

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

Julia Oliveira Santos

**EXPLORANDO FASES EM ÓXIDOS DE COBRE:
ajustes de dados numéricos em investigação de
supercondutividade**

Belo Horizonte
2024

Julia Oliveira Santos

**EXPLORANDO FASES EM ÓXIDOS DE COBRE:
ajustes de dados numéricos em investigação de
supercondutividade**

Dissertação 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 Mestre em Ciências.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Belo Horizonte

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S237e Santos, Julia Oliveira.

Explorando fases em óxidos de cobre: ajustes de dados numéricos em investigação de supercondutividade / Julia Oliveira Santos. – 2024.
52 f. : il.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.

Bibliografia: f. 49 -52.

1. Supercondutividade. 2. Interações fortes. I. Título. II. Aguiar, Maria Carolina de Oliveira. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 537.312.62 (043)



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

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente dissertação, intitulada "**Explorando Fases em Óxidos de Cobre: Ajustes de Dados Numéricos em Investigação de Supercondutividade**" de autoria de **JULIA OLIVEIRA SANTOS** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA**, em vinte e sete de setembro de 2024.

Belo Horizonte, 27 de setembro de 2024.

Profa. Maria Carolina de Oliveira Aguiar
Orientadora da estudante
Departamento de Física/UFMG

Prof. Edmar Avellar Soares
Departamento de Física/UFMG

Prof. Mario Sérgio Carvalho Mazzoni
Departamento de Física/UFMG



Documento assinado eletronicamente por **Maria Carolina de Oliveira Aguiar, Professora do Magistério Superior**, em 27/09/2024, às 15:37, 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 **Edmar Avellar Soares, Professor do Magistério Superior**, em 27/09/2024, às 19:01, 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 **Mario Sergio de Carvalho Mazzoni, Membro**, em 29/09/2024, às 20:00, 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 **3588831** e o código CRC **04B4F13B**.

Aos meus adorados pais, Mirai Ribeiro Santos e Isabel Rosa Oliveira, cujos incansáveis esforços e apoio incondicional foram os fundamentos que sustentaram minha jornada e tornaram possível a realização desta conquista.

AGRADECIMENTOS

Agradeço profundamente à Carol por sua orientação, dedicação, apoio e incentivo essenciais para a realização deste trabalho. Sou imensamente grata não apenas pelo conhecimento em física que ela compartilhou, mas também pelo cuidado e suporte que me ofereceu ao longo de todo o processo.

Agradeço aos professores que fizeram parte desta trajetória, em especial a Mario Sérgio Mazzoni, que foi essencial no primeiro semestre, e a Walber Hugo de Brito, por tantos ensinamentos em física de muitos corpos. Minha gratidão também se estende a Helena, pela colaboração e pelas valiosas sugestões para a melhoria do trabalho, assim como pelos dados fornecidos de TCMDC.

Agradeço aos meus colegas de laboratório pela convivência agradável e pelos momentos de discussão de física, concentração e reflexões sobre o futuro, que foram fundamentais para o meu desenvolvimento profissional. Em especial, sou grata à Maria por compartilhar comigo tanto os momentos felizes quanto os angustiantes ao longo dessa jornada.

Agradeço aos meus amigos que conheci durante esta jornada. Sou grata a Luana, Taynara e Bárbara, cuja presença foi essencial para tornar tudo mais leve. Em especial, minha eterna gratidão vai para o Guilherme, pelos momentos compartilhados na salinha de física e no bar, e pelo apoio constante ao longo do processo. Só nós sabemos o quanto nos ajudamos nessa caminhada.

Agradeço profundamente às minhas amigas de longa data, fundamentais em minha vida que sempre renovam minha energia durante as férias. Um agradecimento especial à Clara, com quem tive a sorte de compartilhar esta jornada em Belo Horizonte, e à Luane, que sempre me ouviu com tanto cuidado e atenção.

Agradeço ao meu companheiro de vida, Mateus, por ser meu suporte constante, pela paciência e confiança que sempre deposita em mim, e por tornar os momentos mais difíceis mais leves de enfrentar.

Agradeço aos meus pais, a razão pela qual fiz e continuo fazendo pesquisa. Eles fazem o possível e o impossível para apoiar minha trajetória. Agradeço ao meu pai, Mirai, por confiar tanto na minha capacidade, e à minha mãe, Isabel, por todo o amparo e orações que me sustentam, mesmo estando longe deles. Agradeço também à minha irmã, Beatriz, pelo apoio incondicional e pelo amor que sempre me dedicou.

Por último, expresso minha gratidão às agências de fomento CNPq, FAPEMIG e CAPES pelo suporte financeiro que foi crucial para o desenvolvimento deste trabalho.

RESUMO

Nesta dissertação investigamos a supercondutividade em sistemas fortemente correlacionados, com o foco específico nos óxidos de cobre, conhecidos como cupratos. Esses materiais exibem uma variedade de fases emergentes, ao variarmos parâmetros como temperatura, dopagem, pressão. Além da fase supercondutora, outras fases, como a *pseudogap*, permanecem pouco compreendidas. A fase *pseudogap* é caracterizada por uma supressão do peso espectral em certas direções no espaço de momento. Compreender essa fase é fundamental para entender a supercondutividade, pois se acredita que haja assinaturas da fase supercondutora na fase *pseudogap*.

O modelo de Hubbard é utilizado para descrever sistemas fortemente correlacionados, uma vez que descreve bem a competição entre a energia cinética e a interação de Coulomb dos elétrons. Acredita-se que muito se pode aprender sobre os cupratos considerando o modelo de Hubbard em duas dimensões espaciais, correspondendo aos planos de cobre e oxigênio, na presença de dopagem, advinda dos demais átomos. No entanto, o modelo não possui solução exata em duas dimensões, exigindo o uso de método numérico para sua resolução. Em trabalhos anteriores do grupo, o modelo foi resolvido numericamente sem considerar supercondutividade via extensões da Teoria de Campo Médio Dinâmico (TCMD). Esta técnica mapeia o modelo de Hubbard no problema de impurezas de Anderson, simplificando a resolução. Os resultados obtidos revelaram duas fases metálicas distintas, a convencional e a *pseudogap*, à medida que a dopagem do sistema variava.

O objetivo desta dissertação é verificar se as fases metálicas distintas citadas acima originam diferentes fases supercondutoras. Para isso, um termo de formação de pares de elétrons foi adicionado ao hamiltoniano e novos resultados numéricos de TCMD foram obtidos. Esses resultados são de difícil compreensão; para analisá-los, utilizamos um modelo fenomenológico que descreve a dinâmica do elétron em baixas energias. Construímos um código que ajusta, de forma simultânea, as curvas de TCMD para as partes real e imaginária das autoenergias normal e anômala ao modelo fenomenológico para cada valor de dopagem, permitindo a análise dos parâmetros do modelo partindo das diferentes regiões metálicas. Nossos resultados preliminares mostram flutuações desses parâmetros ao variarmos a dopagem, sugerindo que seria desejável a obtenção de resultados de TCMD mais precisos, o que encontra-se em andamento, para que então novos ajustes ao modelo fenomenológico sejam realizados.

Palavras-chave: Interações fortes, supercondutividade, fase *pseudogap*.

ABSTRACT

In this dissertation we investigate superconductivity in strongly correlated systems, with a specific focus on copper oxides, known as cuprates. These materials exhibit a variety of emerging phases as we vary parameters such as temperature, doping, and pressure. In addition to the superconducting phase, other phases, such as the pseudogap, remain poorly understood. The pseudogap phase is characterized by a suppression of spectral weight in certain directions in momentum space. Understanding this phase is fundamental to understanding superconductivity, as it is believed that there are signatures of the superconducting phase in the pseudogap phase.

The Hubbard model is used to describe strongly correlated systems, as it well describes the competition between the kinetic energy and the Coulomb interaction of electrons. It is believed that much can be learned about cuprates considering the Hubbard model in two spatial dimensions, corresponding to the planes of copper and oxygen, in the presence of doping, arising from the other atoms. However, the model does not have an exact solution in two dimensions, requiring the use of a numerical method for its resolution. In previous work by the group, the model was solved numerically without considering superconductivity via extensions of Dynamical Mean Field Theory (DMFT). This technique maps the Hubbard model onto the Anderson impurity problem, simplifying the resolution. The results obtained revealed two distinct metallic phases, conventional and pseudogap, as the system doping varied.

The objective of this dissertation is to verify whether the different metallic phases mentioned above give rise to different superconducting phases. For this, an electron pair formation term was added to the Hamiltonian and new numerical DMFT results were obtained. These results are difficult to understand; to analyze them, we use a phenomenological model that describes electron dynamics at low energies. We built a code that simultaneously adjusts the DMFT curves for the real and imaginary parts of the normal and anomalous self-energies to the phenomenological model for each doping value, allowing the analysis of the model parameters starting from the different metallic regions. Our preliminary results show fluctuations in these parameters when we vary the doping, suggesting that it would be desirable to obtain more accurate DMFT results, which is in progress, so that new adjustments to the phenomenological model can be made.

Keywords: Strong interactions, superconductivity, pseudogap phase.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	SUPERCONDUTIVIDADE	14
2.1	Supercondutividade Convencional	16
2.1.1	Hamiltoniano BCS	17
2.2	Supercondutividade não Convencional	19
2.2.1	Supercondutividade em Cupratos	19
2.3	Motivações experimentais	21
2.4	Motivação Teórica	25
3	MODELO DE HUBBARD E TEORIA DO CAMPO MÉDIO DINÂMICO	27
3.1	Modelo de Hubbard	27
3.2	Teoria do Campo Médio Dinâmico	27
3.2.1	Teoria de Campo Médio	28
3.2.2	Teoria de Campo Médio Dinâmico	29
3.2.3	Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular	31
3.3	Modelo Fenomenológico	34
4	RESULTADOS	38
4.1	Testes Iniciais	38
4.2	Ajuste simultâneo das quatro curvas	39
4.2.1	Analisando os ajustes em diferentes dopagens	40
4.3	Analisando os parâmetros do modelo fenomenológico	43
5	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	47
	REFERÊNCIAS	49

1 Introdução

Embora constituídos por muitas partículas, diversos sistemas são bem descritos por modelos de partículas únicas; nesses casos as interações entre as partículas são colocadas no hamiltoniano através de um potencial efetivo. No entanto, em alguns sistemas é necessário considerar a interação entre as partículas de forma mais precisa, sendo estes conhecidos como sistemas fortemente correlacionados. Materiais que apresentam essas características geralmente são aqueles que possuem orbitais d e f semipreenchidos, por exemplo, óxidos de metais de transição, ligas intermetálicas e actínidos. Nesses materiais, as propriedades físicas não são descritas por teorias que se baseiam na aproximação de partícula única, pois propriedades emergentes advêm da forte correlação eletrônica. Algumas dessas propriedades é transição metal-isolante, supercondutividade não convencional, férmions pesados, entre outras.

O objetivo geral desta dissertação é investigar supercondutividade em sistemas fortemente correlacionados, em específico nos óxidos de cobre, que possuem diversas fases não muito bem compreendidas além da fase supercondutora. Nesta introdução discorreremos brevemente sobre a diversidade de fases desses materiais e o modelo que descreve bem sistemas fortemente correlacionados. Resultados numéricos obtidos anteriormente pelo grupo de pesquisa também serão apresentados nesta seção.

Os óxidos de cobre são materiais que têm em sua composição várias camadas de cobre e oxigênio (CuO_2), separadas por camadas contendo átomos como, por exemplo, o Ba, Sr, La e outros, que servem como reservatórios de carga. Esses materiais são nomeados como cupratos e dispõem de diversas transições de fases e propriedades emergentes advindas da forte interação entre os elétrons. O motivo para a transição de fase pode estar relacionado a diversos fatores, como, por exemplo, variação da temperatura, pressão, dopagem. Na Fig. 1 observamos o diagrama de fases esquemático dos óxidos de cobre em relação à dopagem e temperatura.

O diagrama mencionado acima mostra as fases dos cupratos à medida que o dopamos. A parte em cinza corresponde a um isolante de Mott (MI). Essa fase se dá devido à interação de Coulomb entre os elétrons, ou seja, a interação Coulombiana é superior à energia cinética dos elétrons, resultando em uma fase isolante devido ao caráter localizado dos mesmos. À medida que se dopa esse isolante, encontra-se a fase supercondutora (SC), região em amarelo na figura, na qual há evidência de que os elétrons agrupam-se em pares. Essa região desperta um grande interesse em pesquisa para fins tecnológicos, devido à alta temperatura crítica (pode chegar a ser da ordem de 180 K) dos cupratos supercondutores. Além do interesse em aplicações, esta fase ainda não é bem compreendida, já que a

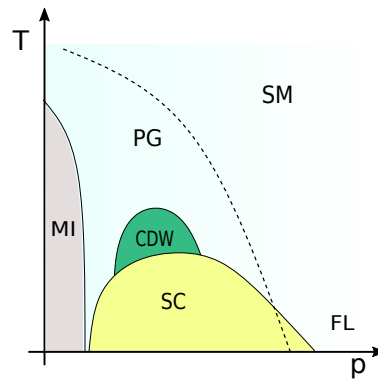


Figura 1 – Diagrama de fases esquemático temperatura em função da dopagem para os cupratos. As siglas para as diferentes fases são explicadas no texto.

formação dos pares de elétrons nesses materiais não é explicada pela teoria que descreve a supercondutividade convencional, conhecida como Teoria BCS. Na teoria BCS, a interação atrativa entre elétrons é mediada pelas vibrações da rede cristalina, ou seja, pelos fônons. No entanto, nos supercondutores não convencionais o mecanismo de formação dos pares de elétrons permanece desconhecido. Acredita-se que a ordem magnética e as fortes interações antiferromagnéticas estejam relacionadas ao mecanismo de emparelhamento de elétrons nesses materiais. Algumas teorias sugerem que esse emparelhamento pode estar associado a flutuações de spin. Mais informações podem ser encontradas nas referências [1, 2].

A região em verde na Fig. 1 representa uma fase com ordenamento de carga (CDW, do inglês *charge density wave*). Nessa fase, ao dopar o isolante de Mott e para uma certa região de temperatura acima da fase SC, os elétrons se rearranjam em uma distribuição periódica de carga. Acima da fase CDW se nota a fase *pseudogap* (PG), em que há uma supressão de peso espectral no nível de Fermi em algumas direções do espaço de momento. A fase *pseudogap* também se trata de uma fase não muito bem entendida. Para baixas temperaturas e alta dopagem, tem-se a fase metálica convencional, descrita pela teoria de Líquido de Fermi (FL). Por fim, para altas temperaturas e alta dopagem tem-se a fase de metais estranhos (SM), que não são descritos pela teoria de metais usuais.

O interessante nesses materiais é que acredita-se que toda a física emergente é advinda dos planos de cobre e oxigênio. Assim, acredita-se que as diferentes fases desses materiais podem ser descritas considerando um modelo bidimensional, representando os planos de cobre e oxigênio. O modelo de Hubbard é uma abordagem simples e eficaz, capaz de descrever a competição entre a energia cinética dos elétrons e a interação Coulombiana quando há dois elétrons no mesmo sítio. Contudo, a solução exata para este modelo só se dá em uma dimensão; para os casos bidimensionais ou tridimensionais, a solução não é trivial e requer a utilização de métodos numéricos.

Uma das técnicas eficientes para resolver modelos fortemente correlacionados, como o modelo bidimensional de Hubbard, é a Teoria de Campo Médio Dinâmico (TCMD). A

teoria tem por finalidade mapear um problema com muitos graus de liberdade em um problema de uma impureza de Anderson, facilitando assim a resolução do modelo de Hubbard, uma vez que o problema de uma impureza de Anderson é bem compreendido na literatura.

Em um trabalho anterior do grupo [3], foi resolvido numericamente o modelo de Hubbard bidimensional sem supercondutividade, revelando duas fases metálicas distintas: a fase convencional e a fase *pseudogap*. Obter respostas sobre essas fases contribui para a compreensão da diversidade de fases dos óxidos de cobre.

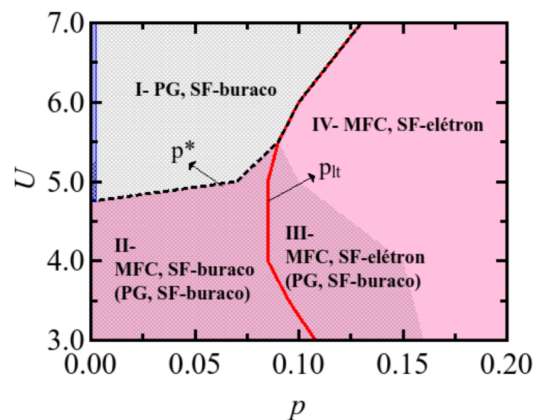


Figura 2 – Diagrama de fases $U \times p$ do modelo de Hubbard bidimensional. A fase em rosa representa um metal fortemente correlacionado (MFC) e a região em cinza é a fase *pseudogap* (PG). O trabalho considera *hopping* $t = 1$ entre primeiros sítios vizinhos e $t' = -0.1$ entre segundos vizinhos. Diagrama obtido na Ref. [3].

