

Universidade Estadual de Campinas

Supercondutividade nodal em metais de transição dicalcogenados

por

Bruno Uchoa Barboza

Orientado por Guillermo Cabrera

Banca examinadora

Prof. Dr. Guillermo Cabrera

Prof. Dr. Valter Luiz Líbero

Prof. Dr. Wilson Aires Ortiz

Prof. Dr. Iakov Kopelevitch

Prof. Dr. Carlos Rettori

Campinas, São Paulo

13 de agosto de 2004

Agradecimentos

Esse trabalho não teria acontecido sem a ajuda de várias pessoas. Agradeço ao meu orientador por ter ajudado a construir a base da minha intuição física, e pela imensa liberdade que tive ao longo desses anos; ao Antônio Hélio, que me ensinou como fazer ciência pode ser um trabalho divertido e empolgante, agradeço pela dedicação e pela hospitalidade; ao Eduardo Miranda, por ter aguçado o meu olhar crítico e pela grande ajuda que recebi.

O agradecimento se estende a todas as pessoas que conviveram comigo, pacificamente ou não, durante esse período. Em especial, gostaria de mencionar o Rodolfo e a Maria, que moraram comigo durante um bom tempo. Agradeço ao Marcello Barbosa e ao Eduardo Peres, pelas incontáveis discussões que tanto ajudaram no período em que passei em Boston.

Agradeço também à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo suporte financeiro entre agosto de 2000 a abril de 2004, através do projeto 00/06881-9, e à Universidade de Boston pela hospitalidade.

pra Carolina.

Resumo

Investigamos os efeitos macroscópicos de ondas da densidade de carga (CDW) e da supercondutividade em sistemas organizados em planos que exibem quebra da simetria de inversão da rede (o que permitiria o aparecimento de piezoelectricidade), como nos metais de transição dicalcogenados (TMDs). Partindo da teoria de Ginzburg-Landau com dependência temporal a baixas temperaturas, estudamos como as distorções da rede e os modos coletivos de baixa energia da CDW se acoplam ao parâmetro de ordem supercondutor na presença de campos eletromagnéticos. Demonstramos que a supercondutividade e a piezoelectricidade podem coexistir nesses metais singulares. Além disso, este estudo indica a natureza do ponto crítico quântico entre a fase CDW comensurável e a fase de faixas de carga, observado em função da pressão aplicada. Estes resultados são utilizados para fundamentar um modelo microscópico que unifica a supercondutividade às fases de CDW nos TMDs. Baseados na natureza do acoplamento elétron-fônon e na topologia peculiar da superfície de Fermi, propomos que o gap de CDW tem simetria f e quebra a simetria de inversão da rede na fase disorcida. As quase-partículas da teoria são férmions de Dirac definidos pelas excitações elementares da CDW na vizinhança dos nós da superfície de Fermi, onde o gap da CDW se fecha. O estado supercondutor é formado pela atração entre férmions de Dirac através de fônons virtuais mediados pelo acoplamento piezoelétrico. Segundo esta teoria, as propriedades de transporte e o tempo de meia-vida das excitações de quase-partícula mostram fortes desvios em relação à teoria do líquido de Fermi.

Abstract

We investigate the macroscopic effects of charge density waves (CDW) and superconductivity in layered superconducting systems with broken lattice inversion symmetry (allowing for piezoelectricity) such as two dimensional (2D) transition metal dichalcogenides (TMD). We work with the low temperature time dependent Ginzburg-Landau theory and study the coupling of lattice distortions and low energy CDW collective modes to the superconducting order parameter in the presence of electromagnetic fields. We show that superconductivity and piezoelectricity can coexist in these singular metals. Furthermore, our study indicates the nature of the quantum phase transition between a commensurate CDW phase and the stripe phase that has been observed as a function of applied pressure. These results are used to support a microscopic unified picture with superconductivity and CDW phases in TMD. Based on the nature of the electron-phonon coupling and Fermi surface topology, we propose a f -wave symmetry CDW gap which breaks the lattice inversion symmetry in the distorted phase. The quasiparticles are Dirac fermions defined by the elementary excitations of the CDW in the vicinity of the Fermi surface nodes, where the CDW gap is zero. The superconducting state has its origin in virtual phonon attraction of the Dirac fermions, mediated by the piezoelectric coupling. According to this theory, the transport properties and the quasiparticles life-time show strong deviations from the Fermi liquid theory.

Sumário

1	Introdução	1
2	Metais de transição dicalcogenados	5
2.1	Instabilidade de CDW	8
2.1.1	Fases de CDW	12
2.2	Transporte	15
2.2.1	Propriedades termodinâmicas	17
2.3	Problemas em aberto	17
3	Modelo fenomenológico	19
3.1	Hamiltoniana CDW	19
3.1.1	Acoplamento piezoelétrico	23
3.2	Ansatz de emparelhamento	25
3.3	Modelo marginal	27
4	Plasmons nodais	31
4.1	Susceptibilidade de carga	33
4.1.1	Excitações interbanda	35
4.1.2	Excitações intrabanda	37
4.2	Dispersão dos plasmons	37
5	Modos normais	41
5.1	Dinâmica semi-clássica	41
5.2	Modos coletivos	45
5.2.1	Regime quase-estático	46
5.2.2	Regime dinâmico	47
5.2.3	Resultados experimentais	48
6	Teoria microscópica	51
6.1	Hamiltoniana	51
6.1.1	Equação do gap	53

6.2	Funções termodinâmicas	56
6.2.1	Calor específico	57
6.3	Fatores de coerência	61
6.3.1	Atenuação de ultra-som	63
6.3.2	Relaxação de NMR	65
6.4	Teoria BCS	70
7	Transporte	73
7.1	Condutividade óptica	74
7.1.1	Peso espectral	78
7.2	Condutividade térmica	80
7.2.1	Lei de Wiedemann-Franz	83
7.2.2	Efeito de impurezas na fase normal CDW	85
8	Efeito Meissner	87
8.1	Rigidez de London	87
8.1.1	Comprimento de penetração	89
9	Efeitos do bolso	91
9.1	Equação do gap	93
9.1.1	Temperatura zero	94
9.1.2	Temperatura finita	96
9.1.3	Temperatura crítica	98
9.2	Funções termodinâmicas	100
9.3	Atenuação de ultra-som	103
9.4	Relaxação de NMR	106
9.5	Condutividade óptica	107
9.6	Condutividade térmica	114
9.6.1	Condutividade térmica na fase normal de CDW	117
9.6.2	Efeitos de centros espalhadores na fase normal CDW	118
9.7	Efeito Meissner	119
9.8	Resumo dos efeitos do bolso	123
10	Conclusões	125
A	Definições	129
A.1	Eletromagnetismo	129
A.2	Matrizes de Pauli	129
A.3	Funções de Green	130
A.4	Teorema de Noether	131

B Acoplamento elétron-fônon	133
B.1 Linhas nodais	135
C Excitações de plasmon	137
C.1 Função dielétrica	137
C.2 Relações de Kramers-Kronig	138
C.3 Função espectral interbanda	138
C.4 Função espectral intrabanda	141
D Modos normais	145
D.1 Minimização variacional	145
D.2 Modos quase-estáticos	147
D.3 Modos dinâmicos	150
E Kernel de London	153
F Cálculos de traço	157
F.1 Traço da polarização de corrente térmica	157
F.2 Traço da susceptibilidade de carga no bolso	158
G Função espectral da susceptibilidade de carga no bolso	161

Lista de Figuras

- 2.1 Estrutura cristalina do 2H-NbSe₂. Acima: Sanduíche MX₂ na forma trigonal prismática. Figura inferior: Rede hexagonal planar. Os átomos de Se estão num segundo plano 1.47 Å abaixo ou acima do plano dos átomos de Nb . As direções **a** e **b** indicam primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. 6
- 2.2 Temperatura de transição das fases CDW e supercondutora nos TMDs à pressão ambiente. Os quadrados preenchidos representam T_{CDW} e os triângulos T_c . Da esquerda para a direita: TaSe₂, TaS₂, NbSe₂ e NbS₂. O eixo horizontal indica anisotropia entre o parâmetro de rede nos planos (a) e na direção normal a eles (c) para cada cristal. [2, 1] . 8
- 2.3 À esquerda: Rede recíproca nos planos de Nb no 2H-NbSe₂. Os pontos de alta simetria da zona de Brillouin são indicados por Γ , K e M . A superfície de Fermi das bandas d é formada por duas partes: a uma parte centrada em Γ (S_I) e uma segunda (S_{II}) centrada em K . As direções G_i da figura indicam os vetores da rede recíproca. O S indica o *ponto de sela* da estrutura eletrônica de bandas. À direita: representação pictórica da superfície de Fermi na direção normal aos planos [28]. 10
- 2.4 Diagrama de fase temperatura vs. pressão no TaSe₂. Círculos sólidos: espalhamento de neutrons [6]; quadrados e círculos abertos: difração de raio-x [5, 92]. 12
- 2.5 Acima: Medidas de ARPES em cristais de TaSe₂ a $T = 34$ K [7]. a) intensidade de fotoemissão em função da energia e momento. As cores mais claras indicam maior intensidade; b) curvas de distribuição de energia a momento constante. Abaixo: resultado de ARPES no NbSe₂ a $T = 10$ K [41]. A derivada da dispersão é descontínua em torno de ~ 50 meV. A região que foge ao comportamento quadrático na dispersão indica alguma interação das quase-partículas, possivelmente com fônons. Nenhum traço do gap de CDW foi observado nos dois cristais. 13
- 2.6 Acima: parte imaginária da autoenergia das excitações de quase-partícula no TaSe₂. Círculos fechados: ARPES [7]; linha sólida: curva de resistividade [32]. Abaixo: parte real da condutividade óptica do 2H-TaSe₂ para várias temperaturas, acima e abaixo das transições de CDW ($T_{CDW} \sim 122$ K) e de comensurabilidade ($T_I \sim 90$ K) [32] à pressão ambiente. Figura menor: a redução da temperatura redistribui o peso espectral para o infravermelho ($\omega = 0$). 16

- 3.1 Figura esquemática da superfície de Fermi. As linhas tracejadas representam as linhas nodais associadas ao vetor de onda \mathbf{Q}_1 da CDW. Os círculos preenchidos representam os nós da superfície de Fermi e os círculos vazios os pontos de sela. A linha sólida em torno da folha de dentro indica o gap de CDW proposto [10]. 20
- 3.2 Condição de aninhamento da superfície de Fermi $\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$. Um momento \mathbf{k} fora da superfície de Fermi S_I é mapeado por um deslocamento de CDW no momento $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$, dentro da folha S_{II} 22
- 3.3 Inverso do tempo de decaimento das excitações, definida pela parte imaginária da auto-energia Σ . Os pontos são medidas de ARPES para o TaSe₂ [23]: quadrados ($T = 34$ K); pentágonos ($T = 76$ K). As linhas são resultado do modelo: pontilhada ($T = 0$); sólida ($T = 34$ K); tracejada ($T = 76$ K). 24
- 3.4 A) Os estados que contribuem para que a interação elétron-fônon seja atrativa pertencem à intersecção entre os dois anéis com largura $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ cada um, em torno de k_F . A área de intersecção é maximizada para $q = 0$ (aproximação de emparelhamento). B) Aproximação de emparelhamento para os férmions de Dirac: o acoplamento elétron-fônon é mediado pela CDW com vetor de onda \mathbf{Q} , conectando os espaços nodais $+$, $-$ 25
- 4.1 a) Representação esquemática do estado fundamental no cone de Dirac. Os estados preenchidos representam as partículas da teoria. A região vazia no ramo inferior do cone é um bolso gerado pelo rebaixamento do potencial químico. b) Seção cônica da superfície de Fermi do bolso nas direções normal (v_F) e paralela (v_{Δ}) à superfície de Fermi. 32
- 4.2 Regiões sombreadas: contínuo de excitações de partícula-buraco ($\text{Im } \chi \neq 0$). A presença de um bolso com momento k_F^* abre um gap no contínuo das excitações interbanda definido pela parte imaginária da Eq. (4.19). O ramo óptico de plasmon não é amortecido em $\bar{q} \rightarrow 0$ para $\nu_p(0) = \nu_0 < 2k_F^*$ 38
- 6.1 Acima: Energia livre F e energia interna E vs. temperatura ($g = 1.1$) em unidades de $10^{-2}\alpha^2 V/g_c$. A linha tracejada corresponde ao sistema com $\Delta_s = 0$. A diferença entre a energia livre das duas curvas a $T = 0$ é igual à energia de condensação dos pares. O zero de energia foi fixado arbitrariamente. Abaixo: Entropia S (em unidades de $Vk_B\alpha^2/(2\pi\hbar^2 v_F v_{\Delta})$) vs. temperatura para $g/g_c = 1.1$. O gráfico da direita mostra que a entropia do sistema normal aumenta quadraticamente com a temperatura. 58
- 6.2 Linha sólida: campo crítico H_c em função da temperatura, em unidades de $\alpha\sqrt{V/g_c}$. $g/g_c = 1.1$. Pontilhada: lei empírica $H_c(0)[1 - T^2/T_c^2]$. Figura menor: diferença entre as duas curvas. 59
- 6.3 Dependência do calor específico C_v com a temperatura (C_v em unidades de $Vk_B\alpha g_c^{-1}$ e $g/g_c = 1.1$). O salto do calor específico ocorre na transição normal-SC à temperatura $k_B T_c \sim \Delta_0/\ln 4$ 61
- 6.4 Taxa de atenuação de ultra-som normalizada pela fase normal, α_s/α_n vs. temperatura. Linha sólida: férmions de Dirac; linha tracejada: modelo BCS. 65

6.5	Relaxação de NMR normalizada pela fase normal. Curva tracejada: relaxação no plano $\mathbf{b} = \hat{z}$ no espaço de spin. Sólida: planos $\mathbf{b} = \hat{x}, \hat{y}$; curva pontilhada: pico de Hebel-Slichter segundo a teoria BCS.	69
6.6	Representação pictórica do mapeamento da intensidade de atenuação de NMR nas direções da zona de Brillouin nos planos supercondutores. Linhas tracejadas: direções da tripla distorção de CDW, \mathbf{Q}_i , $i = 1, 2, 3$. As regiões escuras indicam as direções de atenuação mais intensas.	70
7.1	Processo de excitação interbanda com transferência de energia $\hbar\omega$ e transferência de momento zero (limite limpo), mediada pela absorção de um fóton. O preenchimento completo da banda de baixo proíbe a absorção de fótons por elétrons já termicamente excitados. A abertura do gap restringe os processos de absorção aos elétrons do condensado e aos fótons com energia maior que $2\Delta_s$	77
7.2	Absorção infravermelha do supercondutor (normalizada pela fase normal) em função da frequência. $\hbar\omega$ em unidades de $2\Delta_s$	78
7.3	Comportamento anômalo do peso espectral diamagnético ($\omega = 0$) com a temperatura. Unidades de $v_F e^2 \alpha / (2\hbar^2 v_\Delta)$	79
8.1	Comportamento do kernel de London [em unidades de $e^2 v_F / (2\pi d \hbar^2 v_\Delta c)$] com a temperatura na aproximação do cone.	90
9.1	À esquerda: Dispersão dos férmions de Dirac no bolso. À direita: espectro com a abertura do gap para $\Delta_s = \frac{3}{2}\mu$. Cada uma das bandas tem dois ramos $\pm\mu$, indicados pelas linhas sólida e pontilhada.	93
9.2	Reescalamto da equação do gap à temperatura zero. $h(g_c) = 0$ no acoplamento crítico g_c	95
9.3	Dependência do gap à temperatura zero $\Delta_{0\mu}/\alpha$ com o acoplamento g . Gráficos para $\mu/\alpha = 0, 0.1$ e 0.3 . A linha sólida representa a solução numérica da equação do gap (9.10). A linha pontilhada corresponde à solução analítica em aproximação de acoplamento forte ($\mu \ll \Delta_{0\mu}$) e a linha tracejada à aproximação de acoplamento fraco ($\mu \gg \Delta_{0\mu}$).	96
9.4	Reescalamto da equação do gap à temperatura finita: Δ_s/μ vs. g/g_c . Linha tracejada ($\delta = 1, \mu/\alpha = 0.2$), sólida ($\delta = 1, \mu/\alpha = 0.1$), ponto-tracejada ($\delta = 0.01, \mu/\alpha = 0.2$) e pontilhada ($\delta = 0.01, \mu/\alpha = 0.1$).	97
9.5	Acima: Gap $ \Delta_s (T, g, \mu)$ em função do acoplamento g/g_c . Linha sólida: solução numérica da equação do gap; linha pontilhada: solução analítica em aproximação de acoplamento forte. Da esquerda para a direita: $k_B T/\alpha = 0.005, 0.1, 0.2$ e $\mu/\alpha = 0.2, 0.2, 0.1$, respectivamente. Abaixo: Dependência do gap com a temperatura. Escalas normalizadas pela energia de corte do cone α . Curva sólida: $\mu/\alpha = 0, g/g_c = 1.2$; pontilhada: $\mu/\alpha = 0.06, g/g_c = 1.2$; tracejada; $\mu/\alpha = 0.06, g/g_c = 1.1$	99

- 9.6 Calor específico vs temperatura para $g/g_c = 1.2$ e $\mu/\alpha = 0.05$ (acoplamento forte). C_v em unidades de $Vk_B\alpha g_c^{-1}$ 103
- 9.7 Taxa de relaxação de NMR vs. temperatura, para $\mu/\alpha = 0.05$ and $g/g_c = 1.1$. Curva tracejada: relaxação na direção $\hat{\mathbf{b}} = z$ (ou seja, $\chi_{xx} + \chi_{yy}$); ponto-tracejada: relaxação nas direções x e y 108
- 9.8 Representação esquemática do processo de absorção de fótons pelo canal de excitações térmicas do condensado, dentro da janela de absorção. 111
- 9.9 Em cima: condutividade óptica σ_{\perp} vs. frequência. Eixos: $v_F e^2 / (2\hbar v_{\Delta})$ vs. $\hbar^{-1} 2\Delta_s$. $\mu/(2\Delta_s) = 0.9$: linha tracejada ($T = 0$) e sólida ($k_B T = 1.2\Delta_s$). $\mu = 0$: pontilhada ($T = 0$). Em baixo: condutividade óptica σ_{\perp} vs. temperatura em unid. de $v_F e^2 / (2v_{\Delta})$, para $g/g_c = 1.1$ e $\mu/\alpha = 0.1$. Linhas tracejadas: canais térmicos de absorção de fótons ($0.4\Delta_0 < \hbar\omega < 1.4\Delta_0$); sólida: $\hbar\omega = 2.3\Delta_0$; pontilhadas: canais de absorção envolvendo elétrons do condensado ($2.8\Delta_0 < \hbar\omega < 4\Delta_0$). 112
- 9.10 Condutividade de Drude integrada em ω em função da temperatura para $g/g_c = 1.1$ e $\mu/\alpha = 0.1$. Unidades de $v_F e^2 \alpha / (2\hbar^2 v_{\Delta})$ 113
- 9.11 Peso espectral diamagnético em função da temperatura para $g/g_c = 1.1$. Curvas desenhadas para $0 \leq \mu/\alpha \leq 0.12$, de baixo para cima, em intervalos fixos de 0.03. A em unidades de $v_F e^2 \alpha / (2\hbar^2 v_{\Delta})$ 113
- 9.12 Acima: Condutividade térmica $\times T$ em função da frequência. Unidades de $(2v_F/v_{\Delta})\Delta_s^2$ vs. $2\Delta_s/\hbar$, com $\mu/(2\Delta_s) = 1.1$. Linha tracejada: limite de $T \rightarrow 0$; pontilhada: $k_B T = \frac{1}{2}\Delta_s$; sólida: $k_B T = \Delta_s$; ponto-tracejada: $k_B T = \frac{5}{2}\Delta_s$. Abaixo: Dependência da condutividade térmica (unid. de $k_B v_F \alpha / (2v_{\Delta})$) com a temperatura para $g/g_c = 1.1$ e $\mu/\alpha = 0.1$. Linhas sólidas: canais térmicos de excitação de quase-partícula ($0.4\Delta_0 < \omega < 1.4\Delta_0$); pontilhadas: canais de excitação a partir dos elétrons do condensado ($1.6\Delta_0 < \omega < 4\Delta_0$). Linha ponto-tracejada: termo de Drude integrado em ω , em unidades de $\frac{1}{5}k_B v_F \alpha^2 / (2v_{\Delta})$; 116
- 9.13 Resistividade da fase normal CDW ($\Delta_s = 0$) em função da temperatura. ρ em unidades de $2\pi^2 \hbar w_{\Delta} / (e^2 v_F)$ e T normalizado pela energia de corte α . Modelo II: curva sólida ($1/(2\tau_0) = 0.3\alpha$, $\eta = 2$, $\mu = 0.1\alpha$) em valores típicos para o TaSe₂ [23]; modelo I: curva pontilhada ($\Gamma = 0.3\alpha$, $\mu = 0.1\alpha$), ponto-tracejada ($\Gamma = 0.2\alpha$, $\mu = 0.01\alpha$) e tracejada ($\Gamma = 0.1\alpha$, $\mu = 0.01\alpha$). 119
- 9.14 Dependência do kernel de London $-[Q(\Delta_s) - Q(0)]$ com a temperatura na aproximação do cone ($g/g_c = 1.1$). Curvas entre $0 \leq \mu/\alpha \leq 0.16$, de baixo para cima, em intervalos fixos de 0.02. Unidades de $e^2 v_F \alpha / (2\pi d \hbar^2 v_{\Delta} c)$ 122

Abreviações

TMD	metal de transição dicalcogenado
CDW	onda de densidade de carga
MFL	líquido de Fermi marginal
HTc	supercondutores de alta temperatura
STM	microscopia de varredura por tunelamento
ARPES	espectroscopia de fotoemissão resolvida angularmente
GL	Ginzburg-Landau
NMR	ressonância nuclear magnética
NQR	ressonância nuclear de quadrupolo
LEG	gás de elétrons em camadas
RPA	aproximação de fases aleatórias
QCP	ponto crítico quântico
2D	representação bidimensional
3D	representação tridimensional
SC	fase supercondutora
BCS	Bardeen-Cooper-Schrieffer

Capítulo 1

Introdução

“There are more things in heaven and earth, Horatio,
than are dreamt of in your philosophy”.

Hamlet, 1^o ato.

Nos últimos quinze anos, uma grande variedade de propriedades surpreendentes têm sido observadas em compostos cristalinos, como supercondutividade de altas temperaturas em materiais isolantes, fases microscópicas não homogêneas de carga e spin, transporte quase-unidimensional, efeitos de desordem e antiferromagnetismo dentre outras, gerando grande excitação na área de matéria condensada. Esta tese trata sobre um grupo específico de cristais, os metais de transição dicalcogenados (TMDs), que exibem uma quantidade enorme de características consideradas exóticas. Os TMDs [1] 2H-NbSe₂, 2H-TaS₂ and 2H-TaSe₂ são compostos organizados em camadas, altamente anisotrópicos, onde a supercondutividade coexiste com a ordem de ondas de densidade de carga (CDW) [2]. O diagrama de fase destes compostos é extremamente rico. Existe uma vasta literatura experimental reportando o aparecimento de propriedades anômalas como a redução da resistividade e o desacoplamento do transporte planar do transporte normal aos planos na fase de CDW [3], efeitos anômalos de impurezas na supercondutividade, efeito Hall não linear [4], fases de faixas [5], diferentes regimes de comensurabilidade de CDW [6], entre outras propriedades. Experimentos recentes de fotoemissão resolvida angularmente (ARPES) no cristal de 2H-TaSe₂ mostram que a meia-vida das quase-partículas na vizinhança da superfície de Fermi tem um comportamento diferente do esperado para um líquido de Fermi usual [7]. Esse cenário fica um pouco mais instigante a partir da constatação de que muitas dessas propriedades são análogas às observadas nos óxidos supercondutores de alta temperatura (HTc). Nos HTc, não existe um gap de CDW mas um *pseudo-gap* no espectro de antiferromagnetismo que coexiste com a fase supercondutora. Nos dois casos, as propriedades termodinâmicas e de transporte são fracamente dependentes da aplicação de campos externos na fase normal CDW/pseudo-gap e fortemente dependentes desses campos na fase supercondutora [8]. Além disso, o aumento da pressão nos TMDs tende a intensificar a supercondutividade e suprimir a fase de CDW [9], ana-

logamente ao que acontece no diagrama de fase dos óxidos de alta temperatura com o aumento da dopagem. Diferentemente dos HTc, no entanto, os TMD são cristais extremamente limpos, ou seja, livres de impurezas. As características anômalas dos TMDs são portanto intrínsecas ao sistema e independentes da amostra. Com isso, esses materiais podem trazer novas pistas que ajudem a entender a física de toda uma classe de sistemas supercondutores de baixa dimensão.

A idéia central deste trabalho é baseada num modelo proposto pelo Prof. Castro Neto, quando estive na Universidade de Boston, EUA em 2002. Desde então, alguns resultados experimentais em espectroscopia trouxeram novas informações sobre esses materiais. Castro Neto [10] propôs um modelo unificado entre as fases CDW e supercondutora, capaz de explicar algumas das anomalias observadas experimentalmente. Partindo de uma Hamiltoniana CDW, dentro do espírito de um líquido de Fermi marginal (MFL), a teoria propõe que o mecanismo da supercondutividade está relacionado à formação de pares com simetria s no canal de singleto, formados entre as excitações elementares dos elétrons nos pontos da superfície de Fermi onde o gap de CDW se fecha. Esses pontos serão chamados de *nós* da superfície de Fermi e as excitações elementares vestidas com a estrutura de banda CDW são análogos não relativísticos dos férmions de Dirac, por causa da estrutura da dispersão linearizada na vizinhança dos nós. Os pares dessa teoria guardam algumas semelhanças com os pares de Cooper da teoria BCS exceto pela natureza do acoplamento elétron-fônon e por algumas propriedades de simetria ligadas ao espaço nodal.

Dentro da teoria de Peierls, a formação do gap de CDW em sistemas de dimensão 1 está ligada ao fenômeno de aninhamento (*nesting*) da superfície de Fermi. Em sistemas de dimensão efetiva 2, como nos TMDs, o aninhamento é imperfeito e algumas partes da superfície de Fermi podem não abrir um gap ligado à instabilidade de CDW. A formação da CDW nos TMDs provoca uma quebra na simetria de inversão do cristal, observada através de espalhamento de neutrons [11]. Esta quebra de simetria permite o aparecimento de piezoelectricidade, que é induzida pelo aumento da energia elástica do sistema através da distorção periódica da rede, acoplada à CDW. Baseado na natureza de *tight-binding* dos orbitais eletrônicos nos TMDs, no aninhamento imperfeito entre diferentes folhas da superfície de Fermi e na simetria de inversão quebrada na fase distorcida, o gap de CDW proposto tem simetria *tipo f*. A teoria propõe a formação de pares com uma interação atrativa mediada por fônons virtuais *via* acoplamento piezoelétrico entre férmions de Dirac e fônons.

A estrutura de nós ligada à simetria do gap de CDW do modelo é semelhante à zona de Brillouin da grafite, onde os nós ali representam os pontos da zona onde as bandas de condução e de valência encostam uma na outra. Nos TMDs, diferentemente da grafite, a simetria de inversão da rede é quebrada na fase distorcida. A piezoelectricidade, no entanto, é usualmente observada em materiais isolantes, uma vez que os metais blindam completamente o campo de polarização. Uma boa pergunta seria: é possível haver piezoelectricidade em um supercondutor? Para responder a essa pergunta, é preciso primeiro considerar que numa teoria de líquido de Fermi marginal baseada em férmions de Dirac, a densidade de estados vai a zero nos nós e portanto os elétrons não blindam o campo elétrico. Neste caso, é possível conciliar uma teoria metálica (no

sentido de que as excitações elementares não tem um gap no espectro) com a piezoelectricidade. O desaparecimento da densidade de estados nas regiões não gapeadas da superfície de Fermi, no entanto, não é uma condição essencial para que a piezoelectricidade possa aparecer. Na verdade, é suficiente que os elétrons sejam tão lentos quanto as velocidades típicas de vibração da rede. Do ponto de vista da teoria, isso é equivalente a acoplar os elétrons dos nós (basicamente férmions com uma velocidade de propagação renormalizada) com fônons acústicos. Isto portanto seria correto em qualquer sistema com uma baixa densidade de estados nos nós, como na grafite, e que apresentam uma quebra de simetria de inversão da rede. Entretanto, a coexistência entre os dois fenômenos não deixa de ser surpreendente, já que permitiria a geração de supercorrentes simplesmente apertando o cristal.

Se por um lado a piezoelectricidade e o caráter metálico não são mutuamente excludentes, resta saber que tipo de efeito é causado pelo vetor de polarização sobre a coerência de fase supercondutora. A resposta a esta pergunta pode ser encontrada olhando para os modos normais do sistema. A invariância do calibre eletromagnético em um supercondutor é garantida pela resposta longitudinal dos plasmons, que blindam completamente os elétrons através de uma nuvem de plasmons virtuais em torno dos deslocamentos eletrônicos [12]. Assim, apenas os plasmons respondem aos campos longitudinais, blindando os efeitos de 1 partícula. Como a piezoelectricidade envolve essencialmente campos elétricos, ela deve afetar os modos normais do sistema, mas não deve afetar os elétrons individualmente. Portanto, ela não interfere na coerência de fase do condensado através de canais de quebra de pares. Além disso, a invariância de calibre garante via mecanismo de Anderson-Higgs que os modos normais do supercondutor no limite de comprimentos de onda longos recaiam na frequência de plasma da fase normal [13]. Mais adiante, vamos mostrar que não existe contradição entre a piezoelectricidade e a supercondutividade, investigando as flutuações de carga e corrente nesses sistemas do ponto de vista dos modos coletivos. Para isso, vamos construir uma ação baseada na Lagrangeana de Ginzburg-Landau com dependência temporal, incluindo plasmons, fônons acústicos, campos eletromagnéticos e o acoplamento piezoelétrico. Este cálculo foi publicado recentemente na Ref. [14].

Uma vez superada a dificuldade inicial de conceber uma teoria supercondutora baseada no acoplamento piezoelétrico, o passo seguinte é calcular as propriedades previstas por este modelo. Este trabalho é portanto uma espécie de caracterização de uma possível nova classe de supercondutores.

A estrutura desta tese foi organizada da seguinte forma: as características experimentais dos TMDs, incluindo detalhes sobre a superfície de Fermi, instabilidade de CDW, supercondutividade e propriedades de transporte são discutidas no cap.2; no cap. 3, vamos introduzir o modelo fenomenológico que tenta unificar as duas fases. Os modos de plasmon do modelo CDW marginal são calculados no cap. 4, e utilizados no capítulo 5 para determinar as propriedades coletivas macroscópicas a partir de uma ação efetiva. O capítulo 6 trata sobre a teoria microscópica de supercondutividade baseada no modelo apresentado no cap. 3. A equação do gap é derivada e a partir dela resultam as propriedades termodinâmicas (calor específico, entropia, etc.) assim

como os resultados de atenuação de ultra-som e relaxação de spin nuclear (NMR). As condutividades óptica e térmica são calculadas no capítulo 7. O capítulo 8 trata sobre o efeito Meissner. Finalmente, no capítulo 9 calculamos os efeitos provocados pela densidade de estados (finita) nos nós, que representa o caso real.

Este modelo é capaz de explicar corretamente algumas das propriedades anômalas dos TMDs como o comportamento marginal da meia vida das excitações, a dependência crítica da transição supercondutora com os parâmetros da rede e a redução da resistividade na fase CDW [10]. Dentre todas as propriedades calculadas, que incluem a presença de um ponto crítico quântico na transição supercondutora em função do regime de acoplamento, fatores de coerência anômalos no limite limpo e ausência (ou forte atenuação) do pico de Hebel-Slichter de NMR [15], as duas principais assinaturas experimentais deste modelo são a intensidade do salto do calor específico eletrônico na transição supercondutora (que é fortemente reduzida pela baixa densidade de estados na superfície de Fermi), e uma anisotropia de NMR na fase supercondutora, ligada à quebra de simetria de rotação do cristal pela CDW. Se por um lado essa quebra de simetria não foi observada nos cristais de 2H-NbSe₂, onde a aplicação deste modelo é bastante questionável, a enorme diferença de escala de energia entre o gap de CDW em relação ao gap supercondutor no 2H-TaSe₂, cerca de duas ordens de grandeza menor que o primeiro, abre espaço para a possibilidade da criação de pares de quase-partículas nodais entre as excitações elementares da CDW na superfície de Fermi. A fase supercondutora do composto de Ta não foi ainda suficientemente estudada por causa da baixa temperatura de transição ~ 0.1 K. Em todos os TMDs, entretanto, a questão da simetria do gap da fase distorcida assim como o mecanismo que leva à instabilidade de CDW são questões importantes em aberto. Se por um lado existem algumas pistas sobre isso, falta uma boa teoria de CDW para acoplamento forte, como parece ser o caso nos cristais de 2H-NbSe₂. Vamos tratar sobre isto, entre outras coisas, no capítulo seguinte.

