}) \Phi_{\mathbf{p}}, \quad (\text{G.18})$$

onde $\Phi_{\mathbf{p}}^{\dagger} \equiv (\Psi_{\mathbf{p}}^{(c)\dagger}, \Psi_{\mathbf{p}}^{(f)\dagger})$, com

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{(c)\dagger} \equiv (c_{\mathbf{p}}^{\dagger}, c_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}_x}^{\dagger}, c_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}_x}^{\dagger}, \dots, c_{\mathbf{p}+3\mathbf{Q}_x+3\mathbf{Q}_y}^{\dagger}), \quad (\text{G.19})$$

o mesmo spinor $\Psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ que no caso com apenas CDW, e

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{(f)\dagger} \equiv (f_{\mathbf{p}}^{\dagger}, f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}_x}^{\dagger}, f_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}_x}^{\dagger}, \dots, f_{\mathbf{p}+3\mathbf{Q}_x+3\mathbf{Q}_y}^{\dagger}). \quad (\text{G.20})$$

A matriz $\mathbf{H}(\mathbf{p})$ em (G.18) é uma matriz 32×32 por construção, na forma de bloco

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}(\mathbf{p}) & \Lambda_{\mathbf{p}}^* \\ \Lambda_{\mathbf{p}} & \mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f \end{pmatrix}, \quad (\text{G.21})$$

onde $\mathcal{H}(\mathbf{p})$ é nossa matriz CDW 16×16 inicial, dada na Eq. (7.18), e $\Lambda_{\mathbf{p}}$ e $\mathcal{H}_{\mathbf{p}}^f$ são duas matrizes diagonais 16×16 (veja o texto principal) representando o acoplamento PG e o hamiltoniano não-interagente para os férmions $f_{\mathbf{k}}$, respectivamente.

A partir da matriz (G.21) podemos obter a função de Green e, consequentemente, a função espectral

$$\mathbf{A}(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{(\omega + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}(\mathbf{p})}, \quad (\text{G.22})$$

onde agora $\mathbf{A}(\mathbf{p}, \omega)$ é uma matriz 32×32 . Como foi feito para o caso com apenas CDW, podemos relaxar a condição $\mathbf{p} \in \text{rBZ}$ depois da inversão matricial. A função de Green que descreve a coexistência CDW-PG é aquela, por construção, que vem dos férmions $c_{\mathbf{k}}$. Assim, temos que esta função de Green é simplesmente

$$\mathbf{A}^{(c)}(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{A}_{11}(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{G.23})$$

onde, não custa repetir, $\mathbf{k} \in \text{BZ}$.

A resposta Raman é obtida ainda usando a Eq. (7.25), com a função espectral em (G.22), mas agora a matriz de vértice fica

$$\Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu \text{CDW}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (\text{G.24})$$

onde $\Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu \text{CDW}}$ é a matriz 16×16 em (7.26), e $\mathbf{0}$ é a matriz nula 16×16 . Esta redefinição de $\Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu}$ é necessária, pois precisamos considerar apenas os férmions $c_{\mathbf{k}}$.

Apesar do método acima parecer ser mais custoso computacionalmente do que o método exposto no texto principal, pois agora precisaremos inverter uma matriz 32×32 , os dois métodos terminam o cálculo efetivamente no mesmo tempo. Isto porque enquanto um método precisa fazer uma (para cada ponto $(\omega, \mathbf{p})$) inversão matricial de uma matrix 32×32 , o outro precisa fazer duas inversões matriciais envolvendo uma matriz 16×16 . Assim, os dois métodos são equivalentes em todos os sentidos. Mas, o método baseado em integrais de caminho possui a grande vantagem, do ponto de vista de interpretação da física, de nos fornecer uma expressão formal para a função de Green do sistema, na qual vemos claramente a contribuição da fase CDW e da fase PG. Isto, como mencionado no texto principal, permite-nos incorporar diretamente a informação sobre outras fases, como, por exemplo, a PDW e a SC.