A Fig. 2 mostra um dos resultados do trabalho do nosso grupo, em que são estudadas as diferentes fases normais (sem supercondutividade) do modelo de Hubbard bidimensional. O diagrama apresentado é da interação elétron-elétron U em função da dopagem p . Notam-se algumas regiões distintas à medida que se dopa o material. A região sem dopagem, dada pela linha em azul, representa um isolante de Mott. A partir do momento em que se começa a dopar o material, surge uma nova fase na região II, sendo essa uma fase metálica com superfície de Fermi do tipo buraco.¹ Ao aumentar a interação elétron-elétron (de $U = 5.0$ até 7.0), para pequenas dopagens, surge uma fase denominada *pseudogap* (região I), que desperta curiosidade, pois nessa fase, em certas regiões do espaço de momento, observamos um comportamento de um isolante e, em outras, de um metal. Por fim, à medida que se aumenta a dopagem é possível perceber uma fase metálica com superfície de Fermi do tipo elétron regiões (III e IV). Nota-se também, para valores

¹ Pela teoria do líquido de Fermi, as excitações de um sistema interagente são mapeadas nas excitações de um sistema não interagente de quase partículas, que apresentam energias renormalizadas pela interação. A topologia da superfície de Fermi depende do sinal dessa energia renormalizada em $\vec{k} = (0, \pi)$: a topologia será do tipo buraco (elétron) se essa energia for negativa (positiva) [3].

menores de U , nas regiões II e III, uma coexistência entre um metal convencional (MFC)² e uma fase *pseudogap* de energia um pouco mais alta.

O trabalho citado acima encontrou duas fases metálicas distintas, a convencional e a *pseudogap*. Tendo como base esse estudo, o objetivo principal desta dissertação é concluir se as duas fases metálicas encontradas dão origem a duas fases supercondutoras diferentes ou não.

Os resultados obtidos anteriormente não consideram a fase supercondutora dos cupratos. Para investigar essa fase, é necessário adicionar um termo de formação de pares no Hamiltoniano do modelo, para “ligar a supercondutividade”. Além disso, é preciso usar uma extensão da TCMD na qual o problema da rede é mapeado em um conjunto de sítios interagentes, considerando efeitos de correlações não locais.

Os resultados numéricos para a fase supercondutora foram obtidos anteriormente, mas sua análise é desafiadora. Nesta dissertação, essa análise foi realizada ao se ajustar as funções de Green encontradas numericamente a uma expressão analítica de um modelo fenomenológico [4]. Esse modelo descreve bem os resultados numéricos obtidos por TCMD e visa descrever a dinâmica dos elétrons em baixa energia. O ajuste foi feito para as soluções supercondutoras encontradas derivadas da fase convencional e da fase *pseudogap*.

Esta dissertação está dividida em três capítulos: o primeiro capítulo contém uma revisão bibliográfica, o segundo capítulo a metodologia utilizada para a resolução do modelo de Hubbard e o modelo fenomenológico utilizado nos ajustes, por fim há um capítulo com a discussão dos resultados. Abaixo descrevemos com um pouco mais de detalhes o conteúdo de cada capítulo.

- O capítulo 1 é dedicado à revisão bibliográfica sobre supercondutividade. Inicialmente, fazemos uma breve discussão sobre supercondutores convencionais, abordando a Teoria BCS. Em seguida, discutimos a distinção entre esses supercondutores e os não convencionais, com foco na supercondutividade dos óxidos de cobre. Apresentamos também as motivações experimentais e teóricas para o estudo dos cupratos.
- No capítulo 2 discutimos brevemente o modelo de Hubbard sem supercondutividade e abordamos o método de resolução utilizado (TCMD) para este modelo. Além disso, exploramos o modelo de Hubbard com o termo adicional para a formação de pares de elétrons, mencionando brevemente a extensão de TCMD utilizada para resolver este caso. Também discutimos a resolução do problema de Anderson de uma impureza por meio da diagonalização exata.
- O capítulo 3 aborda os resultados obtidos dos ajustes dos dados de TCMD com o modelo fenomenológico à medida em que variamos a dopagem do sistema.

² O MFC é descrito pela teoria do líquido de Fermi e assim corresponde à fase FL no diagrama da Fig. 1.

Para completar este trabalho, apresentamos as conclusões e futuras perspectivas de estudo para as fases dos óxidos de cobre.

2 Supercondutividade

Em 1911, Heike Kamerlingh Onnes e sua equipe observaram supercondutividade em materiais a baixas temperaturas [5]. Naquela época, não se sabia exatamente o que estava acontecendo, mas a liquefação do Hélio possibilitou experimentos a temperaturas em torno de 4 K, permitindo a observação do comportamento da resistência em alguns materiais, como, por exemplo, o Mercúrio [6]. Notou-se que, abaixo de uma certa temperatura crítica, a sua resistência caía abruptamente, passando de um estado metálico para um estado supercondutor.

Além do comportamento da resistência, outras características evidenciam a supercondutividade em determinados materiais, como o efeito Meissner. Por este fenômeno campos magnéticos externos fracos são expelidos por um supercondutor, resultando em um campo nulo em seu interior. Um esquema desse efeito pode ser observado na Fig. 3, onde inicialmente tem-se um material em um estado normal e, quando se diminui a temperatura e se aplica um campo externo, nota-se o diamagnetismo ideal de um supercondutor.

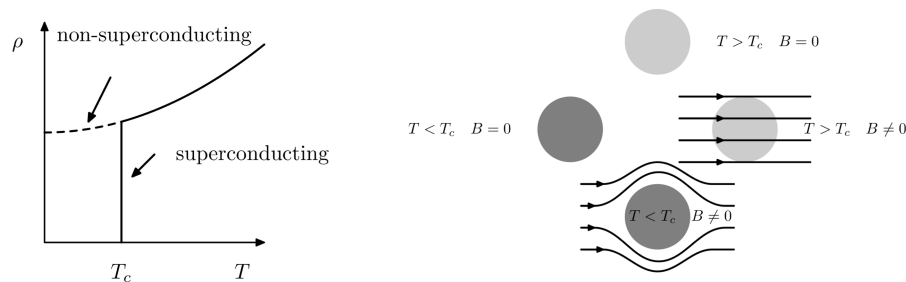


Figura 3 – A figura à esquerda mostra como a resistividade se comporta para um metal típico e um supercondutor. Em metais, a resistividade diminui progressivamente com a temperatura, até atingir um valor finito. No estado supercondutor, a resistividade cai para zero a partir de uma certa temperatura T_c . À direita, o esquema representa como um material se comporta na presença de um campo externo, tanto na fase supercondutora ($T < T_c$) quanto na não supercondutora ($T > T_c$). Figura retirada de [7].

Por muito tempo, esses efeitos não tinham uma teoria satisfatória que os explicasse. Somente em 1957 Barden, Cooper e Schrieffer elaboraram a teoria que descreve este fenômeno, denominada como teoria BCS [8]. Após a descoberta da explicação fundamental para a supercondutividade, que será resumida na próxima seção, foram identificados diversos outros materiais que também apresentam esse fenômeno em determinadas condições. Na Fig. 4, é possível observar as descobertas de compostos supercondutores ao longo dos anos e suas respectivas temperaturas críticas.

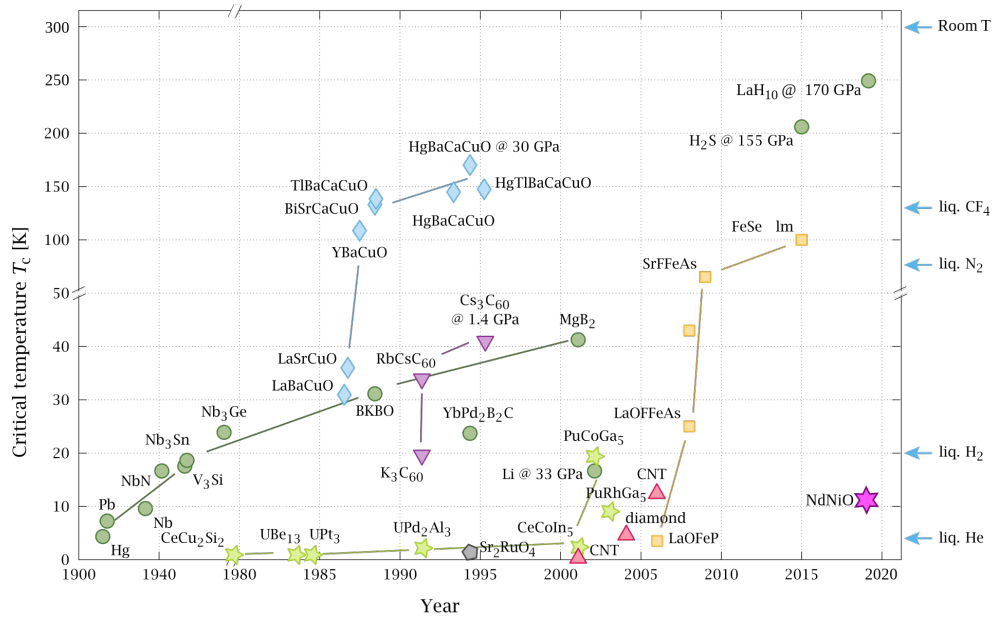


Figura 4 – Descobertas de compostos supercondutores ao longo dos anos com suas respectivas temperaturas críticas. Círculos verdes correspondem a supercondutores convencionais, estrelas em verde-claro representam férmions pesados, losangos azuis simbolizam óxidos de cobre, triângulos (roxo-vermelho) retratam supercondutores orgânicos, quadrados laranjas retratam supercondutores baseados em ferro e a estrela em rosa corresponde a um supercondutor a base de Níquel. Figura retirada de [9].

As diferentes formas geométricas simbolizam cada família supercondutora: os círculos verdes correspondem a supercondutores convencionais, os primeiros a serem descobertos, com baixas temperaturas críticas; as estrelas verdes representam férmions pesados; os losangos azuis representam os supercondutores a base de óxido de cobre (cupratos); os quadrados laranjas são supercondutores a base de Ferro; os triângulos roxos e vermelhos representam supercondutores orgânicos, e o mais recente que consta na figura e foi descoberto em 2019 é um supercondutor a base de Níquel. Observa-se também supercondutores convencionais com alta temperatura crítica, como H₂S e LaH₁₀, que se tornam supercondutores com pressões elevadas.

A família dos supercondutores a base de óxidos de cobre possui alta temperatura crítica e ainda é uma questão em aberto o porquê do surgimento dessa fase nesses materiais, já que em seu estado normal o mesmo se comporta como um isolante fortemente correlacionado. Neste capítulo, abordaremos brevemente a teoria BCS e detalharemos supercondutores que em sua composição contém oxigênio e cobre (losangos azuis), que exibem fortes efeitos de correlação.

2.1 Supercondutividade Convencional

Após a descoberta da fase supercondutora buscou-se entender a explicação da interação atrativa entre os elétrons, que leva a formação de pares. A teoria BCS foi a primeira a conseguir explicar os fenômenos associados à fase supercondutora, sendo um deles o efeito isotópico, onde a temperatura de transição T_c varia conforme a massa M dos íons da rede cristalina ($T_c \propto M^{-\alpha}$), sendo α o expoente isotópico [10]. A teoria presume que o valor do expoente isotópico seja $\alpha = 1/2$, indicando que a temperatura crítica é influenciada pela massa do átomo. Na tabela 1, podemos observar que alguns supercondutores confirmam essa previsão. No entanto, há exceções, como, por exemplo, o supercondutor a base de óxido de cobre com uma alta temperatura crítica, que possui $\alpha = 0$.

	T_c (K)	α
Zn	0.9	0.45
Pb	7.2	0.49
Hg	4.2	0.49
Mo	0.9	0.33
Os	0.65	0.2
Ru	0.49	0.0
Zr	0.65	0.0
Nb ₃ Sn	23	0.08
MgB ₂	39	0.35
YBa ₂ Cu ₃ O ₇	90	0.0

Tabela 1 – Valor do expoente isotópico em alguns supercondutores e suas respectivas temperaturas críticas. Tabela retirada de [7].

Além do efeito isotópico, a teoria BCS explica bem o surgimento de um *gap* de energia no nível de Fermi. Em metais convencionais, os estados são ocupados até o nível de Fermi; contudo em supercondutores um *gap* igual a 2Δ separa os estados ocupados e desocupados. Esse *gap* representa a energia mínima necessária para quebrar os pares de elétrons. A Fig. 5 mostra os níveis de energia para um estado normal preenchido e um supercondutor. Os experimentos em que se mediu o *gap* supercondutor contribuíram diretamente para a explicação da formação dos pares de Cooper [11], sendo essa advinda da interação elétron-fônon.

A dedução completa da teoria requer métodos matemáticos avançados da teoria de muitos corpos. O objetivo desta seção é entender o hamiltoniano BCS, que descreve bem a supercondutividade convencional. Detalhes sobre essa teoria podem ser encontrados nas seguintes referências [12] e [13].

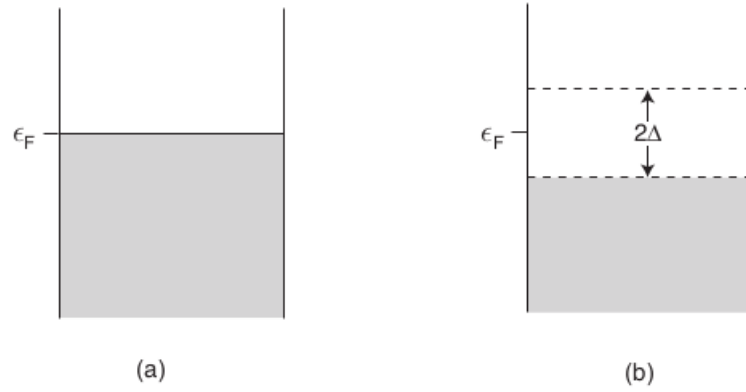


Figura 5 – (a) Níveis de energia preenchidos no estado normal. (b) Surgimento de um *gap* de energia igual a 2Δ no estado supercondutor. Figura retirada de [12].

2.1.1 Hamiltoniano BCS

Com o desenvolvimento da teoria e descobertas experimentais [14, 15], ficou evidente que o mecanismo da atração efetiva entre os elétrons com momentos e spins opostos, próximo ao nível de Fermi, é devido à interação elétron-fônon. O hamiltoniano é expresso por

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}). \quad (2.1)$$

Utilizando a notação de segunda quantização, $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ e $a_{\mathbf{k}}$ são operadores de criação e aniquilação do elétron com momento $\mathbf{k}$. O primeiro termo é referente à energia cinética eletrônica, sendo ξ a dispersão de energia. O segundo termo é referente à energia dos fônons, onde $\omega_{\mathbf{q}}$ são as frequências dos fônons e $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ e $b_{\mathbf{q}}$ são operadores de criação e aniquilação dos fônons com momento $\mathbf{q}$. $M_{\mathbf{q}}$ representa o elemento de matriz em relação à interação elétron-fônon. Os índices de spins foram omitidos na eq. 2.1.

A interação atrativa entre os elétrons é obtida mediante uma transformação canônica (transformação de Schrieffer-Wolff) aplicada à eq. 2.1 como detalhado no apêndice D da referência [3]. Após a transformação, o hamiltoniano é reescrito como:

$$H' = H_0 + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}',-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{(\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}',-\mathbf{q}})^2 - (\hbar \omega_{\mathbf{q}})^2} \right). \quad (2.2)$$

O termo H_0 representa os termos não interagentes, sendo composto pela energia cinética dos elétrons e a energia dos fônons. O termo proporcional à matriz $M_{\mathbf{q}}$ é referente ao potencial efetivo entre os elétrons, que é atrativo quando $|\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}',-\mathbf{q}}| < \hbar \omega_{\mathbf{q}}$, ou seja, nesse caso o acoplamento elétron-fônon gera uma atração efetiva entre os elétrons. O produto dos operadores de criação e aniquilação de elétrons corresponde à formação de pares de elétrons. O diagrama de Feynman da Fig. 6 facilita a compreensão desse produto.

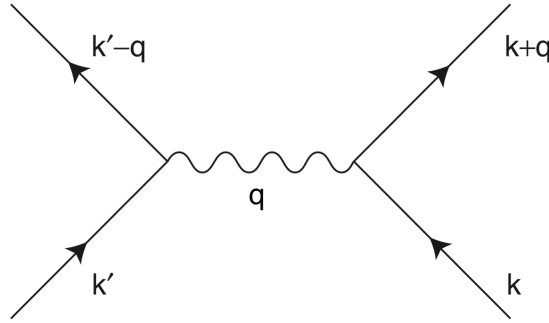


Figura 6 – O diagrama de Feynman acima ilustra bem a interação dos elétrons com momento $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ com um fônon de momento $\mathbf{q}$. Dois elétrons com momentos $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ (retas) são aniquilados ao interagir com um fônon de momento $\mathbf{q}$ (segmento em zig-zag), resultando na criação de dois elétrons com momentos $\mathbf{k}'-\mathbf{q}$ e $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ diferentes dos iniciais. Figura retirada e adaptada de [12].