Capítulo 2

Metais de transição dicalcogenados

A intenção deste capítulo é oferecer uma introdução geral ao cenário dos TMDs conhecido atualmente. Esses sistemas foram ostensivamente estudados ao longo da década de 70. Recentemente, o aperfeiçoamento das técnicas de espectroscopia e de microscopia de tunelamento deram novo ânimo ao estudo dos TMDs, cuja grande motivação parece ser a notável semelhança que alguns desses compostos têm com as propriedades dos HTc. Apesar dos avanços experimentais dos últimos anos, existem lacunas importantes no entendimento desses sistemas. Pretendo discorrer resumidamente sobre o que se sabe e sobre alguns pontos importantes que ainda precisam ser esclarecidos.

Os metais de transição dicalcogenados formam uma extensa família de compostos, com mais de 60 tipos diferentes. Os compostos com elementos de transição dos grupos IV, V e VI da tabela periódica tem a estrutura formada por planos com simetria hexagonal fracamente acoplados. Somente os TMDs do grupo VII A e acima não apresentam estrutura planar. Um extensa revisão sobre esses materiais pode ser encontrada na Ref. [2].

A estrutura geral dos dicalcogenados MX_2 é formada por sanduíches de ligações covalentes X-M-X entre um metal de transição e dois calcogênios (Se, Te ou S). Nos materiais planares, os sanduíches são separados por um grande gap de Van der Waals. Essa característica faz com que os TMDs organizados em planos sejam altamente anisotrópicos na direção normal aos planos c , tanto eletricamente quanto mecanicamente. A condutividade elétrica sofre uma redução da ordem de $10^2 - 10^3$ na direção c em relação às direções no plano; a condutividade térmica diminui por um fator ~ 10 enquanto que a velocidade do som é duas a três vezes menor. O fraco acoplamento das ligações de Van der Waals entre os planos permite a intercalação de outros compostos, a exemplo do que acontece na grafite. Do ponto de vista da estrutura, o empacotamento dos átomos não metálicos ao redor do metal de transição pode ser tanto octaédrico quanto trigonal prismático.

As propriedades elétricas são das mais variadas. Existem exemplos de TMDs que apresentam caráter isolante, como o semicondutor MoS_2 ou o semi-metal WTe_2 , e metálico (NbS_2 e VSe_2); outros se comportam como sistemas efetivamente unidimensionais, como o 1T- TaS_2 e 1T- TaSe_2 e exibem transição metal-isolante quando dopados. Os prefixos 1T e 2H se referem aos arranjos

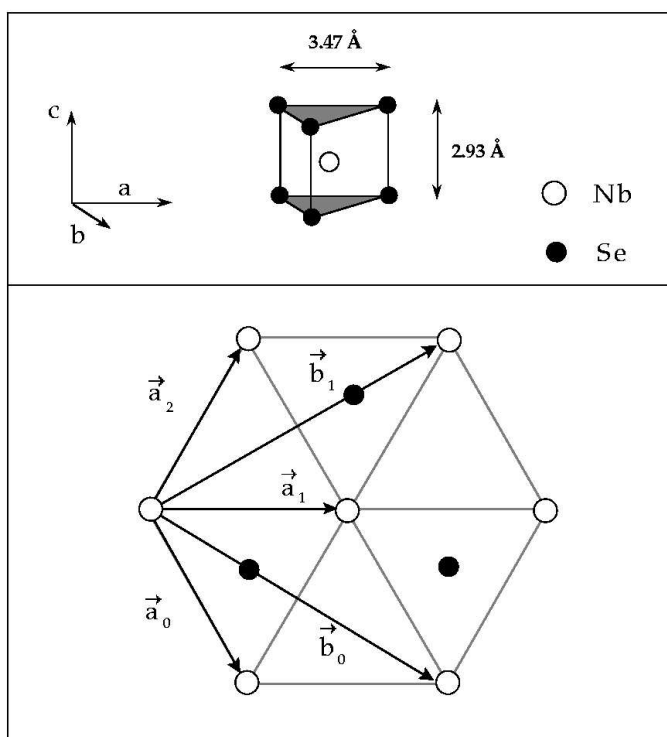


Figura 2.1: Estrutura cristalina do 2H-NbSe₂. Acima: Sanduíche MX₂ na forma trigonal prismática. Figura inferior: Rede hexagonal planar. Os átomos de Se estão num segundo plano 1.47 Å abaixo ou acima do plano dos átomos de Nb. As direções **a** e **b** indicam primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

de *polítipos* possíveis entre os átomos não metálicos do sanduíche. Na maioria dos TMDs, as propriedades de transporte estão ligadas à mobilidade eletrônica nas bandas anti-ligantes d . Nos dicalcogenados com propriedades 3D essas bandas são bastante largas (~ 1 eV) e propriedades como a condutividade óptica podem exibir grandes variações dependendo do nível de preenchimento da banda. Nesses casos o diamagnetismo é em geral observado. Nos compostos com dimensão efetiva mais baixa, como 2H-NbSe₂ (2D) e 1T-TaS₂ (1D), a banda d é sensivelmente mais estreita. Todos os compostos com Nb e Ta são supercondutores a baixas temperaturas, independentemente da estrutura, e não apresentam ordem magnética [16].

Medidas de difração de raio-x e neutrons[1, 11] apontam para o aparecimento de superestruturas identificadas como ondas de densidade de carga, observadas em várias famílias de compostos. Em particular para os compostos 2H-NbSe₂, 2H-TaS₂ e 2H-TaSe₂, o fato mais intrigante é que a CDW coexiste com a supercondutividade e está ligada a propriedades anômalas como a diminuição da resistividade na fase distorcida [2]. No TaSe₂, o decaimento da meia vida das excitações de quase-partícula, definida pelo inverso da parte imaginária da auto-energia, tem comportamento de líquido de Fermi marginal [17]

$$\text{Im} \Sigma(k_F, \omega) \propto \tau_0^{-1} + b|\omega|,$$

em contraste com o comportamento do líquido de fermi usual, onde o decaimento é quadrático em ω [18]. Daqui em diante, sempre que fizermos menção aos TMDs estaremos nos referindo *especificamente* a estes três compostos.

O parâmetro de ordem supercondutor tem simetria do tipo s , com formação de pares no canal de singleto. No NbSe₂, existem evidências de supercondutividade de multi-banda (variações do valor do gap entre diferentes folhas da superfície de Fermi) observadas em estudos de espectroscopia [19], em medidas de calor específico [20] e condutividade térmica [21]. A temperatura de transição supercondutora varia entre ~ 0.1 K para o TaSe₂, no caso onde supercondutividade é menos favorável, até ~ 8 K nos compostos de Nb. A transição de CDW varia inversamente de 120 K no primeiro composto e cai para ~ 38 K no NbSe₂(a ordem de CDW não é observada no 2H-NbS₂). O comportamento das duas fases apresenta uma dependência ligada à anisotropia cristalina, definida pela razão $\frac{a}{c}$. O desacoplamento entre os planos favorece a instabilidade de CDW e diminui o caráter metálico dos planos ligados à supercondutividade (ver Fig.2.2). Os dois casos mais interessantes para estudo são o TaSe₂, onde a transição de CDW acontece a altas temperaturas e o NbSe₂, que tem o maior T_c . Os TMDs são supercondutores do tipo II altamente anisotrópicos. No NbSe₂, o comprimento de coerência é da ordem de $\xi_{\parallel} \sim 110$ Å na direção dos planos e $\xi_{\perp} \sim 37$ Å na direção normal a eles. O comprimento de penetração também varia significativamente de $\lambda_{\perp} \sim 1600$ Å na direção normal para $\lambda_{\parallel} \sim 4800$ Å [20].

Efeitos anômalos são observados nos TMDs dopados com Fe, como transição metal-isolante, magnetismo, supressão ou aumento da supercondutividade, dependendo do cristal e do tipo de

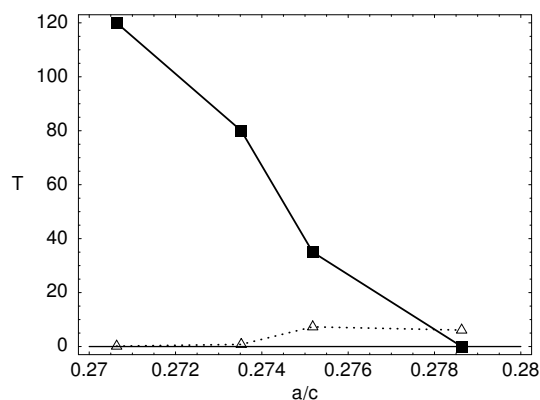


Figura 2.2: Temperatura de transição das fases CDW e supercondutora nos TMDs à pressão ambiente. Os quadrados preenchidos representam T_{CDW} e os triângulos T_c . Da esquerda para a direita: TaSe₂, TaS₂, NbSe₂ e NbS₂. O eixo horizontal indica anisotropia entre o parâmetro de rede nos planos (a) e na direção normal a eles (c) para cada cristal. [2, 1]

dopagem, intercalada ou substitucional [4]. Os compostos 2H-Fe_xTaSe₂ e 2H-Fe_xNbSe₂ tem a supercondutividade fortemente suprimida e exibem um valor *mínimo* de resistividade com a temperatura (como no efeito Kondo [22]) abaixo de uma temperatura T_{min} , mesmo a dopagens muito pequenas. Esse efeito é acompanhado pelo aparecimento de uma magnetoresistência negativa sob a aplicação de um campo magnético paralelo aos planos e de um efeito Hall anômalo. Nos compostos não dopados, a resistividade Hall é positiva a altas temperaturas e negativa a baixas temperaturas. A troca de sinal coincide com a temperatura de formação da ordem de CDW. Dopagens da ordem de $x \lesssim 0.01$ no entanto, são suficientes para remover a transição Hall ligada à CDW e induzir uma alta resistividade Hall positiva para $T < T_{min}$. No cristal de Fe_xTaS₂, ao contrário, a supercondutividade é favorecida com a intercalação de íons de Fe entre os planos para dopagens de até 8%. A temperatura de transição supercondutora sofre um aumento de 0.8 K no cristal puro para 3.3 K no Fe_{0.05}TaS₂ [4].

2.1 Instabilidade de CDW

A origem da instabilidade de CDW nos compostos 2H-TaSe₂ e 2H-NbSe₂ tem sido motivo de grande controvérsia nas últimas décadas e ainda não foi definitivamente esclarecida. A resolução dos dispositivos experimentais, no entanto, têm sido consideravelmente melhorada e existe a perspectiva real de uma conclusão definitiva sobre isso em breve. Vamos dar um panorama geral sobre as alternativas consideradas nos últimos anos.

Uma boa introdução às CDWs pode ser encontrada na Ref. [1]. De maneira geral, um potencial periódico que *aninha* partes diferentes da superfície de Fermi com um vetor de onda bem definido deve acoplar os estados eletrônicos entre as regiões e gerar uma CDW. Como na distorção

de Peierls em dimensão 1, os estados de dentro da superfície de Fermi têm a energia rebaixada e os de fora têm a energia aumentada, abrindo um gap em torno dela. Distorções periódicas na densidade eletrônica são acompanhadas obrigatoriamente de uma distorção periódica na rede. Por isso, a estabilidade da CDW depende de que a variação total induzida sobre a energia de banda de 1 elétron, sobre a energia elástica da rede e sobre a energia de correlação eletrônica rebaixe a energia do sistema. Vamos considerar o caso ilustrativo de elétrons não interagentes mas acoplados aos modos coletivos da rede. A dispersão dos modos normais acoplados à λ -ésima banda que minimizam a energia livre, é dada por [24]

$$\omega_\lambda^2(\mathbf{q}) = \omega_I^2(\mathbf{q}) + \Sigma_\lambda^E(\mathbf{q}), \quad (2.1)$$

onde ω_I é a frequência natural de oscilação dos íons e $\Sigma_\lambda(\mathbf{q}) = -|W(\mathbf{q})|^2 \chi^0(\mathbf{q}) / [1 + g(\mathbf{q}) \chi^0(\mathbf{q})]$ é a contribuição do acoplamento elétron-fônon para a autoenergia dos elétrons, com W o potencial de interação dos elétrons com a rede, g o acoplamento elétron-fônon e

$$\chi^0(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_\lambda(\mathbf{k}) - n_{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\lambda(\mathbf{k}) - E_{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (2.2)$$

é a susceptibilidade não interagente. O critério para a existência da CDW pode ser formulado como a condição em que uma distorção estática da rede ($\omega_\lambda^2 = 0$) passa a ser energeticamente mais favorável [29], ou seja

$$\frac{|W(\mathbf{q})|^2}{E^I} - g(\mathbf{q}) > \frac{1}{\chi^0(\mathbf{q})}.$$

Claramente, as divergências provocadas na susceptibilidade pelo aninhamento de partes da superfície de Fermi tornam a formação de uma CDW bastante propícia. A condição plena de aninhamento, no entanto, só é satisfeita em sistemas de dimensão 1, que em geral são bons candidatos à instabilidades periódicas. Em sistemas de dimensão 2, as divergências no denominador da Eq. (2.2) são integradas pela soma em k , atenuando os picos da susceptibilidade. Para esses sistemas, o papel do acoplamento elétron-fônon é essencial para permitir o aparecimento de uma superestrutura. No caso dos TMDs, a descrição de elétrons quase livres não é válida. As bandas d associadas ao metal de transição são mais adequadamente descritas pelo limite de *tight-binding*.

A superfície de Fermi dos TMDs é formada por uma parte centrada ao redor de Γ e por uma outra menor centrada em K . Ambas têm simetria (quase) cilíndrica ao longo da direção normal aos planos (ver Fig 2.3) e são provenientes das bandas $4-d$ do metal de transição. No cristal de NbSe₂, há além delas uma folha menor achatada (tipo *panqueca*) centrada em Γ associada à banda $4-p$ dos átomos de Se (não indicada na figura), como indicam experimentos de *Haas-van Alphen* [27] e de fotoemissão resolvida angularmente (ARPES) [19]. Essa banda é comumente chamada de *banda Γ* . As duas partes da superfície de Fermi ligadas às bandas d são formadas cada uma por duas folhas concêntricas, detalhe também não mostrado pela figura. Não é difícil perceber que a forma da superfície de Fermi é bastante complicada. Ela

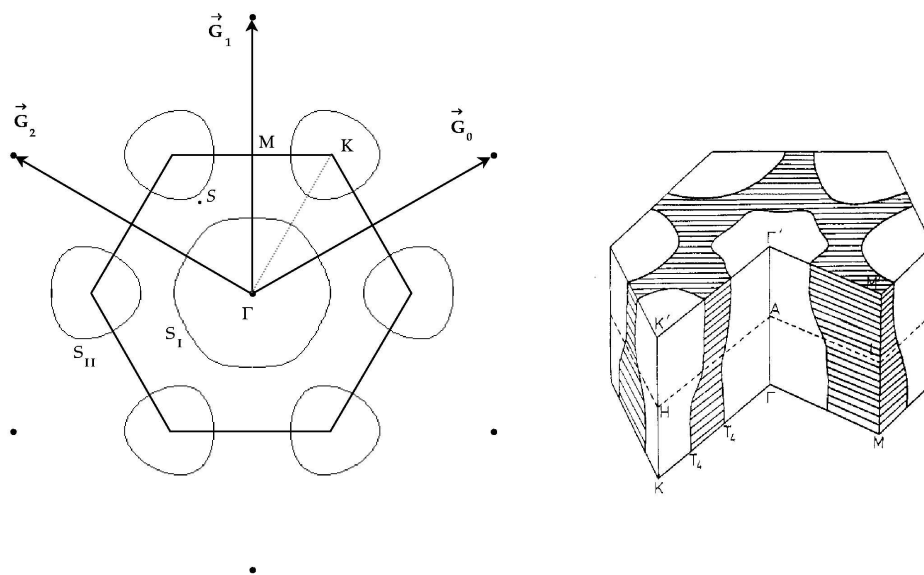


Figura 2.3: À esquerda: Rede recíproca nos planos de Nb no 2H-NbSe₂. Os pontos de alta simetria da zona de Brillouin são indicados por Γ , K e M . A superfície de Fermi das bandas d é formada por duas partes: uma parte centrada em Γ (S_I) e uma segunda (S_{II}) centrada em K . As direções G_i da figura indicam os vetores da rede recíproca. O S indica o *ponto de sela* da estrutura eletrônica de bandas. À direita: representação pictórica da superfície de Fermi na direção normal aos planos [28].

foi proposta originalmente por cálculos de banda [28] baseados em experimentos de difração de raio-x [2]. Técnicas mais modernas de microscopia de varredura por tunelamento (STM) permitem formar uma imagem da superfície de Fermi a partir do mapeamento da densidade de estados. A sensibilidade de STM permite resolver tanto a textura eletrônica dos átomos quanto a de superestruturas de CDW [35, 36]. Além disso, a técnica pode ser usada para estudos de espectroscopia em junções de STM resolvidas numa barreira da ordem de alguns angstroms. A condutividade local é não-linear com a corrente de tunelamento e sensível a amplitude do gap de CDW. Medidas de STM a 4.2 K nos TMDs 2H-TaSe₂, 2H-TaS₂ e 2H-NbSe₂ indicam que $\Delta_{CDW} \sim 80, 50$ e 34 meV respectivamente [36]. Imagens recentes de STM [34] mostram que o vetor de onda de CDW da fase comensurável tem $\frac{1}{3}$ do tamanho da zona de Brillouin na direção correspondente, em acordo com estudos anteriores de espalhamento de neutrons [11, 30].

O cenário de aninhamento mais aceito atualmente pressupõe que partes da superfície de Fermi são conectas pelos vetores de CDW nas direções de distorção \mathbf{Q}_i identificadas com os vetores da rede recíproca na Fig. 2.3. Rice e Scott [31] propuseram um modelo alternativo independente de mecanismos da superfície de Fermi, em que os vetores \mathbf{Q}_i se “aninhariam” nos pontos de sela (S) da banda d , (indicados na Fig. 2.3 em torno de $\frac{1}{2}\Gamma K$) gerando uma divergência logarítmica na susceptibilidade χ^0 . Cálculos de estrutura de banda [28] e alguns experimentos de espectroscopia (ARPES) [38] no NbSe₂, no entanto, sugerem que esses pontos não estão tão próximos de $\frac{1}{2}\Gamma K$, como seria necessário para confirmar o resultado de neutrons. Além disso, a energia de ligação

entre o duplete de bandas de condução no ponto de sela é de ~ 50 meV no NbSe₂ [37] e portanto muito acima da energia da ordem de CDW, $k_B T_{CDW} \sim 3$ meV. Note que $k_B T_{CDW} \ll \Delta_{CDW}$, o que indica que a teoria capaz de descrever o regime de CDW é possivelmente uma teoria de acoplamento forte. No TaSe₂, por outro lado, os resultados de ARPES detectaram a presença de uma *banda de sela* estendida ao longo da direção ΓK . Essa banda é bastante “chata” e está mais próxima da energia de Fermi do que o previsto por cálculos de estrutura de banda [25]. Como os pontos de sela não são bem definidos neste caso, é questionável justificar o comprimento de onda de CDW medido por neutrons a partir de um mecanismo de “aninhamento” de alguma parte da banda de sela. Se por um lado o mecanismo convencional de pontos de sela pode ser descartado, não existe ainda um consenso sobre o mecanismo que leva à fase de CDW. Alguns resultados de ARPES no NbSe₂ sugerem que o recobrimento da superfície de Fermi pelo gap de CDW é bem menor do que se imaginava [41].

A espectroscopia de fotoemissão (ARPES) permite determinar a energia e o momento dos elétrons no sólido. Para uma dada energia do fóton incidente, a sondagem da superfície de Fermi é feita através das curvas de distribuição de momento a energia constante. A técnica também permite medir a dispersão das quasi-partículas através da largura da curva de distribuição de energia dos elétrons a momento constante. As medidas mostradas nas Ref. [7, 41] sugerem que a autoenergia das quase-partículas no NbSe₂ é sensivelmente menos afetada pela formação da CDW que no TaSe₂. No segundo composto, a dependência do inverso do tempo de decaimento das excitações ($\propto \text{Im } \Sigma$) com a temperatura mostra uma súbita mudança na transição de fase de CDW, diferentemente do primeiro. Os autores sugerem que no TaSe₂ a fase de CDW é essencialmente eletrônica, enquanto que no NbSe₂ ela depende fortemente do acoplamento elétron-fônon. Esta última hipótese é sustentada pela observação de uma descontinuidade na derivada do espectro de quase-partícula no NbSe₂, cuja origem estaria no forte acoplamento das quase-partículas aos fônons (ver Fig. 2.6).

Os estudos de espectroscopia no NbSe₂, no entanto, não foram capazes de detectar a abertura do gap em *nenhuma* parte da superfície de Fermi, apesar do gap de CDW medido por STM (~ 35 meV) ser bastante grande. Por outro lado, o gap supercondutor (~ 1 meV, e portanto muito menor) é detectado por ARPES. Isto foi interpretado como uma evidência de que a superfície de Fermi é muito fracamente recoberta pelo gap de CDW e que a origem da instabilidade estaria relacionada ao auto-aninhamento da superfície de Fermi centrada em $K - H$, como sugeriu Wilson [30]. Uma explicação alternativa para isto, seria supor que as regiões gapeadas estariam sendo mascaradas pelos bolsos de carga formados nos pontos da superfície de Fermi onde o gap se fecha. No TaSe₂, esses bolsos seriam consideravelmente menores e determinariam tanto as propriedades de transporte quanto o comportamento marginal do tempo de decaimento das excitações. Além disso, a detecção de um gap com nós e que viola a simetria de inversão do cristal pode oferecer problemas para experimentos em ARPES. Infelizmente, não existe ainda uma boa teoria de CDW para acoplamento forte. O mecanismo por trás da formação da instabilidade de CDW nos TMDs não é claro até o momento.

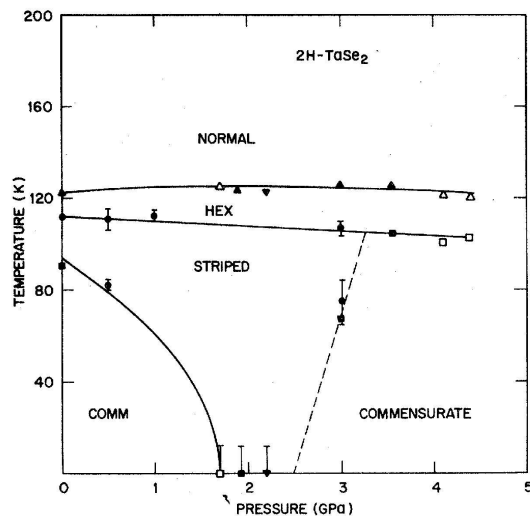


Figura 2.4: Diagrama de fase temperatura vs. pressão no TaSe_2 . Círculos sólidos: espalhamento de neutrons [6]; quadrados e círculos abertos: difração de raio-x [5, 92].

2.1.1 Fases de CDW

Existe uma farta literatura experimental a respeito das ordens de CDW comensuráveis e incomensuráveis nos TMD. Experimentos de difração de neutrons e raio-x nos compostos TaSe_2 and NbSe_2 revelam a presença de picos de Bragg em vetores de onda incomensuráveis $\mathbf{Q}_i = (1 - \delta_i)\mathbf{b}_i/3$, onde \mathbf{b}_i são os três vetores da rede recíproca com simetria hexagonal ($|\mathbf{b}_i| = 4\pi/(\sqrt{3}a)$), a é o parâmetro de rede e $\delta_i \lesssim 0.02$ é a incomensurabilidade [11, 5]. Esse estado é chamado de fase de tripla CDW.

No TaSe_2 , o diagrama de fase temperatura vs. pressão P é bastante rico [6], e exhibe três diferentes fases (ver Fig. 2.4): (1) uma fase hexagonal de CDW incomensurável de altas temperaturas (HCDW), com três direções incomensuráveis $\delta_i \neq 0$ ($i = 1, 2, 3$); (2) uma fase incomensurável de faixas onde um vetor de onda é comensurável, por exemplo, $\delta_1 = 0$, mas os outros dois são incomensuráveis, $\delta_{2,3} \neq 0$; (3) duas fases comensuráveis de CDW (CCDW), onde $\delta_i = 0$ ($i = 1, 2, 3$). A transição da fase não distorcida (normal) para HCDW ocorre a uma temperatura $T_{N-H} \approx 120\text{K}$ independente da pressão, até pressões da ordem de 4.5 GPa; a transição entre HCDW e a fase de faixas $T_{H-S} \approx 110\text{K}$ é também pouco influenciada pela pressão; diferentemente das anteriores, a transição entre a fase de faixas e CCDW, $T_{S-C}(P)$, é altamente dependente da pressão e vai a zero em $P = P_c \approx 1.8$ GPa. Portanto, existe um ponto crítico quântico ($T = 0$) como função da pressão aplicada em $P = P_c$. A altas pressões, o sistema volta à fase CCDW num segundo ponto crítico quântico, em $P \approx 2.4$ GPa. Esse diagrama de fase será discutido com mais detalhe na seção 5.2.3.

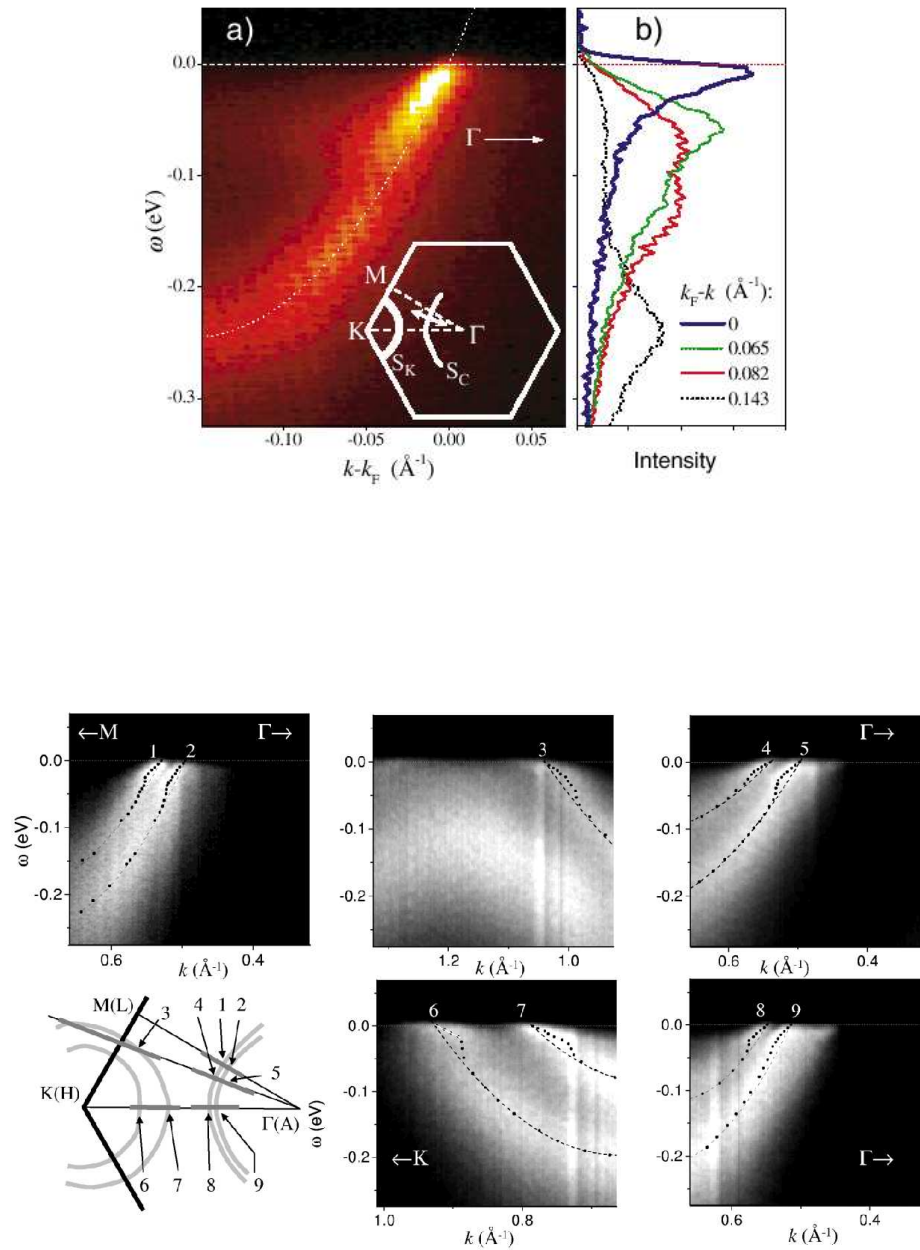


Figura 2.5: Acima: Medidas de ARPES em cristais de TaSe₂ a $T = 34$ K [7]. a) intensidade de fotoemissão em função da energia e momento. As cores mais claras indicam maior intensidade; b) curvas de distribuição de energia a momento constante. Abaixo: resultado de ARPES no NbSe₂ a $T = 10$ K [41]. A derivada da dispersão é descontínua em torno de ~ 50 meV. A região que foge ao comportamento quadrático na dispersão indica alguma interação das quase-partículas, possivelmente com fônons. Nenhum traço do gap de CDW foi observado nos dois cristais.

2.2 Transporte

A observação experimental de “vestígios” da fase CDW a temperaturas muito acima da transição em T_{CDW} pode dar pistas sobre a natureza metálica da fase distorcida. No TaSe₂, por exemplo, a atenuação da dispersão dos fônons nos vetores de onda da CDW persiste acima da temperatura crítica ($T_{CDW} \sim 122$ K) até ~ 300 K [11] (ver Fig. 2.4). Esta fase tem características de uma fase de *pseudo-gap*, onde as CDWs se fragmentariam em segmentos desordenados e de curto alcance. Na fase CDW, o ordenamento desses segmentos recuperaria a coerência no transporte perdida a $T > T_{CDW}$ pela ação da desordem sobre esses segmentos, que teriam o papel de centros espalhadores dos portadores de carga. Segundo essa idéia, o transporte no TaSe₂ seria dominado por efeitos de interação eletrônica. Na fase CDW, os canais de espalhamento seriam menos efetivos e justificariam a redução da resistividade em duas ordens de grandeza com a diminuição da temperatura de 120 a 4 K.

Essa hipótese é examinada por Vescoli *et al.* [32] através de um estudo de espectroscopia óptica no TaSe₂, que guarda grande semelhança com os HTc. À pressão ambiente, o cristal sofre uma transição de segunda ordem em T_{CDW} [40, 92], indo da fase normal para a fase hexagonal triplamente incomensurável (com três direções incomensuráveis). A temperaturas mais baixas, o cristal sofre uma transição de primeira ordem em $T_I \sim 90$ K em direção à fase comensurável (ver Fig. 5.1). Os resultados de absorção óptica nos planos mostram que com a redução da temperatura abaixo de 300 K o peso espectral é progressivamente redistribuído entre uma contribuição larga no espectro de infravermelho médio (MIR) e entre um modo tipo *Drude* em torno da frequência $\omega = 0$, com uma largura característica que diminui à medida em que $T \rightarrow 0$. Tipicamente esse modo tem a forma $\sigma \propto 1/[\omega + \Gamma]$, onde Γ define a largura do pico, associada a processos de espalhamento eletrônico. O aparecimento de um modo de Drude na condutividade DC é uma característica de sistemas de baixa dimensão que apresentam uma fase de pseudo-gap em $T > T_{CDW}$ como em cristais de K_{0.3}MoO₃ [43]. Interessantemente, não se observam diferenças substanciais da condutividade no TaSe₂ na transição de fase de CDW, como indica a Fig. 2.6. No NbSe₂ essas diferenças são ainda mais sutis e são creditadas ao maior peso do acoplamento elétron-fônon como o mecanismo que orienta a instabilidade de CDW nesse material ao invés de mecanismos puramente eletrônicos [45, 41, 7]. Outra distinção entre os cristais de TaSe₂ e NbSe₂ é que no segundo as quase-partículas são bem definidas a baixas temperaturas e estão situadas na região de líquido de Fermi $\tau^{-1} < \omega$, onde a taxa de espalhamento τ^{-1} é menor que a energia da quase-partícula, diferentemente do primeiro [44]. O panorama geral das propriedades ópticas nesses dois cristais é apresentado na Ref. [45]. O cenário parece indicar que a condutividade é dominada por centros espalhadores na fase de pseudo-gap e que esses canais de espalhamento são progressivamente suprimidos na fase de CDW com a redução da temperatura.