O esquema da Fig. 7 pode ajudar no entendimento do surgimento da formação de pares no hamiltoniano. O elétron se move em um sólido atraindo os íons, positivamente carregados. À medida que o elétron passa pelo íon, este se aproxima do elétron e, em seguida, retorna lentamente à sua posição de equilíbrio. No entanto, essa mudança na rede iônica também atrai outros elétrons em direção aos íons que foram distorcidos pela passagem do primeiro elétron. Ou seja, o movimento coletivo desses íons, provocado pelo primeiro elétron, faz com que outros elétrons sejam atraídos em direção ao primeiro.



Figura 7 – Representação esquemática da vibração da rede (esferas em vermelho) à medida que o elétron (esfera em azul) percorre o sólido e a atração elétron-elétron resultante da interação com esta vibração. Figura retirada de [16].

A função de onda de muitos corpos que leva em consideração o pareamento de elétrons deve satisfazer a antissimetrização da função de onda fermiônica. Uma abordagem geral para descrever a função de onda de muitos férmions é através do determinante de Slater.¹ Para simplificar e compactar a descrição da função de onda BCS, ela pode ser escrita em termos do número de ocupação, representada no espaço de momento, utilizando operadores de criação e aniquilação que atuam sobre o estado de vácuo [16]:

¹ O determinante de Slater é utilizado na mecânica quântica para descrever funções de onda antissimétricas de sistemas de muitos férmions, que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli.

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \left[\prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}) \right] |0\rangle, \quad (2.3)$$

no qual $u_{\mathbf{k}}$ é a amplitude de probabilidade de que o par de orbitais esteja vazio e $v_{\mathbf{k}}$ é a probabilidade de que esses orbitais estejam ocupados com um par de Cooper. Os pares de Cooper da teoria BCS são formados então por momentos com o mesmo módulo, mas sentidos opostos e, quanto ao spin, da teoria BCS os pares estão no estado singlete.

2.2 Supercondutividade não Convencional

As pesquisas sobre supercondutividade têm sido intensas desde sua descoberta. O fenômeno da queda da resistência muito chamou atenção para fins de aplicação. No entanto, a temperatura crítica na qual certos materiais conduzem eletricidade sem resistência é baixa, o que tem dificultado sua aplicação. As descobertas de novos materiais com temperaturas críticas mais altas contribuí para avanços na utilização da supercondutividade. Um exemplo de aplicação foi o teste feito na Dinamarca em que 15000 residências receberam eletricidade através de supercondutores de alta temperatura [17]. No entanto, o desafio da refrigeração dos fios ainda não permite essa aplicação em larga escala.

A partir da década de 80, chamou atenção a descoberta de alguns compostos cerâmicos com fases supercondutores em altas temperaturas críticas, conhecidos como supercondutores não convencionais. A temperatura crítica agora é superior aos supercondutores convencionais, permitindo que os materiais sejam resfriados através de nitrogênio líquido, com temperatura de liquefação de 77 K. A descoberta desses compostos impulsionou ainda mais as pesquisas envolvendo supercondutividade. Embora muito tenha sido compreendido sobre esses materiais, alguns aspectos ainda permanecem em aberto.

2.2.1 Supercondutividade em Cupratos

A descoberta da supercondutividade em materiais de óxidos de cobre ocorreu de maneira inesperada, uma vez que esses materiais são cerâmicos e mau condutores em seu estado normal, ao contrário dos supercondutores convencionais que são metálicos. A família dos supercondutores a base de óxido de cobre apresenta temperaturas críticas que podem chegar a 180 K. Sua estrutura cristalina tem como característica principal planos de cobre e oxigênio ligados a planos de outros elementos, como pode ser visto na Fig. 8. Acredita-se que o surgimento da fase supercondutora nesses materiais está relacionado principalmente com os planos de cobre e oxigênio, enquanto os outros átomos servem apenas como reservatórios de carga [18].

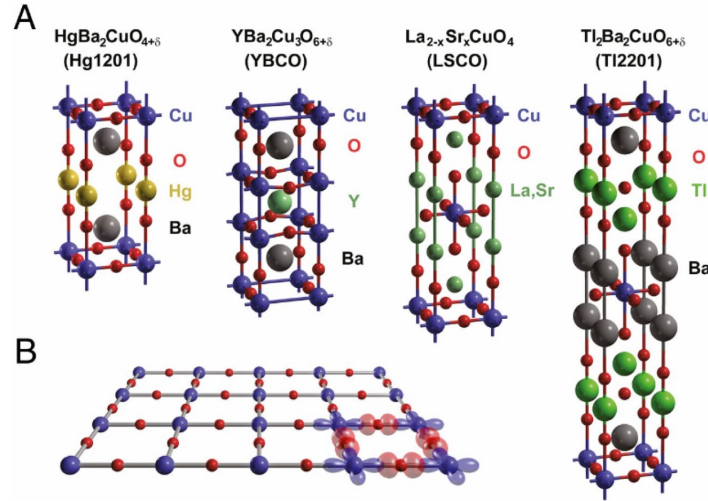


Figura 8 – Representação esquemática de (A) várias estruturas de cupratos, e (B) plano constituído de átomos de cobre (esferas em azul) e oxigênio (esferas em vermelho), que formam a estrutura cristalina dos cupratos. Figura retirada de [19].

Na Fig. 8 percebem-se diferentes compostos supercondutores a base de cobre e oxigênio. O valor crítico da temperatura aparenta depender do número de planos de CuO_2 [18]. A estrutura do plano de cobre e oxigênio é exibida no painel B da Fig. 8, onde cada átomo de cobre tem como vizinho 4 átomos de oxigênio. O átomo de cobre isolado possui uma distribuição eletrônica $[\text{Ar}] 3d^{10}4s^1$, enquanto o átomo de oxigênio possui $2s^22p^4$ [18]. No caso do plano de cobre e oxigênio, para estabilidade, o Cu cede dois elétrons para o oxigênio, tornando-se cátion Cu^{+2} e ficando com estrutura eletrônica $3d^9$, sendo um material fortemente correlacionado com orbital d semipreenchido. Nos óxidos de cobre supercondutores, a simetria da onda é do tipo d , sendo mais relevante o orbital $d_{x^2-y^2}$, que aponta para os orbitais do oxigênio (p_x, p_y). Os supercondutores dos óxidos de cobre de onda d são distintos dos supercondutores descritos pela teoria BCS, que apresentam simetria de onda s [18].

Como foi mencionado brevemente na introdução, os cupratos apresentam um diagrama de fases vasto veja a Fig. 1. À medida que se dopa por buracos, os óxidos de cobre exibem diversas fases para diferentes dopagens. A dopagem na qual se observa a temperatura crítica mais alta para a fase supercondutora é denominada como dopagem ótima p_{opt} . A região de dopagens maiores $p \gg p_{opt}$ é denominada como *overdoped*, enquanto a de dopagens menores $0 < p < p_{opt}$ é nomeada como *underdoped*. Além da fase supercondutora não ser completamente compreendida, esses materiais possuem outras fases que ainda possuem questões não resolvidas, permanecendo o questionamento sobre qual a influência dessas outras fases na fase supercondutora.

Na introdução também apresentamos resultados anteriores do nosso grupo 2, em que se identificou duas fases metálicas (convencional e *pseudogap*) distintas para o modelo de

Hubbard bidimensional, na região de forte correlação eletrônica, que é a região de interesse no estudo dos cupratos. O foco desta dissertação é investigar se, partindo dessas duas fases metálicas distintas, chegamos à mesma fase supercondutora. A fase metálica convencional já é bem compreendida pela teoria de Líquido de Fermi. No entanto, a compreensão da fase *pseudogap* é essencial para esta investigação. Na próxima seção, faremos uma breve revisão sobre a fase *pseudogap*, discutindo tanto resultados experimentais que mostram semelhanças com a fase supercondutora, quanto resultados teóricos específicos da fase *pseudogap*.

2.3 Motivações experimentais

Conforme discutido anteriormente, em uma certa região de dopagem dos óxidos de cobre, ocorre uma competição entre diferentes fases. A conjunção entre a fase supercondutora e outras fases ainda não é completamente compreendida, e não se sabe ao certo como uma fase pode interferir nas outras. Resultados experimentais investigam o comportamento dessas fases e a possível relação entre elas. Uma das técnicas utilizadas na observação das diferentes fases dos cupratos é a espectroscopia de fotoemissão resolvida em ângulo (ARPES, *angle-resolved photoemission spectroscopy*). Por meio desta técnica, é possível determinar a função espectral $A(\vec{k}, \omega)$ em função da frequência ω em diferentes direções do espaço do momento $\vec{k}$.

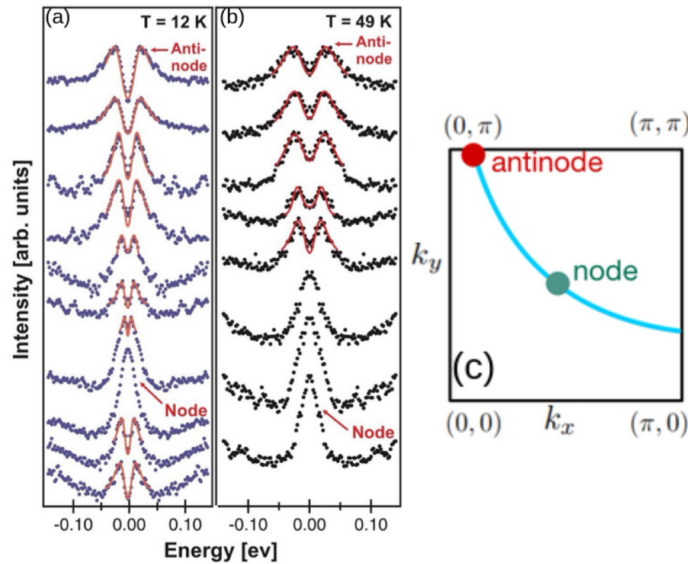


Figura 9 – Resultados de ARPES para $\text{La}_{1.895}\text{Sr}_{0.105}\text{CuO}_4$ ($T_c = 30$ K). Observa-se supressão da função espectral em torno do nível de Fermi na região antinodal, para a fase supercondutora ($T = 12$ K) e para a fase *pseudogap* ($T = 49$ K). No painel (c), vemos a primeira zona de Brillouin, onde estão definidas a região nodal e a antinodal. Figura retirada e adaptada de [20].

Os resultados da Fig. 9 para o material $\text{La}_{1.895}\text{Sr}_{0.105}\text{CuO}_4$ ($T_c = 30$ K) foram obtidos via ARPES na fase supercondutora ($T = 12$ K) e *pseudogap* ($T = 49$ K) nas regiões antinodal e nodal da superfície de Fermi, definidas no painel à direita [Fig. 9 (c)]. Para a fase supercondutora [Fig. 9 (a)] observa-se o surgimento de um *gap*, através da supressão de peso espectral em torno do nível de Fermi na região antinodal. Na região nodal o *gap* supercondutor se fecha.

Os resultados obtidos para a fase *pseudogap* [Fig. 9 (b)] são semelhantes aos resultados da fase supercondutora. Na região nodal há peso espectral em $\omega = 0$ e, à medida que se vai em direção à região antinodal, observa-se uma supressão na intensidade medida. A supressão em torno do nível de Fermi na região antinodal vista no painel (a) representa um *gap* supercondutor com simetria *d*. Na fase *pseudogap*, observa-se uma forma de *gap* similar. Os autores do artigo argumentam que esse resultado revela uma assinatura direta da fase supercondutora na *pseudogap*, sugerindo a pré-formação dos pares de Cooper acima de T_c .

Através do ARPES também é possível analisar a topologia da superfície de Fermi na fase *pseudogap*. A superfície de Fermi é definida como a superfície no espaço recíproco que separa os estados ocupados e vazios a temperatura zero. A topologia da superfície de Fermi é controlada pelo sinal da energia de quase-partícula renormalizada $\tilde{\epsilon}_{(\pi,0)}$. Quando essa energia é positiva, a superfície de Fermi é do tipo elétron. Por outro lado, se a energia renormalizada for negativa, a superfície de Fermi é do tipo buraco. A Fig. 10 abaixo mostra a forma que a superfície assume para os dois casos.

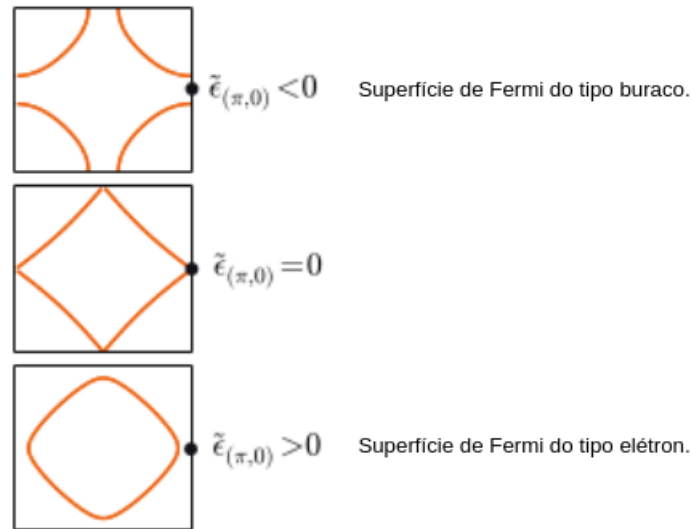


Figura 10 – Representação da topologia da superfície de Fermi, com o sinal da energia de quase-partícula no ponto antinodal $\vec{k} = (\pi, 0)$ para cada tipo de topologia. Figura retirada de [21].

Um resultado de ARPES é exibido na Fig. 11 e mostra a intensidade da função espectral $A(\vec{k}, \omega)$ em torno do nível de Fermi para diferentes dopagens do material

$\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ na fase *pseudogap*. O resultado confirma a predominância de peso espectral na região nodal, na qual a intensidade chega a ser máxima, sendo mínima nas regiões azuis. Considerando os pontos em que a função espectral é máxima (região em marrom) e levando em conta as definições da Fig. 10, identificamos que a superfície de Fermi da fase *pseudogap* é do tipo buraco, formando o que chamamos de arcos de Fermi. Esses resultados são fundamentais para o entendimento da fase *pseudogap*, a qual não pode ser descrita por uma teoria de líquido de Fermi convencional.

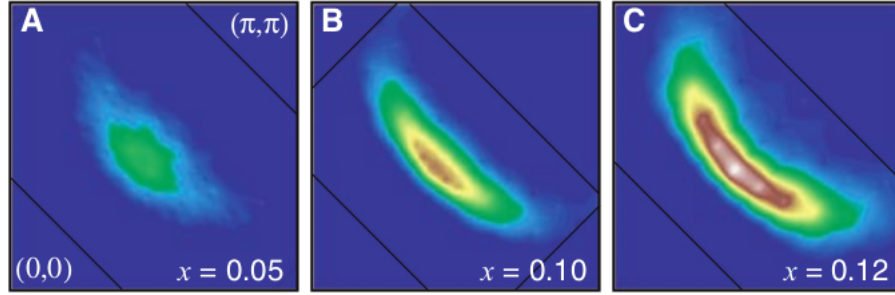


Figura 11 – Distribuição do peso espectral em função do momento (na primeira zona de Brillouin) do material $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ em uma janela de ± 10 meV em torno do nível de Fermi, para diferentes valores de dopagem. As cores indicam a intensidade da função espectral: azul indica valores próximo de zero e marrom corresponde a intensidades maiores. Figura retirada de [22].

Além da técnica de ARPES, é possível obter resultados utilizando outros métodos experimentais. Um deles é a microscopia de tunelamento por varredura (STM, do inglês *scanning tunnelling microscopy*). Esse método consiste em uma ponta metálica que varre a superfície da amostra sujeita a uma certa tensão, permitindo que os elétrons tunelem entre a ponta e a amostra, possibilitando resultados em escala atômica. Essa técnica possibilita compreender se o surgimento do gap acima de T_c está associado ao emparelhamento de elétrons e a temperatura na qual os pares se formam.

Os resultados da Fig. 12 foram obtidos utilizando STM de ultra-alto vácuo de temperatura variável [23], permitindo rastrear áreas específicas da amostra em escala atômica em função da temperatura. Mais especificamente, a figura apresenta resultados da evolução do gap de emparelhamento em um supercondutor de onda-*d* $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ($T_c = 65$ K), utilizando medições de mapeamento espectroscópico em grandes áreas (≈ 300 Å) da amostra. Observa-se que, à medida que a temperatura é aumentada para $T > T_c$ (painéis c e d) há um rápido aumento das regiões sem gap, mesmo sendo regiões com temperaturas próximas a T_c do material. As medições demonstram que o gap persiste apenas em faixas de temperaturas específicas. Mais resultados para outras temperaturas e dopagens também foram analisados no artigo da Ref. [23].

No diagrama da Fig. 13, podemos visualizar com mais clareza a porcentagem de área que apresenta um *gap* para diferentes temperaturas e dopagens específicas, os

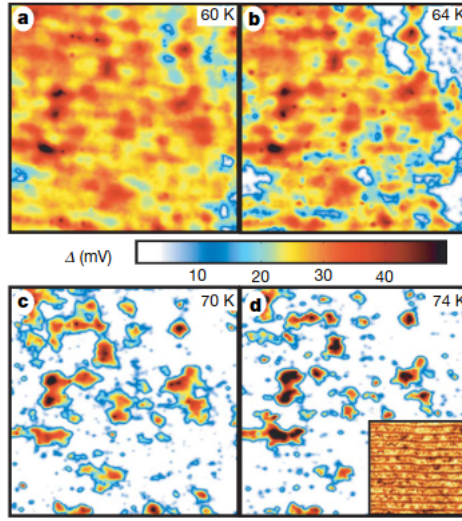


Figura 12 – Evolução do gap para dopagem acima de p_{opt} ($x = 0.22$) para o $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ com $T_c = 65$ K. Mapas de gap na mesma área ($300 \text{ \AA}$). Resultados obtidos em diferentes temperaturas próximas a T_c . A inserção em (d) mostra a topografia da área. Figura retirada de [23].

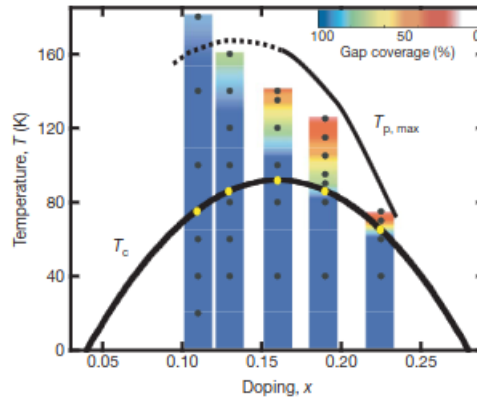


Figura 13 – Diagrama de fase da temperatura em função da dopagem para o $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. As cores representam a porcentagem da amostra que possui gap em determinada dopagem e temperatura. Os pontos representam as medições feitas com STM de ultra-alto vácuo de temperatura variável. $T_{p,max}$ corresponde à temperatura na qual $< 10\%$ da amostra apresenta gap. Figura retirada de [23].

pontos no diagrama indicam onde os resultados foram obtidos. As cores representam a porcentagem da amostra com um *gap* em determinadas temperaturas, confirmando então a presença do *gap* até uma determinada temperatura $T_{p,max} > T_c$. Assim, o artigo da Ref. [23] conclui que uma teoria abrangente sobre óxidos de cobre deveria explicar as correlações de pareamento em regiões isoladas em altas temperaturas, além do pareamento na fase supercondutora.

2.4 Motivação Teórica

Resultados teóricos anteriores obtidos pelo nosso grupo [3] contribuem para o entendimento da fase *pseudogap*. Pelo diagrama de fases apresentado na introdução na Fig. 2, notamos que há duas soluções metálicas identificadas para o modelo de Hubbard bidimensional: um metal fortemente correlacionado (MFC) e uma fase *pseudogap* (PG).

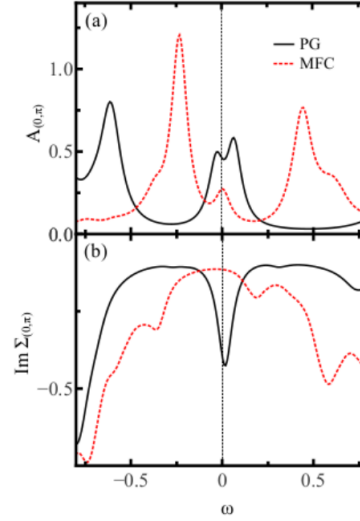


Figura 14 – (a) Função espectral em função da frequência para $\vec{k} = (0, \pi)$ para a fase *pseudogap* e o metal fortemente correlacionado. (b) Parte imaginária da autoenergia $\text{Im}\Sigma_{(0,\pi)}$, para $U = 4.0$, $t = 1$ e $t' = -0.1$. Figura retirada de [24].

A partir do cálculo autoconsistente da Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular, obtém-se a função de Green no espaço de momento e frequência, $G(\vec{k}, \omega)$, e dela a função espectral $A(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\vec{k}, \omega)$, bem como a autoenergia $\Sigma(\vec{k}, \omega)$, que descreve correlações eletrônicas.² Na Fig. 14 temos a função espectral para as duas fases metálicas distintas para $U = 4.0$ e também a parte imaginária da autoenergia $\text{Im}\Sigma(\vec{k}, \omega)$, ambas em $\vec{k} = (0, \pi)$, na região antinodal. Para o metal fortemente correlacionado (curva em vermelho pontilhada), a função espectral no painel (a) mostra que em torno do nível de Fermi $\omega = 0$ há um peso espectral finito, sendo este característico de um Líquido de Fermi. A parte imaginária da autoenergia tem o comportamento $\sim \omega^2$. No caso da fase *pseudogap* (curva em preto), a função espectral apresenta uma supressão em $\omega = 0$, indicando a presença de um *gap*, de acordo com os resultados experimentais reproduzidos na Fig. 9, na região antinodal. Quanto à parte imaginária da autoenergia na fase *pseudogap*, há um aumento do seu módulo em torno do nível de Fermi.

Na Fig. 15, reproduzimos o resultado para a função espectral no nível de Fermi para um metal fortemente correlacionado (MFC) e para a fase *pseudogap* (PG). Esses resultados teóricos descrevem bem a topologia da superfície de Fermi, em concordância

² Mais detalhes sobre a relação entre essas grandezas serão apresentados no Capítulo 2.

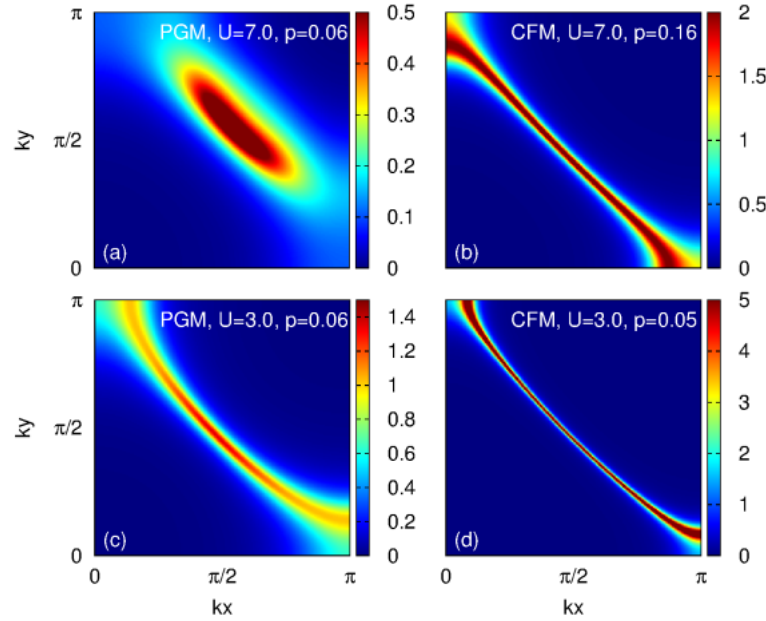


Figura 15 – Função espectral $A(\vec{k}, \omega = 0)$ para as fases *pseudogap* metálica (PGM) e metálica fortemente correlacionada (MFC) (na figura, identificada como CFM, do inglês *correlated Fermi liquid metal*) na primeira zona de Brillouin, considerando diferentes valores de interação e dopagem. No painel (a), para a interação forte $U = 7$ e dopagem pequena $p = 0.06$, temos a fase PG. No painel (b), para a mesma interação forte $U = 7$, mas com dopagem alta $p = 0.16$, observamos a fase MFC. Nos painéis (c) e (d), com interação fraca $U = 3$, as dopagens são baixas: $p = 0.06$ para a fase PG e $p = 0.05$ para a fase MFC. Figura retirada de [24].

com resultados experimentais de ARPES, como apresentamos na Fig. 11. Para $U = 3$ e em dopagens pequenas, tanto a fase PG quanto a fase MFC [painéis (c) e (d)] apresentam uma superfície de Fermi do tipo buraco. No entanto, a fase MFC é mais estável (tem menor energia), não exibindo arcos de Fermi. No caso de forte interação $U = 7$, a fase PG passa a ser estável e exhibe nitidamente arcos de Fermi em pequenas dopagem $p = 0.06$ [painel (a)], enquanto o MFC torna-se estável em altas dopagens $p = 0.16$ [painel (b)], sendo sua superfície de Fermi do tipo elétron, sem arcos.

Os resultados teóricos apresentados nesta seção são advindos do modelo de Hubbard bidimensional, sem considerar supercondutividade. No próximo capítulo, discutiremos a metodologia utilizada para resolver este modelo com e sem supercondutividade.

3 Modelo de Hubbard e Teoria do Campo Médio Dinâmico

3.1 Modelo de Hubbard

Como foi mencionado anteriormente, muitos sistemas são estudados desconsiderando a interação entre as partículas ou colocando-as como um potencial efetivo. No caso dos óxidos de cobre, acredita-se que a interação elétron-elétron é responsável pelos fenômenos emergentes. Com isso, faz-se necessário um modelo que considere essa interação; um modelo que descreve bem a competição entre a itinerância e a interação das partículas é o modelo de Hubbard. O hamiltoniano é expresso por

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \epsilon \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (3.1)$$

onde t_{ij} é a amplitude do *hopping* de um sítio para outro, i e j são sítios de uma rede; em particular denotaremos por t (t') o *hopping* entre sítios primeiros (segundos) vizinhos. Os operadores $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ são de criação e aniquilação de partículas no sítio i com spin σ . No segundo termo, U é a interação Coulombiana entre os elétrons no mesmo sítio e $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ é o operador número. O ϵ é a energia local dos elétrons de condução. O último termo é proporcional ao potencial químico μ , que controla a ocupação na rede.

Há solução analítica para o modelo da eq. 3.1 em uma dimensão [25], enquanto para problemas bidimensionais é necessário recorrer a técnicas numéricas. Nesta dissertação investigamos a supercondutividade em óxidos de cobre, sendo esse fenômeno advindo do plano de cobre e oxigênio presente nesses materiais. A resolução do modelo de Hubbard bidimensional é feita de forma numérica através da Teoria do Campo Médio Dinâmico (TCMD) e suas extensões, apresentadas a seguir.

3.2 Teoria do Campo Médio Dinâmico

O objetivo central da Teoria de Campo Médio é simplificar o tratamento matemático de alguns sistemas. A técnica pode ser aplicada tanto no caso clássico, como no modelo de Ising, quanto no caso quântico. O problema com muitos graus de liberdade é transformado em um problema local. No caso quântico, isso ocorre ao mapear o problema de uma rede de elétrons interagentes em um problema de uma impureza de Anderson, sendo este muito bem conhecido na literatura e com diversas técnicas de resolução, por exemplo, Hartree-Fock, Monte Carlo Quântico, Teoria da Pertubação. Utilizamos o caso quântico

dessa teoria para resolver o modelo de Hubbard. No entanto, vamos analisar inicialmente o caso clássico e em seguida chegaremos ao quântico.

3.2.1 Teoria de Campo Médio

No caso clássico a teoria de campo médio é utilizada, por exemplo, para resolver o modelo de Ising

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad (3.2)$$

em que J é a energia de interação entre os spins, capaz de produzir um estado ferromagnético para $J > 0$, e $\langle ij \rangle$ indica que o somatório é sobre os primeiros vizinhos. As variáveis S_i e S_j são referentes ao spin, podendo assumir valores de ± 1 . Em uma dimensão, o modelo de Ising tem solução analítica [26], com exceção apenas para temperatura e campo externo iguais a zero [27]. Resolver o modelo corresponde a encontrar a função de partição canônica, pois toda termodinâmica é decorrente dela. No entanto, para o caso bidimensional, é muito complicado encontrar a magnetização do modelo. Nesse caso, a teoria de campo médio de Weiss facilita a resolução do problema.

Na teoria, cada spin de uma rede 2D interage apenas com seus primeiros vizinhos. A teoria de campo médio descreve cada componente de spin como um valor médio mais as flutuações em torno da média

$$S_i = \langle S_i \rangle + \delta S_i. \quad (3.3)$$

Os pares de primeiros vizinhos i e j interagem por meio de

$$S_i S_j = [\langle S_i \rangle + \delta S_i][\langle S_j \rangle + \delta S_j] = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \delta S_i \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle \delta S_j + \mathcal{O}[\delta S^2]. \quad (3.4)$$

Podemos rescrever a eq. 3.4 em termos dos spins originais, considerando que os termos de flutuações são desprezíveis

$$S_i S_j \approx - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + S_i \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle S_j. \quad (3.5)$$

Substituindo o resultado da eq. 3.5 na eq. 3.2, temos

$$H' = -J_{ij} \sum_{\langle ij \rangle} (- \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + S_i \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle S_j). \quad (3.6)$$

No caso uniforme, sendo $\langle S_i \rangle = m$ independente do sítio, o hamiltoniano é expresso por:

$$H' = -J_{ij} \sum_{\langle i=j \rangle} (-m^2 + 2mS_i) = Jm^2 \sum_{\langle ij \rangle} 1 - 2Jm \sum_i S_i. \quad (3.7)$$

Resolvendo o somatório, podemos expressar a eq. 3.7 em termos da quantidade de sítios e primeiros vizinhos

$$H' = \frac{NJzm^2}{2} - zJm, \quad (3.8)$$

onde z é a quantidade de primeiros vizinhos, N o número total de sítios e J o acoplamento entre spins. A equação é dividida por dois para não considerar a mesma interação entre primeiros vizinhos duas vezes. O segundo termo do hamiltoniano é referente à magnetização média induzida pelos spins vizinhos, sendo denominado como campo efetivo de Weiss ($h_w = zJm$). No caso em que existe um campo externo h , este campo é adicionado ao termo anterior para se definir o campo efetivo ($h_w = zJm + h$).

A partir do hamiltoniano efetivo, consegue-se calcular a função de partição $Z(T, h)$ e a partir dela a energia livre por spin $f(T, h)$, onde T é a temperatura. Através dessas informações é possível encontrar a magnetização, por spin, que satisfaz uma equação autoconsistente expressa por:

$$m(T, h) = -\frac{\partial f(T, h)}{\partial h} = -\frac{\partial}{\partial h} \left(-\frac{1}{\beta N} \ln Z(h) \right) = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial h} = \tanh(\beta h_w), \quad (3.9)$$

dado que o campo efetivo h_w depende da magnetização. Uma maneira de encontrar a solução da eq. 3.9 é de forma gráfica. Resultados gráficos e detalhes das contas feitas para chegar na expressão acima podem ser encontrados na referência [28]. A aproximação de campo médio se torna mais aprimorada à medida que z aumenta, ou seja, quanto maior for o número de vizinhos.

3.2.2 Teoria de Campo Médio Dinâmico

No caso quântico, temos a Teoria de Campo Médio Dinâmico, que, como mencionamos acima, utilizamos para resolver o modelo de Hubbard da eq. 3.1 no caso bidimensional. O método consiste em mapear o problema de muitos corpos em um problema local, ao olhar para um único sítio, enquanto os demais são vistos como um reservatório de elétrons não interagentes, denominado como banho de elétrons. É possível compreender melhor observando a Fig. 16 abaixo. Na TCMD considera-se que cada sítio da rede possui um número infinito de vizinhos, pois a solução dessa teoria se torna exata à medida que o número de vizinhos aumenta, similar ao caso clássico.