No limite assintótico de $T \rightarrow 0$, a condutividade térmica do NbSe₂ apresenta uma contribuição eletrônica que aumenta linearmente com a temperatura (a campo magnético zero), e uma contribuição dos fônons, proporcional a T^3 [21]. No TaSe₂, a condutividade térmica a $\omega = 0$

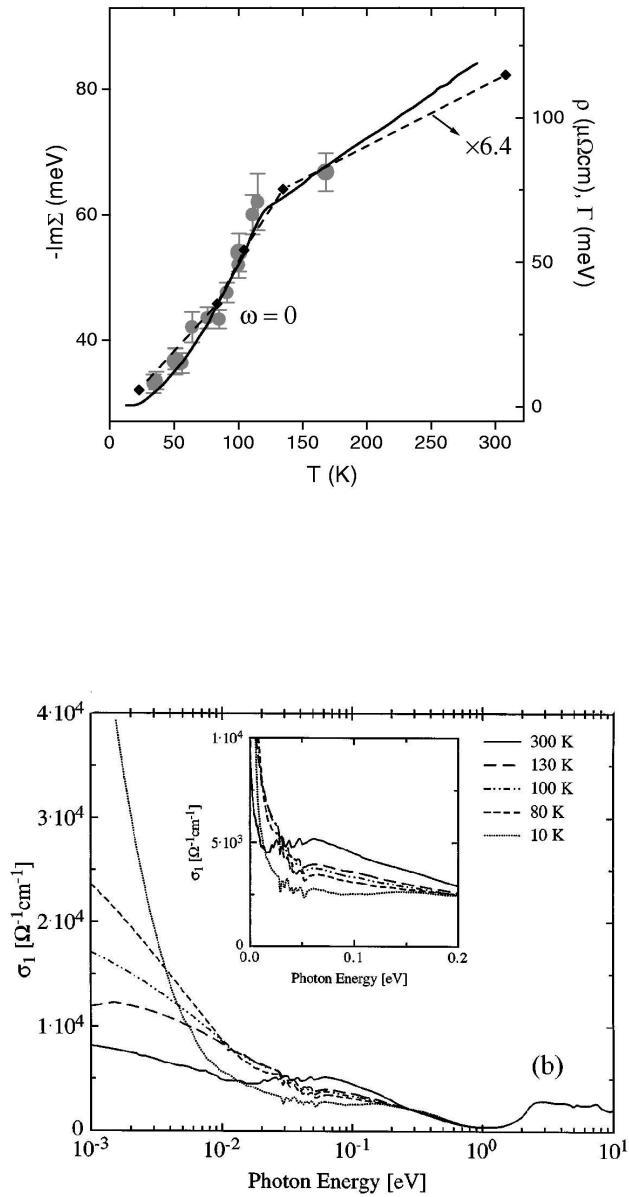


Figura 2.6: Acima: parte imaginária da autoenergia das excitações de quase-partícula no TaSe₂. Círculos fechados: ARPES [7]; linha sólida: curva de resistividade [32]. Abaixo: parte real da condutividade óptica do 2H-TaSe₂ para várias temperaturas, acima e abaixo das transições de CDW ($T_{CDW} \sim 122$ K) e de comensurabilidade ($T_I \sim 90$ K) [32] à pressão ambiente. Figura menor: a redução da temperatura redistribui o peso espectral para o infravermelho ($\omega = 0$).

tem um comportamento anômalo e diminui com o aumento da temperatura na fase de CDW, passando a aumentar monotonamente depois da transição em T_{CDW} [33].

2.2.1 Propriedades termodinâmicas

No cristal de NbSe₂, o calor específico na fase normal CDW tem o comportamento $C_n = \gamma T + \beta T^3$, onde γ é a constante de Sommerfeld associada ao calor específico eletrônico e β é o coeficiente do calor específico dos fônons da rede. A constante do salto do calor específico normalizado pela fase normal a campo zero foi determinada em $\Delta C/C_n \sim 2$ [20, 46], bem acima do valor BCS de 1.43. Isto foi interpretado como mais um indício de supercondutividade de acoplamento forte no NbSe₂. Além disso, as medidas de calorimetria mostram que a dependência do calor específico na fase supercondutora não pode ser ajustada por uma única curva exponencial, mas por duas curvas associadas a gaps com amplitudes diferentes [20]. Esse comportamento corrobora a observação de supercondutividade de multibanda em alguns estudos de espectroscopia no NbSe₂ [19], que atribuem o segundo gap de menor amplitude à banda Γ . O calor específico dos cristais de TaS₂ e TaSe₂ exibe um salto nas transições de fase de CDW e na transição de comensurabilidade entre as fases ICDW-CCDW. O primeiro salto em T_{CDW} é amplificado pelo efeito de flutuações da transição de fase, enquanto que o segundo salto mostra alguma histerese (típico de transição de primeira ordem) e depende de características da amostra [40]. A fase supercondutora do TaSe₂ ainda não foi suficientemente estudada por causa da baixa temperatura de transição $T_c \sim 0.1\text{K}$.

Os resultados de NMR (ressonância nuclear magnética) [47] e de NQR (ressonância nuclear de quadrupolo) [50] no NbSe₂ mostram que o tempo de relaxação T_1 do spin nuclear na fase CDW normal segue a dependência com a temperatura $T_1 T = \text{const.}$ tanto para os íons de Nb quanto de Se. Na fase supercondutora, a quantidade $1/T_1$ tem um pico de Hebel-Slichter abaixo de T_c . Este pico, no entanto, é bastante pequeno e só foi detectado recentemente [50]. A susceptibilidade de spin é anisotrópica na direção normal aos planos. O *Knight shift* observado nos íons de Se e de Nb é da ordem de 0.3 % [47].

2.3 Problemas em aberto

Existem algumas perguntas que ainda estão esperando para serem respondidas. O primeiro ponto é que parece haver um desacordo entre as medidas de STM e ARPES em relação ao gap de CDW. Apesar dos resultados de microscopia indicarem um gap da ordem de dezenas de meV, todos os experimentos em espectroscopia de fotoemissão falharam em detectar algum traço do gap CDW, por menor que ele seja. A habilidade de ARPES em medir o gap supercondutor, que é dezenas de vezes menor que o gap de CDW foi interpretada como um indício de que o aninhamento é altamente imperfeito e recobre muito fracamente a superfície de Fermi. Se isto for verdade, fica a questão de como justificar o aparecimento da instabilidade de CDW a altas temperaturas a partir de um mecanismo tão tênue. A teoria de Rice e Scott, que prevê o gapeamento dos pontos de sela na banda d , não explicaria o comprimento do vetor de onda da CDW que é observado

por neutrons, partindo de um mecanismo de distorção tipo Peierls. Mesmo ali, nenhum gap é observado pela espectroscopia no NbSe_2 . Seja qual for o mecanismo, é comumente aceito hoje que o acoplamento elétron-fônon tem um papel determinante. A falta de uma boa teoria de acoplamento forte, entretanto, limita sensivelmente o horizonte de entendimento sobre a origem do fenômeno que causa a instabilidade de CDW nesses sistemas. Acredito que possivelmente existem mais informações escondidas por trás dos experimentos de espectroscopia do que eles de fato revelam. Nesse contexto, a simetria e a extensão de cobertura da superfície de Fermi pelo gap de CDW continuam obscuros e à espera de uma conclusão.

Em segundo lugar, a rica variedade de fases de CDW que aparecem no diagrama do TaSe_2 continua sem uma explicação baseada num cálculo de primeiros princípios, apesar de haver um entendimento fenomenológico bastante satisfatório sobre isso já a algum tempo [48, 49]. O cenário das fases incomensuráveis de CDW é descrito a partir de defeitos na fase da modulação da CDW comensurável, chamados de *discomensurações*. Na fase incomensurável, os defeitos se localizam formando uma superestrutura periódica de regiões incomensuráveis (que deslocam a fase da CDW) intercaladas por pedaços de CDW comensuráveis com a rede. A transição de comensurabilidade é interpretada como uma espécie de derretimento dos defeitos da fase incomensurável, onde a densidade de discomensurações é finita. Entretanto, a origem física das interações que regulam o aparecimento dessas fases ainda não é clara. Com relação a isto, esperamos que este trabalho possa ser útil em oferecer alguma pista. Os resultados desenvolvidos no cap. 5 sugerem que a origem da fase de faixas no diagrama no TaSe_2 está possivelmente ligada ao acoplamento piezoelétrico, que explicaria a origem dos pontos críticos quânticos observados em função da pressão aplicada.

Capítulo 3

Modelo fenomenológico

A proposta consiste em desenvolver uma teoria fenomenológica que unifique a descrição física das fases CDW e supercondutora nos TMDs, sugerida por Castro Neto [10] a algum tempo. Neste capítulo, vamos construir heurísticamente a Hamiltoniana CDW a partir das simetrias da rede na fase distorcida e do acoplamento elétron-fônon. Um dos pilares dessas simetrias é a forte dependência do acoplamento elétron-fônon com as direções da zona de Brillouin, acompanhada pela simetria hexagonal da tripla CDW. O segundo pilar é a quebra da simetria de inversão da rede, introduzida pelo gap da CDW. Estas duas propriedades ditam a estrutura da banda das excitações eletrônicas em torno da superfície de Fermi e levam a um modelo mínimo marginal. O modelo deve ser contrastado com a teoria invariante de calibre proposta há algum tempo por Littlewood e Varma [52] para descrever perturbativamente o acoplamento entre a CDW e ordem supercondutora no líquido de Fermi (NbSe₂). O foco deste capítulo é dirigido ao cristal de TaSe₂, onde a descrição de MFL é válida.

3.1 Hamiltoniana CDW

Considerando a origem da instabilidade de CDW no aninhamento entre diferentes folhas da superfície de Fermi, o ponto de partida do modelo é baseado na idéia de que o fraco aninhamento produz um recobrimento imperfeito da superfície de Fermi pelo gap da CDW. As regiões onde o gap se fecha podem ser inferidas indiretamente através do acoplamento elétron-fônon. Diferentemente dos metais convencionais, o acoplamento elétron-fônon $g_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ dos metais de transição é fortemente dependente do momento eletrônico [54]. Aqui, $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ é o momento transferido por um elétron com momento \mathbf{k} espalhado por um fônon e λ é a polaridade do fônon espalhador. Essa dependência com as direções do espaço k é responsável por várias anomalias observadas no espectro de fônons [53, 54]. Através de um cálculo simplificado tipo *tight-binding* para os elétrons fracamente interagentes da banda d , o acoplamento elétron-fônon tem a forma [10, 55]

$$g_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \sqrt{\frac{2\hbar}{NM\omega_{\lambda,\mathbf{q}}}} \sum_{\mathbf{a}} c_{|\mathbf{a}|} \mathbf{e}_{\lambda,\mathbf{q}} \cdot \mathbf{a} \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}/2) \cos[(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \cdot \mathbf{a}], \quad (3.1)$$

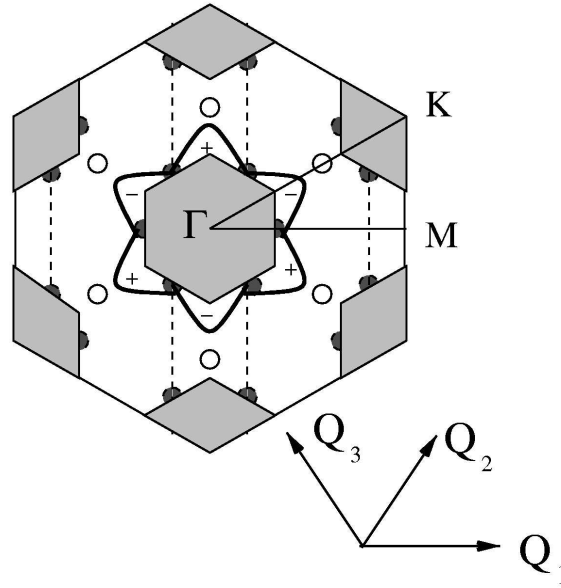


Figura 3.1: Figura esquemática da superfície de Fermi. As linhas tracejadas representam as linhas nodais associadas ao vetor de onda \mathbf{Q}_1 da CDW. Os círculos preenchidos representam os nós da superfície de Fermi e os círculos vazios os pontos de sela. A linha sólida em torno da folha de dentro indica o gap de CDW proposto [10].

onde N é o número de átomos do sistema, M é a massa atômica, $\omega_{\lambda,\mathbf{q}}$ é a dispersão dos fônons, $\mathbf{e}_{\lambda,\mathbf{q}} = -\mathbf{e}_{\lambda,-\mathbf{q}}$ é o vetor de polarização, \mathbf{a}_i são os vetores de primeiros vizinhos do cristal e $c_{|\mathbf{a}|}$ é um parâmetro com dependência na distância entre os primeiros vizinhos no espaço \mathbf{k} .

A introdução adiabática de uma distorção eletrônica tipo CDW provoca uma distorção periódica na rede cristalina via mecanismo de pólarons, ou seja, deslocamentos eletrônicos acompanhados por uma núven de fônons virtuais. Os pontos da superfície de Fermi onde o acoplamento elétron-fônon g_λ associado aos fônons que se acoplam à CDW é zero indicam, portanto, os pontos onde não deve haver distorção eletrônica e o gap CDW se fecha. Ou seja, $\Delta_{CDW} \propto g_L(\mathbf{k}, \mathbf{Q}_i)$, onde \mathbf{Q}_i são os vetores de onda da CDW e L são os fônons longitudinais acoplados a \mathbf{Q}_i . A direção dos três vetores que geram a rede recíproca é indicada na Fig. 3.1 pelos vetores \mathbf{Q}_i , com $i = 1, 2, 3$. Os vetores de primeiros vizinhos \mathbf{a}_i estão rodados em $\frac{\pi}{2}$ na zona de Brillouin em relação aos geradores da rede recíproca, e apontam na direção ΓK e nas direções simétricas. Definindo o ângulo polar θ no espaço k em relação à direção ΓM , o acoplamento $g_L(\mathbf{k}, \mathbf{Q}_1)$ definido pela Eq. (3.1) se anula ao longo das linhas nodais

$$\cos \theta = \frac{1}{k} \left[\pm \frac{Q_1}{4} + \frac{m\pi}{a'} \right],$$

e na direção ΓM , $\theta = n\pi$, com m e n inteiros, onde $a' = a\frac{\sqrt{3}}{2}$ é a projeção do parâmetro de rede

na direção ΓM (ver apêndice B). As linhas nodais associadas aos outros dois vetores \mathbf{Q}_2 e \mathbf{Q}_3 são equivalentes, a menos de uma rotação de $\frac{\pi}{3}$ e $\frac{2\pi}{3}$ respectivamente em torno do centro da zona de Brillouin Γ .

A origem do gap de CDW estaria ligada ao aninhamento imperfeito entre as folhas S_I e S_{II} da superfície de Fermi [28] (ver Fig 2.3) e à forte dependência do acoplamento elétron-fônon com as direções da zona de Brillouin. Note pela fig. 3.1 que as “faces” da folha S_I da superfície de Fermi se aninham com a folha S_{II} , o que leva ao aparecimento de uma distorção de Peierls com os vetores de onda de CDW indicados por \mathbf{Q}_i , que conectam as faces nas três direções da rede hexagonal. As folhas S_I e S_{II} não sofrem auto-aninhamento [28]. A distorção abriria um gap de CDW nas duas folhas, a menos dos pontos onde a abertura do gap é proibida pelo acoplamento elétron-fônon. Esses pontos são indicados pela intersecção das linhas nodais da tripla-CDW com a superfície de Fermi. Pela simetria do problema, o parâmetro de ordem da CDW tem nós nos pontos onde o gap se anula e lobos nas direções dos pontos de sela, onde a amplitude do gap é máxima.

Nos TMDs, a distorção de CDW introduz uma quebra na simetria de inversão da rede no cristal. Do ponto de vista fenomenológico, a quebra de simetria da fase distorcida é incorporada pela simetria do parâmetro de ordem da CDW, representado pela função do gap $\Delta_{\mathbf{c}\mathbf{k}}$ com dependência nas direções da zona de Brillouin. Considerando que a amplitude do gap da tripla CDW $|\Delta_{\mathbf{c}\mathbf{k}}|$ conserva a simetria da rede hexagonal, a perda da simetria de inversão afeta a paridade do parâmetro de ordem $\Delta_{\mathbf{c}\mathbf{k}}$, que é ímpar ante a troca de \mathbf{k} por $-\mathbf{k}$. Pela Fig. 3.1, é fácil ver que isto é correto se a função do gap for anti-simétrica, mudando de sinal em cada um dos nós. Portanto, o parâmetro de ordem proposto tem *simetria tipo f*.

Nesse cenário, as excitações elementares da CDW são excitações eletrônicas de pares partícula-buraco na vizinhança dos nós. Vamos definir os operadores usuais de criação (aniquilação) de férmions $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k},\sigma}$), com momento \mathbf{k} e spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Note pela Fig. 3.1 que os nós são conectados pelos vetores de onda da CDW. Isto naturalmente leva à troca de elétrons entre dois nós ligados por \mathbf{Q}_i via processo de espalhamento de *Bragg* da função de onda dos elétrons pela superestrutura da CDW. Por isso, o modelo mínimo deve levar em conta esses dois subsistemas juntos na mesma Hamiltoniana. Por conveniência, vamos introduzir o espinor

$$\Psi_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i,\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{+,i,\sigma}(\mathbf{k}) \\ \psi_{-,i,\sigma}(\mathbf{k}) \end{pmatrix},$$

cujos índices $+$, $-$ indicam os dois subsistemas nodais. A Hamiltoniana dos elétrons normais na vizinhança de dois nós ligados por \mathbf{Q}_i admite dois termos

$$H = H_e + H_{e-c}.$$

O primeiro termo H_e é a Hamiltoniana não interagente dos elétrons em torno de cada um dos

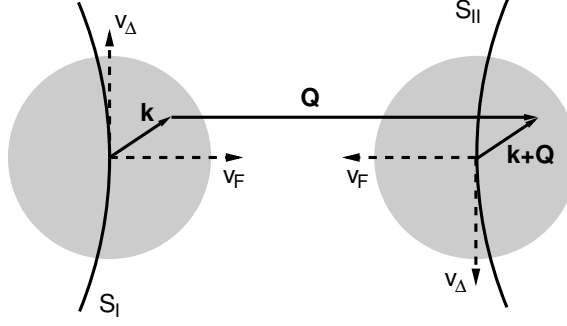


Figura 3.2: Condição de aninhamento da superfície de Fermi $\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$. Um momento \mathbf{k} fora da superfície de Fermi S_I é mapeado por um deslocamento de CDW no momento $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$, dentro da folha S_{II} .

nós

$$\begin{aligned}
 H_e &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i} \left[\epsilon_{\mathbf{k}} c_{\sigma, \mathbf{k}}^\dagger c_{\sigma, \mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i} c_{\sigma, \mathbf{k}+\mathbf{Q}_i}^\dagger c_{\sigma, \mathbf{k}+\mathbf{Q}_i} \right] \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, a, b, \sigma, i} \psi_{a, i, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \left[(\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i}) \sigma_0^{ab} + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i}) \sigma_3^{ab} \right] \psi_{b, i, \sigma}(\mathbf{k}), \quad (3.2)
 \end{aligned}$$

onde σ_ν ($\nu = 0, 1, 2, 3$) são as matrizes de Pauli que atuam no espaço nodal, com índices $a, b = \pm$ (ver Apêndice A.2) e $\epsilon_{\mathbf{k}}$ é a dispersão dos elétrons livres medida em relação à superfície de Fermi. O segundo termo, H_{e-c} , é o termo de espalhamento da CDW, cuja magnitude é proporcional ao gap Δ_c ,

$$\begin{aligned}
 H_{e-c} &= \sum_{i, \mathbf{k}} \Delta_c \mathbf{k} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i} + h.c. \\
 &= \sum_{i, \mathbf{k}, \sigma, a, b} \Delta_c \mathbf{k} \psi_{a, i, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \sigma_1^{ab} \psi_{b, i, \sigma}(\mathbf{k}). \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

Este termo tem o papel de uma Hamiltoniana de troca de elétrons entre dois nós ligados por um vetor de CDW \mathbf{Q}_i . O índice i será ignorado daqui em diante, já que os férmions de Dirac estão desacoplados entre estes subespaços. Assim como a dispersão de banda do gap CDW Δ_c é ímpar em relação aos nós, a dispersão dos elétrons livres $\epsilon_{\mathbf{k}}$ é ímpar em relação à superfície de Fermi. Aplicando a condição de *aninhamento* $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ (representada pela Fig. 3.2) sobre a Eq. (3.2), a Hamiltoniana total dos elétrons vestidos com a CDW pode ser escrita na notação espinorial como:

$$H_{CDW} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) [\epsilon_{\mathbf{k}} \sigma_3 + \Delta_c \mathbf{k} \sigma_1] \Psi_\sigma(\mathbf{k}).$$

Como a Hamiltoniana acima é válida somente na vizinhança da superfície de Fermi, em torno dos nós, as dispersões podem ser aproximadas pela variação local. Expandindo a dispersão

eletrônica ϵ em ordem mais baixa na direção normal à superfície de Fermi, $\epsilon \sim \hbar v_F k_\perp$, onde v_F é a velocidade de Fermi e k_\perp é a componente do momento na direção correspondente. Da mesma forma, a dispersão do gap CDW é ímpar em torno dos nós por causa da quebra de simetria de inversão da rede. Ela pode ser aproximada em primeira ordem por $\Delta_{c\mathbf{k}} \sim \hbar v_\Delta k_\parallel$, onde $\hbar v_\Delta = \frac{\partial \Delta_c}{\partial k_\parallel}$ é a velocidade na direção tangente à superfície de Fermi, ao longo da qual as variações do gap são grandes, ou seja,

$$H_{CDW} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) [\hbar v_F k_\perp \sigma_3 + \hbar v_\Delta k_\parallel \sigma_1] \Psi_\sigma(\mathbf{k}). \quad (3.4)$$

Essas duas aproximações serão chamadas de *aproximação do cone*, numa referência explícita à dispersão dos férmions de Dirac da teoria de campos. Apesar de compartilharem a mesma dispersão relativística, os nossos férmions de Dirac, por assim dizer, são entidades clássicas no sentido de que o spin eletrônico não se acopla à dinâmica, como acontece em teorias genuinamente relativísticas [56]. A Hamiltoniana (3.4) é apenas um *mapeamento* do problema na Hamiltoniana 2D de Dirac com férmions sem massa, com quiralidade entre as duas espécies de férmions identificadas com cada um dos dois subespaços nodais. Mais detalhes sobre esse mapeamento serão oportunamente introduzidos no capítulo seguinte.

Antes de prosseguir, é importante salientar que as motivações originais deste modelo são duas: a primeira é oferecer uma explicação simples para o tempo de decaimento das excitações de quase-partícula, que sugere a física de um líquido de Fermi *marginal*. Nesse contexto, a motivação de uma teoria nodal de CDW parece ser auto-explicativa, já que ela reduz drasticamente a densidade de estados em torno da superfície de Fermi. A segunda, como foi dito logo no início do capítulo, é propor um modelo capaz de unificar a descrição da CDW com a supercondutividade. Vamos então tratar da primeira motivação.

3.1.1 Acoplamento piezoelétrico

Como foi mencionado antes, a formação da superestrutura de CDW nos TMDs está ligada à quebra na simetria de inversão da rede. Esta quebra de simetria permite o aparecimento da piezoelectricidade, que é induzida pelo aumento da energia elástica do sistema através do acoplamento da CDW a uma distorção periódica do cristal. A interpretação de que instabilidades de CDW podem ser estabilizadas pela energia elástica de polarização da rede foi considerada por Overhauser [57], que demonstrou a possibilidade da ocorrência de uma CDW num metal caso os íons pudessem se distorcer o suficiente para compensar a energia de polarização eletrônica e anular o campo elétrico dentro do material. Naturalmente, a energia de ligação dos íons num metal é grande demais para que a rede possa se distorcer significativamente. O mesmo no entanto não acontece nos TMDs, cujas interações entre íons são muito mais fracas. A justificativa para a incorporação da piezoelectricidade na teoria pode ser dada de outro modo. Do ponto de vista do grupo de renormalização, o acoplamento elétron-fônon usual da fase distorcida é irrelevante no limite $q \rightarrow 0$, enquanto que o acoplamento piezoelétrico é marginal. Por isso, o acoplamento

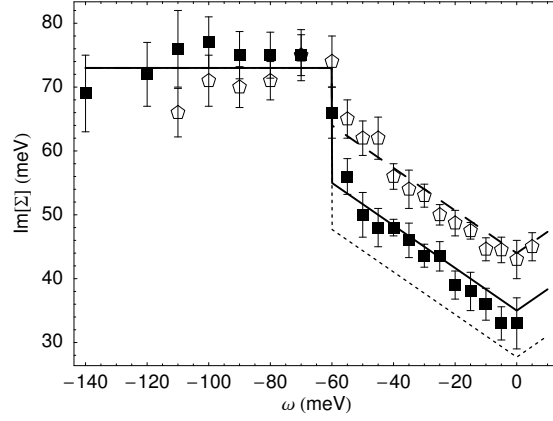


Figura 3.3: Inverso do tempo de decaimento das excitações, definida pela parte imaginária da autoenergia Σ . Os pontos são medidas de ARPES para o TaSe₂ [23]: quadrados ($T = 34$ K); pentágonos ($T = 76$ K). As linhas são resultado do modelo: pontilhada ($T = 0$); sólida ($T = 34$ K); tracejada ($T = 76$ K).

efetivo entre os férmions de Dirac e os fônons vestidos com a CDW deve ser piezoelétrico, de forma a incorporar a quebra de simetria da CDW. O campo dos fônons acústicos polarizados ao longo das direções Q_i é descrito por

$$H_A = \frac{1}{2\rho_L} \int d\mathbf{r} \{ \Pi^2(\mathbf{r}) + \rho_L^2 v_f^2 [\nabla\Phi]^2 \}, \quad (3.5)$$

onde v_f é a velocidade do som, ρ_L é a densidade de massa da rede, $\Phi(\mathbf{r})$ é o campo dos fônons e $\Pi(\mathbf{r}) = \partial_0\Phi$ é o momento canonicamente conjugado. O acoplamento elétron-fônon será

$$H_{e-p} = \delta \int d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{r}) \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (3.6)$$

com δ a constante de acoplamento piezoelétrico.

Usando o método das funções de Green sobre a Hamiltoniana (3.4), (3.5) e (3.6), o cálculo da autoenergia Σ é feito autoconsistentemente através da técnica de análise de escala e da teoria do grupo de renormalização [10, 63]. O resultado desse cálculo pode ser considerado um êxito deste modelo, dada a sua simplicidade (ver Fig. 3.3). O amortecimento dos férmions de Dirac é dado por [10]

$$\text{Im} \Sigma(k_F, \omega) = \tau_0^{-1} + \alpha T + \gamma |\omega|, \quad (3.7)$$

com os parâmetros $\tau_0^{-1} = 27$ meV, $\alpha = 2.14$ e $\gamma = 0.212$. Esses resultados são válidos para energias menores que $\hbar\omega \ll \max[\Delta_{CDW}] \sim 60$ meV. Esta energia corresponde à energia de corte do cone de Dirac, onde o espectro de energia adquire correções de ordem superior à aproximação linear.

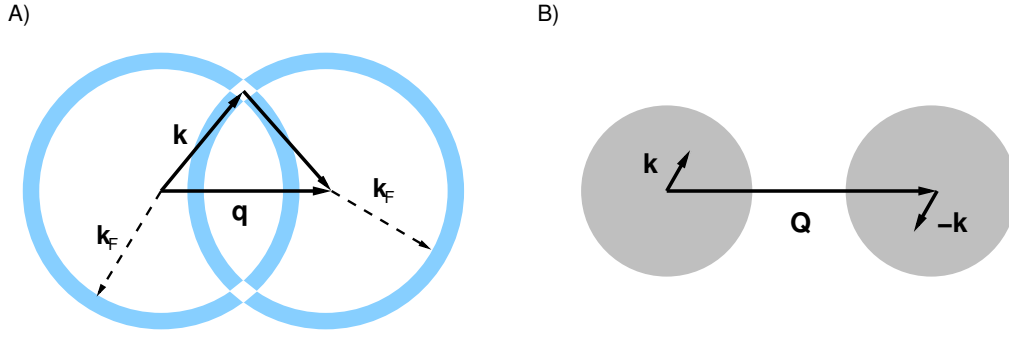


Figura 3.4: A) Os estados que contribuem para que a interação elétron-fônon seja atrativa pertencem à intersecção entre os dois anéis com largura $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ cada um, em torno de k_F . A área de intersecção é maximizada para $q = 0$ (aproximação de emparelhamento). B) Aproximação de emparelhamento para os férmions de Dirac: o acoplamento elétron-fônon é mediado pela CDW com vetor de onda \mathbf{Q} , conectando os espaços nodais $+$, $-$.

3.2 Ansatz de emparelhamento

Vamos tratar da segunda motivação deste modelo, ou seja, a inclusão da supercondutividade. Numa teoria supercondutora usual, o estado do condensado é definido através de uma soma em momento sobre os operadores de criação de pares aplicados no vácuo (definido pela superfície de Fermi completamente preenchida),

$$\psi_C = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma_1, \sigma_2} a_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{q} - \mathbf{k}, \sigma_2}^\dagger |0\rangle, \quad (3.8)$$

onde \mathbf{q} é o momento do par. Para que o acoplamento do termo de interação elétron-elétron mediado por fônons virtuais [58],

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = |M_{\mathbf{q}}|^2 \frac{2\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{[E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k})]^2 - \hbar^2\omega_{\mathbf{q}}^2},$$

seja atrativo ($V < 0$), os momentos \mathbf{k} e em $\mathbf{k}' = \mathbf{q} - \mathbf{k}$ devem pertencer à região de intersecção entre duas cascas com o raio da superfície de Fermi e largura $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, deslocadas uma em relação à outra pelo vetor \mathbf{q} . Para um dado momento \mathbf{q} , a contribuição para o potencial atrativo é proporcional à área de intersecção, mostrada na Fig 3.4 A. Não é difícil perceber que a contribuição mais importante (aquela que maximiza a área) acontece no caso $\mathbf{q} = 0$. A hipótese que restringe a formação dos pares aos que têm momento total zero no condensado (3.8) é conhecida como *aproximação de emparelhamento*, válida na formação dos pares de Cooper na teoria BCS.

No caso da CDW, o acoplamento elétron-fônon proposto é piezoelétrico e por isso o mecanismo de acoplamento atrativo entre os férmions de Dirac via fônons virtuais deve obrigatoriamente envolver o espalhamento dos elétrons através da tripla-superestrutura da CDW, responsável pela quebra de simetria de inversão da rede. O *ansatz* que propomos é baseado na idéia de que os

pares supercondutores são formados por elétrons localizados em diferentes nós da superfície de Fermi. A aproximação de emparelhamento portanto envolve a formação de um condensado de pares com momento total *igual* ao momento \mathbf{Q}_i da CDW. Note que na teoria BCS, os elétrons do par são simétricos em relação à superfície de Fermi. Aqui, os férmions de Dirac que formam o par têm momentos simétricos em relação aos *nós* da superfície de Fermi (ver Fig. 3.4 B). No canal de singleto, o spin total do par de férmions de Dirac é zero.

A proposição da forma da Hamiltoniana de emparelhamento deve satisfazer algumas prerrogativas de simetria do *ansatz*. Além da quebra de simetria provocada pela distorção da rede, a formação de pares com centro de massa deslocado pelo momento da CDW introduz uma quebra da simetria de inversão temporal na fase supercondutora. De acordo com Anderson [59], a formidável insensibilidade dos supercondutores tipo BCS à presença de impurezas no limite sujo é garantida pelo fato de que os elétrons buscam os estados do condensado com a maior degenerescência possível, o que consiste em parear cada elétron com o seu simétrico em spin e momento. Neste caso, os canais de espalhamento promovem transições entre estados degenerados no espaço de pares, mantendo a coerência de fase do sistema. Tradicionalmente, a ausência de simetria de inversão temporal torna a supercondutividade se não instável, bastante sensível a impurezas. Um critério alternativo foi proposto por Anderson [60] para a formação de pares no canal de tripleto no limite limpo. Segundo este critério, a coerência do condensado exigiria um centro de inversão da rede. Ao que parece, a história não termina por aí. Muito recentemente, a supercondutividade foi observada no composto de férmions pesados CePt₃Si (que não apresenta um centro de inversão da rede) na vizinhança do ponto crítico quântico (QCP) da fase ferromagnética [61]. Perto do QCP, seria natural que as flutuações de spin mediadas por pares de Cooper ocorressem no canal de tripleto. A constatação de que o campo crítico H_{c2} observado é cerca de 5 vezes maior que o campo necessário para levantar a degenerescência dos spins no canal de singleto (e portanto destruindo a supercondutividade) é uma indicação adicional em favor do canal de tripleto no cristal CePt₃Si. Por isso, aparentemente não existe um critério suficientemente geral para a estabilidade da fase supercondutora em sistemas que quebram a simetria de inversão do cristal [62]. De qualquer forma, no caso dos TMDs, o espalhamento da CDW não altera a degenerescência dos estados do condensado. Por isso, a perda da simetria de inversão temporal causada pelo deslocamento do par pelo vetor da CDW \mathbf{Q}_i não deve abrir novos canais de quebra de pares, conquanto que os férmions de Dirac Ψ_i estejam desacoplados entre os subespaços nodais indexados pelas três direções de CDW $i = 1, 2, 3$. Uma vez garantida essa condição, a estrutura nodal pode ser encarada como um mapeamento “exótico” que afeta a simetria da interação de troca de spin na fase supercondutora, como ficará claro mais tarde na resposta de NMR, porém sem maiores consequências sobre a estabilidade do condensado.