O mapeamento do modelo de Hubbard em um problema de uma impureza pode ser visto com mais detalhes na referência [30]. No modelo de impureza o sítio localizado é tratado como interagente, enquanto os demais sítios são vistos como um banho de elétrons não interagentes. O hamiltoniano do modelo de Anderson de uma impureza é definido como:

$$H_{imp} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} (a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}) + \sum_{i\sigma} V_i (a_{i\sigma}^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_{i\sigma}) + \epsilon_0 \sum_{\sigma} c_\sigma^\dagger c_\sigma + U c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow}. \quad (3.10)$$

O primeiro termo descreve a energia cinética dos elétrons do banho $a_{\vec{k}\sigma}$, sendo estes delocalizados. O operador c_σ destrói um elétron localizado na impureza e por isso perde a dependência em $\vec{k}$. No caso de dupla ocupação na impureza, se paga uma energia U ,

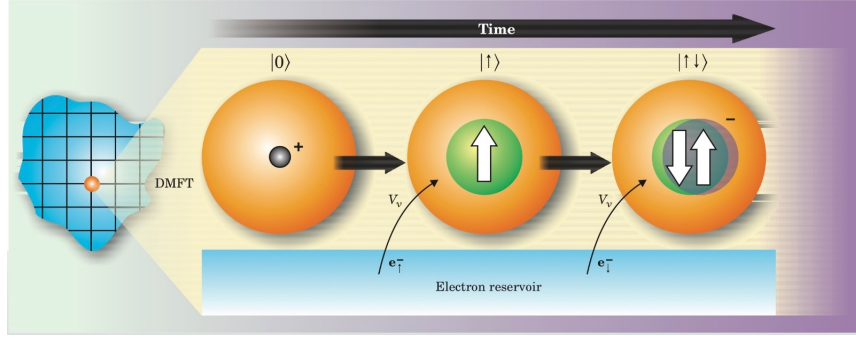


Figura 16 – Na TCMD, o problema de uma rede de elétrons (à esquerda, em azul) é mapeado no problema de um único sítio ou impureza (em laranja, à direita). A TCMD é uma aproximação de campo médio no espaço, mas que mantém a descrição de flutuações temporais. Assim, na primeira região em laranja nota-se um estado sem ocupação $|0\rangle$. Já na segunda região um elétron sai do banho de elétrons e vai para a impureza, que passa a ter uma ocupação $|\uparrow\rangle$. Por fim, na terceira região outro elétron vai do banho para a impureza, que passa a ter dupla ocupação $|\uparrow\downarrow\rangle$. Figura retirada de [29].

sendo o quarto termo da equação. O termo V_i é referente à hibridização do banho com a impureza e vice-versa. O ϵ_0 é a energia dos elétrons localizados na impureza.

A física de muitos corpos se baseia em termos de funções respostas, visto que é difícil resolver a equação de Schrödinger de muitos corpos, sendo essas funções as de Green. Tanto o modelo de Hubbard quanto o modelo de Anderson possuem funções de Green relacionadas, sendo essas, respectivamente,

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, \omega)}, \quad (3.11)$$

$$G_{imp}(\omega) = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1}(\omega) - \Sigma_{imp}(\omega)}. \quad (3.12)$$

Na função de Green do modelo de Hubbard, ω são as frequências e μ no denominador é o potencial químico. Já $\epsilon_{\vec{k}}$ é referente ao termo de hopping da eq. 3.1 através da transformada de Fourier $(t_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)})$. A autoenergia $\Sigma(\vec{k}, \omega)$ contém a interação eletrônica U . Já na função de Green da impureza $\mathcal{G}_0(\omega) = [\omega + \mu - \epsilon_0 - \Delta(\omega)]^{-1}$ é a parte “não interagente” e $\Delta(\omega)$ é a função banho referente à hibridização com os elétrons delocalizados,

$$\Delta(\omega) = \sum_i \frac{|V_i|^2}{\omega - \epsilon_{\vec{k}}}. \quad (3.13)$$

O $\Sigma_{imp}(\omega)$ é a autoenergia local que contém a interação elétron-elétron na impureza. Assim, a equação de Dyson da eq. 3.12 estabelece uma relação entre a função de Green não interagente e um termo que descreve a interação.

A TCMD é utilizada para resolver modelos fortemente correlacionados, no caso em questão, buscamos utilizá-la para resolver o modelo de Hubbard, como abordado acima. O

mapeamento do modelo de Hubbard no modelo de Anderson é exato quando o número de vizinhos da rede vai ao infinito [31]. A TCMD assume então que a autoenergia do modelo de Hubbard é igual à autoenergia do problema de uma impureza

$$\Sigma(\omega) = \Sigma_{imp}(\omega), \quad (3.14)$$

ou seja, a autoenergia do modelo de Hubbard nesse limite perde a dependência com $\vec{k}$, podendo ser escrita como $\Sigma(\omega)$.

É preciso também relacionar a função de Green do modelo de Hubbard com a do problema auxiliar local. Para isso, é definida uma função de Green local da rede,

$$G(\omega) = \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma_{imp}(\omega)}, \quad (3.15)$$

e estabelece-se uma conexão entre os dois modelos impondo que $G(\omega) = G_{imp}(\omega)$. As relações do problema da rede com o problema de uma impureza são exigências da TCMD, sendo empregadas no cálculo iterativo realizado da seguinte maneira:

1° Inicia-se com uma tentativa para a função $\mathcal{G}_0(\omega)$. Com esse chute, resolve-se o problema de uma impureza por um dos métodos citados anteriormente (Monte Carlo quântico, teoria de perturbação, diagonalização exata), obtendo-se a autoenergia $\Sigma_{imp}(\omega)$.

2° Com a autoenergia da impureza é possível encontrar o valor de $G(\omega)$ pela eq. 3.15, que devido às condições de TCMD tem que ser igual a $G_{imp}(\omega)$.

3° Por meio da função $G_{imp}(\omega)$ encontra-se um novo $\mathcal{G}_0(\omega)$ pela eq. 3.12 e volta-se ao primeiro passo. O processo iterativo acaba quando $\mathcal{G}_0(\omega)$ determinado na iteração anterior coincide o calculado neste passo.

3.2.3 Teoria de Campo Médio Dinâmico Celular

Na seção anterior, vimos a técnica de TCMD para resolver problemas fortemente correlacionados, onde uma rede de elétrons é mapeada em um problema de uma impureza de Anderson. Contudo, para o estudo da supercondutividade, é necessário levar em consideração efeitos de correlações não locais.

Técnicas foram desenvolvidas considerando interações não locais de curto alcance. Dois exemplos de técnicas que mapeiam o modelo de Hubbard em um *cluster* de impurezas interagentes, que hibridiza com um banho de elétrons não interagentes, são a Aproximação Dinâmica do *Cluster* (DCA, do inglês *Dynamical Cluster Approximation*) e a Teoria do Campo Médio Dinâmico Celular (TCMDC). O método DCA é efetivo no espaço do momento, já TCMDC é eficaz no espaço real [32] [33]. Os resultados que serão utilizados no presente trabalho são advindos de TCMDC, que, do ponto de vista numérico, é bastante similar com as etapas mencionadas acima da TCMD. No entanto, agora o mapeamento

passa a ser em um *cluster* de 4 impurezas, a função de Weiss $\mathcal{G}_{o,ji\sigma}(\omega)$ para cada spin σ passa a ter dimensão de uma matriz $N_c \times N_c$, onde N_c é o número de sítios no *cluster* e i e j indicam as coordenadas de cada sítio dentro do *cluster*.

O hamiltoniano do modelo de Anderson agora é para o *cluster* de impurezas,

$$H_{imp}^{cluster} = \sum_{ij} \sum_{\sigma} E_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} + \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_l \sum_{i\sigma} (V_{li\sigma} a_{l\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + V_{li\sigma}^* c_{i\sigma}^{\dagger} a_{l\sigma}). \quad (3.16)$$

O modelo segue escrito em segunda quantização, como o da eq. 3.10, onde agora os termos $c_{i\sigma}^{\dagger}$ e $c_{j\sigma}$ representam respectivamente, os operadores de criação e aniquilação de um elétron com spin σ nos sítios i e j do *cluster* de impurezas interagentes. O operador $a_{l\sigma}$ refere-se a um elétron no sítio l que faz parte do banho. O primeiro termo da expressão 3.16 é relativo ao *hopping* no *cluster* de impurezas, e $E_{ij\sigma}$ é a matriz com os parâmetros correspondentes. O segundo termo considera a interação de Coulomb U entre elétrons no mesmo sítio quando este sítio faz parte do *cluster*. Já $\epsilon_{\vec{k}\sigma}$ representa a dispersão dos elétrons do banho, enquanto $V_{li\sigma}$ é respectivo à hibridização do banho com o *cluster* de impurezas. De maneira similar à TCMD, a hibridização e a dispersão do banho são obtidos de forma que o modelo para o *cluster* de impurezas corresponda ao problema original (modelo de Hubbard bidimensional). Na Fig. 17, vemos um esquema do mapeamento da rede em um *cluster* de impurezas.

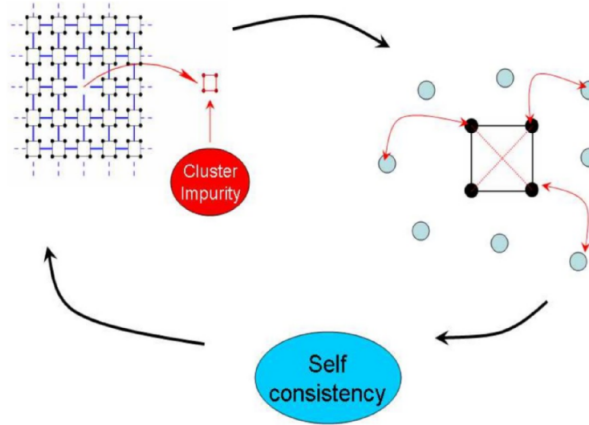


Figura 17 – Figura esquemática do mapeamento de TCMD da rede original quadrada em um *cluster* de 4 sítios interagentes. O *cluster* é envolto em um banho de elétrons (bolazinhas azuis). Figura retirada [34].

Para descrever a fase supercondutora dos óxidos de cobre, é necessário considerar a formação de pares de elétrons, embora a explicação para esse fenômeno ainda não seja conhecida. Para isso, é adicionado um termo de formação de pares ao hamiltoniano 3.16,

que passa a ser reescrito como:

$$\begin{aligned}
H_{imp}^{cluster} = & \sum_{ij} \sum_{\sigma}^{N_c} E_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i^{N_c} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} \\
& + \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \epsilon_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_l^{N_b} \sum_{i\sigma}^{N_c} \left(V_{li\sigma} a_{l\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + V_{li\sigma}^* c_{i\sigma}^{\dagger} a_{l\sigma} \right) \\
& + \sum_{\alpha} \Delta^{\alpha} \left(a_{1\uparrow}^{\alpha} a_{2\downarrow}^{\alpha} - a_{2\uparrow}^{\alpha} a_{3\downarrow}^{\alpha} + a_{3\uparrow}^{\alpha} a_{4\downarrow}^{\alpha} - a_{4\uparrow}^{\alpha} a_{1\downarrow}^{\alpha} \right. \\
& \left. + a_{2\uparrow}^{\alpha} a_{1\downarrow}^{\alpha} - a_{3\uparrow}^{\alpha} a_{2\downarrow}^{\alpha} + a_{4\uparrow}^{\alpha} a_{3\downarrow}^{\alpha} - a_{1\uparrow}^{\alpha} a_{4\downarrow}^{\alpha} + h.c. \right).
\end{aligned} \tag{3.17}$$

O termo adicionado refere-se a correlações supercondutoras de amplitude Δ^{α} e simetria de onda-d. Tais correlações são adicionadas entre elétrons do banho - usamos uma representação de sítios no banho com a mesma geometria do *cluster* de 4 impurezas. Observa-se que cada correlação é do tipo singlete, considerando apenas correlações em sítios vizinhos; correlações em segundos vizinhos e mesmo sítio são desconsideradas. As correlações são adicionadas no banho e analisa-se se geram correlações no *cluster* ao longo do cálculo iterativo da TCMDC.

As exigências de TCMD permanecem. Neste caso, a função de Green “local” da rede tem que ser igual à função de Green do *cluster* de impurezas. A eq. 3.18 exhibe como a função de Green local da rede é obtida:

$$\hat{G}_{loc}(\omega) = \sum_{\vec{K}} \hat{G}(\vec{K}, \omega) = \int_{ZBR} \frac{1}{(i\omega_n + \mu)\mathbb{I} - \hat{t}_{\vec{K}} - \hat{\Sigma}(\omega)} \frac{dK^d}{(2\pi)^d/N_c}. \tag{3.18}$$

Como abordado anteriormente, as variáveis passam a ser matrizes. A autoenergia da rede também é assumida como “local”, assim sendo restrita ao *cluster*, levando em consideração apenas as interações de curto alcance dentro do *cluster*. $\vec{K}$ descreve o vetor de momento no espaço recíproco da “super-rede”; no mapeamento entre a rede e o *cluster* de impurezas, consideramos uma “super-rede” em que cada “sítio” é dado por uma estrutura com a geometria do *cluster* considerado, como representado na Fig. 17 (topo, à esquerda). $\mathbb{I}$ é a matriz identidade $N_c \times N_c$ e $\hat{t}_{\vec{K}}$ é referente à matriz de *hopping* no espaço de momento dentro do *cluster* de impureza.

De maneira análoga à TCMD, a solução é obtida de forma autoconsistente: de início chuta-se $G_{0,ji\sigma}^{-1}(\omega)$, nesse caso, descrita por uma matriz. Com a função de Green “não interagente” é resolvido o problema do *cluster* de impurezas, obtendo assim a autoenergia $\hat{\Sigma}(\omega)$, também na forma matricial. Através da equação de Dyson é encontrada uma nova função $G_{0,ji\sigma}^{-1}(\omega)$, que servirá como nova entrada para o *loop* autoconsistente de TCMDC. O cálculo é finalizado quando a convergência é atingida, ou seja, as funções de Green coincidem com as da iteração anterior.

O problema de uma impureza é bastante discutido na literatura e possui diversos métodos de resolução, tanto analíticos quanto numéricos. Os resultados utilizados no

presente trabalho foram obtidos usando diagonalização exata para resolver o problema do *cluster* de impurezas. Algumas vantagens desse método são a alta precisão na determinação das propriedades do estado fundamental a temperatura zero, acesso a informações no espaço real de frequências, capacidade de tratar sistemas com grande U . No entanto, uma das desvantagens é a limitação nos tamanhos do *cluster* de impurezas e do banho. Os resultados utilizados neste trabalho foram obtidos para um *cluster* com $N_c = 4$ e o número de sítios do banho $N_b = 8$. O tamanho de *cluster* escolhido é a menor escolha possível para descrever a geometria de supercondutores de onda-d. A relação entre o tamanho do *cluster* e a diferença nos resultados pode ser observada com mais detalhes na referência [35], onde se conclui que os resultados para um *cluster* de 4 sítios coincidem de maneira satisfatória com os resultados para um *cluster* de 16 sítios. O sistema $N_s = N_b + N_c = 12$ é diagonalizado através do método de Lanczos. Mais detalhes sobre o *loop* de TCMDC que utiliza diagonalização exata para resolver o modelo de *cluster* de impurezas são encontrados nas referências [3, 34].

3.3 Modelo Fenomenológico

Após a resolução do problema de um *cluster* de impureza na TCMDC uma saída usual é a função de Green de partícula única, que, no caso supercondutor, é escrita no formalismo de Nambu,

$$\hat{G}(\vec{k}, \omega) = \begin{pmatrix} G(\vec{k}, \omega) & F(\vec{k}, \omega) \\ F(\vec{k}, \omega) & G(\vec{k}, \omega)^* \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

onde $G(\vec{k})$ é a função de Green normal, que descreve efetivamente a dinâmica dos elétrons em sistemas fortemente correlacionado, e $F(\vec{k}, \omega)$ é a função de Green anômala, que está relacionada com a correlação entre pares de elétrons, sendo eficaz para distinguir o tipo de supercondutividade em cada sistema [30]. As autoenergias normal e anômala podem ser encontradas através da equação de Dyson,

$$\begin{pmatrix} \Sigma^{nor}(\vec{k}, \omega) & \Sigma^{ano}(\vec{k}, \omega) \\ \Sigma^{ano}(\vec{k}, \omega) & \Sigma^{nor}(\vec{k}, \omega)^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \omega + \epsilon_{\vec{k}} \end{pmatrix} - [G(\vec{k}, \omega)]^{-1}. \quad (3.20)$$

No cálculo no eixo real, ω é substituído por $\omega + i\eta$, onde η é introduzido para evitar divergências, devendo permanecer pequeno; na prática, usamos $\eta = 0.05$, o que gera um alargamento da banda. Ao resolver o problema do *cluster* de impurezas, as autoenergias e funções de Green são encontradas nos pontos de alta simetria no espaço de momento no primeiro quadrante da Zona de Brillouin. Em alguns pontos, como $\vec{k} = (0, 0)$ e $\vec{k} = (\pi, \pi)$, o gap supercondutor desaparece. Portanto, resultados mais relevantes são encontrados em torno dos pontos antinodais $\vec{k} = (0, \pi)$ e $\vec{k} = (\pi, 0)$, onde a autoenergia anômala é

não nula devido à simetria de onda-d dos supercondutores. Os resultados de TCMDC apresentados neste trabalho foram obtidos no ponto $\vec{k} = (0, \pi)$ no espaço de momento.