Para introduzir a quebra de simetria de inversão no parâmetro de ordem supercondutor Δ_s , queremos que o estado do condensado (3.8) seja anti-simétrico em relação à aplicação do operador de inversão temporal, que consiste basicamente em trocar $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, inverter o spin e trocar a ordem dos operadores de criação. Em linguagem espinorial, o emparelhamento anti-simétrico

entre as duas espécies de férmions $+$, $-$ é feita com a matriz de Pauli anti-simétrica σ_2 . Assim, propomos que o condensado seja formado por pares de singlete com a forma

$$\psi_P(\mathbf{k}) = \sum_{a,b} \psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) |0\rangle.$$

Após tomar o traço dos fônons, o termo de interação de pares terá a forma:

$$H_P = -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{a,b,c,d} \sigma_2^{ab} \sigma_2^{cd} \psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \psi_{c,\uparrow}(\mathbf{k}') \psi_{d,\downarrow}(-\mathbf{k}'),$$

onde $g \sim \frac{\delta^2}{\omega_D}$ é a constante de acoplamento piezoelétrica efetiva, com $\omega_D \sim v_f \Lambda$ a frequência de Debye, $\Lambda \sim \frac{1}{a}$ a frequência de corte da rede e V o volume. Em aproximação de campo médio,

$$\psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) = \langle \psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \rangle + \epsilon_{ab}(\mathbf{k}),$$

a Hamiltoniana de pares tem a forma

$$\begin{aligned} H_P &= -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{a,b,c,d} \sigma_2^{ab} \sigma_2^{cd} \left[\langle \psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \rangle + \epsilon_{ab}(\mathbf{k}) \right] \\ &\quad \times \left[\langle \psi_{c,\uparrow}(\mathbf{k}') \psi_{d,\downarrow}(-\mathbf{k}') \rangle + \epsilon_{dc}^* \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a,b} \left[\Delta_s \psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) + h.c. \right] + \frac{V \Delta_s^2}{g} + O(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde

$$\Delta_s = -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a,b} \langle \psi_{a,\uparrow}(\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b,\downarrow}(-\mathbf{k}) \rangle \quad (3.10)$$

é o parâmetro de ordem supercondutor complexo, com uma simetria $U(1)$ adicional na fase.

Considerando idealmente um conjunto de planos desacoplados, as flutuações do parâmetro de ordem nos planos supercondutores devem ser do tipo Kosterlitz-Thouless (tipo modelo XY 2D) na fase de desacoplamento entre pares de vórtice e anti-vórtice, acima da temperatura $T_{KT} \approx T_c \propto |\Delta_s(T=0, g)|^2$, proporcional à densidade superfluida nos planos [64, 65]. O fraco acoplamento entre os planos supercondutores muda a classe de universalidade do modelo para a do modelo XY 3D, onde $T_c \approx T_{KT} \{1 + 1/\ln^2 [aT_{KT}/(cU_\perp)]\}$, para $T_{KT} \gg cU_\perp$, com U_\perp o acoplamento entre os planos e c a distância de separação entre eles. A transição supercondutora é portanto reescalada no sentido inverso ao do parâmetro $\frac{c}{a}$, indicando que a coerência de fase é suprimida pelo aumento da anisotropia entre os planos.

3.3 Modelo marginal

A marginalidade do modelo proposto é baseada no comportamento da densidade de estados, que vai a zero na superfície de Fermi ou para um valor próximo de zero, conforme pequenos

deslocamentos do potencial químico. A teoria do *líquido de Fermi marginal* (MFL) [17] foi concebida originalmente para descrever a fase normal de pseudo-gap dos supercondutores HTc. À semelhança do TaSe₂, os HTc exibem algumas anomalias na fase normal, como o aumento linear do inverso do tempo de decaimento das quase-partículas com a energia [66], o excesso de absorção óptica na região do infravermelho médio (que não poderia ser explicado através de uma simples teoria de Drude) [67], o comportamento metálico da resistividade com a temperatura ($\rho \propto T$), entre outras características que inviabilizariam a descrição através de um líquido de Fermi convencional.

Sistemas com caráter marginal tipicamente apresentam funções de polarização com a forma geral

$$\text{Im } \Pi(\mathbf{q}, \omega, T) \sim \begin{cases} \omega/T, & \hbar\omega \ll k_B T \\ \text{const.}, & \hbar\omega \gg k_B T. \end{cases} \quad (3.11)$$

A relação anterior implica via transformação de Kramers-Kronig que a compressibilidade generalizada $\text{Re } \Pi(\mathbf{q}, \omega) \sim \ln \frac{\omega}{T}$ tem uma divergência logarítmica no infravermelho. A autoenergia eletrônica segue a forma [68]

$$\Sigma(\omega) = \lambda\omega \left[\ln \frac{x}{\alpha} + i \frac{\pi}{2} x \text{sgn}(\omega) \right],$$

com $x = \max(|\omega|, T)$ e α a energia de corte.

A função de Green de um sistema marginal é genericamente formada por uma contribuição coerente de processos de quase-partícula na vizinhança da energia de Fermi e por uma parte incoerente atribuída a excitações de 1-partícula nos estados de alta energia da banda. O peso espectral das quase-partículas $z = [1 - \partial \text{Re} \Sigma / \partial \omega]_{\omega=E_{\mathbf{k}}}^{-1} \sim 1 / \ln |\alpha / E_{\mathbf{k}}|$, com energia $E_{\mathbf{k}}$ definida em relação à superfície de Fermi, vai a zero logaritmicamente no limite $E_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$: daí a marginalidade do modelo, pensando em termos da massa efetiva do líquido de Fermi de Landau. Em resumo, o conjunto dessas características descreve um líquido de Fermi marginal.

O estudo fenomenológico da supercondutividade *tipo s* no MFL foi feito pelos autores da Ref. [17] em acoplamento forte e sugere o aparecimento de várias propriedades anômalas em relação ao cenário convencional, como a formação de novos picos de absorção no infravermelho e ausência do pico de Hebel-Slichter de NMR. O modelo microscópico proposto na seção anterior, no entanto, apresenta duas peculiaridades importantes que são possíveis fontes de anomalias nas propriedades da fase supercondutora: 1) a falta de um centro de inversão no cristal e a quebra da simetria de inversão temporal dos pares, e 2) a presença de *duas* bandas no espectro de excitações das quase-partículas. Somando-se a isto, claro, a marginalidade do modelo introduzida pelo comportamento da densidade de estados.

Numa última observação, note que o modelo proposto limita o papel do acoplamento elétron-fônon ao mecanismo formador dos pares. A razão é que o acoplamento com os fônons na fase normal é irrelevante a temperaturas muito menores que a energia de Debye, o que no caso

particular do TaSe₂ é correto a temperaturas muito acima de T_c por causa da baixa temperatura de transição. Ao que tudo indica, as várias anomalias observadas nesse cristal têm uma origem essencialmente eletrônica. Com isto, temos um modelo mínimo que seria em princípio capaz de unificar a descrição entre as fases de CDW normal e supercondutora. A partir do capítulo seguinte, vamos examinar as implicações deste modelo sobre as propriedades gerais do sistema.

Capítulo 4

Plasmons nodais

O modelo nodal da fase normal CDW desenvolvido no Cap. 3 para os TMDs será usado para determinar os modos coletivos dos elétrons. Vamos analisar um pouco melhor as excitações de quase-partícula deste modelo para encontrar as excitações de plasmon permitidas pelo parâmetro de ordem da CDW. A Hamiltoniana CDW (3.4)

$$\mathcal{H}_{CDW} = \sum_{\sigma} \int_{BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \hbar (v_F \sigma_3 k_{\perp} + v_{\Delta} \sigma_1 k_{\parallel}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{k}). \quad (4.1)$$

descreve as excitações elementares dos elétrons nos nós da superfície de Fermi. A quantização do campo é feita a partir de operadores de criação e aniquilação de partícula-buraco, expandindo Ψ numa base de autofunções

$$\Psi(\mathbf{k}, t) = a_{\mathbf{k}}(t) u(\mathbf{k}) + b_{-\mathbf{k}}(t) v(-\mathbf{k}), \quad (4.2)$$

que diagonalizam a Hamiltoniana. As quasipartículas têm dois ramos de dispersão

$$\pm E_{\mathbf{k}} = \pm \hbar v_F \bar{k},$$

com $\bar{\mathbf{k}} = \vec{k}_{\perp} + (v_{\Delta}/v_F) \vec{k}_{\parallel}$ definindo o vetor de onda anisotrópico. Os ramos estão associados aos dois autovetores

$$u(\mathbf{k}) = \frac{1}{u_n(\mathbf{k})} \begin{pmatrix} \hbar v_F k_{\perp} - E_{\mathbf{k}} \\ \hbar v_{\Delta} k_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

$$v(-\mathbf{k}) = \frac{1}{v_n(\mathbf{k})} \begin{pmatrix} \hbar v_F k_{\perp} + E_{\mathbf{k}} \\ \hbar v_{\Delta} k_{\parallel} \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

com u_n e v_n os respectivos fatores de normalização, e levam numa descrição Hamiltoniana na forma segundo quantizada:

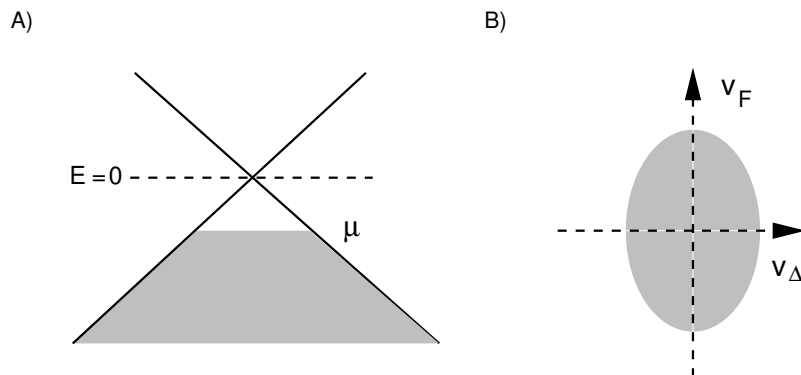


Figura 4.1: a) Representação esquemática do estado fundamental no cone de Dirac. Os estados preenchidos representam as partículas da teoria. A região vazia no ramo inferior do cone é um bolso gerado pelo rebaixamento do potencial químico. b) Seção cônica da superfície de Fermi do bolso nas direções normal (v_F) e paralela (v_Δ) à superfície de Fermi.

$$H_{CDW} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} - b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \right). \quad (4.5)$$

Claramente, a e b representam operadores de destruição (criação) de partículas (buracos) operando separadamente em cada um dos dois ramos do cone de Dirac. Vamos definir que os estados com energia negativa correspondem aos estados do ramo inferior do cone, enquanto os outros com energia positiva correspondem às excitações de quasi-partícula no ramo de cima. À semelhança de um sistema de duas bandas em um semiconductor de gap zero como a grafite [70], o vácuo de N -partículas é o estado onde todos os elétrons preenchem completamente os estados abaixo do potencial químico μ . O deslocamento do potencial químico do vértice do cone introduz um *bolso* em torno dos nós com energia $\mu = E_F^* = \hbar v_F k_F^*$, onde k_F^* é o momento da superfície de Fermi do bolso. Um bolso tipo *partícula* ($\mu > 0$) portanto desloca para cima o potencial químico, enquanto que um bolso tipo *buraco* ($\mu < 0$) rebaixa a superfície de Fermi, preenchendo os estados de energia mais alta da banda de baixo do cone com buracos (ver Fig.4.1).

Considerando o caso $\mu < 0$, a densidade de ocupação de partículas à temperatura zero é

$$\begin{aligned} n_a(\mathbf{k}) &= \langle 0 | a^{\sigma\dagger}(\mathbf{k}) a^\sigma(\mathbf{k}) | 0 \rangle = 0 \\ n_b(\mathbf{k}) &= \langle 0 | b^{\sigma\dagger}(\mathbf{k}) b^\sigma(\mathbf{k}) | 0 \rangle = \theta(\bar{k} - k_F^*). \end{aligned}$$

Os modos coletivos de plasmon derivam do cálculo função de correlação retardada densidade-densidade de carga. É suficiente fazer o cálculo em aproximação de RPA (*random phase approximation*) [81], que elimina as contribuições incoerentes vindas de excitações de 1 partícula e conserva apenas as excitações de partícula-buraco, que efetivamente geram o plasmon. A aproximação basicamente consiste em escrever a densidade de flutuação de carga $\rho_{\mathbf{q}} \propto \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$, em

termos de uma base de ondas planas [71]. Para $q \neq 0$ o valor esperado $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle$ é aproximadamente zero, por causa da soma nas fases “aleatórias”. Esta aproximação descreve as interações residuais de longo alcance entre as cargas que não foram completamente blindadas pela interação de curto alcance. Elas são responsáveis pelas correlações eletrônicas no limite $q \rightarrow 0$ e pelo comportamento coletivo dos elétrons. Em RPA, a função dielétrica é dada por

$$\epsilon(\omega, \mathbf{q}, k_z) = 1 - V_0(q, k_z) \chi^0(\omega, \mathbf{q}) \quad (4.6)$$

onde χ^0 é a função de polarização retardada do sistema não interagente, também genericamente chamada de função de *susceptibilidade de carga*. A dispersão do plasmon é definida nos pontos onde $\epsilon(\Omega_p, \mathbf{q}, k_z)$ é igual zero.

4.1 Susceptibilidade de carga

Os efeitos de muitos corpos são incorporados às interações de carga através da função de susceptibilidade eletrônica

$$\chi^0(q) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha\beta} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \text{Tr}[G_{\beta\alpha}^0(k)G_{\alpha\beta}^0(k+q)], \quad (4.7)$$

com α, β somados sobre o spin. Ela é definida através da função de Green não interagente à temperatura zero,

$$i G_{\beta\alpha}^0(\mathbf{k}, t) = \langle \Psi_{\beta}(\mathbf{k}, t) \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}, 0) \rangle \theta(t) - \langle \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}, 0) \Psi_{\beta}(\mathbf{k}, t) \rangle \theta(-t). \quad (4.8)$$

Reescrevendo os operadores fermiônicos na forma segundo quantizada (4.2), os valores esperados são:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\beta}(\mathbf{k}, 0) \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}, t) \rangle &= e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \langle a_{\mathbf{k}}^{\beta} a_{\mathbf{k}}^{\alpha\dagger} \rangle u(\mathbf{k}) u^{\dagger}(\mathbf{k}) + e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \langle b_{-\mathbf{k}}^{\beta} b_{-\mathbf{k}}^{\alpha\dagger} \rangle v(-\mathbf{k}) v^{\dagger}(-\mathbf{k}) \\ &= e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} u(\mathbf{k}) u^{\dagger}(\mathbf{k}) + e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} v(-\mathbf{k}) v^{\dagger}(-\mathbf{k}) \left(1 - \theta(\tilde{k} - k_F) \right) \delta_{\alpha\beta}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}, t) \Psi_{\beta}(\mathbf{k}, 0) \rangle &= e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \langle b_{-\mathbf{k}}^{\alpha\dagger} b_{-\mathbf{k}}^{\beta} \rangle v(-\mathbf{k}) v^{\dagger}(-\mathbf{k}) \\ &= e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} v(-\mathbf{k}) v^{\dagger}(-\mathbf{k}) \theta(\tilde{k} - k_F) \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Usando a identidade:

$$\theta(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\delta},$$

e substituindo em (4.8), a função de Green dos férmions de Dirac tem a forma

$$G_{\beta\alpha}^0(\mathbf{k}, \omega) = \left[\frac{u(\mathbf{k}) u^{\dagger}(\mathbf{k})}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i\delta} + \frac{v(-\mathbf{k}) v^{\dagger}(-\mathbf{k})}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} + i\delta} \theta(k_F^* - \bar{k}) + \frac{v(-\mathbf{k}) v^{\dagger}(-\mathbf{k})}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} - i\delta} \theta(\bar{k} - k_F^*) \right] \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.9)$$

Qualitativamente, a função de polarização é resultado de dois tipos de processos:

$$\chi^0(q) = \chi_{intra}^0(q) + \chi_{inter}^0(q),$$

onde χ_{intra}^0 corresponde às excitações *intra*banda e χ_{inter}^0 às excitações *inter*banda. O primeiro tipo corresponde a excitações entre estados localizados no mesmo ramo do cone enquanto o segundo é atribuído às excitações entre ramos diferentes. Essa nomenclatura vem das bandas de condução π da grafite [70] e será usada extensivamente ao longo do texto em referência aos dois ramos do cone. O termo de excitações intra banda depende explicitamente do tamanho do bolso, definido pela energia de Fermi E_F^* , e desaparece completamente quando o potencial químico vai a zero.

Os passos seguintes são substituir a Eq. (4.8) em (4.7), somar sobre as frequências em torno dos pólos das funções de Green e calcular o traço dos espinores u e v ,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[u(\mathbf{k})u^\dagger(\mathbf{k})v(-\mathbf{k}-\mathbf{q})v^\dagger(-\mathbf{k}-\mathbf{q}) \right] &= \text{Tr} \left[v(-\mathbf{k})v^\dagger(-\mathbf{k})u(\mathbf{k}+\mathbf{q})u^\dagger(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\bar{\mathbf{k}} \cdot (\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}})}{\bar{\mathbf{k}} |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|} \right], \end{aligned}$$

$$\text{Tr} \left[v(-\mathbf{k})v^\dagger(-\mathbf{k})v(-\mathbf{k}-\mathbf{q})v^\dagger(-\mathbf{k}-\mathbf{q}) \right] = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\bar{\mathbf{k}} \cdot (\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}})}{\bar{\mathbf{k}} |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|} \right].$$

Fazendo uma transformação do elemento de volume do cone em termos das duas direções anisotrópicas, v_F, v_Δ

$$\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} = \frac{v_F}{v_\Delta} \int \frac{d^2\bar{k}}{(2\pi)^2},$$

as duas contribuições têm a forma

$$\begin{aligned} \chi_{intra}^0(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{1}{\hbar v_\Delta} \frac{1}{d} \int \frac{d^2\bar{k}}{(2\pi)^2} \left(1 - \frac{\bar{\mathbf{k}} \cdot (\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}})}{\bar{\mathbf{k}} |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \times \\ &\quad \times \left[\frac{\theta(|\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}| - k_F^*)}{\nu + \bar{k} + |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}| - i\delta} - \frac{\theta(\bar{k} - k_F^*)}{\nu - \bar{k} - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}| + i\delta} \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \chi_{inter}^0(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{1}{\hbar v_\Delta} \frac{1}{d} \int \frac{d^2\bar{k}}{(2\pi)^2} \left(1 + \frac{\bar{\mathbf{k}} \cdot (\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}})}{\bar{\mathbf{k}} |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \times \\ &\quad \times \left[\frac{\theta(k_F^* - k) \theta(|\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}| - k_F^*)}{\nu - \bar{k} + |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}| - i\delta} - \frac{\theta(k_F - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|) \theta(k - k_F^*)}{\nu - \bar{k} + |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}| + i\delta} \right], \end{aligned} \quad (4.11)$$

com $\nu = \omega/v_F$. Note que o *momento de corte* Λ do cone define uma superfície de energia constante com uma seção de corte elíptica no espaço k ,

$$\frac{1}{\hbar^2} E_F^{*2} = v_F^2 \Lambda_\perp^2 + v_\Delta^2 \Lambda_\parallel^2 = \text{const.},$$

mas que resulta num momento de corte circular no espaço \bar{k} . Por esse motivo, a integração pode ser exatamente mapeada num espaço isotrópico através da substituição de variável $\bar{k} \rightarrow k$. O simbolo “-” será mantido apenas para o momento externo q .

A susceptibilidade retardada depende da troca de sinal $\pm i\delta \rightarrow i\delta$. Explorando a simetria na troca de variáveis $\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}} \rightarrow -\mathbf{k}$, as duas contribuições retardadas da susceptibilidade são:

$$\chi_{intra}^0(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\hbar v_\Delta} \frac{1}{d} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(1 - \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}})}{k |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \times \left[\frac{\theta(k - k_F^*)}{\nu + k + |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| + i\delta} - \frac{\theta(k - k_F^*)}{\nu - k - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| + i\delta} \right] \quad (4.12)$$

$$\chi_{inter}^0(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\hbar v_\Delta} \frac{1}{d} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(1 + \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}})}{k |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \theta(k_F^* - k) \theta(|\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| - k_F^*) \times \left[\frac{1}{\nu - k + |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| + i\delta} - \frac{1}{\nu - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| + k + i\delta} \right]. \quad (4.13)$$

O resultado analítico de cada uma das contribuições será sucintamente descrito nas duas próximas seções. Mais detalhes sobre esse cálculo podem ser encontrados no apêndice C. Os efeitos sobre os modos de plasmon serão mostrados na seção 4.2.

4.1.1 Excitações interbanda

A maneira mais simples de calcular a susceptibilidade é calcular primeiro a função espectral e depois a parte real usando as relações de Kramers-Kronig [98]. Utilizando a identidade:

$$\frac{1}{\omega \pm i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} \mp i\pi\delta(\omega),$$

com \mathcal{P} definindo a *parte principal*, a parte imaginária da susceptibilidade interbanda é

$$\text{Im } \chi_{inter}^0(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{\pi}{d \hbar v_\Delta} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(1 - \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{q}})}{k |\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{q}}|} \right) \theta(k - k_F^*) \times [\delta(\nu - k - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|) - \delta(\nu + k + |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|)]. \quad (4.14)$$

O resultado do cálculo desta integral pra $\nu > 0$ (ver apêndice C.3) é igual a

$$\text{Im } \chi_{inter}^0(q, \nu) = -\frac{1}{8\pi d \hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\nu^2 - \bar{q}^2}} \times \begin{cases} \frac{2\Lambda - \nu}{\bar{q}} \sqrt{1 - \left(\frac{2\Lambda - \nu}{\bar{q}}\right)^2} + \left[\frac{\pi}{2} + \arcsin\left(\frac{2\Lambda - \nu}{\bar{q}}\right)\right], & 2\Lambda - \bar{q} < \nu \leq 2s + \bar{q} \\ \pi, & 2k_F^* + \bar{q} \leq \nu \leq 2\Lambda - \bar{q} \\ \frac{\nu - 2k_F^*}{\bar{q}} \sqrt{1 - \left(\frac{\nu - 2k_F^*}{\bar{q}}\right)^2} + \left[\arcsin\left(\frac{\nu - 2k_F^*}{\bar{q}}\right) + \frac{\pi}{2}\right], & \gamma \leq \nu < 2k_F^* + \bar{q} \end{cases} \quad (4.15)$$

e zero do contrário, onde

$$\gamma = \begin{cases} \bar{q}, & \text{para } \bar{q} > k_F^* \\ 2k_F^* - \bar{q}, & \text{para } \bar{q} < k_F^* \end{cases},$$

e Λ é o momento de corte do cone. Para momentos pequenos em comparação ao tamanho do cone, $\bar{q}/\Lambda \ll 1$,

$$\text{Im } \chi_{inter}^0(\mathbf{q}, \omega) \xrightarrow{\bar{q}/\Lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{8d\hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\nu^2 - \bar{q}^2}} \theta(\nu - 2k_F^* - \bar{q}), \quad (4.16)$$

Olhando para a Eq. (4.14), é fácil ver que o caso $\nu < 0$ leva a um resultado semelhante, bastando trocar ν por $-\nu$ e introduzir um sinal global de menos à expressão. A parte real segue diretamente das relações de Kramers-Kronig (ver apêndice C.2),

$$\begin{aligned} \text{Re } \chi_{inter}^0(\mathbf{q}, \nu) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' \text{Im } \Pi^0 R(\nu', \mathbf{q}) \frac{1}{\nu' - \nu} \\ &\xrightarrow{\bar{q}/\Lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{8\pi d \hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}} \theta(\bar{q} - \nu) \varphi(\nu, \bar{q}). \end{aligned}$$

onde

$$\varphi(\nu, q) = \begin{cases} \arctan \left(\frac{4\sqrt{k_F^*(k_F^* + \bar{q})}\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}}{4k_F^*(k_F^* + \bar{q}) - (\bar{q}^2 - \nu^2)} \right), & \text{se } 4k_F^*(k_F^* + \bar{q}) - (\bar{q}^2 - \nu^2) > 0 \\ \pi + \arctan \left(4\frac{\sqrt{k_F^*(k_F^* + \bar{q})}\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}}{4k_F^*(k_F^* + \bar{q}) - (\bar{q}^2 - \nu^2)} \right), & \text{do contrário.} \end{cases}$$

Existem dois limites interessantes para a expressão acima. Quando as distâncias consideradas são grandes em relação ao inverso do momento de Fermi do bolso, $\bar{q}/k_F^* \ll 1$,

$$\text{Re } \chi_{inter}^0(\mathbf{q}, \nu) \xrightarrow{\bar{q}/k_F^* \ll 1} -\frac{1}{8\pi d \hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}}{k_F^*} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}} \theta(\bar{q} - \nu). \quad (4.17)$$

e no limite oposto, em que a energia do bolso é igual a zero ($k_F^* = 0$),

$$\text{Re } \chi_{intra}^0(\nu, \mathbf{q}) \xrightarrow{k_F^* \rightarrow 0} -\frac{1}{8d \hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}} \theta(\bar{q} - \nu). \quad (4.18)$$

Neste último caso a contribuição *intra* banda é obviamente zero, uma vez que a banda inferior está completamente preenchida e o sistema tem simetria de partícula-buraco ($\mu = 0$). O complexo conjugado da susceptibilidade para este caso é simplesmente

$$\chi^{0*}(\nu, \mathbf{q}) = -\frac{1}{8d \hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}}. \quad (4.19)$$

4.1.2 Excitações intrabanda

Vamos considerar agora o segundo tipo de excitação no cone de Dirac. A parte imaginária da Eq. (4.13) é igual a

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_{intra}^0 &= -\frac{1}{\hbar v_{\Delta} d} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(1 + \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}})}{k |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \theta(k_F^* - k) \theta(|\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| - k_F^*) \times \\ &\quad \times [\delta(\nu + k - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|) - \delta(\nu + |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| - k)]. \end{aligned} \quad (4.20)$$

O cálculo da integral acima é mostrado em detalhe no apêndice C.4. O resultado para $\nu > 0$ é

$$\text{Im } \chi_{intra}^0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{8\pi d \hbar v_{\Delta}} \frac{\bar{\mathbf{q}}^2}{\sqrt{\nu^2 - \bar{\mathbf{q}}^2}} \begin{cases} -\Gamma(-\nu) & , \quad \text{se } \gamma' < \nu \leq \tilde{q} \\ \Gamma(\nu) - \Gamma(-\nu) & , \quad \text{se } 0 \leq \nu < \gamma'' \end{cases}, \quad (4.21)$$

onde

$$\Gamma(\nu) = \frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}} \sqrt{\left(\frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}}\right)^2 - 1} - \ln \left[\frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}} + \sqrt{\left(\frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}}\right)^2 - 1} \right],$$

e

$$\begin{aligned} \gamma'' &= \begin{cases} 2k_F^* - \bar{q}, & \text{para } k_F^* < \bar{q} < 2k_F^* \\ \bar{q}, & \text{para } \bar{q} < k_F^* \end{cases}, \\ \gamma' &= \begin{cases} \bar{q} - 2k_F^*, & \text{para } \bar{q} > 2k_F^* \\ 2k_F^* - \bar{q}, & \text{para } k_F^* < \bar{q} < 2k_F^* \bar{q} \end{cases}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

No limite de comprimentos de onda longos $\bar{q}/k_F^* \ll 1$, é fácil ver que

$$\text{Im } \chi_{intra}^0(\omega, \mathbf{q}) \xrightarrow{\bar{q} \rightarrow 0} -\frac{k_F^*}{d\pi \hbar v_{\Delta}} \frac{\nu}{\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}} \theta(\bar{q} - \nu) \quad (4.23)$$

Aplicando a relação de Kramers-Kronig, a parte real da susceptibilidade é dada por

$$\begin{aligned} \text{Re } \chi_{intra}^0(\nu, \mathbf{q}) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' \text{Im } \Pi_{intra}^{0R}(\nu', \mathbf{q}) \frac{1}{\nu' - \nu} \\ &\xrightarrow{\bar{q} \rightarrow 0} \frac{k_F^*}{\pi \hbar v_{\Delta}} \left(\frac{\nu}{\sqrt{\nu^2 - \bar{q}^2}} - 1 \right) \theta(\nu - \bar{q}). \end{aligned} \quad (4.24)$$

4.2 Dispersão dos plasmons

Na ausência de termos de transferência de elétrons entre os planos, as excitações coletivas dos fermions de Dirac são atribuídas unicamente ao potencial de Coulomb 3D entre portadores de carga em diferentes planos, $V_0(q, k_z) = 2\pi d e^2 / (\epsilon_0 q) S(q, k_z)$, com o fator de estrutura $S(q, k_z) = \sinh(qd) / [\cosh(qd) - \cos(k_z d)]$ (ver apêndice C.1), como no gás de elétrons em camadas (LEG)[77]

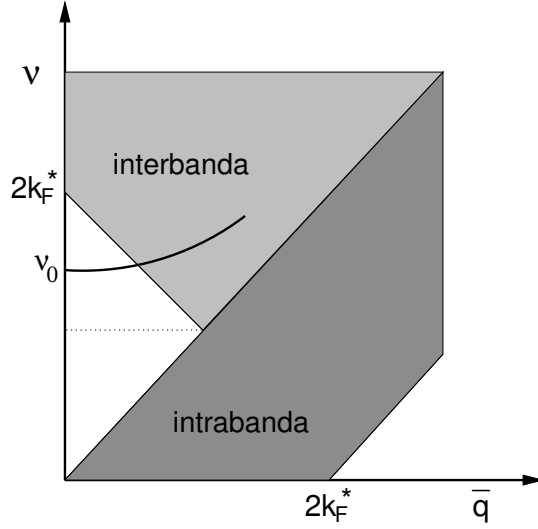


Figura 4.2: Regiões sombreadas: contínuo de excitações de partícula-buraco ($\text{Im } \chi \neq 0$). A presença de um bolso com momento k_F^* abre um gap no contínuo das excitações interbanda definido pela parte imaginária da Eq. (4.19). O ramo óptico de plasmon não é amortecido em $\bar{q} \rightarrow 0$ para $\nu_p(0) = \nu_0 < 2k_F^*$.

(e é a carga do elétron e ϵ_0 a constante dielétrica de fundo). Quando o potencial químico intercepta o ponto de Dirac ($\mu = 0$), a Hamiltoniana CDW (4.1) leva à susceptibilidade (4.19),

$$\chi^{0*}(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{v_F}{8d\hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{v_F^2 \bar{q}^2 - \omega^2}}.$$

A substituição da Eq. acima na definição da função dielétrica (4.6), basicamente

$$\epsilon(\Omega_p, \mathbf{q}, k_z) = 1 - V_0(q, k_z) \text{Re } \chi^0(\omega, \mathbf{q}) = 0,$$

mostra que *não* existem modos de plasmon na ausência do bolso (note que $V_0 > 0$ e que $\text{Re } \chi^0$ é sempre negativa).