Os resultados numéricos de TCMDC são muitas vezes de difícil compreensão. Eles são bem representados por um modelo fenomenológico criado com o intuito de descrever a dinâmica do elétron em baixa energia (em torno do nível de Fermi) [4]. Esse modelo é útil para melhor compreensão dos resultados numéricos, podendo facilitar o entendimento das fases supercondutora e *pseudogap*.

O modelo consiste em elétrons de baixa energia (c) representados na Fig. 18, que podem ser transferidos para vários estados de férmions ocultos (f_α).

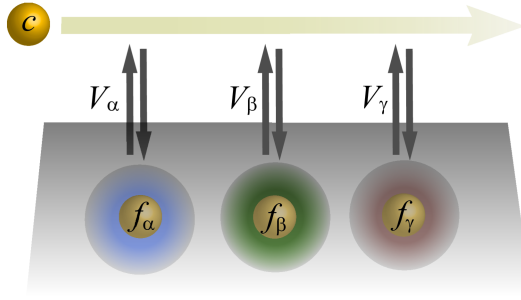


Figura 18 – O elétron c percorre o cristal, ocasionalmente migrando para estados virtuais (através de hibridização V_α), representados por férmions ocultos f_α . Figura retirada de [4].

Para descrever a hibridização dos elétrons c com os férmions ocultos f_α , propõe-se que a autoenergia do estado normal seja dada por

$$\Sigma^{nor}(\vec{k}, \omega) = s(\vec{k}) + \sum_{\alpha=1,2,\dots} \frac{V_\alpha(\vec{k})^2}{\omega - \epsilon_{f_\alpha}(\vec{k})}, \quad (3.21)$$

onde $s(\vec{k})$ representa a parte da autoenergia independente de ω . O segundo termo descreve a contribuição dos estados virtuais de férmions ocultos sendo $\epsilon_{f_\alpha}(\vec{k})$ a energia dos elétrons no estado virtual α e $V_\alpha(\vec{k})$ a hibridização entre os estados. O hamiltoniano correspondente à autoenergia proposta acima é

$$\begin{aligned} H_{c,f,normal} = & \sum_{\vec{k}\sigma} [\{\epsilon_c(\vec{k}) + s(\vec{k})\} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\alpha} \epsilon_{f_\alpha}(\vec{k}) f_{\alpha\vec{k}\sigma}^\dagger f_{\alpha\vec{k}\sigma} \\ & + \sum_{\alpha} V_\alpha(\vec{k}) (f_{\alpha\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + c_{\vec{k}\sigma}^\dagger f_{\alpha\vec{k}\sigma})], \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde $\epsilon_c(\vec{k})$ é a energia do elétron c . O hamiltoniano da eq. 3.22 pode ser estendido para o estado supercondutor ao incluir termos que descrevem a formação de pares. Esses termos são acrescentados tanto para os elétrons c itinerantes, com o parâmetro de ordem supercondutor D_c , quanto para os elétrons no estado virtual f_α , com o parâmetro de

ordem supercondutor D_f . Assim, o hamiltoniano para o estado supercondutor pode ser expresso da seguinte forma:

$$H_{c,f,super} = H_{c,f,normal} - \sum_{\vec{k}} D_c(\vec{k})(c_{\vec{k}\uparrow}c_{-\vec{k}\downarrow} + H.c) - \sum_{\alpha\vec{k}} D_{f\alpha}(\vec{k})(f_{\alpha\vec{k}\uparrow}f_{\alpha-\vec{k}\downarrow} + H.c). \quad (3.23)$$

Com isso, a autoenergia do estado supercondutor é construída de uma parte dita normal e outra anômala, dadas pelas expressões 3.24 e 3.25 no caso de um único estado de férmion oculto (apenas $\alpha = 1$)

$$\Sigma^{nor}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{V_1^2(\omega + \epsilon_{f1}(\mathbf{k}))}{\omega^2 - \epsilon_{f1}(\mathbf{k})^2 - D_{f1}(\mathbf{k})^2} + \tilde{a}(\mathbf{k}) - b(\mathbf{k})\omega; \quad (3.24)$$

$$\Sigma^{ano}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-V_1^2 D_{f1}(\mathbf{k})}{\omega^2 - \epsilon_{f1}(\mathbf{k})^2 - D_{f1}(\mathbf{k})^2} + \tilde{D}_{HE}(\mathbf{k}). \quad (3.25)$$

Depois da substituição ω para $\omega + i\eta$, as expressões são separadas em parte imaginária e real. Dessa forma, as autoenergias normal e anômala se decompõem em duas equações. Nota-se três parâmetros em comum nas eqs. 3.24 e 3.25, sendo V_1 relacionado à hibridização dos estados de férmions ocultos com elétrons de baixa energia, ϵ_{f1} à energia dos férmions ocultos e D_{f1} ao parâmetro de ordem supercondutor. Os polos das expressões encontram-se na raiz quadrada da soma dos quadrados da energia do férmion oculto e do parâmetro de ordem supercondutor. Os demais termos ($\tilde{a}$, b e $\tilde{D}_{HE}$) correspondem a uma correção de alta energia, para aprimorar os resultados. É importante ressaltar que, quando $D_{f1} = 0$, a eq. 3.25 referente à autoenergia anômala vai a zero, ficando apenas a autoenergia normal, que descreve o estado *pseudogap* ou metálico correspondente àquela solução supercondutora, apresentando apenas um polo em ϵ_{f1} . O caso em que o modelo descreve a fase líquida de Fermi ocorre quando $V_1 = 0$, ou seja, na ausência de hibridização.

O artigo do modelo em questão [4] visa estudar de forma abrangente a evolução da estrutura eletrônica com a temperatura, dopagem e interação U . Os autores abordam como os parâmetros das expressões 3.24 e 3.25 variam conforme a modificação desses três aspectos. No artigo, o ajuste do modelo com os resultados de TCMDC é feito inicialmente com a parte imaginária das funções 3.24 e 3.25; exemplos do artigo para os ajustes das partes imaginárias podem ser vistos na Fig. 19.

Os ajustes da Fig. 19 são referentes às regiões *underdoped* e *overdoped* (dopagem abaixo e acima daquela em que T_c é máxima), respectivamente. Para $n = 0.965$ a dopagem é $p = 0.035$ ($p = 1 - n$). Relembrando a Fig. 2, obtida sem supercondutividade, nota-se que nesta região de dopagem temos a fase *pseudogap*. Já em relação a $n = 0.868$, a dopagem está em torno de $p = 0.132$, referente à fase metálica convencional nos resultados de TCMDC obtidos anteriormente.

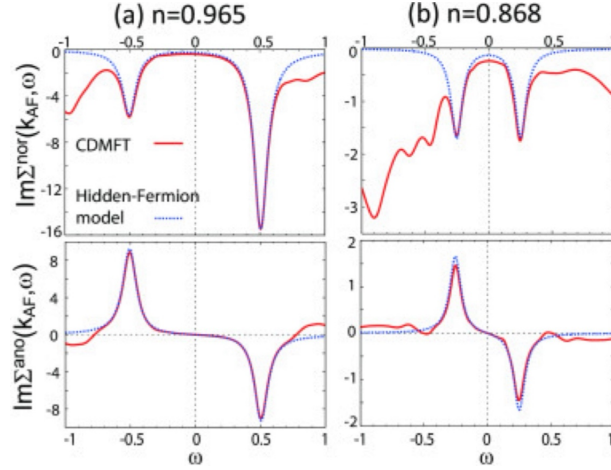


Figura 19 – Partes imaginárias das autoenergias normal e anômala em função de ω obtidas por TCMDC (curvas vermelhas) no espaço de momento em $\vec{k} = (0, \pi)$ para $U = 8$, $T = 0.01$ e ajuste das equações do modelo de férmions escondidos (curvas tracejadas em azul). Figura retira de [4].

Observa-se que o modelo é capaz de reproduzir com precisão os resultados numéricos em baixas energias. Para $n = 0.965$, o ajuste em torno do nível de Fermi ($\omega = 0$) é preciso; no entanto, à medida que se afasta da frequência em torno de zero, o ajuste acaba não sendo tão eficaz. Em relação a $n = 0.868$, percebe-se que o ajuste do modelo com os dados piora, como pode ser observado no caso da parte imaginária da autoenergia normal ($\text{Im}\Sigma^{\text{nor}}(k_{AF}, \omega)$) em torno do nível de Fermi, em que a curva do ajuste se afasta um pouco dos dados de TCMDC. De maneira geral, observamos que o ajuste piora à medida que a densidade diminui.

Os gráficos da variação dos parâmetros ($V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}, \tilde{a}, b, \tilde{D}_{HE}$) do modelo em relação à densidade serão exibidos no próximo capítulo, juntamente com os obtidos de ajustes de resultados para a fase supercondutora obtidos em trabalhos anteriores do grupo, ajustes estes realizados no presente trabalho.

4 Resultados

Como mencionado, em trabalhos anteriores do grupo, o modelo de Hubbard foi estudado sem considerar a supercondutividade, identificando duas fases metálicas distintas: a convencional e a *pseudogap*. Com base nesse estudo, o principal objetivo da pesquisa atual é investigar se essas duas fases metálicas encontradas originam duas fases supercondutoras distintas ou não. Para isso, utilizamos um modelo fenomenológico, descrito no capítulo anterior, para ajustar as autoenergias da fase supercondutora, determinando os parâmetros das expressões analíticas das eqs. 3.24 e 3.25. Essas autoenergias correspondem a resultados de Teoria do Campo Médio Dinâmico Celular considerando supercondutividade, que foram obtidos por colaboradores, para $U = 8$, amplitude de *hopping* $t = 1$ e $t' = -0.1$ e temperatura nula, para diferentes valores de dopagens. Neste trabalho, todos os ajustes foram realizados por meio da implementação de um código em *python* que chama a rotina de mínimos quadrados *least-squares*.

4.1 Testes Iniciais

Inicialmente, tentamos ajustar separadamente as quatro equações da autoenergia: partes real e imaginária da autoenergia normal e partes real e imaginária da autoenergia anômala. No entanto, os parâmetros em comum nas quatro equações ($V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}, b$) apresentaram valores distintos. Outra tentativa foi ajustar primeiro as equações referentes às partes imaginárias, encontrando inicialmente os parâmetros em comum e, posteriormente, o ajuste das partes reais otimizaria apenas os parâmetros restantes nas equações da parte real ($\tilde{a}, \tilde{D}_{HE}$).

Observa-se que os ajustes referentes às partes imaginárias, exemplificados na Fig. 20 para $p = 0.082$ ou $n = 0.918$ (pois $p = 1 - n$), próximo ao nível de Fermi $\omega = 0$ são eficazes tanto para a autoenergia normal quanto para a autoenergia anômala. Após determinar os valores de $V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}$ e b e fixá-los para o ajuste das partes reais, encontramos os valores de $\tilde{a}$ e $\tilde{D}_{HE}$. Os ajustes das partes reais não se mostram eficazes com os dados de TCMDC, ao contrário das partes imaginárias. Outros testes foram realizados, ajustando juntamente as partes real e imaginária da autoenergia normal e posteriormente as curvas para a autoenergia anômala. Contudo, os resultados permaneceram insatisfatórios. Constatou-se que, para obter um bom ajuste de todas as curvas e garantir a concordância dos parâmetros em comum, é necessário realizar ajustes simultâneos das quatro curvas.

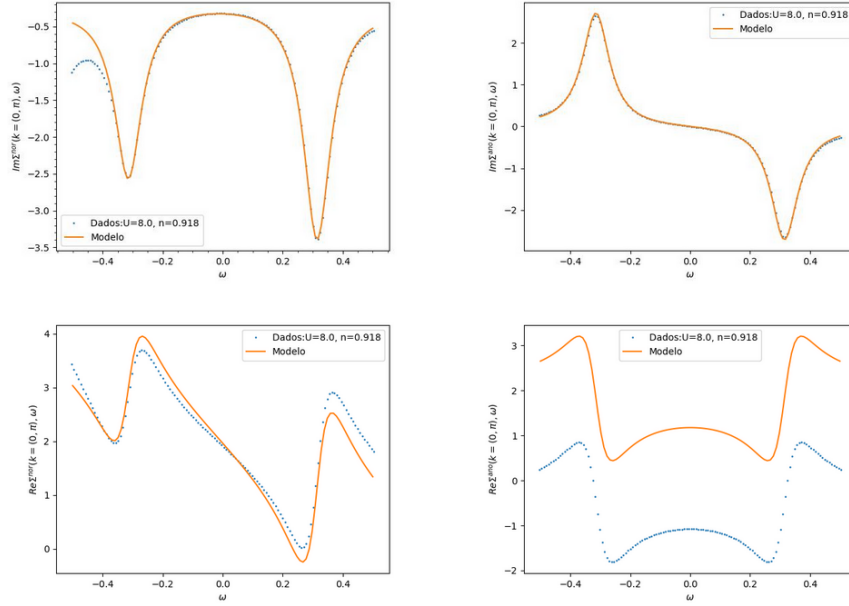


Figura 20 – Partes imaginária e real das autoenergias normal e anômala em função de ω obtidas por TCMDC (curvas tracejadas em azul) no espaço de momento, em $\vec{k} = (0, \pi)$, para $U = 8$, $T = 0$, $n = 0.918$ ($p = 0.082$), e ajuste das equações do modelo de férmions escondidos (curvas em laranja). Os valores dos parâmetros ($V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}, b, \tilde{a}, \tilde{D}_{HE}$) são respectivamente $[0.5515, 0.04723, -0.3118, 3.5446, 2.1068, -0.1485]$. Ajustes realizados inicialmente para as equações das partes imaginárias e, em seguida, para partes reais.

4.2 Ajuste simultâneo das quatro curvas

Nesta seção, discutimos os ajustes simultâneos das quatro equações das autoenergias normal e anômala, partes real e imaginária. No código, cada equação gera um vetor de resíduos, que representa a diferença entre os dados de TCMD e as funções ajustadas. Para realizar a otimização simultânea, esses vetores de resíduos são combinados em um único vetor, permitindo que a função de otimização, neste caso a *least-square*, encontre o conjunto de parâmetros que minimiza a soma dos quadrados dos resíduos de todas as equações em conjunto.

A Fig. 21 exhibe os ajustes para a mesma densidade mostrada anteriormente. A melhoria nos ajustes das quatro expressões com os dados de TCMDC é evidente, com todos os quatro painéis mostrando bons ajustes, ao encontrar um único valor para cada parâmetro das equações de autoenergia. Nas seções seguintes discutiremos os parâmetros obtidos e os ajustes realizados para diferentes dopagens.

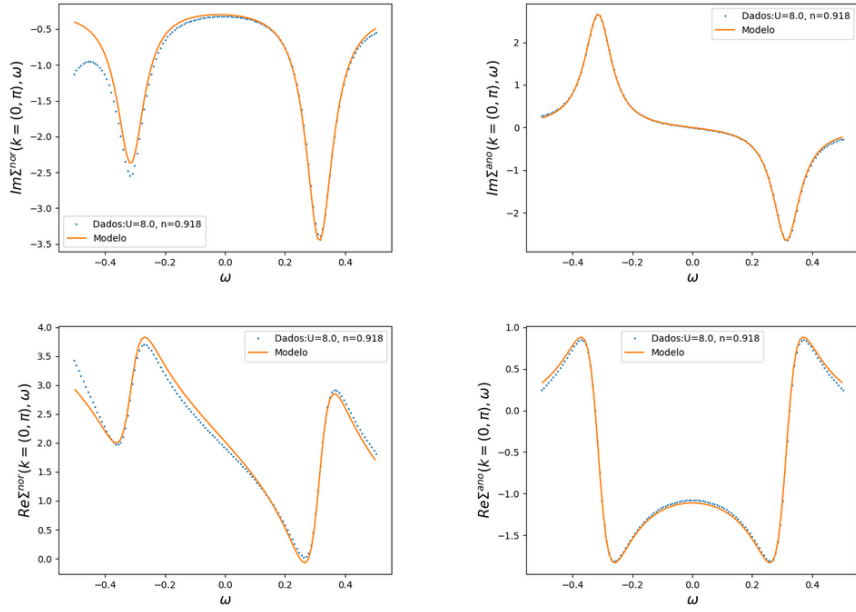


Figura 21 – Partes imaginária e real das autoenergias normal e anômala em função de ω obtidas por TCMDC (curvas tracejadas em azul) no espaço de momento, em $\vec{k} = (0, \pi)$, para $U = 8$, $T = 0$, $n = 0.918$ ($p = 0.082$), e ajuste das equações do modelo de férmions escondidos (curvas em laranja). Os valores dos parâmetros ($V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}, b, \tilde{a}, \tilde{D}_{HE}$) são respectivamente $[0.5484, 0.06290, -0.3089, 3.0364, 2.2063, -0.1994]$. Ajustes realizados simultaneamente para as quatro equações da autoenergia.