O rebaixamento do potencial químico, no entanto, torna esse quadro bastante diferente. O surgimento de excitações intrabanda combinado ao aumento na densidade de estados na superfície de Fermi do bolso dão origem a uma banda de excitações de plasmon. Se $k_F^* \neq 0$, é fácil perceber comparando (4.17) com (4.24) que a susceptibilidade intrabanda domina completamente o espectro de excitações coletivas quando $\bar{q}/k_F \ll k_F^*/\Lambda$, ou equivalentemente no limite $\bar{q}/k_F^* \rightarrow 0$. Renormalizando ϵ_0 com eventuais contribuições interbanda na região do contínuo de excitações de partícula buraco (onde $\text{Im } \chi_{inter} \neq 0$), a dispersão do plasmon no bolso satisfaz à equação:

$$\frac{k_F}{d\pi\hbar v_\Delta} 2\pi d \frac{e^2}{\epsilon_0' q} S(q, k_z) \left(\frac{\nu}{\sqrt{\nu_p^2 - \bar{q}^2}} - 1 \right) = 1.$$

levando ao aparecimento da banda de plasmons do gás de elétrons num sistema de planos acoplados pelo potencial de Coulomb,

$$\Omega_p^2(\mathbf{k}) = \frac{k_F v_F^2 e^2 \bar{q}^2}{\hbar v_\Delta \epsilon'_0 q} S(q, k_z) + \frac{3}{4} v_F^2 \bar{q}^2. \quad (4.25)$$

Notando que $S(0, k_z \neq 0) = 1$, os modos $0 < k_z \leq \pi/d$ são acústicos e recobrem o caso do gás de elétrons 2D no limite $q \rightarrow 0$ (onde $\omega_p \propto \sqrt{q}$),

$$\Omega_{p\ 2D}^2(\mathbf{k}) = \frac{k_F v_F^2 e^2 \bar{q}^2}{\hbar v_\Delta \epsilon'_0 q} + \frac{3}{4} v_F^2 \bar{q}^2, \quad (4.26)$$

enquanto que no modo $k_z = 0$, $S(q \rightarrow 0, 0) = \frac{2}{d} \frac{1}{q}$, dando origem ao modo óptico 3D

$$\Omega_{p\ 3D}^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 \frac{\bar{q}^2}{q^2} + \frac{3}{4} v_F^2 \bar{q}^2, \quad (4.27)$$

com $\omega_0 = \sqrt{2k_F^* v_F^2 e^2 / (d \hbar v_\Delta \epsilon'_0)}$.

A contribuição das excitações intrabanda nos modos de plasmon foi calculada originalmente na grafite dopada com buracos [73]. A partir da Eq. (4.16), pode-se perceber que para $v_F \bar{q} \leq \omega < v_F (2k_F^* - \bar{q})$ existe um gap no contínuo das excitações de partícula buraco (ver Fig. 4.2) definidas pela parte imaginária da susceptibilidade (4.16). Portanto, existe uma região onde os plasmons são livres de amortecimento de Landau no limite de comprimento de onda longos ($q \rightarrow 0$).

A energia do modo óptico em $q = 0$ é da mesma ordem da energia do bolso, $\hbar\omega_0 \sim E_F^*$. Note que no caso anisotrópico ($v_F \neq v_\Delta$) o gap no espectro do ramo óptico depende da direção da superfície de Fermi do bolso. Se além disso adicionarmos o acoplamento elétron-fônon [10]

$$\mathcal{H}_{EP} = \gamma \sum_{\sigma} \int d^3x \phi(\mathbf{x}) \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{x}), \quad (4.28)$$

associado aos fônons acústicos $\phi(\mathbf{x})$ com energia $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ às excitações do bolso, a função dielétrica RPA sofre uma correção: $\epsilon(\omega, \mathbf{q}, k_z) = 1 - [V_0(q, k_z) + (\gamma^2/\hbar)D^0(\omega, \mathbf{q})]\Pi^0(\omega, \mathbf{q}, \mu)$, onde [72]

$$D^0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}^2}{\omega^2 - (\omega_{\mathbf{q}} - i\eta)^2},$$

é o propagador dos fônons, que afeta em muito pouco o modo óptico dos plasmons no limite $q \rightarrow 0$.

Além da dopagem, o transporte coerente de elétrons entre os planos leva a um *crossover* dimensional em direção a um sistema efetivamente 3D, induzindo a formação de um bolso em torno dos nós da superfície de Fermi [78]. A energia do bolso é da mesma ordem da energia de salto (*hopping*) dos elétrons entre planos vizinhos, calculada nos compostos TMD NbSe₂ e NbS₂

em ~ 0.1 eV [79]. É preciso destacar que esses cálculos de banda não levam em consideração as interações eletrônicas entre os planos, e essa energia poderia ser bem menor. São necessários mais estudos experimentais para investigar a natureza dos modos coletivos de baixa energia nesses materiais. Entretanto, pode-se dizer que os TMDs admitem um modo óptico, como nos metais, porém com uma frequência de plasmon consideravelmente menor por causa da baixa densidade de estados na superfície de Fermi.

Capítulo 5

Modos normais

Neste capítulo, vamos mostrar que algumas das conjecturas sobre os TMD, como a possível coexistência entre a supercondutividade e a piezoelectricidade não são apenas consistentes como sugerem conexões surpreendentes com o ponto crítico quântico observado na separação das fases de CDW comensurável-incomensurável. Vamos analisar os modos normais e as excitações macroscópicas que surgem em teoria de campo médio introduzindo fônons acústicos, plasmons, campos eletromagnéticos, o acoplamento piezoelétrico e a supercondutividade na mesma ação semi-clássica.

5.1 Dinâmica semi-clássica

Em primeiro lugar, vamos considerar o problema dos férmions de Dirac descritos pela Hamiltoniana (3.4) acoplados às vibrações da rede dadas pela Hamiltoniana

$$H_{PH} = \sum_n \frac{\mathbf{P}_n^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} K_{nm} (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2 \quad (5.1)$$

onde n indexa os sítios da rede R_n^i . P_n^i é o operador momento da rede canonicamente conjugado, isto é, $[P_n^i, R_m^j] = i\hbar\delta_{ij}\delta_{nm}$ (com $i = x, y, z$) e K_{nm} é o tensor elástico da rede. Em seguida, vamos considerar que os férmions de Dirac e os graus de liberdade da rede se acoplam com um campo eletromagnético clássico. Ele é definido em termos dos potenciais vetor e escalar $A^\mu(\mathbf{r})$ através do tensor de campo eletromagnético, $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ ($\partial^\mu = \partial/\partial x_\mu$ com $\mu, \nu = 0, i$), cuja densidade de energia eletromagnética é:

$$E_{el} = -\frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}, \quad (5.2)$$

convencionando que índices repetidos devem ser somados. As componentes não diagonais $F_{0j} = -E_j$ descrevem o campo elétrico (vamos usar a métrica relativística $g_{\mu,\nu} = (1, -1, -1, -1)$) usual na literatura [80].

Num material piezoelétrico, o campo elétrico se acopla diretamente à distorção da rede $X_n^i = R_n^i - R_{n+1}^i$ através do tensor piezoelétrico Δ_j^i ,

$$H_P = \sum_n \Delta_j^i E_i X_n^j. \quad (5.3)$$

O acoplamento entre os férmions de Dirac e as vibrações da rede são descritas pela Eq. (4.28). O problema pode ser formulado com integrais de caminho sobre o funcional da ação total:

$$Z = \int D\bar{\psi} D\psi \int D\mathbf{X} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt \int d\mathbf{r} \mathcal{L}[\psi, \mathbf{X}, A_\mu] \right\}, \quad (5.4)$$

onde \mathcal{L} é a Lagrangeana do problema e $\bar{\psi}$, ψ são variáveis de Grassmann.

Vamos considerar por enquanto o caso normal não supercondutor. Do ponto de vista da distribuição eletrônica, nós estamos interessados apenas no limite de comprimentos de onda longos, que segundo o capítulo anterior é descrito pelos modos de plasmon. Esses modos podem ser separados do contínuo de partícula-buraco usando o formalismo criado por Bohm e Pines [81]. A Lagrangeana do problema se reduz a:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_N &= \mathcal{L}_{el} + \mathcal{L}_{plasmon} + \mathcal{L}_{fonon} + \mathcal{L}_{piez} \\ &= -\frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{1}{c} j_N^\mu A_\mu + \frac{1}{2} \Omega [\omega_p^{-2} (\partial_t \rho_N)^2 - \rho_N^2] \\ &\quad + \frac{1}{2} \kappa [(\partial_t X^i)^2 - v_{ph}^2 (\partial_i X^i)^2] + \Delta_j^i X_i F^{0j}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde $\Omega \approx 4\pi/k_c^2$, com k_c o vetor de onda de blindagem 3D do gás de elétrons (num metal isotrópico $k_c = \sqrt{3\pi n e^2 / (2E_F)}$ onde n é a densidade eletrônica 3D e E_F a energia de Fermi [81]), κ é a densidade de massa da rede, v_{ph} é a velocidade do som, $j_N^0/c = \rho_N$ é a densidade de elétrons normais e j_N^i a densidade de corrente normal Ohmica. Na nossa notação, $\partial^0 = c^{-1} \partial_t$ é a derivada temporal normalizada pela velocidade da luz c .

As propriedades coletivas dos elétrons no sistema normal são as mesmas dos elétrons na fase supercondutora, uma vez que a abertura do gap supercondutor *não* afeta a parte real da susceptibilidade de carga $\chi(\mathbf{q})$ para comprimentos de onda longos [82]. Na verdade, pode-se mostrar facilmente dentro do contexto da teoria BCS, em aproximação de RPA, que $\text{Re} \chi(\mathbf{q}, 0)$ permanece essencialmente inalterada até que o gap seja da ordem da energia de Fermi, onde a aproximação de emparelhamento BCS é inválida. Em outras palavras, para q pequeno os plasmons não são sensíveis à transição supercondutora. Elétrons normais ou supercondutores blindam o campo elétrico exatamente da mesma forma e portanto devem entrar do mesmo modo no termo de plasmon da Lagrangeana. Independentemente da fase, ρ_N pode ser substituído na Eq. (5.5) pela densidade total de elétrons $\rho = \rho_N + \rho_s$, onde ρ_s é a densidade de elétrons supercondutores ($\rho_s = 0$ no estado normal). As correntes normais, no entanto, têm como origem as excitações de quase partícula enquanto que as supercorrentes j_s^μ aparecem em consequência do

estado fundamental do condensado [83]. Assim, o potencial vetor se acopla apenas às correntes normais. Numa última observação, à temperatura finita T , o número de elétrons normais e supercondutores não é conservado separadamente [85]. Por simplicidade, preferimos trabalhar à $T = 0$, onde todos os elétrons estão no condensado e a corrente total é $j^\mu = j_s^\mu$.

O parâmetro de ordem superconductor Φ pode ser introduzido através de uma transformação de Hubbard-Stratanovich, tomando o traço sobre os elétrons [84]. O funcional gerador fica:

$$Z = \int D\bar{\Phi} D\Phi \int D\mathbf{X} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt \int d\mathbf{r} (\mathcal{L}_N[\rho, \mathbf{X}, \mathbf{A}] + \mathcal{L}_{GL}[\Phi, \mathbf{A}]) \right\} \quad (5.6)$$

onde \mathcal{L}_{GL} é a Lagrangeana de Ginzburg-Landau. Para descrever as flutuações de carga-corrente, é preciso incluir a dependência temporal no parâmetro de ordem superconductor. Isto não é óbvio mas pode ser feito em dois limites: perto de $T = 0$, e próximo à temperatura crítica T_s [86]. A altas temperaturas ($T \lesssim T_c$), a validade da expansão no gap Δ_s das equações de Gorkov dependentes do tempo exigem escalas de frequências muito maiores que a energia de ligação dos pares de Cooper, $\hbar\omega \gg \Delta_s$. Nesse limite, as flutuações têm energia suficiente para quebrar os pares e convertê-los em excitações de quase-partícula, levando a um regime difusivo [87]. No limite oposto, à temperatura zero, a descrição hidrodinâmica é rigorosamente válida para $\hbar\omega < \Delta_s$. Vamos introduzir a Lagrangeana de Ginzburg-Landau com dependência temporal para baixas temperaturas [86, 87],

$$\mathcal{L}_{GL} = -\alpha|\Phi|^2 - \beta|\Phi|^4 - \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \Phi \right|^2 + \frac{1}{2m^*v_s^2} \left| \left(\frac{\hbar c}{i} \partial^0 + e^* \phi \right) \Phi \right|^2. \quad (5.7)$$

que é especialmente aplicável à supercondutores do tipo II, onde o comprimento de penetração é muito maior que o comprimento de coerência. (em (5.7) ϕ é o potencial eletrostático). No limite *limpo*, v_s é da ordem da velocidade de Fermi v_F . Partindo da hipótese de que os campos variam muito mais lentamente que o comprimento de coerência, vamos assumir que a magnitude do parâmetro de ordem superconductor é constante e portanto todas as flutuações vêm da fase supercondutora $\varphi(t, \mathbf{x})$. O parâmetro de ordem será escrito como:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_0 e^{i\varphi(t, \mathbf{x})}. \quad (5.8)$$

Apesar da invariância de calibre da Eq. (5.7) (qualquer mudança arbitrária $\nabla\chi$ no potencial vetor ou equivalentemente $-\partial^0\chi$ em ϕ pode ser compensada por uma mudança de fase de $e^*\chi/(c\hbar)$), vamos assumir por conveniência o calibre de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

Note que a Lagrangeana $\mathcal{L}_N + \mathcal{L}_{GL}$ não está completa ainda, uma vez que as supercorrentes permanecem desacopladas com os campos eletromagnéticos. Esse problema pode ser resolvido assumindo de antemão a validade das duas equações de Maxwell não-homogêneas. A equação de Poisson é claramente um vínculo entre a densidade de elétrons supercondutores e o potencial

eletrostático,

$$g(t, \mathbf{x}) \equiv \nabla^2 \phi + 4\pi \rho_s = 0, \quad (5.9)$$

e deve ser introduzido através de um multiplicador de Lagrange $\Lambda(x^\mu)$ na Lagrangeana total.

No regime semi-clássico, onde $\hbar \rightarrow 0$, o comportamento dos campos segue o princípio da ação mínima

$$\delta S = \delta \int d^4x (\mathcal{L}_N + \mathcal{L}_{GL} + \Lambda g) = \delta \int d^4x \mathcal{L} = 0,$$

com respeito às variáveis A^μ , ρ_s , X^i , φ and Λ . Minimizando com respeito a A^μ e Λ , encontramos as duas equações de Maxwell não-homogêneas

$$\nabla^2 \phi + 4\pi \rho_s = 0, \quad (5.10)$$

$$-\square \mathbf{A} - \partial_0 \nabla \phi + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_s = 0, \quad (5.11)$$

com a supercorrente j_s^μ definida por

$$\rho_s = -\frac{e^* \Phi_0^2}{m^* v_s^2} (\hbar c \partial_0 \varphi + e^* \phi) - \delta \nabla \cdot \mathbf{X} - \nabla^2 \Lambda \quad (5.12)$$

$$\mathbf{j}_s = \frac{e^* \Phi_0^2}{m^*} \left[\hbar \nabla \varphi - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right] + c \delta \partial_0 \mathbf{X}. \quad (5.13)$$

Por simplicidade, vamos assumir que o tensor piezoelétrico é diagonal e isotrópico, $\Delta^i_j = \delta \delta_{ij}$. A minimização nos outros graus de liberdade completa o conjunto de equações:

$$\frac{1}{4\pi} \Omega (\omega_p^{-2} \partial_t^2 \rho_s + \rho_s) = \Lambda, \quad (5.14)$$

$$\nabla^2 \varphi - \frac{c^2}{v_s^2} (\partial^0)^2 \varphi - \frac{e^* c}{\hbar v_s^2} \partial^0 \phi = 0, \quad (5.15)$$

$$\kappa (\partial_t^2 \mathbf{X} - v_{ph}^2 \nabla^2 \mathbf{X}) - \delta (\nabla \phi + \partial^0 \mathbf{A}) = 0. \quad (5.16)$$

Os detalhes da minimização estão no apêndice D.1. Substituindo a expressão da supercorrente na equação da continuidade, $\partial_\mu j_s^\mu = 0$, vamos encontrar

$$c \partial_0 \rho_s + \partial_i j_s^i = -c \partial_0 \nabla^2 \Lambda = 0.$$

Na ausência de correntes externas Λ ou é dependente do tempo ou da posição, mas não de ambos. Se Λ depende do tempo, então ρ é uma distribuição estacionária (no sentido de que a decomposição em Fourier é congelada no tempo, somente com a amplitude global variando) e homogênea (ou não periódica) dada a Eq. (5.14), o que obviamente viola a conservação de carga. Por isso, pode-se concluir que $\partial_0 \Lambda = 0$.

O multiplicador de Lagrange define duas classes distintas de soluções para a densidade de

carga: (i) *tipo-blindagem* quando $\Lambda(\mathbf{x}) \neq 0$, e (ii) *tipo-plasmon* quando $\Lambda \equiv 0$. No primeiro caso $\rho(\omega, \mathbf{k}) \propto f(\mathbf{k})\delta(\omega)$, onde $f(\mathbf{k})$ depende das condições de contorno, não apresenta dinâmica e descreve a resposta física a uma perturbação como uma pressão externa no cristal ou a introdução de uma carga de prova. No caso (ii), os elétrons são livres para oscilar na frequência de plasmon, permitindo o aparecimento de modos normais.

5.2 Modos coletivos

Vamos considerar agora o problema de um sólido formado por um número infinito de planos fracamente acoplados (como por exemplo os TMD). No contínuo, esse problema se transforma num modelo efetivo 3D com anisotropia espacial na direção perpendicular aos planos, digamos a direção z . É conveniente definir um tensor diagonal de anisotropia $\tau_j^i = (1, 1, \tau)$, onde τ é o parâmetro de anisotropia (vamos introduzir a notação $\tilde{\partial}^i \equiv \tau_j^i \partial^j$ e $\tilde{A}^i \equiv \tau_j^i A^j$), e reescrever a Lagrangeana de Ginzburg-Landau como no modelo de Lawrence-Doniach com dependência temporal [15]:

$$\mathcal{L}_{GL} = -\alpha|\Phi|^2 - \beta|\Phi|^4 - \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \tilde{\partial}^i - \frac{e^*}{c} \tilde{\mathbf{A}} \right) \Phi \right|^2 + \frac{1}{2m^* v_s^2} \left| \left(\frac{\hbar c}{i} \partial^0 + e^* \phi \right) \Phi \right|^2. \quad (5.17)$$

Esse modelo leva à versão anisotrópica da Eq. (5.15),

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\nabla} \varphi - \frac{c^2}{v_s^2} (\partial^0)^2 \varphi - \frac{e^* c}{\hbar v_s^2} \partial^0 \phi - \frac{e^*}{\hbar c} \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{A}} = 0, \quad (5.18)$$

e ao aparecimento de correntes Josephson entre os planos, representadas pela componente anisotrópica da supercorrente:

$$\mathbf{j}_s(t, \mathbf{x}) = \frac{e^* \Phi_0^2}{m^*} \left[\hbar \tilde{\nabla} \varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{e^*}{c} \tilde{\mathbf{A}}(t, \mathbf{x}) \right] + c \delta \partial_0 \vec{X}(t, \mathbf{x}). \quad (5.19)$$

Daqui em diante, vamos empregar a notação \vec{x} , \vec{q} , \vec{X} , $\vec{\nabla}$, etc., para representar vetores orientados da direção dos planos. Nessa notação, vamos definir \vec{q} como a projeção no plano do momento \mathbf{k} , de forma que $\mathbf{k} = (q, k_z)$ e $\tilde{\mathbf{k}} = (q, \tau k_z)$.

A ausência de piezoelectricidade ao longo da direção z em compostos altamente anisotrópicos é justificada pela fraca distorção dos ions nessa direção. A componente z da velocidade do som é também muito menor do que nas outras direções, em razão do fraco acoplamento elástico entre os planos. No limite $v_{phz}/v_{ph} \rightarrow 0$, a dispersão dos fônons acústicos é $\omega_{ph} = v_{ph} q$ e a equação dos fônons (5.16) nos planos tem simetria cilíndrica

$$\kappa (-\omega^2 + \omega_{ph}^2) \vec{X}(\omega, \mathbf{k}) - i \delta \left[\vec{q} \phi(\omega, \mathbf{k}) + \frac{\omega}{c} \vec{A}(\omega, \mathbf{k}) \right] = 0. \quad (5.20)$$

5.2.1 Regime quase-estático

Dada a dispersão do plasmon $\omega_p(\mathbf{k})$, a equação da densidade de carga no espaço de fourier fica:

$$\Omega [-\omega^2 + \omega_p^2(\mathbf{k})] \rho_s(\omega, \mathbf{k}) = 8\pi^2 \omega_p^2(\mathbf{k}) \Lambda(\mathbf{k}) \delta(\omega). \quad (5.21)$$

A solução tipo blindagem é:

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = 8\pi^2 \frac{\Lambda(\mathbf{k})}{\Omega} \delta(\omega), \quad (5.22)$$

para $\Lambda(\mathbf{k})$ não nula. A solução simultânea das Eq. (5.10)–(5.12), (5.18)–(5.20) e (5.22) tem como resultado $\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = \Lambda_0(\hat{\mathbf{k}}) \delta(k^2 + k_0^2)$, para alguma função Λ_0 e com o momento característico (ver apêndice D.2)

$$k_0^2 = 4\pi \left(\frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* v_s^2} - \frac{\delta^2}{\kappa v_{ph}^2} \right). \quad (5.23)$$

O caso $k_0^2 > 0$ leva a soluções que decaem exponencialmente e descrevem a blindagem dos elétrons induzida por condições de contorno como uma compressão ou distensão do cristal. Se o acoplamento piezoelétrico for maior que um valor crítico ($k_0^2 < 0$), a blindagem é suprimida e uma modulação de carga quase-estática deve ser observada, de forma a minimizar a energia elástica. Esta análise é confirmada ao introduzirmos uma carga de prova Q na origem: nesse caso, reobtemos o resultado de Thomas-Fermi [72],

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = -2\pi \frac{Q k_0^2}{k^2 + k_0^2} \delta(\omega), \quad (5.24)$$

que implica em potenciais blindados para $k_0^2 > 0$. A expressão acima recobre o caso metálico para $k_0^2 > 0$ quando a zona de Brillouin é levada no infinito,

$$\rho_s(r) = -\frac{Q k_0^2}{4\pi} \frac{e^{-k_0 r}}{r},$$

e tem o comportamento

$$\rho_s(r) = -\frac{Q k_0^2}{4\pi} \frac{\cos(|k_0| r)}{r},$$

no caso oposto, não blindado ($k_0^2 < 0$). Esse limite deve dar corretamente o comportamento assintótico, no limite em que $|k_0| \ll \Lambda \sim \frac{2\pi}{a}$, com a o parâmetro de rede nos planos e $d \rightarrow 0$. De qualquer forma vamos considerar que o caso físico de interesse envolve escalas de comprimentos grandes em relação parâmetro de rede para que a teoria de campo médio faça sentido. Nesse regime ($\Lambda \neq 0$), a fase do parâmetro de ordem superconductor não apresenta dinâmica e obedece à equação de vórtice a campo magnético zero $(\vec{\nabla})^2 \varphi = 0$.

5.2.2 Regime dinâmico

Os modos coletivos aparecem através de um cálculo ligeiramente diferente. Partindo das soluções de plasmon da Eq. (5.21),

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = \rho_0(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})), \quad (5.25)$$

onde $\rho_0(\mathbf{k})$ é uma função que depende não apenas das condições de contorno mas também das condições iniciais determinadas pela perturbação localizada no instante t_0 , as soluções dos campos no limite não relativístico $v_F/c \rightarrow 0$ são (os detalhes do cálculo são mostrados no apêndice D.3):

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = \rho(\hat{q}) \delta(q - q_0) \delta(k_z) \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})), \quad (5.26)$$

$$\phi(\omega, \mathbf{k}) = 4\pi \frac{\rho_s(\omega, \mathbf{k})}{k^2}, \quad (5.27)$$

$$\varphi(\omega, \mathbf{k}) = 4\pi i \frac{\omega e^*}{\hbar} \frac{\rho_s(\omega, \mathbf{k})}{k^2} \frac{1}{\omega^2 - v_s^2 k^2}, \quad (5.28)$$

$$\vec{X}(\omega, \mathbf{k}) = 4\pi \frac{\delta \vec{q}}{i \kappa k^2} \frac{\rho_s(\omega, \mathbf{k})}{(\omega^2 - \omega_{ph}^2)}, \quad (5.29)$$

$$\mathbf{A}(\omega, \mathbf{k}) = 4\pi \frac{\omega}{c} \vec{q} \frac{\rho_s(\omega, \mathbf{k})}{k^4} \mathcal{D}(\omega, \mathbf{k}), \quad (5.30)$$

onde

$$\mathcal{D}(\omega, \mathbf{k}) = 1 - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} \frac{1}{\omega^2 - v_s^2 k^2} + 4\pi \frac{\delta^2}{\kappa} \frac{1}{\omega^2 - v_{ph}^2 q^2}.$$

A Eq. (5.26) representa o modo de plasmon $k_z = 0$, que prevalece sobre o resto da banda. Esse resultado indica que o acoplamento eletrônico entre os planos leva a um *crossover* para uma física efetiva 3D no espectro de comprimentos de onda longos. No apêndice D.3, demonstramos que esse efeito está ligado à hipótese de que o parâmetro de anisotropia entre os planos $\tau \neq 0, 1$. O inverso da escala de modulação de carga nos planos q_0 é dada pela equação

$$\mathcal{D}(\omega_p, q_0) = 0, \quad (5.31)$$

como mostrado no apêndice.

Notando que a $T = 0$ a densidade eletrônica n é o dobro da densidade de pares Φ_0^2 , a quantidade $4\pi e^{*2} \Phi_0^2 / m^*$ pode ser convenientemente escrita na forma da expressão que descreve o quadrado da frequência de plasma, $\Omega_p^2 = 4\pi e^2 n / m$. Em termos gerais, n é dado pela regra de soma [15]

$$\omega_p^2(k = 0) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im} \epsilon(\omega, k) = 4\pi \frac{e^2 n}{m} f(\bar{q}/q), \quad (5.32)$$

onde $\text{Im} \epsilon$ é a parte imaginária da função dielétrica, dada em aproximação de RPA por $\text{Im} \epsilon(\omega, \mathbf{k}) = -V_0(q, k_z) \text{Im} \chi^0(\omega, \vec{q}, \mu)$ e $f(\bar{q}/q)$ é a função de anisotropia associada à forma da superfície de Fermi, com $f(\bar{q}/q) \equiv 1$ no caso isotrópico. Para um sistema nodal com um bolso, como des-

critério no capítulo anterior, a função de anisotropia tem a forma $f(\vec{q}/q) = \vec{q}^2/q^2$, como pode-se facilmente verificar substituindo a susceptibilidade intrabanda (4.23)

$$\text{Im } \Pi^0(\omega, \vec{q}, \mu) \xrightarrow{q/k_F^* \ll 1} -\frac{k_F^*}{\pi \hbar v_\Delta d} \frac{\omega}{\sqrt{v_F^2 \vec{q}^2 - \omega^2}}$$

na Eq. (5.32), resultando em

$$4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} = \omega_0^2,$$

com $\omega_0 = \sqrt{2k_F^* v_F^2 e^2 / (d\epsilon_0 \hbar v_\Delta)}$ a frequência de dispersão do modo óptico (4.27). Vamos considerar apenas o caso isotrópico, onde a aproximação baseada na rigidez da amplitude Φ_0 do parâmetro de ordem superconductor é rigorosa. Usando o modo de plasmon óptico $\omega_p^2 = \omega_0^2 + (v_0 q)^2$, e substituindo na Eq. (5.31), vamos encontrar

$$q_0 = \left[b - \sigma(b) \sqrt{b^2 - \frac{g\omega_0^2}{(v_s^2 - v_0^2)(v_{ph}^2 - v_0^2)}} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5.33)$$

onde σ é uma função sinal, $b = (g + \omega_0^2) / [2(v_{ph}^2 - v_0^2)]$ e

$$g = 4\pi \frac{\delta^2}{\kappa} \quad (5.34)$$

é o acoplamento piezoelétrico efetivo.

Notando que $v_s > v_{ph}$, uma vez que os íons são muito mais lentos que os elétrons, existem dois casos distintos (1) $v_0 > v_s$ e (2) $v_0 < v_s$. O caso (1) claramente não apresenta modos normais (ou seja, q_0 real e finito) para qualquer valor de g . Por outro lado, esses modos são possíveis no regime (2), para g finito. No limite limpo do superconductor, $v_s = v_F/\sqrt{3}$. No caso particular de um sistema nodal com um bolso, a velocidade de dispersão do modo óptico é $v_0 = (\sqrt{3}/2)v_F$ e portanto corresponde ao caso (1) mencionado acima. Este também é o caso do metal, ($v_0 = \sqrt{3/5}v_F$), e da grafite dopada ($v_0 = (\sqrt{3}/2)v_F$). Portanto, no caso particular dos TMDs, nenhuma diferença essencial nos modos de plasmon deveria ser observada em relação ao LEG (onde $g = 0$) em função da psoelectricidade.

5.2.3 Resultados experimentais

Conforme a discussão apresentada na seção 2.31, experimentos de difração de neutrons e raios nos compostos TaSe₂ e NbSe₂ mostram a presença de picos de Bragg em vetores de onda incomensuráveis $\mathbf{Q}_i = (1 - \delta_i)\mathbf{b}_i/3$, onde \mathbf{b}_i são os três vetores da rede recíproca e $\delta_i \lesssim 0.02$ é a incomensurabilidade [11, 5]. No TaSe₂, a transição de comensurabilidade entre a fase de faixas e a fase incomensurável é fortemente dependente da pressão e recai em dois pontos críticos quânticos em torno de $P = P_{c1} \approx 1.8$ GPa e de $P_{c2} \approx 2.4$ GPa, como mostra a Fig. 2.4.

A natureza da fase de faixas foi discutida do ponto de vista fenomenológico por McMillan [48] e outros [88] como o resultado da formação de defeitos topológicos no parâmetro de ordem CDW complexo. A fase de faixas pode ser observada facilmente com microscopia eletrônica [89]. No entanto, a origem microscópica dessa fase permanece desconhecida. Os resultados derivados do cálculo semi-clássico neste capítulo sugerem que a origem das faixas pode estar intimamente ligada ao acoplamento piezoelétrico no sólido. Nós observamos que uma modulação na densidade de carga deve aparecer sempre que $k_0^2 < 0$ (ver Eq.(5.23)). Essa modulação pode ser interpretada como uma incomensurabilidade $\delta_i = 3\sqrt{-k_0^2}/|\mathbf{b}_i|$. Equivalentemente, usando a definição (5.34) existe uma constante de acoplamento crítico g_c que leva a uma modulação de carga ($\delta_i > 0$) quando $k_0^2 < 0$ ou

$$g > g_c = 4\pi \frac{v_{ph}^2}{v_s^2} \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*}. \quad (5.35)$$

Lembrando que os compostos TaSe₂ ($T_c \approx 0.1K$) e NbSe₂ ($T_c \approx 8.3K$) são ambos supercondutores [1] cuja temperatura crítica T_c aumenta com a aplicação de pressão [90], isso implica que $\Phi_0 \neq 0$ a $T = 0$. Note que tanto o acoplamento piezoelétrico δ quanto a velocidade do som v_{ph} são funções monotonicamente crescentes com a pressão. Assumindo que no TaSe₂ o acoplamento $g < g_c$ a $T = 0$ e pressão ambiente, então haverá uma transição de fase quântica com a pressão P à medida em que g/v_{ph}^2 for uma função crescente com P . No NbSe₂, entretanto, o sistema é sempre incomensurável, indicando que $g > g_c$ mesmo à pressão ambiente. O segundo ponto crítico quântico aparece com a saturação do acoplamento g a altas pressões. Nesse caso, g/v_{ph}^2 começa a diminuir monotonicamente com o aumento da pressão, após passar por um ponto de máximo, até cruzar o valor crítico novamente na segunda fase comensurável. As fases a $T = 0$ parecem estar diretamente ligadas às fases de faixas observadas à temperatura finita, e por isso podemos concluir que a origem das faixas está possivelmente relacionada ao acoplamento piezoelétrico nesses materiais. Além disso, experimentos recentes em compostos epitaxiais de duas camadas, formados por um cupreto HTc e um isolante polarizado depositado sobre ele, mostram uma significativa modulação eletrostática da temperatura de transição T_c na direção dos planos supercondutores [91]. As conexões entre os TMD e os HTc são notáveis. Acreditamos que o papel da piezoelectricidade nas fases de faixas dos TMD pode ser testado experimentalmente através de dispositivos eletrostáticos semelhantes combinados com espalhamento de neutrons.

Medidas de espalhamento em cristais de NbSe₂ e TaSe₂ mostram um amortecimento atípico do ramo óptico Σ_1 dos fônons nos vetores de onda de CDW \mathbf{Q}_i num amplo intervalo de temperaturas [11]. Esse comportamento foi interpretado como o acoplamento dos fônons ópticos com a ordem de carga. Varreduras de energia com momento fixo em \mathbf{Q}_i mostraram que o gap no espectro dos fônons é da ordem de 10 meV nos dois compostos [11]. O acoplamento dos plasmons com as vibrações da rede, segundo este modelo semi-clássico, leva os fônons de comprimento de onda longos a oscilarem com a frequência do modo de plasmon óptico $k_z = 0$. Em comparação com o caso metálico, onde os modos de plasmon são rígidos (no sentido de que o comprimento de

onda deles tem exatamente o dobro do tamanho do sistema), nós verificamos que o aumento da energia elástica introduzida pelo acoplamento piezoelétrico pode dar origem a plasmons *elásticos* que oscilam em ressonância com o ramo óptico de fônons. Apesar de *não* observável nos TMDs, acreditamos que esta poderia ser a manifestação macroscópica da ressonância plasmon-fônon observada microscopicamente nesses compostos.

Capítulo 6

Teoria microscópica

Neste capítulo, vamos calcular algumas das propriedades previstas pelo modelo microscópico proposto no cap. 3.

6.1 Hamiltoniana

A Hamiltoniana do supercondutor nodal consiste em dois termos. O primeiro corresponde à Hamiltoniana CDW não-interagente (3.4)

$$H_{CDW} = V \sum_{\sigma, a, b} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \hbar \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \left[v_F k_\perp \sigma_3^{ab} + v_\Delta k_\parallel \sigma_1^{ab} \right] \psi_{b\sigma}(\mathbf{k}), \quad (6.1)$$

com $a = +, -$ ligados aos dois subespaços nodais e $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ao spin. $\sigma_\mu = (\sigma_0, \vec{\sigma})$ define o conjunto das matrizes de Pauli que operam nos nós. O segundo termo é a Hamiltoniana de emparelhamento em aproximação de campo médio (3.9)

$$H_P = V \sum_{a, b} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left\{ \Delta_s \psi_{a\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) + h.c. \right\} + \frac{V \Delta_s^2}{g}$$

onde

$$\Delta_s = -g \sum_{a, b} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \langle \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b\downarrow}(-\mathbf{k}) \rangle \quad (6.2)$$

é o parâmetro de ordem supercondutor com simetria s .

Para resolver este problema, é conveniente introduzir o espinor

$$\Psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \psi_{+\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{+\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \\ \psi_{-\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{-\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

que incorpora as estruturas do espaço nodal e do espaço de pares. Para tanto, vamos definir um novo conjunto de matrizes de Pauli τ_μ que opera no espaço de Nambu ($\uparrow k, \downarrow -k$), com k tomado em relação aos nós na superfície de Fermi. O primeiro termo da Hamiltoniana CDW pode ser traduzido por

$$\begin{aligned}
\Psi^\dagger(\mathbf{k}) k_\perp \tau_0 \otimes \sigma_3 \Psi(\mathbf{k}) &= k_\perp \left(\psi_{+\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{+\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{+\downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{+\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \right. \\
&\quad \left. - \psi_{-\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{-\uparrow}(\mathbf{k}) - \psi_{-\downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{-\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \right) \\
&= \sum_\sigma k_\perp \left(\psi_{+\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{+\sigma}(\mathbf{k}) - \psi_{-\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{-\sigma}(\mathbf{k}) \right) \\
&= \sum_{\sigma,a,b} k_\perp \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \sigma_3^{a,b} \psi_{b\sigma}(\mathbf{k}), \tag{6.4}
\end{aligned}$$

notando que o termo de dispersão k_\perp é ímpar sob a troca de $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ dentro do cone de Dirac. O segundo termo CDW é semelhante,

$$\begin{aligned}
\Psi^\dagger(\mathbf{k}) k_\parallel \tau_0 \otimes \sigma_1 \Psi(\mathbf{k}) &= k_\parallel \left(\psi_{+\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{-\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{+\downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{-\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \right. \\
&\quad \left. + \psi_{-\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{+\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{-\downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{+\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \right) \\
&= \sum_\sigma k_\parallel \left(\psi_{+\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{-\sigma}(\mathbf{k}) + \psi_{-\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{+\sigma}(\mathbf{k}) \right) \\
&= \sum_{\sigma,a,b} k_\parallel \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \sigma_1^{a,b} \psi_{b\sigma}(\mathbf{k}). \tag{6.5}
\end{aligned}$$

A Hamiltoniana de emparelhamento nodal pode ser reescrita equivalentemente como:

$$\begin{aligned}
\Psi^\dagger(\mathbf{k}) \tau_1 \otimes \sigma_2 \Psi(\mathbf{k}) &= -i \left(\psi_{+\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{-\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) + \psi_{+\downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{-\uparrow}(\mathbf{k}) \right. \\
&\quad \left. - \psi_{-\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{+\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) - \psi_{-\downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{+\uparrow}(\mathbf{k}) \right) \\
&= \sum_{a,b} \left(\psi_{a\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \sigma_2^{a,b} \psi_{b\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \right) + h.c. \tag{6.6}
\end{aligned}$$

A densidade de Hamiltoniana CDW + SC será portanto

$$\Psi^\dagger(\mathbf{k}) \left[\hbar v_F k_\perp \tau_0 \otimes \sigma_3 + \hbar v_0 k_\parallel \tau_0 \otimes \sigma_1 + \Delta_s \tau_1 \otimes \sigma_2 \right] \Psi(\mathbf{k}), \tag{6.7}$$

sob uma transformação de calibre apropriada $\psi \rightarrow \psi e^{i\theta}$ tal que $\Delta_s e^{2i\theta} \rightarrow \Delta_s$ seja real. A diagonalização desta Hamiltoniana leva aos autovalores

$$\pm E_{\mathbf{k}} = \pm \hbar \omega_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 \bar{k}^2 + \Delta_s^2},$$

que correspondem respectivamente aos ramos positivo e negativo do cone de Dirac, com $\bar{k}^2 = k_{\perp}^2 + (v_{\Delta}/v_F)^2 k_{\parallel}^2$ definindo o momento anisotrópico na vizinhança dos nós. Como na fase CDW, os autovetores correspondentes $u^{\sigma}(\mathbf{k})$ e $v^{\sigma}(\mathbf{k})$ formam a base funcional dos férmions de Dirac Ψ na forma segundo quantizada

$$\Psi(\mathbf{k}) = \sum_{\sigma} [a_{\mathbf{k}}^{\sigma} u^{\sigma}(\mathbf{k}) + b_{-\mathbf{k}}^{\sigma} v^{\sigma}(-\mathbf{k})], \quad (6.8)$$

com a e b os operadores fermiônicos de aniquilação. No caso em que existe simetria de partícula-buraco (ou seja, com $\mu = 0$), $a|0\rangle = b^{\dagger}|0\rangle = 0$.

6.1.1 Equação do gap

Para calcular a amplitude do gap, vamos utilizar o formalismo das funções de Green à temperatura finita. Para uma densidade de Hamiltoniana quadrática geral na forma $\mathcal{H} = \Psi^{\dagger} \hbar \overleftrightarrow{\omega} \Psi$, a função de Green correspondente é (ver Apêndice A.3)

$$\overleftrightarrow{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = - \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle T_{\tau} [\Psi\Psi^{\dagger}] \rangle = \frac{1}{i\omega_n - \overleftrightarrow{\omega}},$$

com $\omega_n = (2n + 1)\pi/(\hbar\beta)$ definindo as frequências de Matsubara fermiônicas e $\beta = 1/(k_B T)$ o inverso da temperatura. Desse modo, o propagador de ordem zero da Hamiltoniana (6.7) será (daqui pra frente, o produto tensorial $\tau_{\mu} \otimes \sigma_{\nu}$ será denotado simplesmente por $\tau_{\mu}\sigma_{\nu}$)

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) &= [i\omega_n - v_F k_{\perp} \tau_0 \sigma_3 - v_0 k_{\parallel} \tau_0 \sigma_1 - \hbar^{-1} \Delta_s \tau_1 \sigma_2]^{-1} \\ &= - \frac{i\omega_n + v_F k_{\perp} \tau_0 \sigma_3 + v_0 k_{\parallel} \tau_0 \sigma_1 + \hbar^{-1} \Delta_s \tau_1 \sigma_2}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2} \\ &= - \frac{i\omega_n + \overleftrightarrow{\omega}}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

explorando a propriedade anti-comutativa das matrizes de Pauli: $\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0$, para $i \neq j$ ($i, j = 1, 2, 3$). Notando que

$$\langle \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) \Psi_{\beta}(\mathbf{k}) \rangle = G_{\beta\alpha}(\mathbf{k}, \tau \rightarrow 0_{-}) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n\delta} G_{\beta\alpha}(\mathbf{k}, i\omega_n)$$

com $\delta \rightarrow 0_{-}$, usando as Eq. (6.6) e (6.2), vamos encontrar

$$\begin{aligned} \Delta_s + \Delta_s^* = 2\Delta_s &= -g \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \text{Tr} \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \tau_1 \sigma_2 \Psi(\mathbf{k}) \rangle \\ &= -g \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} [(\tau_1 \sigma_2)^{\alpha\beta} \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi_{\beta}(\mathbf{k}) \rangle] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{g}{\hbar\beta} \sum_{\omega_n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n\delta} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \text{Tr} \left[\tau_1 \sigma_2 \overset{\leftrightarrow}{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right] \\
&= \frac{2g}{\hbar^2\beta} 2\Delta_s \sum_{\omega_n} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\omega_n\delta}}{\omega_n^2 + \omega_k^2},
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\sum_{\omega_n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\omega_n\delta}}{\omega_n^2 + \omega_k^2} = \frac{\hbar^2\beta}{2g} \quad (6.10)$$

Note que de todas as combinações entre as matrizes de Pauli $\tau_\mu\sigma_\nu$, a identidade tem traço 4 e todas as outras têm traço zero.

Para somar sobre todas as frequências de Matsubara, vamos definir como usual um contorno de integração C orientado no sentido anti-horário em torno dos polos da função de Fermi-Dirac $(e^{\beta\hbar z} + 1)^{-1}$, localizados em $z_n = i\omega_n$ no eixo imaginário. Definindo C' como o contorno horário em torno dos polos no eixo real em $z = \pm\omega_k$, não é difícil ver que

$$\begin{aligned}
\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega_n^2 + \omega_k^2} &= -\frac{\beta\hbar}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{e^{\beta\hbar z} + 1} \frac{1}{\omega_k^2 - z^2} \\
&= \frac{\beta\hbar}{2\pi i} \oint_{C'} \frac{dz}{e^{\beta\hbar z} + 1} \frac{1}{z^2 - \omega_k^2} \\
&= -\frac{\beta\hbar}{2\omega_k} \left[\frac{1}{e^{\beta\hbar z} + 1} - \frac{1}{e^{-\beta\hbar z} + 1} \right] \\
&= \frac{\beta\hbar}{2\omega_k} \tanh\left(\hbar\beta\frac{\omega_k}{2}\right). \quad (6.11)
\end{aligned}$$

Empregando a identidade do elemento de volume do cone anisotrópico $d^2k = \frac{v_F}{v_\Delta} d^2\bar{k}$, e as definições $E_k^2 = \epsilon_k^2 + \Delta_s^2$, com $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar v_F \bar{k}$,

$$\begin{aligned}
\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\beta\hbar}{2\omega_k} \tanh\left(\hbar\beta\frac{\omega_k}{2}\right) &= \frac{v_F}{2v_\Delta} \int_0^s \frac{d^2\bar{k}}{(2\pi)^2} \frac{\hbar\beta}{\omega_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\hbar\beta}{2}\omega_{\mathbf{k}}\right) \\
&= \frac{\beta}{4\pi v_\Delta v_F} \int_{\Delta_s}^\alpha dE \tanh\left(\frac{\beta E}{2}\right) \\
&= \frac{1}{2\pi v_\Delta v_F} \ln \left[\frac{\cosh(\beta\alpha/2)}{\cosh(\beta|\Delta_s|/2)} \right] = \frac{\hbar^2\beta}{2g},
\end{aligned}$$

onde $\alpha = \epsilon_\Lambda = E_s$ é a energia de corte definida pela superfície de energia constante

$$\alpha^2 \equiv \hbar^2 v_F^2 \Lambda^2 = \hbar^2 v_F^2 s^2 + \Delta_s^2 = \text{const.} \quad (6.12)$$

e s o momento de corte associado a essa superfície. Assim, a equação do gap assume a forma:

$$|\Delta_s| = \frac{2}{\beta} \cosh^{-1} \left[\cosh \left[\pi \hbar^2 v_\Delta v_F \beta / g_c \right] e^{-\pi \hbar^2 v_\Delta v_F \beta / g} \right],$$

onde $g_c = 2\pi\hbar v_\Delta/\Lambda$.

Antes de continuar, é preciso fazer duas observações importantes sobre esse momento de corte. A primeira é que os resultados dessa teoria não devem ser levados em conta muito seriamente perto da escala de energia de α , o que restringe a aplicabilidade do modelo a uma certa vizinhança do acoplamento g_c , como ficará claro mais tarde. A razão é muito simples: a contribuição dos estados de alta energia (excluídos pela aproximação do cone) não deve ser ignorada a menos que o gap seja suficientemente pequeno em comparação com o tamanho do cone. Num certo sentido, a definição da energia de corte acima é arbitrária e o motivo da escolha é uma mera questão de conveniência. A segunda observação é que o momento de corte s da Eq. (6.12) *não conserva* a densidade de estados do sistema normal. Para calcular funções termodinâmicas, o momento de corte apropriado é Λ , que mapeia corretamente o volume do cone de Dirac e evita o problema da perda de estados na fase supercondutora, o que fatalmente daria uma resposta incorreta na energia de condensação. De qualquer forma, o cálculo não é severamente afetado pelos detalhes do momento de corte se o gap Δ_s for suficientemente pequeno.

Definindo a quantidade

$$y(\beta) = \cosh [\pi\hbar^2 v_\Delta v_F \beta / g_c] e^{-\pi\hbar^2 v_\Delta v_F \beta / g},$$

e tomando o limite de temperatura zero,

$$|\Delta_s| = \frac{2}{\beta} \ln \left[y(\beta) + \sqrt{y^2(\beta) - 1} \right] \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} & \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{2}{\beta} \ln \left\{ \exp [\pi\hbar^2 v_\Delta v_F \beta (g_c^{-1} - g^{-1})] \right\} \\ & = 2\pi\hbar^2 v_\Delta v_F \left(\frac{1}{g_c} - \frac{1}{g} \right) \end{aligned} \quad (6.14)$$

$$= \alpha \left(1 - \frac{g_c}{g} \right). \quad (6.15)$$

Veja que a equação do gap tem um ponto crítico quântico ($T = 0$) separando as fases normal e SC. A amplitude do gap dentro do cone é portanto regulada pela razão g/g_c . Ela vai a zero no ponto crítico quântico em $g = g_c$ e aumenta monotonamente em direção à energia de corte do cone α no limite de acoplamento forte $g \rightarrow \infty$. A temperatura crítica supercondutora T_c é definida por $\Delta_s(T_c) = 0$. De acordo com (6.13),

$$\begin{aligned} y(\beta_c) & = \cosh [\pi\hbar^2 v_\Delta v_F \beta_c / g_c] e^{-\pi\hbar^2 v_\Delta v_F \beta_c / g} \\ & \sim \frac{1}{2} \exp [\pi\hbar^2 v_\Delta v_F \beta_c (g_c^{-1} - g^{-1})] \\ & = \frac{1}{2} e^{\frac{|\Delta_s(0,g)|}{2k_B T_c}} = 1, \end{aligned}$$

para g suficientemente perto do acoplamento crítico g_c , (*i.e.* $(g - g_c)/(g + g_c) \ll 1$), o que dá

$$T_c = \frac{|\Delta_s|(0, g)}{k_B \ln 4}. \quad (6.16)$$

O expoente crítico do parâmetro de ordem pode ser facilmente encontrado expandindo Δ_s em torno de T_c . Ele segue a lei usual de campo médio

$$\frac{|\Delta_s|(T, g)}{\Delta(0, g)} \xrightarrow{T \rightarrow T_c} \frac{2}{\sqrt{\ln 4}} \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}. \quad (6.17)$$

Por simplicidade, o gap à temperatura zero $\Delta_s(0, g)$ será denotado por Δ_0 daqui pra frente.

6.2 Funções termodinâmicas

Vamos agora calcular a função de partição da Hamiltoniana (6.7) diagonalizada pela base de autoestados (indexada por \mathbf{k} , $a = \pm, \uparrow, \downarrow$) na representação dos férmions de Dirac na forma segundo quantizada (6.8). A Hamiltoniana que entra na função de partição deve levar em conta o termo de campo médio $V\Delta_s^2/g$ da Eq. (3.9), de forma que o estado fundamental forneça corretamente a energia de condensação dos pares. Escrevendo as integrais como somas simbólicas em \mathbf{k} , ou seja $\sum_{\mathbf{k}} \equiv V \int d^2k/(2\pi)^2$, temos

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\beta F} = \text{Tr} \left(e^{-\beta \sum_{\mathbf{k}a} (E_{\mathbf{k}}^a n_{\mathbf{k}}^a) - \beta V g^{-1} \Delta_s^2} \right) \\ &= e^{-\beta V g^{-1} \Delta_s^2} \prod_{\mathbf{k}, a} \sum_{n_{\mathbf{k}}^a=0}^1 \langle n_{\mathbf{k}}^a | e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^a n_{\mathbf{k}}^a} | n_{\mathbf{k}}^a \rangle \\ &= e^{-\beta V g^{-1} \Delta_s^2} \prod_{\mathbf{k}, a} \left(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^a} \right). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Assim, a energia livre total é $F = F_0 + V\Delta_s^2/g$, onde

$$\begin{aligned} F_0(\beta) &= -\frac{1}{\beta} \ln \left[\prod_{\mathbf{k}, a} \left(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^a} \right) \right] \\ &= -\frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [2 + 2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}})] \\ &\equiv -\frac{2V}{2\pi \hbar^2 \beta v_F v_{\Delta}} \int_{\Delta_s}^{E_{\Lambda}} dE E \ln [2 + 2 \cosh(\beta E)] \end{aligned} \quad (6.19)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{V}{2\pi \hbar^2 v_F v_{\Delta}} \left[\frac{4}{\beta^3} (\beta E \text{Li}_2(-z) + \text{Li}_3(-z)) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3} E^2 \left(E + \frac{3}{\beta} \ln \left[\frac{(1+z)^2}{2 + 2 \cosh[\beta E]} \right] \right) \right]_{|\Delta_s|}^{E_{\Lambda}} \end{aligned} \quad (6.20)$$

com $z = e^{-\beta E}$ e $\text{Li}_p(z)$ definindo a função polilogarítmica

$$\text{Li}_p(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^p}.$$

Da mesma forma, a energia interna é definida por $E = E_0 + V\Delta_s^2/g$. Dada a distribuição de Fermi $n_{\mathbf{k}}^a = (e^{\beta E_{\mathbf{k}}^a} + 1)^{-1}$, então

$$\begin{aligned} E_0 &= \sum_{\mathbf{k}, a} E_{\mathbf{k}}^a n_{\mathbf{k}}^a \\ &\equiv 2V \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} E_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1} - \frac{1}{e^{-\beta E_{\mathbf{k}}} + 1} \right) \\ &= -\frac{2V}{2\pi\hbar^2 v_{\Delta} v_F} \int_{\Delta_s}^{E_{\Lambda}} dE E^2 \tanh \left[\frac{\beta E}{2} \right] \\ &= \frac{2V}{2\pi\hbar^2 v_{\Delta} v_F} \left[\frac{4}{\beta^3} (\beta E \text{Li}_2(-z) + \text{Li}_3(-z)) \right. \\ &\quad \left. - \frac{E^3}{3} - 2\frac{E^2}{\beta} \ln(1+z) \right]_{|\Delta_s|}^{E_{\Lambda}}. \end{aligned}$$

A energia livre e a energia interna do sistema estão relacionadas através da entropia

$$S = \frac{E - F}{T} = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V, \quad (6.21)$$

segundo as relações termodinâmicas. A entropia é mostrada na Fig. 6.1 e exibe uma dependência quadrática com a temperatura na fase normal, diferentemente da entropia do líquido de Fermi, que aumenta linearmente.

Finalmente, a energia do condensado está relacionada ao campo magnético crítico H_c por

$$F_n - F_s = \frac{H_c^2(T)}{8\pi},$$

com n e s indexando as fases normal e supercondutora. O comportamento do campo crítico H_c é mostrado na Fig. 6.2.

6.2.1 Calor específico

A última propriedade termodinâmica a ser calculada é o calor específico:

$$C_V = T \frac{dS}{dT} = -\beta \frac{dS}{d\beta}. \quad (6.22)$$

No regime de baixas temperaturas o gap é praticamente independente da temperatura. O calor específico no limite de $T \rightarrow 0$ pode ser facilmente calculado diretamente substituindo a Eq.

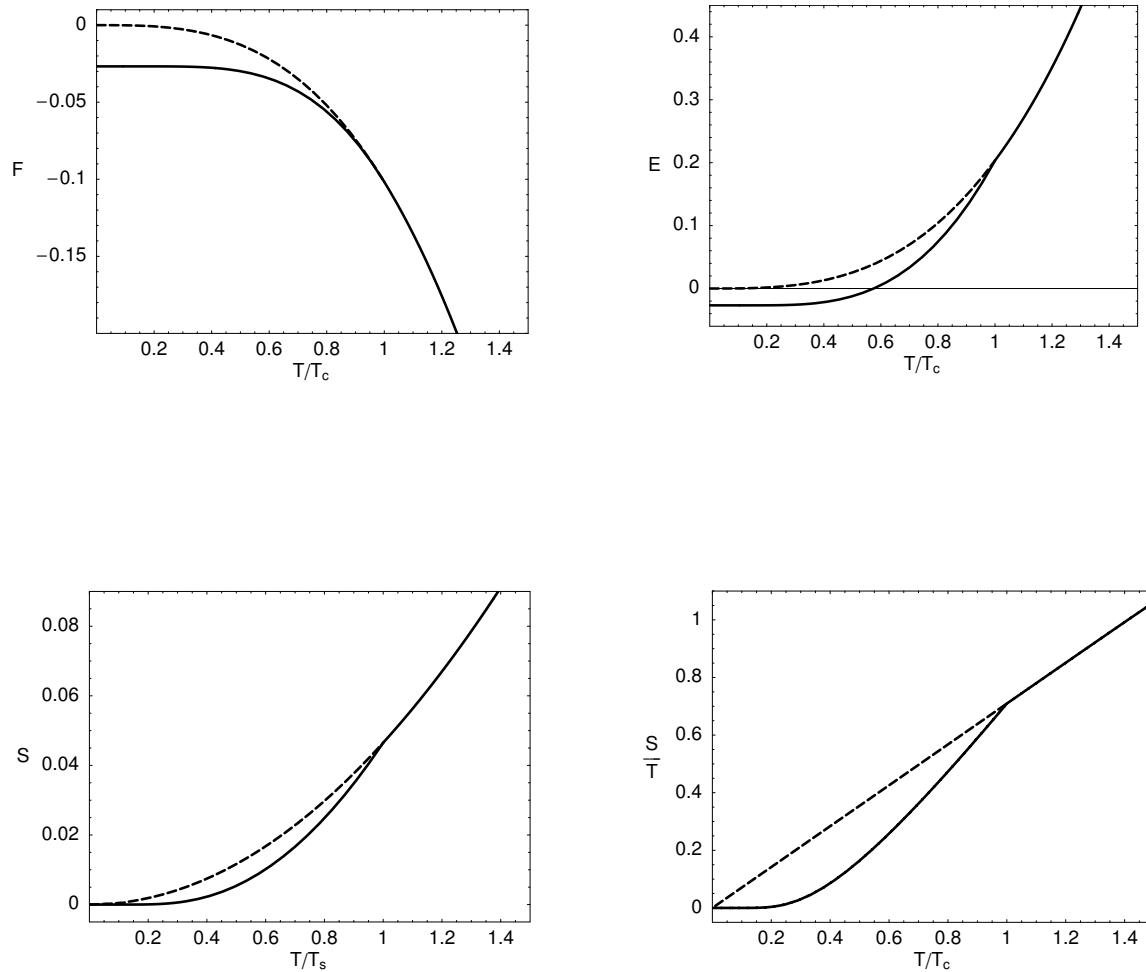


Figura 6.1: Acima: Energia livre F e energia interna E vs. temperatura ($g = 1.1$) em unidades de $10^{-2}\alpha^2 V/g_c$. A linha tracejada corresponde ao sistema com $\Delta_s = 0$. A diferença entre a energia livre das duas curvas a $T = 0$ é igual à energia de condensação dos pares. O zero de energia foi fixado arbitrariamente. Abaixo: Entropia S (em unidades de $V k_B \alpha^2 / (2\pi \hbar^2 v_F v_\Delta)$) vs. temperatura para $g/g_c = 1.1$. O gráfico da direita mostra que a entropia do sistema normal aumenta quadraticamente com a temperatura.

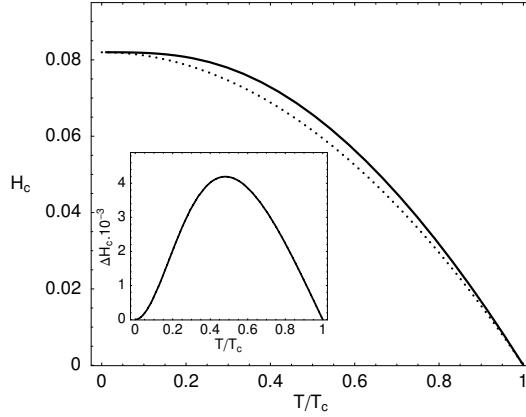


Figura 6.2: Linha sólida: campo crítico H_c em função da temperatura, em unidades de $\alpha\sqrt{V/g_c}$. $g/g_c = 1.1$. Pontilhada: lei empírica $H_c(0)[1 - T^2/T_c^2]$. Figura menor: diferença entre as duas curvas.

(6.19) e (6.21) na Eq. (6.22),

$$C_V \xrightarrow{\beta \gg \beta_c} \frac{V}{2\pi\hbar^2 v_F v_\Delta} \int_{\Delta_s}^{E_\Lambda} dE E^3 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta E}{2}\right)$$

$$\xrightarrow{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{12k_B V}{2\pi\hbar^2 v_F v_\Delta} |\Delta_s|^2 e^{-\beta|\Delta_s|}.$$

Para calcular o salto no calor específico, vamos partir da entropia eletrônica geral do gás de Fermi

$$S = -2k_B \sum_{\mathbf{k}, a} [(1 - n_{\mathbf{k}}^a) \ln(1 - n_{\mathbf{k}}^a) + n_{\mathbf{k}}^a \ln n_{\mathbf{k}}^a].$$

Definindo $\sigma(a)$ como uma função sinal dependente do ramo do cone ($a = +, -$), então [15]

$$\begin{aligned} C_V &= 2k_B \beta \sum_{\mathbf{k}, a} \frac{\partial n_{\mathbf{k}}^a}{\partial \beta} \ln\left(\frac{n_{\mathbf{k}}^a}{1 - n_{\mathbf{k}}^a}\right) \\ &= -2k_B \beta^2 \sum_{\mathbf{k}, a} \sigma(a) E_{\mathbf{k}} \frac{\partial n_{\mathbf{k}}^a}{\partial \beta} \\ &= -2k_B \beta^2 \sum_{\mathbf{k}, a} \sigma(a) E_{\mathbf{k}} \frac{dn_{\mathbf{k}}^a}{d(\beta E_{\mathbf{k}})} \left(E_{\mathbf{k}} + \beta \frac{dE_{\mathbf{k}}}{d\beta}\right) \\ &= -2k_B \beta \sum_{\mathbf{k}, a} \sigma(a) \frac{\partial n_{\mathbf{k}}^a}{\partial E_{\mathbf{k}}} \left(E_{\mathbf{k}}^2 + \frac{\beta}{2} \frac{d\Delta_s^2}{d\beta}\right) \end{aligned} \quad (6.23)$$

O primeiro termo na soma corresponde à parte normal do calor específico. O segundo é a

diferença entre a fase normal e SC,

$$\begin{aligned}\Delta C_V(\beta) &\equiv -k_B\beta^2 \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} V \sum_a \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sigma(a) \frac{\partial n_{\mathbf{k}}^a}{\partial E_{\mathbf{k}}} \\ &= \frac{k_B\beta^3 V}{4\pi\hbar^2 v_\Delta v_F} \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \int_{\Delta_s}^{\infty} dE E \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta E}{2}\right) \\ &\xrightarrow{T \rightarrow T_c} \frac{k_B\beta_c V}{2\pi\hbar^2 v_\Delta v_F} \ln 4 \left. \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \right|_{T_c}.\end{aligned}$$

Utilizando a Eq. (6.17), é fácil ver que

$$\left. \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \right|_{T_c} = \frac{d}{d\beta} [4\Delta_0 (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})]_{T_c} = \frac{4\Delta_0}{\beta_c^2}.$$

Pela Eq. (6.16), o salto do calor específico em T_c é portanto:

$$\Delta C_V(\beta_c) \sim 4(\ln 4)^2 \frac{V}{g_c \alpha} k_B^3 T_c^2. \quad (6.24)$$

Por último, vamos encontrar o calor específico da fase normal a partir do primeiro termo da Eq. (6.23),

$$\begin{aligned}C_{n,V}(\beta) &\equiv -2k_B\beta V \sum_\alpha \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sigma(\alpha) \frac{\partial n_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial E_{\mathbf{k}}} E_{\mathbf{k}}^2 \\ &= \frac{k_B\beta^2 V}{2\pi v_\Delta v_F} \int_0^\alpha dE E^3 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta E}{2}\right) \\ &\xrightarrow{\beta\alpha \gg 1} \frac{18k_B V}{2\pi\hbar^2 v_\Delta v_F} \frac{\zeta(3)}{\beta^2} \\ &= 18 \frac{V}{g_c \alpha} \zeta(3) k_B^3 T^2\end{aligned} \quad (6.25)$$

que aumenta com o quadrado da temperatura. Calculando a razão entre as Eq. (9.22) e (6.25) vamos encontrar a constante universal

$$\left. \frac{\Delta C_V}{C_{n,V}} \right|_{T_c} = \frac{2(\ln 4)^2}{9\zeta(3)} \cong 0.35,$$

que representa uma assinatura deste modelo. O valor encontrado na teoria BCS para acoplamento fraco é de ~ 1.43 . Isto mostra claramente o efeito provocado pelo comportamento da densidade de estados nos nós. A densidade de estados ρ_E é definida em termos da dispersão $\epsilon_{\mathbf{k}}$ a partir do elemento de volume

$$d^D k = d\epsilon \rho_E.$$

onde D é a dimensão do sistema. Para $D = 2$, a dispersão dos férmions de Dirac ($\epsilon \propto k$) faz com que a densidade de estados vá a zero linearmente nos nós da superfície de Fermi ($k = 0$),

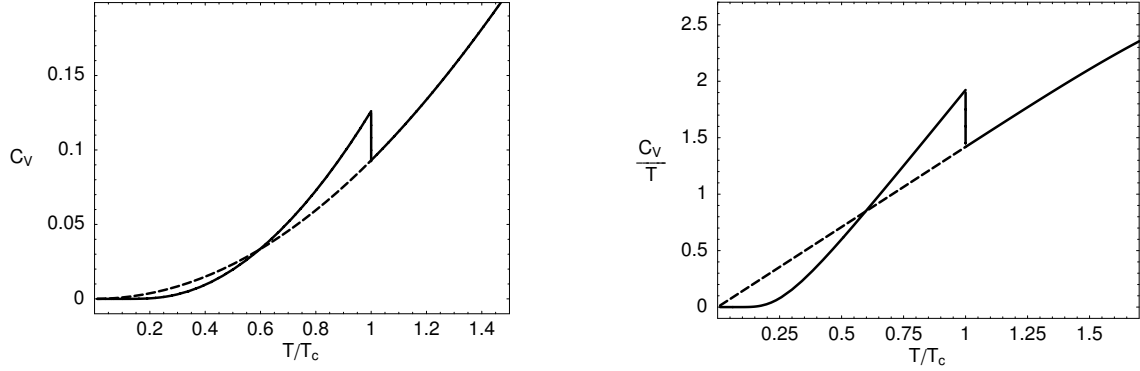


Figura 6.3: Dependência do calor específico C_v com a temperatura (C_v em unidades de $V k_B \alpha g_c^{-1}$ e $g/g_c = 1.1$). O salto do calor específico ocorre na transição normal-SC à temperatura $k_B T_c \sim \Delta_0 / \ln 4$.

diferentemente do metal onde a energia de Fermi é finita e a densidade de estados é uma constante em k_F . Para que o número total de estados na transição supercondutora seja preservado, o elemento de volume do espaço de momento deve permanecer o mesmo, ou seja de $\rho_E^n = dE \rho_E^s$, com n e s indexando as fases normal e SC. Portanto, as densidades de estados nas duas fases são relacionadas por

$$\rho_E^s \propto \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta_s^2}} \rho_E^n, \quad (6.26)$$

mostrando uma clara divergência de ρ_E^s na superfície de Fermi do metal, em contraste com o caso de férmions de Dirac onde ρ_E^s tem um valor finito nos nós. Perto da transição de fase, o número de elétrons que participam do condensado é visivelmente reduzido pela presença dos nós em comparação com a superfície de Fermi não gapeada pela CDW, o que naturalmente explica a atenuação no salto do calor específico.