4.2.1 Analisando os ajustes em diferentes dopagens

Inicialmente, discutiremos os ajustes para três regiões de dopagens: fase *pseudogap*, fase metálica convencional e região próxima a uma possível coexistência das duas fases. Na seção seguinte, uma discussão mais detalhada aborda os valores dos parâmetros em relação às densidades, comparando com os resultados obtidos no artigo do modelo fenomenológico que usamos [4].

Os ajustes da Fig. 22 são para $p = 0.145$ ou $n = 0.855$ (pois $p = 1 - n$). Nesse caso, o ponto de partida da TCMDC é a fase metálica convencional. Observa-se que o modelo não ajusta com precisão as curvas próximas do nível de Fermi, condizendo com o mencionado anteriormente que, para densidades menores (mais longe do isolante de Mott), o ajuste acaba não sendo compatível. No estado supercondutor os polos de autoenergia estão localizados em $\omega = \pm\sqrt{\epsilon_{f1}^2 + D_{f1}^2}$, conforme descrito nas eqs. 3.24 e 3.25. Nesse caso, os picos da autoenergia (linhas pontilhadas pretas) aparecem em torno de $\omega = \pm 0.2633$.

À medida que se diminui a dopagem para $p = 0.088$, ou seja, $n = 0.912$ – veja a Fig. 23, o sistema se aproxima da transição entre a fase metálica convencional e a *pseudogap*, como evidenciado na Fig. 2. Os ajustes do modelo com os dados são mais precisos para essa dopagem em comparação com o caso anterior. No entanto, percebe-se

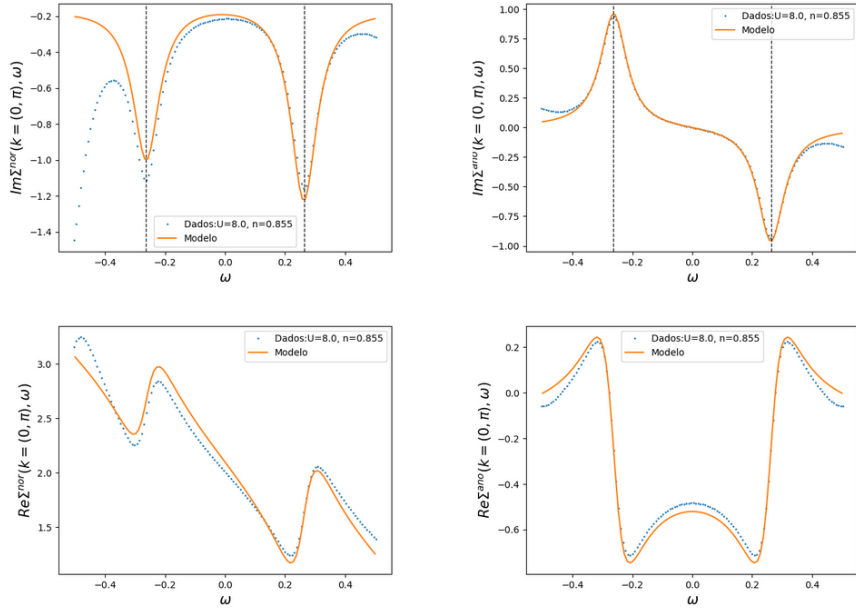


Figura 22 – Partes imaginária e real das autoenergias normal e anômala em função de ω obtidas por TCMDC (curvas tracejadas em azul) no espaço de momento, em $\vec{k} = (0, \pi)$, para $U = 8$, $T = 0$, $n = 0.855$ ($p = 0.145$), e ajuste das equações do modelo de férmions escondidos (curvas em laranja). Os valores dos parâmetros ($V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}, b, \tilde{a}, \tilde{D}_{HE}$) são respectivamente $[0.3235, 0.03074, -0.2615, 2.3575, 2.1428, -0.1394]$.

que em torno do nível de Fermi a parte real da autoenergia normal e a da anômala não se ajustam tão bem. Os picos nas partes imaginárias das autoenergias (linhas pontilhadas pretas) aparecem em torno de $\omega = \pm 0.3009$.

Para dopagens mais baixas, ou densidades de carga perto de 1 (próximo do isolante de Mott), o ajuste se torna mais eficaz. Na Fig. 24, vemos os resultados para $p = 0.041$ ou $n = 0.959$. Nesse caso o ponto de partida da TCMDC é a fase *pseudogap*. Observa-se que os ajustes de todos os gráficos são excelentes. Os picos da autoenergia (linhas pontilhadas pretas) aparecem em torno de $\omega = \pm 0.3824$.

Os resultados teóricos discutidos anteriormente na Fig. 14 referentes à parte imaginária da autoenergia da fase *pseudogap*, desconsiderando a supercondutividade, apresentam um pico no nível de Fermi. Para comparação, se tomarmos $D_{f1} = 0$ na solução acima, para “desligar” a supercondutividade, encontramos que o polo da parte imaginária da autoenergia normal (dada na eq. 3.24) está localizado em $\omega = \epsilon_{f1} = 0.1362$.

O comportamento qualitativo da autoenergia em função da frequência é o mesmo para diferentes dopagens analisadas. Verifica-se que o modelo se ajusta bem em uma faixa específica de densidade de carga. Em regiões com densidades muito baixas, o ajuste é pouco eficaz, enquanto, para densidades próximas de 1, o ajuste é eficiente. Na região próxima à transição de fases, o ajuste não é tão bom.

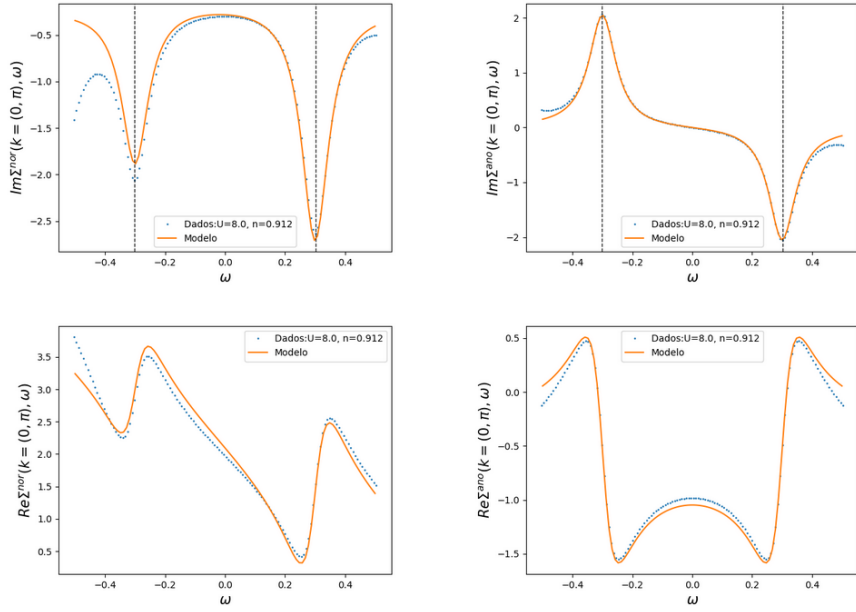


Figura 23 – Partes imaginária e real das autoenergias normal e anômala em função de ω obtidas por TCMDC (curvas tracejadas em azul) no espaço de momento, em $\vec{k} = (0, \pi)$, para $U = 8$, $T = 0$, $n = 0.912$ ($p = 0.088$), e ajuste das equações do modelo de férmions escondidos (curvas em laranja). Os valores dos parâmetros ($V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}, b, \tilde{a}, \tilde{D}_{HE}$) são respectivamente $[0.4794, 0.05947, -0.2950, 3.1845, 2.2412, -0.3190]$.

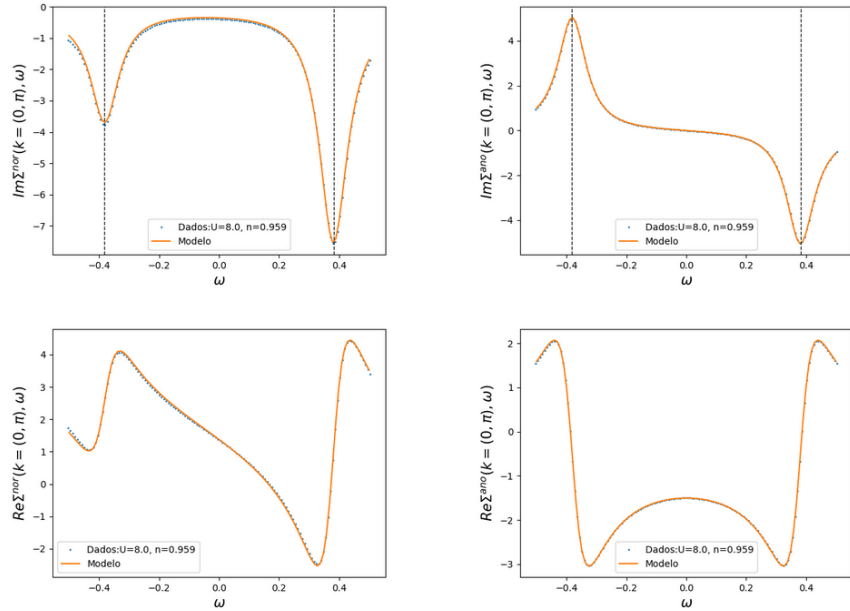


Figura 24 – Partes imaginária e real das autoenergias normal e anômala em função de ω obtidas por TCMDC (curvas tracejadas em azul) no espaço de momento, em $\vec{k} = (0, \pi)$, para $U = 8$, $T = 0$, $n = 0.959$ ($p = 0.041$), e ajuste das equações do modelo de férmions escondidos (curvas em laranja). Os valores dos parâmetros ($V_1, \epsilon_{f1}, D_{f1}, b, \tilde{a}, \tilde{D}_{HE}$) são respectivamente $[0.7885, 0.1362, -0.3573, 2.8938, 1.9463, -0.009704]$.

4.3 Analisando os parâmetros do modelo fenomenológico

Esta seção discute os valores dos parâmetros do modelo em função da densidade de carga obtidos para $U = 8$ e $T = 0$. Primeiramente, serão discutidos os valores obtidos pelos ajustes realizados neste trabalho. Em seguida, esses valores serão comparados com os resultados obtidos no artigo da Ref. [4].

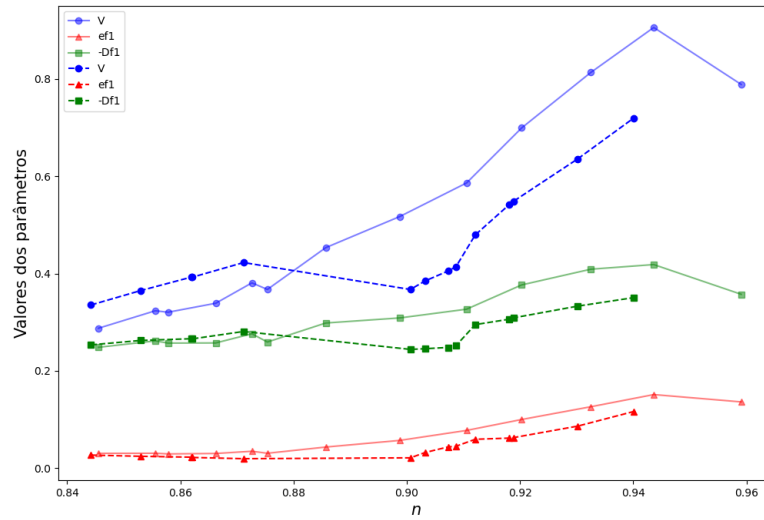


Figura 25 – Dependência dos parâmetros do modelo fenomenológico em relação à dopagem obtidos para $U = 8$ e $T = 0$. Esses parâmetros estão relacionados aos polos de baixa energia das expressões analíticas das eqs. 3.24 e 3.25.

Os valores dos parâmetros são representados por pontos no gráfico, conectados por linhas para guiar nossos olhos – veja a Fig. 25. Cada parâmetro é distinguido por uma cor específica: as curvas mais escuras (linhas tracejadas) mostram os resultados partindo de uma dopagem maior para uma menor, ou seja, vindo da fase metálica convencional para a *pseudogap*. Por outro lado, as curvas mais claras (linhas contínuas) indicam os parâmetros obtidos partindo de uma dopagem menor para uma maior, nesse caso, da fase *pseudogap* para a metálica convencional. Esse procedimento de obter os resultados aumentando e diminuindo a dopagem permite identificar uma possível região de coexistência.¹

As linhas em azul da Fig. 25 referem-se aos valores de hibridização V_1 encontrados nos ajustes. Observa-se um comportamento crescente à medida que se aumenta a densidade de carga. Para a faixa de densidade $0.87 < n < 0.89$ (curva em azul-escuro) verifica-se a

¹ O cálculo da TCMDC é autoconsistente, tendo início a partir de uma função tentativa. No cálculo para uma nova dopagem, podemos usar como tentativa inicial a solução obtida para uma dopagem menor (maior), ou seja, os cálculos são feitos aumentando-se (diminuindo-se) a dopagem. Na presença de uma região de coexistência, os parâmetros devem apresentar uma variação brusca em valores de dopagens diferentes, dependendo de se foram obtidos com o aumento ou diminuição da dopagem.

ausência de pontos. Os dados obtidos em TCMDC para esse intervalo de densidade são atípicos, não correspondendo com os padrões observados nos gráficos de autenergia para outras densidades; é possível que não tenha havido convergência do cálculo. Para baixas densidades, os valores dos parâmetros partindo da fase *pseudogap* e metálica convencional são mais próximos, podendo coincidir dentro da margem de incerteza. Ao analisar o gráfico dos parâmetros, notamos que os valores encontrados para a hibridização V_1 são maiores que zero para todas as densidades consideradas. Nesse caso, se desligamos o parâmetro de ordem superconductor D_{f1} , com V_1 sendo maior que zero em todos os casos, nenhuma solução é correspondente ao líquido de Fermi.'

A energia do férmion oculto (linhas em vermelho) mantém valores próximos de zero; a partir de $n = 0.90$, observa-se um aumento gradual dessa energia. Já o parâmetro de ordem superconductor (em verde) apresenta valores similares tanto partindo da fase *pseudogap* quanto da fase metálica convencional na região de baixas densidades, e posteriormente as duas curvas se distanciam um pouco.

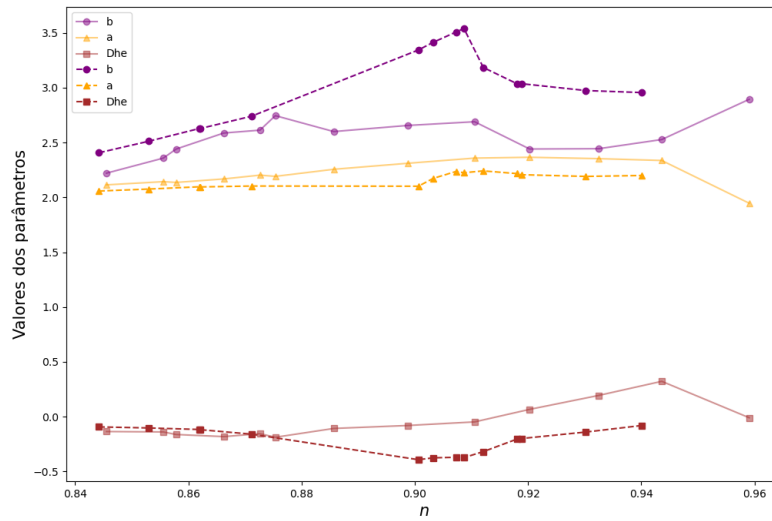


Figura 26 – Dependência dos parâmetros do modelo fenomenológico em relação à dopagem para $U = 8$ e $T = 0$. Esses parâmetros estão relacionados à correção de alta energia das eqs. 3.24 e 3.25.

No gráfico da Fig. 26 estão os valores dos parâmetros da correção de alta energia. Seguindo a lógica anterior, as curvas mais escuras representam os parâmetros correspondendo às soluções obtidas partindo de uma dopagem maior para uma menor, enquanto as mais claras indicam o oposto. As curvas na cor roxa representam o parâmetro b , que aumenta conforme a densidade de carga cresce para as densidades menores analisadas. Observa-se que os parâmetros advindos da *pseudogap* e da fase metálica convencional são próximos, porém possivelmente distintos. Em regiões de maior densidade, o parâmetro b apresenta comportamento decrescente com o aumento da densidade.

Quanto aos valores do parâmetro $\tilde{a}$, nota-se valores aproximados partindo da *pseudogap* e da metálica convencional, principalmente em baixas densidades. De maior para menor densidade, a variação da curva (amarelo-escuro) é mínima, enquanto no sentido oposto, a variação é um pouco maior (amarelo-claro).

O parâmetro $\tilde{D}_{HE}$ exibe flutuações significativas, alterando entre valores positivos e negativos. Ao observarmos a eq. 3.25, notamos que este parâmetro tem o papel de uma constante, influenciando o subir e descer dos ajustes no gráfico.