6.3 Fatores de coerência

A Hamiltoniana de um campo externo qualquer

$$H_I = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} B_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma'},$$

define a probabilidade de transição entre dois estados induzida pela perturbação. Os famosos *fatores de coerência* [94, 15] representam amplitudes de probabilidade de transição de quase-partículas entre estados no espaço de pares $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$. Esses fatores preservam o tipo de simetria de inversão temporal do potencial de interação externo B , que representa uma mudança do momento eletrônico em $k - k'$ e do spin em $\sigma - \sigma'$. As interações de carga são simétricas

ante a troca mútua de k por k' e σ por σ' , enquanto as interações de spin são anti-simétricas. As simetrias de inversão temporal da carga e do spin são caracterizadas pela absorção acústica dos elétrons (interação elétron-fônon) e pela atenuação de NMR (interação de troca), respectivamente. Os fatores de coerência com a simetria de carga são usualmente chamados de *tipo I* e os que têm a simetria de spin de *tipo II*.

A atenuação de ultra-som é ligada a absorção ressonante dos fônons longitudinais no sólido [94]. A taxa de absorção dos fônons no tempo é proporcional à imaginária da susceptibilidade de carga [98]

$$\alpha_s(\mathbf{q} \sim 0) = -\lambda_1^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega} \text{Im} \chi^c(\mathbf{q}, \omega) \right] \quad (6.27)$$

no limite de $q \rightarrow 0$, (já que os fônons longitudinais tem um comprimento de onda típico muito maior que os elétrons). A relaxação de NMR (ressonância nuclear magnética) vem da interação hiperfina entre os spins nucleares orientados e os elétrons de valência

$$H_{\mathbf{I},\mathbf{S}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A \mathbf{I} \cdot \left(\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \vec{\sigma}^{\sigma \sigma'} \psi_{\sigma'}(\mathbf{k}') \right),$$

onde \mathbf{I} é o spin nuclear. A taxa relaxação mede a variação da componente $\hat{\mathbf{b}}$ dos spins nucleares no tempo. No canal de singlete, o spin total dos pares é zero e portanto o condensado não exhibe paramagnetismo. Uma vez que as energias de Zeeman e hiperfina são em geral pequenas em comparação com a energia do gap supercondutor, os únicos processos que contribuem são excitações térmicas de quase-partícula, capazes de arrancar elétrons do condensado. O inverso do tempo de relaxação do spin é proporcional à parte imaginária da susceptibilidade de spin local (*i.e.* somada em todo o espectro q), projetada ao longo de uma direção,

$$T_1^{-1}(\hat{\mathbf{b}}) = -\lambda_2^2 \sum_{\mathbf{q}} \lim_{\omega \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega} \text{Im} \chi_{\hat{\mathbf{b}}}^s(\mathbf{q}, \omega) \right]. \quad (6.28)$$

A susceptibilidade $\chi_{\hat{\mathbf{b}}}^s$ projetada no plano $\hat{\mathbf{b}}$ é dada em termos das direções normais do espaço de spin por

$$\chi_{\hat{\mathbf{b}}}^s(\omega) = \sum_{ij} (\delta^{ij} - b^i b^j) \chi_{ij}^s(\omega), \quad (6.29)$$

com índices $i, j = 1, 2, 3$. Finalmente, as susceptibilidades de carga e spin são definidas pelas respectivas funções de correlação densidade-densidade,

$$\chi^c(\mathbf{q}, i\omega) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_{\tau} [\rho(\mathbf{q}, \tau) \rho(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \quad (6.30)$$

$$\chi_{ab}^s(\mathbf{q}, i\omega) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_{\tau} [S_a(\mathbf{q}, \tau) S_b(-\mathbf{q}, 0)] \rangle. \quad (6.31)$$

6.3.1 Atenuação de ultra-som

Antes de fazer o cálculo da função de correlação, é preciso definir a forma do operador de densidade. A formulação do operador de densidade de carga escrito em termos do espinor (6.3) é

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, a} \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \\
&= \sum_{\mathbf{k}, a} \left[\psi_{a\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) - \psi_{a\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \psi_{a\downarrow}(-\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \tau_3 \sigma_0 \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2). \tag{6.32}
\end{aligned}$$

Vamos calcular a susceptibilidade dos elétrons (6.30) em termos da função de Green

$$\begin{aligned}
\chi^c(\mathbf{q}, i\omega) &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega\tau} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} T_\tau \left[(\tau_3 \sigma_0)^{\alpha\beta} (\tau_3 \sigma_0)^{\nu\gamma} \langle \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, \tau) \Psi_\beta(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, \tau) \times \right. \\
&\quad \left. \times \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}/2, 0) \Psi_\gamma(\mathbf{k}' - \mathbf{q}/2, 0) \rangle \right] \\
&= \frac{1}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_3 \sigma_0 \right]. \tag{6.33}
\end{aligned}$$

Recobrando a definição da função de Green (6.9),

$$\overset{\leftrightarrow}{G}(k, i\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega}(k)}{\omega_n^2 + \omega_k^2},$$

com $\overset{\leftrightarrow}{\omega}(k) = v_F k_\perp \tau_0 \sigma_3 + v_\Delta k_\parallel \tau_0 \sigma_1 + \hbar^{-1} \Delta_s \tau_1 \sigma_2$, o traço da Eq. (6.33) é

$$\begin{aligned}
\chi^c(\mathbf{q}, i\omega) &= \frac{1}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\frac{i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega}(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2})}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^2} \tau_3 \sigma_0 \frac{i(\omega_n + \omega) + \overset{\leftrightarrow}{\omega}(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2})}{(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^2} \tau_3 \sigma_0 \right] \\
&= \frac{4}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{\hbar^{-2} (\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2) - \omega_n (\omega_n + \omega)}{[\omega_n^2 + \omega_-^2] [(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2]}, \tag{6.34}
\end{aligned}$$

onde introduzimos a notação

$$\begin{aligned}
E_\pm &= \hbar\omega_\pm \rightarrow \hbar\omega_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}/2} \\
\vec{\epsilon}_\pm &\rightarrow \hbar v_F (\mathbf{k} \pm \bar{\mathbf{q}}/2).
\end{aligned}$$

A soma nas frequências de Matsubara é feita de forma parecida com o procedimento seguido na Eq. (6.11). Introduzindo um contorno orientado no sentido horário em torno dos quatro pólos do eixo real localizados em $z = \pm\omega_-$ e $z = \pm\omega_+ - i\omega$, a função susceptibilidade é

$$\begin{aligned}
\chi^e(\mathbf{q}, \omega) = & 4 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ n(E_-) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2 + E_-(E_- + i\hbar\omega)}{4E_- E_+} \right. \\
& \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega + E_- - E_+} - \frac{1}{i\hbar\omega + E_- + E_+} \right] \\
& - (1 - n(E_-)) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2 + E_-(E_- - i\hbar\omega)}{4E_- E_+} \times \\
& \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega - E_- - E_+} - \frac{1}{\hbar\omega - E_- + E_+} \right] \\
& + n(E_+) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2 + E_+(E_+ - i\hbar\omega)}{4E_- E_+} \\
& \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega - E_+ - E_-} - \frac{1}{i\hbar\omega - E_+ + E_-} \right] \\
& - (1 - n(E_+)) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2 + E_+(E_+ + i\hbar\omega)}{4E_- E_+} \times \\
& \times \left. \left[\frac{1}{i\hbar\omega + E_+ - E_-} - \frac{1}{i\hbar\omega + E_+ + E_-} \right] \right\}. \quad (6.35)
\end{aligned}$$

Em seguida, vamos tomar o limite de baixas frequências $\hbar\omega \ll \Delta_s$. É facil perceber que os termos de excitação *inrabanda* $(\pm\hbar\omega + E_- - E_+)^{-1}$ são os únicos que têm polos nesse limite. Aplicando a continuação analítica $i\omega \rightarrow \omega + i\delta$ com $\delta \rightarrow 0_+$ (que resulta na susceptibilidade retardada) e usando a identidade

$$\frac{1}{\omega \pm i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} \mp i\pi\delta(\omega),$$

a função espectral de baixas frequências da Eq. (6.35) é

$$\begin{aligned}
\text{Im } \chi^e(\mathbf{q}, \omega) = & -\pi \sum_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2}{E_- E_+} \right) \times (n(E_-) - n(E_+)) \\
& \times [\delta(\hbar\omega + E_- - E_+) - \delta(\hbar\omega - E_- + E_+)] \quad (6.36)
\end{aligned}$$

$$\stackrel{\omega \rightarrow 0}{\longrightarrow} 2\pi\hbar\omega \sum_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2}{E_- E_+} \right) \frac{\partial n(E_-)}{\partial E_-} \delta(E_- - E_+). \quad (6.37)$$

Para calcular a integral acima, basta utilizar a relação útil

$$\delta(f(x) - f(a)) = |f'(a)|^{-1} \delta(x - a). \quad (6.38)$$

Lembrando que $E_{\pm}^2 = \hbar^2 v_F^2 (\mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2)^2 + \Delta_s^2$ ($\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}} = \cos \theta$), a função delta fica

$$\delta(E_- - E_+) = \left| \frac{\partial E_-}{\partial(\cos \theta)} \right|^{-1} \delta(\cos \theta) = \frac{2E_-}{\hbar^2 v_F^2 k \bar{q}} \delta(\cos \theta) = \frac{2E_-}{\hbar^2 v_F^2 k \bar{q}} \left[\delta\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) + \delta\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) \right].$$

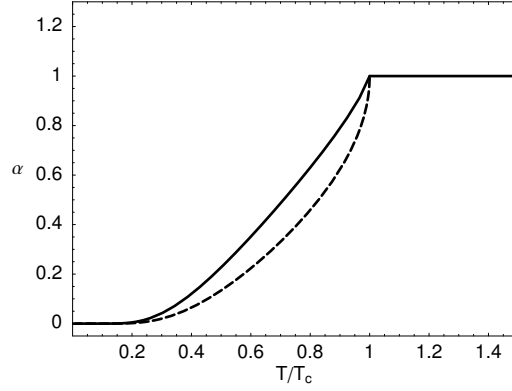


Figura 6.4: Taxa de atenuação de ultra-som normalizada pela fase normal, α_s/α_n vs. temperatura. Linha sólida: fêrmions de Dirac; linha tracejada: modelo BCS.

A absorção de ultra-som tem a expressão final:

$$\begin{aligned}
 \alpha(\mathbf{q}) &= -\lambda_1^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega} \text{Im} \chi^c(\mathbf{q}, \omega) \right] \\
 &= -\frac{1}{v_F \bar{q}} \frac{2\lambda_1^2}{\pi \hbar^2 v_\Delta v_F} \int_0^\Lambda d\epsilon \frac{1}{E} (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) \frac{\partial n(E_-)}{\partial E_-} \\
 \xrightarrow{q \rightarrow 0} & -\frac{1}{v_F \bar{q}} \frac{4\lambda_1^2}{\pi \hbar^2 v_\Delta v_F} \int_0^\alpha d\epsilon \frac{\epsilon^2}{E} \frac{\partial n(E)}{\partial E}.
 \end{aligned} \tag{6.39}$$

A dependência com a temperatura é indicada pela Fig. 6.4.

6.3.2 Relaxação de NMR

Para definir o operador densidade de spin é necessário introduzir antes os graus de liberdade de spin na estrutura spinorial. Isso é feito através do espaço de Balian-Werthamer [93],

$$\Psi_a(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \zeta_a(\mathbf{k}) \\ -i\eta_2 \zeta_a^\dagger(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{a\downarrow}(\mathbf{k}) \\ -\psi_{a\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \\ \psi_{a\uparrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

que contém um espaço de spin adicional

$$\zeta(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{k}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

dentro do espaço de Nambu ($\uparrow \mathbf{k}, \downarrow -\mathbf{k}$). Ele está ao mesmo tempo embutido dentro do espaço de partícula-buraco ($a = \pm$). Definindo um conjunto de matrizes de Pauli $\eta_\mu = (\eta_0, \vec{\eta})$ que operam

nesse novo espaço, o operador de spin na direção 1 (ou equivalentemente x) deve ser

$$\begin{aligned}
S_1(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'a} \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \eta_1^{\sigma\sigma'} \psi_{a\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}a} \left[\psi_{a\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) + \psi_{a\downarrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \right. \\
&\quad \left. - \psi_{a\downarrow}(-(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)) \psi_{a\uparrow}^\dagger(-(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) - \psi_{a\uparrow}(-(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)) \psi_{a\downarrow}^\dagger(-(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) \right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \Psi^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \eta_1 \tau_0 \sigma_0 \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2),
\end{aligned}$$

com \mathbf{k} somado sobre meia zona de Brillouin. Nesta notação, $\eta_1 \tau_0 \sigma_0$ é subentendido como o produto $\eta_1 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_0$. Da mesma forma,

$$\begin{aligned}
S_2(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma,\sigma',a} \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \eta_2^{\sigma\sigma'} \psi_{a\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},a} -i \left[\psi_{a\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) - \psi_{a\downarrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \right. \\
&\quad \left. - \psi_{a\downarrow}(-(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)) \psi_{a\uparrow}^\dagger(-(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) + \psi_{a\uparrow}(-(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)) \psi_{a\downarrow}^\dagger(-(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) \right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \Psi^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \eta_2 \tau_0 \sigma_0 \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2),
\end{aligned}$$

para a direção y do espaço de spin e

$$\begin{aligned}
S_3(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'a} \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \eta_3^{\sigma\sigma'} \psi_{a\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},a} \left[\psi_{a\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) - \psi_{a\downarrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \psi_{a\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \right. \\
&\quad \left. - \psi_{a\uparrow}(-(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)) \psi_{a\uparrow}^\dagger(-(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) + \psi_{a\downarrow}(-(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)) \psi_{a\downarrow}^\dagger(-(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) \right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \Psi^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \eta_3 \tau_0 \sigma_0 \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2),
\end{aligned}$$

para a direção z . A definição geral do operador de spin é portanto

$$S_i(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \Psi^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) \eta_i \tau_0 \sigma_0 \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2). \quad (6.40)$$

com $i = 1, 2, 3$. Generalizando a parte CDW da Hamiltoniana (6.7) nesse espaço estendido, temos

$$\begin{aligned}
H_{\perp} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, a, b} \hbar v_F k_{\perp} \psi_{a\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_3^{ab} \psi_{b\sigma}(\mathbf{k}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, a, b} \hbar v_F k_{\perp} \left[\psi_{a\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_3^{ab} \psi_{b\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{a\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_3^{ab} \psi_{b\downarrow}(\mathbf{k}) \right. \\
&\quad \left. + \psi_{b\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \sigma_3^{ab} \psi_{a\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) + \psi_{b\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \sigma_3^{ab} \psi_{a\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \hbar v_F k_{\perp} \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \eta_0 \tau_0 \sigma_3 \Psi(\mathbf{k}), \tag{6.41}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
H_{\parallel} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, a, b} \hbar v_{\Delta} k_{\parallel} \psi_{a\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_1^{ab} \psi_{b\sigma}(\mathbf{k}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, a, b} \hbar v_{\Delta} k_{\parallel} \left[\psi_{a\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_1^{ab} \psi_{b\downarrow}(\mathbf{k}) + \psi_{a\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_1^{ab} \psi_{b\uparrow}(\mathbf{k}) \right. \\
&\quad \left. + \psi_{b\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \sigma_1^{ab} \psi_{a\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) + \psi_{b\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \sigma_1^{ab} \psi_{a\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \hbar v_{\Delta} k_{\parallel} \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \eta_0 \tau_0 \sigma_1 \Psi(\mathbf{k}). \tag{6.42}
\end{aligned}$$

O termo de emparelhamento traz algo de novo em função da quebra da simetria de inversão temporal, percebendo a antisimetria de σ_2 sob a transposição $\sigma_{\alpha}^{ab} \rightarrow \sigma_{\alpha}^{ba}$,

$$\begin{aligned}
H_P &= \sum_{\mathbf{k}, a, b} \Delta_s \psi_{a\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) + h.c. \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, a, b} \Delta_s \left[\psi_{a\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) + \psi_{a\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \sigma_2^{ab} \psi_{b\uparrow}(\mathbf{k}) \right. \\
&\quad \left. + \psi_{b\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \sigma_2^{ba} \psi_{a\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) + \psi_{b\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \sigma_2^{ba} \psi_{a\downarrow}(\mathbf{k}) \right] \\
&= - \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \Delta_s \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \eta_3 \tau_1 \sigma_2 \Psi(\mathbf{k}). \tag{6.43}
\end{aligned}$$

A Hamiltoniana estendida é portanto:

$$\sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \left[\hbar v_F k_{\perp} \eta_0 \tau_0 \sigma_3 + \hbar v_F k_{\parallel} \eta_0 \tau_0 \sigma_1 - \Delta_s \eta_3 \tau_1 \sigma_2 \right] \Psi(\mathbf{k}).$$

À semelhança da Eq. (6.33), substituindo a Eq. (6.40) em (6.31), é fácil ver que

$$\chi_{ij}^s(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{1}{4\hbar^2\beta} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \eta_i \tau_0 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \eta_j \tau_0 \sigma_0 \right]. \tag{6.44}$$

A função de Green nesse novo espaço é formalmente idêntica

$$\overset{\leftrightarrow}{G}(k, i\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}}}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2}.$$

Como na Eq. (6.34), vamos encontrar

$$\chi_{xx}^s = \frac{1}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{\hbar^{-2}(\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2) - \omega_n(\omega_n + \omega)}{[\omega_n^2 + \omega_-^2][(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2]} = \chi_{yy}^s \quad (6.45)$$

$$\chi_{zz}^s = \frac{1}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{\hbar^{-2}(\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \Delta_s^2) - \omega_n(\omega_n + \omega)}{[\omega_n^2 + \omega_-^2][(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2]}, \quad (6.46)$$

dando origem a uma anisotropia axial orientada na direção z do espaço de spin. A interpretação dessa anisotropia está ligada à quebra da simetria de inversão temporal dos pares na Hamiltoniana original, por causa da estrutura nodal. Como foi discutido no cap. 3, os pares desta teoria diferem numa forma essencial dos pares de Cooper tradicionais. Diferentemente dos pares de Cooper, os pares aqui têm momento finito definido pelo vetor de onda de aninhamento \mathbf{Q}_i da CDW, conectando nós em diferentes folhas da superfície de Fermi. Essa quebra de simetria cria uma estrutura de spin no termo de interação (6.43) (indicada pela matriz de Pauli η_3) orientada na direção z do espaço de spin. Por isso, é imediato concluir que esta direção corresponde à mesma direção \mathbf{Q}_i da CDW no espaço k , uma vez que esta é a única simetria de rotação quebrada no cristal.

Calculando χ_{ii}^s como antes, vamos encontrar:

$$\text{Im } \chi_{xx}^s(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0) = -\frac{\pi}{2} \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2}{E_- E_+} \right) \frac{\partial n(E_-)}{\partial E_-} \delta(E_- - E_+). \quad (6.47)$$

Uma vez que

$$\delta(E_- - E_+) = \frac{E_-}{\hbar^2 v_F^2 k \bar{q}} \left[\delta\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) + \delta\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) \right],$$

então

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_{xx}^s(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0) &= -\frac{\omega}{\bar{q}} \frac{1}{2\pi \hbar v_{\Delta} v_F} \int_0^{\Lambda} d\bar{k} \frac{1}{E_-} (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) \frac{\partial n(E_-)}{\partial E_-} \\ &= -\frac{\omega}{v_F \bar{q} g_c \alpha} \int_{\epsilon_{\mathbf{q}/2}}^{\alpha} d\epsilon \frac{\epsilon}{E} \sqrt{\epsilon^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2} \frac{\partial n(E)}{\partial E}, \end{aligned}$$

A susceptibilidade χ_{zz}^s é semelhante, e resulta em

$$\text{Im } \chi_{zz}^s(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0) = -\frac{\omega}{v_F \bar{q} g_c \alpha} \int_{\epsilon_{\mathbf{q}/2}}^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon}{E} \frac{E^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2}{\sqrt{\epsilon^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2}} \frac{\partial n(E)}{\partial E}. \quad (6.48)$$

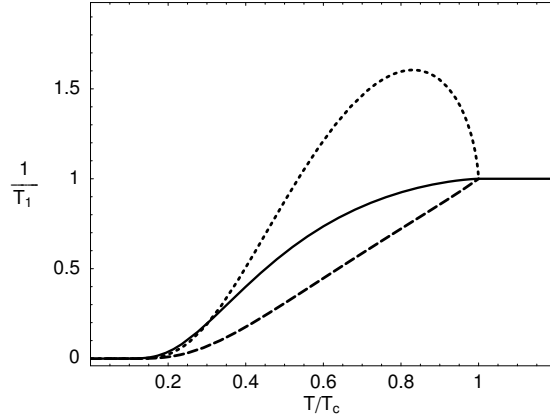


Figura 6.5: Relaxação de NMR normalizada pela fase normal. Curva tracejada: relaxação no plano $\mathbf{b} = \hat{z}$ no espaço de spin. Sólida: planos $\mathbf{b} = \hat{x}, \hat{y}$; curva pontilhada: pico de Hebel-Slichter segundo a teoria BCS.

A relaxação de NMR nas direções do espaço é [ver Eq. (6.29) e (6.28)]

$$\frac{1}{T_1}(\hat{b}_i) = -\lambda_2^2 \int_0^\Lambda \frac{d\bar{q}}{2\pi} \bar{q} \lim_{\omega \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega} \left(\sum_{j=1}^3 \text{Im} \chi_{jj}^s - \text{Im} \chi_{ii}^s \right) \right]. \quad (6.49)$$

A interpretação do resultado de NMR nas direções do espaço indica que a componente zz do tensor susceptibilidade carrega os fatores de coerência com a simetria das interações de spin (ou seja, são ímpares ante a troca de $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$), enquanto que as outras duas componentes diagonais carregam fatores de coerência das interações de carga. Isso pode facilmente entendido através da Fig. 6.5 e da Eq. (6.49). Considere a direção \mathbf{Q}_1 da CDW, por enquanto. A direção \mathbf{Q}_1 (ou equivalentemente a direção z para o spin, segundo a discussão anterior) afeta as correlações eletrônicas de spin nas direções normais, ou seja, no plano xy . Por isso, esta direção é afetada pelas componentes χ_{xx} e χ_{yy} da susceptibilidade, mas não pela componente χ_{zz} [ver Eq. (6.49)]. A direção da CDW induz uma quebra de simetria de inversão temporal adicional à quebra de simetria provocada pela interação de troca, fazendo com que as interações no plano \mathbf{Q}_1 tenham a mesma simetria das interações de carga. Daí vem a semelhança entre a curva de absorção de ultra-som e atenuação de NMR nesse plano. Os planos normais ao plano \mathbf{Q}_1 por outro lado são afetados pela componente χ_{zz} , que conserva a simetria das interações de spin, como no resultado previsto pela teoria BCS. Em resumo, a direção de NMR $\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{Q}_1$ está portanto associada a uma simetria tipo carga, como na resposta de atenuação de fônons (menos intensa), enquanto que as direções de NMR normais a \mathbf{Q}_1 tem uma simetria mista e são mais intensas, como indicado na Fig. 6.5. A mesma análise vale para os vetores $\mathbf{Q}_{2,3}$ separadamente. O efeito desta quebra de simetria no espaço deve ser observado através da superposição das contribuições de cada um dos vetores \mathbf{Q}_i da tripla CDW, que estão rodados cada um em relação aos demais por $\frac{\pi}{3}$ e $\frac{2\pi}{3}$.

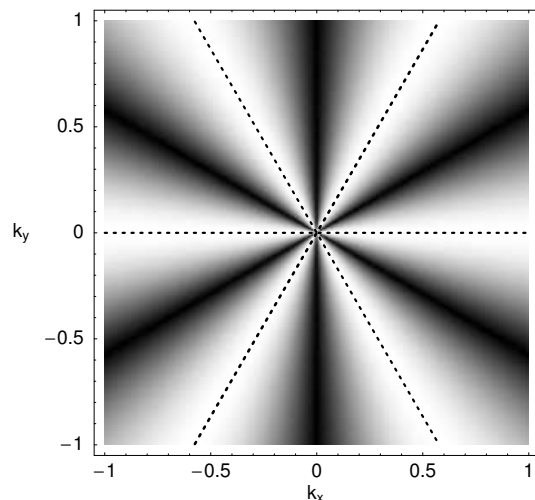


Figura 6.6: Representação pictórica do mapeamento da intensidade de atenuação de NMR nas direções da zona de Brillouin nos planos supercondutores. Linhas tracejadas: direções da tripla distorção de CDW, \mathbf{Q}_i , $i = 1, 2, 3$. As regiões escuras indicam as direções de atenuação mais intensas.

O resultado é que a atenuação de NMR apresenta um padrão de anisotropia nas direções do plano que acompanha a simetria da amplitude do gap da tripla-CDW, indicada pela Fig. 3.1. A intensidade relativa de atenuação é máxima nas direções de NMR paralelas às direções dos pontos de sela e mínima na direção dos nós.

6.4 Teoria BCS

É ilustrativo comparar mais detalhadamente as diferenças entre a teoria supercondutora marginal e a teoria BCS. A supercondutividade em metais é descrita por uma teoria de acoplamento fraco, porém não perturbativa, porposta pela primeira vez na Ref. [95] por Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS). O alicerce central da teoria foi proposto por Cooper [96], ao demonstrar que o mar de Fermi é instável à formação de um estado ligado entre um par de elétrons mediados por uma interação atrativa, por menor que ela seja. Para que a supercondutividade apareça, a energia de ligação do par deve ser igual ao gap Δ no espectro das excitações entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, de forma que $\Delta \sim k_B T_c$ seja independente do volume do sistema [97]. A origem da instabilidade está ligada ao princípio da exclusão de Pauli dos elétrons no mar de Fermi. É essencial que exista um mar de férmions de fundo, onde o princípio da exclusão faz o papel da interação. Do contrário, a formação do estado ligado entre os elétrons do par (no problema de dois corpos) em 3D passa a depender de um potencial atrativo mínimo [15]. Esta propriedade remete para o problema da densidade de estados em torno da superfície de Fermi. A origem do ponto crítico quântico (QCP) no MFL como função do regime de acoplamento,

verificada pela Eq. (6.15), é apenas a consequência da falta do mar de Fermi de fundo, causada pelo comportamento da densidade de estados nos nós. Por isso, a condensação de pares com simetria s no MFL (*i.e.* com um gap isotrópico na superfície de Fermi) só é permitida para acoplamento forte.

A curva de absorção acústica de ultra-som mostrada na Fig. 6.4 compara o resultado do modelo marginal com a curva BCS, $\alpha_s/\alpha_n = 2/(e^{\beta\Delta_s} + 1)$ [94]. O comportamento qualitativo da curva no caso marginal indica que a dependência com a temperatura perto da transição é de uma lei de potência, como no modelo de dois fluidos.

Os efeitos mais visíveis do modelo marginal são a atenuação no salto do calor específico e a ausência do pico de Hebel-Slichter de NMR. A constante universal $\Delta C_V/C_{nV}$ sofre uma redução da ordem de 4 vezes o valor BCS esperado para supercondutores metálicos de acoplamento fraco, como o alumínio. O comportamento suave da densidade de estados no MFL ($\rho_E^s \propto E$) na fase SC contrasta com a divergência em k_F no caso do líquido de Fermi, onde $\rho_E^s \propto E/\sqrt{E^2 - \Delta_s^2}$ [ver Eq. (6.26)]. Por isso, o pico BCS para a resposta de atenuação de NMR, indicada pela Fig. 6.5, não é observado no MFL. Entretanto, esse argumento (apesar de bastante razoável) é apenas qualitativo. Observe que a atenuação de NMR nas direções $\mathbf{b} = \hat{x}, \hat{y}$, é uma média entre a componente zz com as componentes yy e xx , respectivamente. Enquanto as duas últimas se comportam de maneira parecida com a curva de absorção de fônons com a temperatura (ver Fig.6.4), exceto pela natureza local da susceptibilidade, caindo abruptamente abaixo de T_c , a componente zz definida pela Eq. (6.48) envolve uma soma em torno de um ramo de singularidades integráveis em $\epsilon = \epsilon_{\mathbf{q}/2}$ e apresenta um pico abaixo da temperatura de transição. A média entre as duas componentes (zz e xx ou zz com yy) resulta na curva sólida indicada na Fig. 6.5.

Uma outra diferença importante entre o modelo marginal do cap. 3 e a teoria BCS é a dispersão relativística dos férmions de Dirac vestidos pela CDW, com duas bandas no espectro. O cálculo de algumas propriedades supercondutoras na teoria BCS (como a absorção óptica no infravermelho) são feitas no limite sujo, assumindo processos de espalhamento em que a energia é conservada mas não o momento, e por isso dependem da presença de impurezas [15]. Aqui, os férmions de Dirac do condensado podem ser livremente excitados da banda de baixo para a de cima por transições ópticas com energia maior que o gap $2\Delta_s$, inclusive no limite limpo. Esta característica tem efeitos importantes sobre o transporte e será discutida com mais detalhe no capítulo seguinte.

Capítulo 7

Transporte

Neste capítulo, vamos calcular as condutividades óptica e térmica a partir da teoria microscópica desenvolvida no capítulo anterior. A definição usual de corrente térmica é:

$$\mathbf{j}^Q = \mathbf{j}^E - \frac{\mu}{e}\mathbf{j},$$

com \mathbf{j}^E a corrente de energia, \mathbf{j} a corrente elétrica e μ o potencial químico, que no nosso caso é igual a zero. De qualquer forma, as medidas de condutividade térmica são feitas sob a condição de fluxo zero para os portadores de carga na amostra, e por isso podemos considerar que $\mathbf{j}^Q = \mathbf{j}^E$. Para calcular as condutividades térmica e óptica, κ and σ respectivamente, precisamos calcular a parte imaginária das funções de correlação

$$\Pi_{ij}^{CC}(\mathbf{q}, i\omega) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_\tau [j_i(\mathbf{q}, \tau) j_j(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \quad (7.1)$$

$$\Pi_{ij}^{EE}(\mathbf{q}, i\omega) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_\tau [j_i^E(\mathbf{q}, \tau) j_j^E(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \quad (7.2)$$

$$\Pi_{ij}^{EC}(\mathbf{q}, i\omega) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_\tau [j_i^E(\mathbf{q}, \tau) j_j(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \quad (7.3)$$

e então aplicar as fórmulas de Kubo [98]

$$\kappa_{ij}(\omega) = -\frac{1}{\omega T} \lim_{q \rightarrow 0} \text{Im} \Pi_{ij}^{EE}(\mathbf{q}, \omega) + T S_{ij}^2(\omega) \sigma_{ij}(\omega) \quad (7.4)$$

$$\sigma_{ij}(\omega) = -\frac{1}{\omega} \lim_{q \rightarrow 0} \text{Im} \Pi_{ij}^{CC}(\mathbf{q}, \omega), \quad (7.5)$$

onde

$$S_{ij}(\omega) = -\frac{1}{T} \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{\text{Im} \Pi_{ij}^{EC}(\mathbf{q}, \omega)}{\text{Im} \Pi_{ij}^{CC}(\mathbf{q}, \omega)} \right] \quad (7.6)$$

é a condutividade termoeletrica $S = -\Delta V / \Delta T$, que mede a diferença de potencial ΔV criada por um gradiente de temperatura ΔT . O segundo termo na Eq. (7.4) garante a condição de que

o fluxo de energia gerado por um gradiente de temperatura através das colisões entre os elétrons exclua as correntes dos portadores de carga.