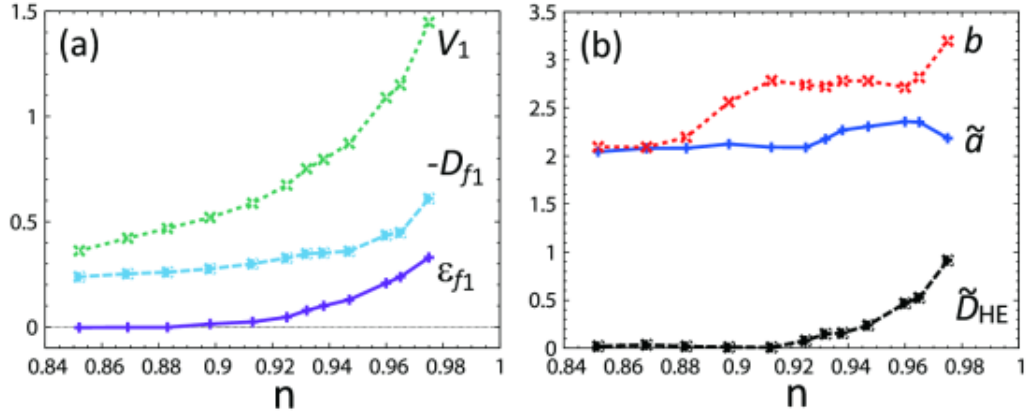


Figura 27 – Valores dos parâmetros encontrados nos ajustes do artigo da Ref. [4]. Os resultados são para $U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.02$ e $T = 0.01$.

Na Fig. 27, são apresentados os resultados dos parâmetros do modelo obtidos para os dados de TCMDC para $U = 8$ e $T = 0.01$ no artigo da Ref. [4]. Ao analisar a Fig. 27 (a), que se refere ao férmion escondido f_1 , observa-se que os parâmetros V_1 , ϵ_{f1} e $|D_{f1}|$ apresentam comportamento semelhante ao encontrado nos nossos ajustes: à medida que n diminui, esses parâmetros também diminuem. O artigo discute que a redução do parâmetro de hibridização reflete a diminuição da intensidade dos polos de autoenergia.

Observa-se também que os valores encontrados por nós para a energia do férmion oculto ϵ_{f1} são semelhantes aos do artigo, aproximando-se de zero na região para baixas densidades. Para algumas densidades ϵ_{f1} é zero no artigo, conforme pode ser visto na Fig. 27 (a).

Em relação aos parâmetros de correção de alta energia, ao compararmos os valores encontrados no artigo com os obtidos nos ajustes realizados neste trabalho, observam-se algumas semelhanças. Os parâmetros $\tilde{a}$ e b da Fig. 27 (b) do artigo apresentam valores iguais para densidades baixas. À medida que a densidade aumenta vemos o comportamento crescente de b , sendo similar ao encontrado nos ajustes deste trabalho. No entanto, para $n > 0.90$ encontramos que os valores de b diminuem, enquanto no artigo permanecem quase constantes nessa região. O comportamento do parâmetro $\tilde{a}$ permanece consistente com os resultados apresentados no artigo para todas as densidades. Por outro lado, o parâmetro $\tilde{D}_{HE}$ nos nossos ajustes possui valores negativos próximos de zero, ao contrário dos valores

da Fig. 27 (b), que permanecem em zero para densidades mais baixas e possuem um leve comportamento crescente para $n > 0.91$.

Como mencionado, a interpretação dos gráficos de autoenergia é abstrata e nota-se uma variabilidade dos parâmetros do modelo fenomenológico para diferentes densidades. A diferença entre as curvas para cada parâmetro obtidas ao aumentar e diminuir n , é pequena em algumas regiões de densidades, o que levanta a necessidade de calcular a incerteza de cada parâmetro para verificar se, de fato, elas coincidem ou não em certas regiões. A rotina de mínimos quadrados utilizada não fornece essas incertezas. Buscamos outras possíveis implementações do cálculo de incertezas e constatamos que ele pode ser feito através da matriz de covariância [36]. Por outro lado, notamos que os dados utilizados apresentam muitas flutuações, o que dificulta a análise. Além disso, o ajuste considera apenas um estado de férmion oculto, sendo que, especialmente na fase metálica convencional, pode ser necessário incluir mais férmions ocultos. No momento, nossos colaboradores estão executando um código numérico com o qual é possível obter soluções de TCMDC mais precisas. No futuro próximo, realizaremos os ajustes do modelo fenomenológico para o novo conjunto de dados da TCMDC, considerando a inclusão de mais férmions escondidos. Se pertinente, retomaremos o estudo da implementação do cálculo das incertezas via matriz de covariância.

5 Conclusão e Perspectivas

O objetivo central deste trabalho foi investigar a fase supercondutora dos óxidos de cobre. Para alcançar esse objetivo, durante o mestrado, foi necessário estudar diversos tópicos relacionados com sistemas fortemente correlacionados. Inicialmente foi analisada a motivação para o estudo de supercondutividade, que neste caso se trata de uma supercondutividade não convencional, não descrita pela teoria BCS. O interesse principal é entender a formação de pares de elétrons nesses materiais. Além da fase supercondutora, há outras fases dos cupratos que não são bem entendidas, como a *pseudogap*, em que há redução de peso espectral em algumas regiões do espaço de momentos. Compreender as diferentes fases dos cupratos contribui para conhecimento do mecanismo de formação de pares desses materiais. Do ponto de vista de aplicações tecnológicas, os cupratos supercondutores possuem uma alta temperatura crítica, que pode chegar a ser da ordem de 180 K. Isso torna mais viável a utilização desses supercondutores em tecnologias.

Para o estudo da fase supercondutora, é essencial um modelo que descreva adequadamente os fenômenos emergentes desses materiais. O modelo de Hubbard é eficaz na descrição de diversas fases dos cupratos, ao considerar a competição entre a energia cinética dos elétrons (proporcional ao *hopping* t) e a energia de interação Coulombiana U quando há dois elétrons no mesmo sítio. No caso dos cupratos, acredita-se que os fenômenos emergentes são originados dos planos de cobre e oxigênio que compõem sua estrutura. A fase supercondutora é observada na presença de dopagem. Assim, para descrever tais materiais, utilizamos o modelo de Hubbard bidimensional dopado. A solução desse modelo no caso bidimensional é realizada numericamente. A Teoria do Campo Médio Dinâmico Celular (TCMDC) é uma das técnicas capazes de resolver esse modelo e descrever os fenômenos associados. Por esse método mapeia-se o problema da rede num problema de *cluster* de impurezas, o que facilita a resolução, pois o problema de impurezas é bem conhecido na literatura. Resultados teóricos do modelo de Hubbard resolvido por TCMDC confirmam a existência de duas fases metálicas distintas em função da dopagem do material: a fase *pseudogap* e a metálica convencional. Contudo, esses resultados foram obtidos desconsiderando a supercondutividade.

Os dados utilizados neste trabalho foram obtidos por colaboradores resolvendo o modelo de Hubbard bidimensional para $U/t = 8$ e temperatura nula, considerando supercondutividade. Para isso, um termo de formação de pares foi adicionado ao modelo de impurezas. O *cluster* de impurezas foi resolvido por diagonalização exata, um método de alta precisão a temperatura zero para sistemas pequenos. Após a resolução, uma saída usual do código de TCMDC é a função de Green interagente ou a autoenergia correspondente, que carrega informações sobre a forte correlação presente no sistema. Contudo, extrair

informações adicionais sobre a fase supercondutora a partir desses dados é desafiador.

Os resultados numéricos obtidos com TCMDC são bem representados por um modelo fenomenológico que descreve a dinâmica do elétron em baixas energias (próxima ao nível de Fermi $\omega = 0$). O modelo consiste em considerar que os elétrons itinerantes encontram-se hibridizados com elétrons localizados ocultos. A partir daí, é possível escrever expressões analíticas para a autoenergia do estado supercondutor, que podem ser ajustadas aos dados de TCMDC. A autoenergia do estado normal pode então ser obtida ao se “desligar” o parâmetro de ordem supercondutor nas expressões analíticas. Com isso, podemos verificar que tipo de estado normal (*pseudogap* ou metal convencional) dá origem à solução supercondutora. Em outras palavras, o comportamento dos parâmetros das expressões das autoenergias em função da dopagem são úteis para o entendimento das fases supercondutora e *pseudogap*.

Neste trabalho, construímos um código que ajusta de forma simultânea as expressões do modelo fenomenológico para as quatro curvas que descrevem a autoenergia para a fase supercondutora. Mais especificamente, ajustamos as curvas numéricas para as partes real e imaginária da autoenergia normal e da autoenergia anômala correspondentes ao modelo de Hubbard resolvido via TCMDC para $U/t = 8$ e vários valores de dopagem. Ao ajustar as expressões do modelo fenomenológico do estado supercondutor com os dados numéricos, pretendíamos concluir se existem duas soluções supercondutoras distintas: uma originária do estado metálico normal e outra do estado *pseudogap*. No entanto, os dados atuais da TCMDC apresentam flutuações que podem dificultar as nossas conclusões; além disso, os ajustes foram feitos considerando apenas um estado fermiônico oculto, deixando de levar em consideração a contribuição dos demais estados de férmions ocultos.

Como perspectiva futura, pretendemos utilizar dados numéricos aprimorados de TCMDC, considerando uma parametrização mais geral do banho no qual o *cluster* de impurezas está embebido, o que já está sendo desenvolvido por colaboradores. Também planejamos adaptar o código de ajustes, incluindo o cálculo de incerteza para cada parâmetro e considerando múltiplos estados fermiônicos ocultos do modelo fenomenológico. Outro aspecto relevante para futuras conclusões é obter novos dados para um valor de $U/t \approx 6.0$, que está mais próximo da região de coexistência das fases *pseudogap* e metálica convencional.

REFERÊNCIAS

- [1] Scalapino, Douglas J: *A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors*. Reviews of Modern Physics, 84(4):1383–1417, 2012. Citado na página 10.
- [2] Taillefer, Louis: *Scattering and pairing in cuprate superconductors*. Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 1(1):51–70, 2010. Citado na página 10.
- [3] Souza Braganca, Helena de: *Emaranhamento, dinâmica de não-equilíbrio e supercondutividade em sistemas de elétrons fortemente interagentes*. 2018. Citado 4 vezes nas páginas 11, 17, 25 e 34.
- [4] Sakai, Shiro, Marcello Civelli e Masatoshi Imada: *Hidden-fermion representation of self-energy in pseudogap and superconducting states of the two-dimensional Hubbard model*. Physical Review B, 94(11):115130, 2016. Citado 7 vezes nas páginas 12, 35, 36, 37, 40, 43 e 45.
- [5] Onnes, Heike Kamerlingh: *Through measurement to knowledge: The selected papers of Heike Kamerlingh Onnes 1853–1926*, volume 124. Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 14.
- [6] Delft, Dirk van e Peter Kes: *The discovery of superconductivity*. Europhysics News, 42(1):21–25, 2011. Citado na página 14.
- [7] Annett, James F: *Superconductivity, superfluids and condensates*, volume 5. Oxford University Press, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 16.
- [8] Bardeen, John, Leon N Cooper e J Robert Schrieffer: *Microscopic theory of superconductivity*. Physical Review, 106(1):162, 1957. Citado na página 14.
- [9] Commons, Wikimedia: *File: timeline of superconductivity from 1900 to 2015. svg—wikimedia commons, 2023*. URL https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Timeline_of_Superconductivity_from_1900_to_2015.svg. [Online. Citado na página 15.
- [10] Garland Jr, James W: *Isotope effect in superconductivity*. Physical Review Letters, 11(3):114, 1963. Citado na página 16.
- [11] Gough, CE, MS Colclough, EM Forgan, RG Jordan, M Keene, CM Muirhead, AIM Rae, N Thomas, JS Abell e S Sutton: *Flux quantization in a high- T_c superconductor*. Nature, 326(6116):855–855, 1987. Citado na página 16.

-
- [12] Phillips, Philip: *Advanced solid state physics*. Cambridge University Press, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 16, 17 e 18.
- [13] Taylor, Philip L e Olle Heinonen: *A quantum approach to condensed matter physics*. Cambridge university press, 2002. Citado na página 16.
- [14] Jérôme, D, A Mazaud, M Ribault e K Bechgaard: *Superconductivity in a synthetic organic conductor (TMTSF) 2PF 6*. Journal de Physique Lettres, 41(4):95–98, 1980. Citado na página 17.
- [15] Keimer, Bernhard, Steven A Kivelson, Michael R Norman, Shinichi Uchida e J Zaanen: *From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides*. Nature, 518(7538):179–186, 2015. Citado na página 17.
- [16] Kaxiras, Efthimios e John D Joannopoulos: *Quantum theory of materials*. Cambridge university press, 2019. Citado na página 18.
- [17] Malozemoff, AP, J Yuan e CM Rey: *High-temperature superconducting (HTS) AC cables for power grid applications*. Em *Superconductors in the power grid*, páginas 133–188. Elsevier, 2015. Citado na página 19.
- [18] Dagotto, Elbio: *Correlated electrons in high-temperature superconductors*. Reviews of Modern Physics, 66(3):763, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- [19] Barišić, Neven, Mun K Chan, Yuan Li, Guichuan Yu, Xudong Zhao, Martin Dressel, Ana Smontara e Martin Greven: *Universal sheet resistance and revised phase diagram of the cuprate high-temperature superconductors*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 110(30):12235–12240, 2013. Citado na página 20.
- [20] Shi, Ming, A Bendounan, E Razzoli, S Rosenkranz, MR Norman, JC Campuzano, J Chang, Martin Månsson, Y Sassa, Tomas Claesson *et al.*: *Spectroscopic evidence for preformed Cooper pairs in the pseudogap phase of cuprates*. Europhysics Letters, 88(2):27008, 2009. Citado na página 21.
- [21] Wu, Wei, Mathias S Scheurer, Shubhayu Chatterjee, Subir Sachdev, Antoine Georges e Michel Ferrero: *Pseudogap and Fermi-surface topology in the two-dimensional Hubbard model*. Physical Review X, 8(2):021048, 2018. Citado na página 22.
- [22] Shen, Kyle M, F Ronning, DH Lu, Felix Baumberger, NJC Ingle, WS Lee, W Meevasana, Y Kohsaka, M Azuma, M Takano *et al.*: *Nodal quasiparticles and antinodal charge ordering in $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$* . Science, 307(5711):901–904, 2005. Citado na página 23.

- [23] Gomes, Kenjiro K, Abhay N Pasupathy, Aakash Pushp, Shimpei Ono, Yoichi Ando e Ali Yazdani: *Visualizing pair formation on the atomic scale in the high- T_c superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* . Nature, 447(7144):569–572, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.
- [24] Bragança, Helena, Shiro Sakai, MCO Aguiar e Marcello Civelli: *Correlation-driven Lifshitz transition at the emergence of the pseudogap phase in the two-dimensional Hubbard model*. Physical review letters, 120(6):067002, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.
- [25] Giamarchi, Thierry: *Quantum physics in one dimension*, volume 121. Clarendon press, 2003. Citado na página 27.
- [26] Brush, Stephen G: *History of the Lenz-Ising model*. Reviews of modern physics, 39(4):883, 1967. Citado na página 28.
- [27] Salinas, Sílvia RA: *Introdução à física estatística*. Edusp, 1999. Citado na página 28.
- [28] Miranda, E: *Transições de Fase e o Grupo de Renormalização*. Unicamp, São Paulo, 2005. Citado na página 29.
- [29] Kotliar, Gabriel e Dieter Vollhardt: *Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory*. Physics today, 57(3):53–59, 2004. Citado na página 30.
- [30] Santos, Flávio Luis Noronha dos *et al.*: *Estados ligados e supercondutividade não convencional em sistemas com impurezas*. 2021. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 34.
- [31] Georges, Antoine e Gabriel Kotliar: *Hubbard model in infinite dimensions*. Physical Review B, 45(12):6479, 1992. Citado na página 31.
- [32] Aryanpour, K, Th A Maier e M Jarrell: *Comment on “cluster methods for strongly correlated electron systems”*. Physical Review B, 71(3):037101, 2005. Citado na página 31.
- [33] Biroli, Giulio e Gabriel Kotliar: *Cluster methods for strongly correlated electron systems*. Physical Review B, 65(15):155112, 2002. Citado na página 31.
- [34] Civelli, Marcello: *Investigation of strongly correlated electron systems with cellular dynamical mean field theory*. arXiv preprint arXiv:0710.2802, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 34.
- [35] Sakai, Shiro, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held e Masatoshi Imada: *Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory*. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 85(3):035102, 2012. Citado na página 34.

-
- [36] Eleno, Luiz TF: *Métodos Computacionais da Física*. Citado na página 46.