7.1 Condutividade óptica

Para incorporar o campo magnético na Hamiltoniana (6.7), vamos utilizar a substituição de Peierls [22]

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}.$$

Assumimos que $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ é simétrico sob a inversão de $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, e por isso empregamos a matriz de Pauli τ_3 que opera no espaço de Nambu usual. Sobre isso é conveniente fazer um parêntese explicativo. Uma função densidade qualquer $\sum_{\sigma} f(\mathbf{k}) \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi_{\sigma}(\mathbf{k})$, escrita em termos dos férmions usuais de spin $\frac{1}{2}$, pode ser escrita equivalentemente como

$$f(\mathbf{k}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}) \psi_{\downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}),$$

por causa da simetria da soma em k , ou ainda na notação de Nambu

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) & \psi_{\downarrow}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -f(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}.$$

Claramente, a matriz de Pauli associada é τ_3 se f é uma função simétrica em k e τ_0 se ela for anti-simétrica. A razão desta nota explicativa é que a substituição de Peierls requer um cuidado adicional quando a dispersão na energia é ímpar com respeito à inversão do momento, já que a própria substituição introduz um termo que é par, violando a simetria da dispersão. Assim, para uma Hamiltoniana com a forma:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \tau_0 \sigma_i \Psi(\mathbf{k}),$$

a substituição de Peierls correta envolve a discriminação dos termos simétricos e anti-simétricos,

$$\epsilon(\mathbf{k}) \tau_0 \rightarrow \epsilon^A(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) \tau_0 + \epsilon^S(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) \tau_3, \quad (7.7)$$

onde

$$\begin{aligned} \epsilon^S(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) &= \frac{1}{2} \left[\epsilon(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) + \epsilon(-\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) \right] \\ \epsilon^A(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) &= \frac{1}{2} \left[\epsilon(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) - \epsilon(-\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) \right], \end{aligned}$$

definem as partes simétrica e anti-simétrica, respectivamente. Com isso, é fácil ver que o termo adicional devido ao campo magnético na Hamiltoniana (6.7) é dado por

$$H_B = -\Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \left[v_F \frac{e}{c} A_{\perp} \tau_0 \sigma_3 + v_{\Delta} \frac{e}{c} A_{\parallel} \tau_0 \sigma_1 \right] \Psi(\mathbf{k}),$$

com τ_0 ao invés de τ_3 , como se poderia ingenuamente esperar pela aplicação direta da substituição $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \tau_3 \mathbf{A}$. A corrente elétrica é portanto:

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) = -c \nabla_{\mathbf{A}} H = \Psi^\dagger(\mathbf{k}) [v_F e \tau_0 \sigma_3 \hat{\mathbf{e}}_\perp + v_\Delta e \tau_0 \sigma_1 \hat{\mathbf{e}}_\parallel] \Psi(\mathbf{k}). \quad (7.8)$$

O próximo passo é calcular as componentes diagonais da função de correlação (7.1). Começando pela componente na direção \perp , temos

$$\begin{aligned} \Pi_\perp^{CC}(\mathbf{q}, i\omega) &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega\tau} (v_F e)^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} T_\tau \left[(\tau_0 \sigma_3)^{\alpha\beta} (\tau_0 \sigma_3)^{\nu\gamma} \langle \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, \tau) \Psi_\beta(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, \tau) \times \right. \\ &\quad \left. \times \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}/2, 0) \Psi_\gamma(\mathbf{k}' - \mathbf{q}/2, 0) \rangle \right] \\ &= \frac{v_F^2 e^2}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overleftrightarrow{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overleftrightarrow{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \right], \end{aligned} \quad (7.9)$$

como na Eq. (6.33). O cálculo do traço resulta em

$$\begin{aligned} \Pi_\perp^{CC}(\mathbf{q}, i\omega) &= \frac{v_F^2 e^2}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\frac{i\omega_n + \overleftrightarrow{\omega}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^2} \tau_0 \sigma_3 \frac{i(\omega_n + \omega) + \overleftrightarrow{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^2} \tau_0 \sigma_3 \right] \\ &= \frac{4v_F^2 e^2}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{v_F^2 \left(\underline{\mathbf{k}} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \cdot \left(\underline{\mathbf{k}} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) - \hbar^{-2} \Delta_s^2 - \omega_n(\omega_n + \omega)}{\left[\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^2 \right] \left[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^2 \right]} \\ &= \frac{4v_F^2 e^2}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{\hbar^{-2} (\underline{\vec{\epsilon}}_- \cdot \underline{\vec{\epsilon}}_+ - \Delta_s^2) - \omega_n(\omega_n + \omega)}{\left[\omega_n^2 + \omega_-^2 \right] \left[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2 \right]}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Aqui, definimos o vetor complexo:

$$\underline{\mathbf{k}} \equiv k_\perp \hat{\mathbf{e}}_\perp + i \frac{v_\Delta}{v_F} k_\parallel \hat{\mathbf{e}}_\parallel$$

cuja norma é $\underline{k}^2 = k_\perp^2 - (v_F/v_\Delta)^2 k_\parallel^2$, com $\underline{\vec{\epsilon}}_\pm = \hbar v_F (\underline{\mathbf{k}} \pm \mathbf{q}/2)$. Somando sobre as frequências de Matsubara, o resultado é bastante parecido com a susceptibilidade de carga (6.35),

$$\begin{aligned} \Pi_\perp^{CC}(\mathbf{q}, \omega) &= v_F^2 e^2 \sum_{\mathbf{k}} \times \left\{ n(E_-) \frac{\underline{\vec{\epsilon}}_- \cdot \underline{\vec{\epsilon}}_+ - \Delta_s^2 + E_-(E_- + i\hbar\omega)}{E_- E_+} \times \right. \\ &\quad \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega + E_- - E_+} - \frac{1}{i\hbar\omega + E_- + E_+} \right] \\ &\quad - (1 - n(E_-)) \frac{\underline{\vec{\epsilon}}_- \cdot \underline{\vec{\epsilon}}_+ - \Delta_s^2 + E_-(E_- - i\hbar\omega)}{E_- E_+} \times \\ &\quad \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega - E_- - E_+} - \frac{1}{\hbar\omega - E_- + E_+} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +n(E_+) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2 + E_+(E_+ - i\hbar\omega)}{E_- E_+} \\
& \quad \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega - E_+ - E_-} - \frac{1}{i\hbar\omega - E_+ + E_-} \right] \\
& - (1 - n(E_+)) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2 + E_+(E_+ + i\hbar\omega)}{E_- E_+} \times \\
& \quad \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega + E_+ - E_-} - \frac{1}{i\hbar\omega + E_+ + E_-} \right] \}. \quad (7.11)
\end{aligned}$$

Tomando a parte imaginária, vamos encontrar a função

$$\begin{aligned}
\text{Im } \Pi_{\perp}^{CC}(\mathbf{q}, \omega) &= -\pi v_F^2 e^2 \sum_{\mathbf{k}} \\
& \quad \left\{ \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2}{E_- E_+} \right) (n(E_-) - n(E_+)) \times \right. \\
& \quad \quad \times [\delta(\hbar\omega + E_- - E_+) - \delta(\hbar\omega - E_- + E_+)] \\
& \quad + \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2}{E_- E_+} \right) (1 - n(E_-) - n(E_+)) \times \\
& \quad \quad \times [\delta(\hbar\omega - E_- - E_+) - \delta(\hbar\omega + E_- + E_+)] \}, \quad (7.12)
\end{aligned}$$

dada em termos de fatores de coerência do tipo I (carga).

Se definirmos os vetores anisotrópicos $\bar{\mathbf{k}} = \bar{k}(\cos\theta, \sin\theta)$ em coordenadas polares com respeito à base $\{\hat{\mathbf{e}}_{\perp}, \hat{\mathbf{e}}_{\parallel}\}$ e tomarmos o limite de $q \rightarrow 0$, não é difícil perceber que $\underline{\mathbf{k}}^2 = \bar{k}^2 \cos(2\theta)$, e portanto

$$\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ \xrightarrow{q \rightarrow 0} (E_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_s^2) \cos(2\theta). \quad (7.13)$$

Substituindo $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}$, a condutividade óptica é dada por

$$\begin{aligned}
\sigma_{\perp}(\omega) &= -\frac{1}{\omega} \text{Im } \Pi_{\perp}^{CC}(0, \omega) \\
&= \frac{e^2 v_F}{\hbar v_{\Delta}} \int_{\Delta_s}^{\alpha} dE E \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \\
& \quad \times \left\{ - \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_s^2}{E_{\mathbf{k}}^2} \right) \left(\frac{n(E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega) - n(E_{\mathbf{k}} - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \right) \delta(\hbar\omega) \right. \\
& \quad \quad \left. + \frac{1}{\hbar\omega} \left(1 - 4 \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_s^2}{\hbar^2 \omega^2} \right) (1 - 2n(E_{\mathbf{k}})) [\delta(\hbar\omega - 2E_-) - \delta(\hbar\omega + 2E_-)] \right\} \\
&= \sigma_{\perp}^{DC}(\omega) + \sigma_{\perp}^{AC}(\omega), \quad (7.14)
\end{aligned}$$

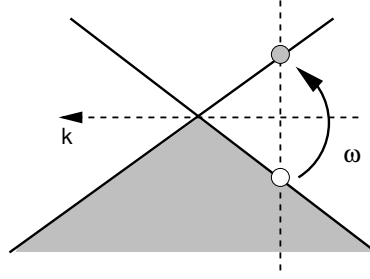


Figura 7.1: Processo de excitação interbanda com transferência de energia $\hbar\omega$ e transferência de momento zero (limite limpo), mediada pela absorção de um fóton. O preenchimento completo da banda de baixo proíbe a absorção de fótons por elétrons já termicamente excitados. A abertura do gap restringe os processos de absorção aos elétrons do condensado e aos fótons com energia maior que $2\Delta_s$.

onde

$$\sigma_{\perp}^{DC}(\omega) = -\frac{e^2 v_F}{\hbar^2 v_{\Delta}} \delta(\omega) \int_{\Delta_s}^{\alpha} dE E \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E^2}\right) \frac{\partial n(E)}{\partial E} \quad (7.15)$$

é a condutividade DC tipo *Drude*, que vem associada a um sistema eletrônico em que as partículas têm livre caminho médio infinito, e o segundo

$$\sigma_{\perp}^{AC}(\omega) = \frac{e^2 v_F}{2\hbar v_{\Delta}} \left(1 + \frac{4\Delta_s^2}{\hbar^2 \omega^2}\right) \left|1 - 2n\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)\right| \theta(\hbar\omega - 2\Delta_s) \quad (7.16)$$

é a condutividade provocada pelas excitações *interbanda*. Para encontrar um livre caminho médio finito na parte DC (como se esperaria talvez em modelos mais realistas) é necessário introduzir centros espalhadores, como por exemplo impurezas. Vamos discutir este ponto um pouco melhor na seção 7.2.2, quando introduzirmos os efeitos de impurezas. A componente \parallel é simétrica pelas substituições $\vec{\epsilon}_{\mathbf{k}} \cdot \vec{\epsilon}_{\mathbf{k}} \rightarrow -\vec{\epsilon}_{\mathbf{k}} \cdot \vec{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ e $v_F \rightarrow v_{\Delta}$. É imediato ver que $\sigma_{\perp} = \frac{v_{\Delta}^2}{v_F^2} \sigma_{\parallel}$.

A absorção de um fóton envolve a excitação de quase-partículas e resulta na formação de correntes em fase com o campo elétrico [87]. A taxa de absorção óptica é portanto proporcional à parte real da condutividade. Em supercondutores convencionais, não há absorção a $T = 0$ na região do infravermelho com energia menor que o gap de massa do par $2\Delta_s$, já que os fótons não têm energia suficiente para excitar elétrons do condensado. À temperatura finita, os canais de excitação de quase-partícula são gradualmente reestabelecidos e os fótons com energia muito menor que $2\Delta_s$ têm uma probabilidade finita de serem absorvidos. É importante frisar que os fatores de coerência desses supercondutores (digamos, tipo BCS) são finitos no limite $q \rightarrow 0$ (ω finito) apenas no limite sujo, em que os processos de excitação conservam energia mas não conservam momento. Não é difícil entender isso, uma vez que normalmente os processos cuja transferência de momento é zero também não transferem energia. Por conta de uma característica particular aos férmions de Dirac, cuja dispersão tem *duas* bandas, os processos que envolvem excitações *interbanda* permitem promover um elétron da banda de baixo para a de cima sem transferir momento. Na situação em que a banda de baixo está completamente preenchida,

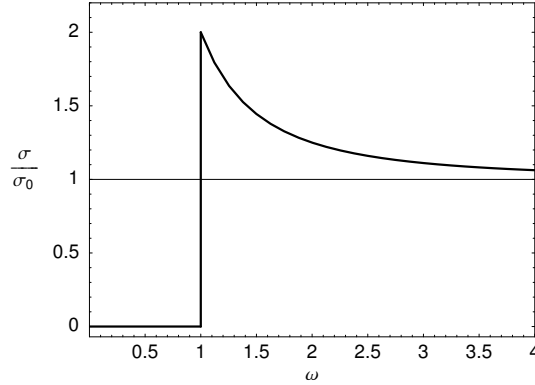


Figura 7.2: Absorção infravermelha do supercondutor (normalizada pela fase normal) em função da frequência. $\hbar\omega$ em unidades de $2\Delta_s$.

o fóton é absorvido apenas quando ele tem energia suficiente para fazer o elétron transpor a barreira do gap $2\Delta_s$. O processo de absorção no limite limpo é totalmente independentemente da temperatura (exceto pela renormalização do gap), já que os canais térmicos fazem as quase-partículas ocuparem a banda de cima, onde elas não absorvem fótons (ver Fig. 7.1).

Na Fig. 7.2, a condutividade óptica mostra uma espécie de borda de absorção anômala em $\hbar\omega = 2\Delta_s$. Esta propriedade está diretamente ligada à quebra da simetria de inversão da rede pelo gap da CDW, que afeta os fatores de coerência (aqui, no caso tipo I) que ditam o comportamento da condutividade no infravermelho.

7.1.1 Peso espectral

De acordo com a regra de soma f ,

$$\int_0^\infty \sigma(\omega) d\omega = \frac{\pi n e^2}{2m}, \quad (7.17)$$

a área “debaixo” das curvas $\sigma^{DC} + \sigma^{AC}$ deve ser conservada tanto na fase supercondutora quanto na fase normal. Na fase supercondutora, entretanto, existe uma “área perdida” em comparação com a fase normal. A diferença de áreas corresponde ao peso espectral em $\omega = 0$ da condutividade infinita que gera as supercorrentes e expulsa o campo magnético [15]. Esta parte do peso espectral (que efetivamente faz com que um supercondutor seja um “supercondutor”) depende de uma ordem de limites diferente entre ω e q e não aparece explicitamente no cálculo. Por isso, a condição necessária para o aparecimento de supercondutividade é que

$$\int_0^\infty [\sigma_s^{DC}(\omega) + \sigma_s^{AC}(\omega)] d\omega < \int_0^\infty [\sigma_n^{DC}(\omega) + \sigma_n^{AC}(\omega)] d\omega.$$

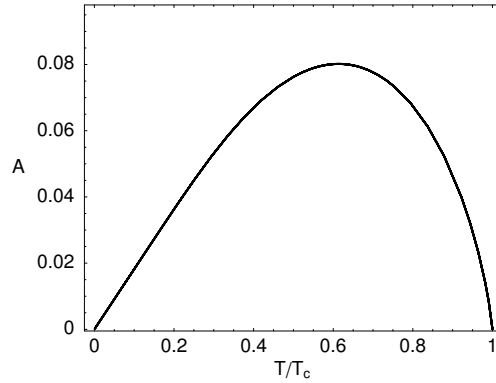


Figura 7.3: Comportamento anômalo do peso espectral diamagnético ($\omega = 0$) com a temperatura. Unidades de $v_F e^2 \alpha / (2 \hbar^2 v_\Delta)$.

Não é difícil verificar que à temperatura zero $\sigma_s^{DC} = \sigma_n^{DC} = 0$, e que as curvas do setor AC nas duas fases têm *exatamente* a mesma área. Uma análise mais apressada indicaria que não existe peso espectral ligado ao condensado e portanto não existe supercondutividade no sistema. Esta análise, no entanto, é incompatível com a verificação termodinâmica de que existe uma energia de condensação (ver Fig. 6.1), que torna a supercondutividade estável. O comportamento da diferença entre as áreas com a temperatura é indicado na Fig. 7.3 e mostra um efeito claramente anômalo na região de baixas temperaturas, sugerindo a supressão do diamagnetismo no limite $T \rightarrow 0$.

Ao que tudo indica, a origem do problema está ligada à redistribuição do peso espectral dos estados de alta energia para os de baixa energia com a redução da temperatura, observada no TaSe₂. Olhando para a Fig. 2.6, existe uma parte do peso espectral na região em torno de 60 meV (\sim da ordem da energia de corte do cone) a 300 K que é deslocada para a região de Drude no infravermelho a temperaturas da ordem da transição supercondutora. Aparentemente a abertura do gap atrai estados da região do espectro de altas energias, que estão além da aproximação do cone, para o infravermelho. Esses estados fornecem contribuições não lineares em momento ao espectro da Hamiltoniana CDW. Em ordem quadrática $\epsilon_k \propto (k - \frac{e}{c}A)^2$, e portanto esses são os estados que contribuem para o diamagnetismo, que resulta dos termos $\propto A^2$ na energia. A redistribuição do peso espectral é uma característica frequente em sistemas com acoplamento forte. Apesar de respeitar o limite correto em torno da transição de fase, a regra de soma falha em contabilizar corretamente a contribuição dos estados diamagnéticos, principalmente na região de baixas temperaturas onde o peso espectral sente mais o efeito dos estados de altas energias. As propriedades ópticas de campo zero, ou seja, propriedades não relacionadas à expulsão do campo magnético, entretanto, são menos sensíveis aos estados de alta energia e podem ser corretamente descritas dentro da aproximação do cone. Vamos voltar a tratar deste problema em breve no capítulo 8.

7.2 Condutividade térmica

A corrente de energia é uma quantidade conservada definida pelas componentes não diagonais T_0^i do tensor de *energia e momento*

$$T_\nu^\mu \equiv \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Psi)} \partial_\nu \Psi - \mathcal{L} \delta_\nu^\mu \right]. \quad (7.18)$$

Este tensor é derivado diretamente a partir do teorema de Noether (ver Apêndice A.4). Usando a relação usual

$$H = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \Psi)} \partial_0 \Psi - \mathcal{L},$$

a Lagrangeana associada à Hamiltoniana original (6.7) escrita no espaço real tem a forma

$$\mathcal{L} = \Psi^\dagger(x) [i\hbar c\tau_3\sigma_0\partial_0 - i\hbar v_F\tau_0\sigma_3\partial_3 - i\hbar v_\Delta\tau_0\sigma_1\partial_1 - \Delta_s\tau_1\sigma_2] \Psi(x). \quad (7.19)$$

Assim, a corrente de energia é igual a

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^E(x) = cT_0^i &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \Psi)} c\partial_0 \Psi \\ &= -i\hbar \Psi^\dagger(x) [v_F\tau_0\sigma_3\hat{\mathbf{e}}_\perp + v_\Delta\tau_0\sigma_1\hat{\mathbf{e}}_\parallel] c\partial_0 \Psi(x), \end{aligned}$$

ou equivalentemente

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^E(\mathbf{q}, \tau) &= \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, \tau) [\hbar v_F\tau_0\sigma_3\hat{\mathbf{e}}_\perp + \hbar v_\Delta\tau_0\sigma_1\hat{\mathbf{e}}_\parallel] \partial_\tau \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, \tau), \\ &= -\sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, \tau) [\hbar v_F\tau_0\sigma_3\hat{\mathbf{e}}_\perp + \hbar v_\Delta\tau_0\sigma_1\hat{\mathbf{e}}_\parallel] \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, \tau), \end{aligned} \quad (7.20)$$

notando que $c\partial_0 \equiv i\partial_\tau$, com τ o tempo imaginário e que a evolução temporal dos férmions de Dirac Ψ é dada por

$$\Psi(\mathbf{q}, \tau) = e^{-\tau \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{q}}} \Psi(\mathbf{q}),$$

onde $\overset{\leftrightarrow}{\omega}$ é o tensor da dispersão, definido na Eq. (6.7).

Vamos começar com a componente diagonal da função de polarização corrente-corrente $\Pi_{11}^{EE} \equiv \Pi_{\perp}^{EE}$. A expressão é semelhante à Eq. (6.33), cujo traço é igual a

$$\Pi_{\perp}^{EE}(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{v_F^2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0\sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0\sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} \right] \quad (7.21)$$

$$= \frac{v_F^2}{\beta \hbar^2} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{\frac{1}{\hbar^2} \left[(\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2)^2 - (\vec{\epsilon}_+ \times \vec{\epsilon}_-)^2 - \epsilon_{\mathbf{q}}^2 \Delta_s^2 \right] - \omega_n(\omega_n + \omega) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2]}{[\omega_n^2 + \omega_-^2] [(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2]}, \quad (7.22)$$

Mais detalhes no apêndice F.1. Definindo

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = (\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2)^2 - (\vec{\epsilon}_+ \times \vec{\epsilon}_-)^2 - \underline{\epsilon}_q^2 \Delta_s^2,$$

e comparando as Eq. (7.22) e (7.10), é fácil ver que

$$\begin{aligned} \Pi_{\perp}^{EE}(\mathbf{q}, i\omega) = & v_F^2 \sum_{\mathbf{k}} \\ & \times \left\{ n(E_-) \frac{\mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + E_-(E_- + i\hbar\omega) (\underline{\epsilon}_- \cdot \underline{\epsilon}_+ - \Delta_s^2)}{E_- E_+} \right. \\ & \quad \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega + E_- - E_+} - \frac{1}{i\hbar\omega + E_- + E_+} \right] \\ & - (1 - n(E_-)) \frac{\mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + E_-(E_- - i\hbar\omega) (\underline{\epsilon}_- \cdot \underline{\epsilon}_+ - \Delta_s^2)}{E_- E_+} \\ & \quad \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega - E_- - E_+} - \frac{1}{\hbar\omega - E_- + E_+} \right] \\ & + n(E_+) \frac{\mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + E_+(E_+ - i\hbar\omega) (\underline{\epsilon}_- \cdot \underline{\epsilon}_+ - \Delta_s^2)}{E_- E_+} \\ & \quad \times \left[\frac{1}{i\hbar\omega - E_+ - E_-} - \frac{1}{i\hbar\omega - E_+ + E_-} \right] \\ & - (1 - n(E_+)) \frac{\mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + E_+(E_+ + i\hbar\omega) (\underline{\epsilon}_- \cdot \underline{\epsilon}_+ - \Delta_s^2)}{E_- E_+} \times \\ & \quad \times \left. \left[\frac{1}{i\hbar\omega + E_+ - E_-} - \frac{1}{i\hbar\omega + E_+ + E_-} \right] \right\} \quad (7.23) \end{aligned}$$

A parte imaginária é igual a

$$\begin{aligned} \text{Im } \Pi_{\perp}^{EE}(\mathbf{q}, \omega) = & -\pi v_F^2 \sum_{\mathbf{k}} \\ & \left\{ \left(\frac{\mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + E_+ E_- (\underline{\epsilon}_- \cdot \underline{\epsilon}_+ - \Delta_s^2)}{E_- E_+} \right) (n(E_-) - n(E_+)) \right. \\ & \quad \times [\delta(\hbar\omega + E_- - E_+) - \delta(\hbar\omega - E_- + E_+)] \\ & - \left(\frac{\mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - E_+ E_- (\underline{\epsilon}_- \cdot \underline{\epsilon}_+ - \Delta_s^2)}{E_- E_+} \right) (1 - n(E_-) - n(E_+)) \\ & \quad \times [\delta(\hbar\omega - E_- - E_+) - \delta(\hbar\omega + E_- + E_+)] \left. \right\}. \quad (7.24) \end{aligned}$$

No limite de $q \rightarrow 0$, $\mathcal{A}(\mathbf{k}, 0) = E_{\mathbf{k}}^4$. Portanto, a polarização térmica é igual a

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EE}(0, \omega) &= \frac{v_F}{v_{\Delta}} \frac{1}{\hbar^2} \delta(\omega) \int_{\Delta_s}^{\infty} dE E^3 \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E^2} \right) \frac{\partial n(E)}{\partial E} \\ &\quad + \frac{v_F}{2v_{\Delta}} \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 \left(1 + \frac{4\Delta_s^2}{\hbar^2\omega^2} \right) \left[1 - 2n \left(\frac{\hbar|\omega|}{2} \right) \right] \theta(\hbar\omega - 2\Delta_s) \\ &= \frac{v_{\Delta}^2}{v_F^2} \frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\parallel}^{EE}(0, \omega) \end{aligned} \quad (7.25)$$

O traço da função de correlação termoeétrica Π^{EC} definida pela Eq. (7.3) é

$$\begin{aligned} \Pi_{\perp}^{EC}(\mathbf{q}, i\omega) &= \frac{ev_F^2}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \right] \\ &= \frac{ev_F^2}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \frac{i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^2} \tau_0 \sigma_3 \frac{i(\omega_n + \omega) + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^2} \tau_0 \sigma_3 \right] \\ &= \frac{4ev_F^2}{\beta\hbar^3} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{[i\omega_n \underline{\epsilon}_+^2 + i(\omega_n + \omega) \epsilon_+ \cdot \epsilon_-]}{[\omega_n^2 + \omega_-^2] [(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2]}. \end{aligned}$$

Calculando a soma nas frequências de Matsubara, vamos encontrar

$$\begin{aligned} \Pi_{\perp}^{EC}(\mathbf{q}, \omega) &= 4ev_F^2 \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \\ &\quad \left\{ n(\sigma E_-) \frac{E_- (\underline{\epsilon}_+^2 - \Delta_s^2) + (E_- + i\sigma\hbar\omega)(\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2)}{4E_+ E_-} \right. \\ &\quad \times \left[\frac{1}{i\sigma\hbar\omega + E_- - E_+} - \frac{1}{i\sigma\hbar\omega + E_- + E_+} \right] \\ &\quad + n(\sigma E_+) \frac{(E_+ - i\sigma\hbar\omega)(\underline{\epsilon}_+^2 - \Delta_s^2) + E_+(\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2)}{4E_+ E_-} \\ &\quad \times \left[\frac{1}{i\sigma\hbar\omega - E_+ - E_-} - \frac{1}{i\sigma\hbar\omega - E_+ + E_-} \right] \left. \right\}, \end{aligned}$$

cuja parte imaginária é

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EC}(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{ev_F^2}{\omega} \pi \sum_{\mathbf{k}} [n(E_-) - n(E_+)] \frac{E_- (\underline{\epsilon}_+^2 - \Delta_s^2) + E_+(\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \Delta_s^2)}{E_- E_+} \\ &\quad \times [\delta(\hbar\omega + E_- - E_+) + \delta(\hbar\omega - E_- + E_+)] \\ &\quad + \frac{ev_F^2}{\omega} \pi \sum_{\mathbf{k}} [n(E_-) - n(-E_+)] \frac{E_- (\underline{\epsilon}_+^2 - \Delta_s^2) - E_+(\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \Delta_s^2)}{E_- E_+} \\ &\quad \times [\delta(\hbar\omega + E_- + E_+) + \delta(\hbar\omega - E_- - E_+)]. \end{aligned}$$

Repare nos sinais das funções delta. Os polos do primeiro termo se cancelam no limite $q \rightarrow 0$. O segundo termo é igual a

$$\frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EC}(0, \omega) = \frac{ev_F}{2\hbar v_{\Delta}} \frac{\hbar\omega}{2} \left(1 + \frac{4\Delta_s^2}{\hbar^2\omega^2}\right) \left[n\left(-\frac{\hbar|\omega|}{2}\right) - n\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)\right] \theta(\hbar|\omega| - 2\Delta_s). \quad (7.26)$$

Substituindo as Eq. (7.16) e (7.26) na Eq. (7.6), a condutividade termoelétrica será

$$S_{\perp} = -\frac{1}{T} \frac{\text{Im} \Pi_{\perp}^{EC}(0, \omega)}{\text{Im} \Pi_{\perp}^{CC}(0, \omega)} = \frac{\hbar\omega}{2eT}.$$

Não é difícil ver que as Eq. (7.26) e (7.25) levam a um cancelamento exato da condutividade térmica (7.4) no setor AC. A única contribuição finita vem do termo de Drude

$$\begin{aligned} \kappa(\omega) &= -\frac{1}{\omega T} [\text{Im} \Pi_{ij}^{EE}(0, \omega) - \omega T^2 S_{\perp}^2(\omega) \sigma_{ij}(\omega)] \\ &= \kappa^{DC}(\omega), \end{aligned}$$

que é igual a

$$\kappa^{DC}(\omega) = -\frac{v_F}{\hbar^2 v_{\Delta} T} \delta(\omega) \int_{\Delta_s}^{\infty} dE E^3 \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E^2}\right) \frac{\partial n(E)}{\partial E}, \quad (7.27)$$

O cancelamento do termo de excitações interbanda na condutividade térmica é causado pelo preenchimento completo da banda de baixo dos férmions de Dirac. O argumento é o seguinte [101]: o processo de excitação descrito pela Fig. 7.1 envolve a aniquilação de um elétron com energia negativa (o que é equivalente a criar um buraco no setor de energia negativa ao custo de energia $+E_{\mathbf{k}}$) e a criação de uma partícula com energia positiva $-E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega = +E_{\mathbf{k}}$, onde $\hbar\omega$ é a energia do fóton incidente. Destruir uma partícula com momento \mathbf{k} e carga e é equivalente a criar um buraco com momento $-\mathbf{k}$ e carga $-e$, já que o buraco é a ausência da partícula. Assim, a corrente elétrica transportada pela quase-partícula formada pelo par partícula-buraco no processo descrito acima é igual a $e(\mathbf{k}) + (-e)(-\mathbf{k}) = 2e\mathbf{k}$, enquanto que a corrente de energia da quasepartícula é igual a $E_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) + (E_{\mathbf{k}})(-\mathbf{k}) = 0$. A corrente de energia do par é portanto zero por causa da simetria de partícula-buraco do sistema.

7.2.1 Lei de Wiedemann-Franz

É importante verificar se a fase normal CDW obedece à relação DC geral

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\kappa(0)}{T\sigma(0)} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2,$$

válida para uma grande classe de materiais, incluindo metais e isolantes. Apesar do limite de baixas temperaturas ser dominado pelas excitações interbanda,

$$\begin{aligned}\sigma_n(\omega) &= \frac{v_F e^2}{2\hbar v_\Delta} \left[1 - 2n\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) \right] - \frac{v_F e^2}{\hbar^2 v_\Delta} \delta(\omega) \int_0^\alpha dE E \frac{\partial n(E)}{\partial E} \\ \xrightarrow{\beta \gg \alpha} & \frac{v_F e^2}{2\hbar v_\Delta} \tanh\left(\frac{\beta\omega}{4}\right) + \ln(2) \frac{v_F e^2}{v_\Delta \hbar^2 \beta} \delta(\omega),\end{aligned}\quad (7.28)$$

à frequência zero a condutividade é tipo Drude (repare na ordem dos limites). Tomando a expressão da condutividade térmica (7.14) na fase CDW,

$$\begin{aligned}\kappa_n(\omega) &= -\frac{v_F}{\hbar^2 v_\Delta T} \delta(\omega) \int_0^\alpha dE E^3 \frac{\partial n(E)}{\partial E} \\ \xrightarrow{\beta \gg \alpha} & 9\zeta(3) \frac{v_F k_B}{2\hbar^2 v_\Delta \beta^2} \delta(\omega),\end{aligned}$$

A parte de Drude da condutividade CDW segue a dependência com a temperatura da lei de Weidemann-Franz,

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\kappa_n(0)}{T \sigma_n(0)} = \frac{9\zeta(3)}{2 \ln(2)} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2,$$

porém com a constante numérica $\frac{9\zeta(3)}{2 \ln(2)} \cong 7.8$.

A inversão da ordem dos limites em ω e T leva a uma aparente violação da lei de Weidemann-Franz pela parte interbanda do espectro de excitações (como sugerem os autores da Ref. [101]), que domina o regime de baixas temperaturas na condutividade óptica, mas que é ausente na condutividade térmica. Nesse caso, surge um comportamento anômalo na condutividade óptica à temperatura zero

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(\omega, T = 0) = \frac{v_F e^2}{2\hbar v_\Delta}. \quad (7.29)$$

Essa violação deve ser vista com reserva. Vamos examinar isso um pouco melhor. Em primeiro lugar, ela aconteceria apenas a $T = 0$, considerando o limite $T \ll \omega$, já que relações do tipo Wiedemann-Franz são válidas como respostas a campos DC. À temperatura finita, o limite $\omega = 0$ da Eq. (7.28) leva a uma resposta tipo Drude, que satisfaz a lei empírica. Esse comportamento singular parece sugerir que há uma diferença essencial na condutividade dependendo da ordem em que os canais de excitação térmica e os processos de absorção de fótons são suprimidos. Considere o experimento ideal em que um cristal bombardeado com fótons é lentamente resfriado até o zero absoluto. Nessa situação, os canais de excitação térmica foram completamente desligados, e a resposta da condutividade dada pela Eq. (7.28) passa a ser uma constante independente da energia dos fótons incidentes. É bastante claro pela Fig. 7.1 que os processos que promovem elétrons de uma banda para a outra mediados pela absorção de um fóton são permitidos para qualquer energia, exceto em $\omega = 0$, onde não há transição alguma. O limite “anômalo” em questão

envolve transições entre estados eletrônicos mediadas por espalhamento de fótons com frequências cada vez menores, porém muito maiores que a escala de energia do sistema, $\omega/(k_B T) \gg 1$. Nesse limite, a energia das excitações de quase-partícula não tem escala definida em $T = 0$. Por isso, a inversão da ordem dos limites não representa uma violação da lei de Wiedmann-Franz, cuja validade é restrita ao regime oposto $\omega \ll k_B T$, onde o limite DC é bem definido independentemente da temperatura.

7.2.2 Efeito de impurezas na fase normal CDW

A separação clara entre o setor AC do termo de Drude é causada pela ausência de canais de espalhamento eletrônico. Com isso, o tempo de decaimento τ das excitações de quase-partícula é infinito e a resistividade vai a zero, como num condutor perfeito, mesmo na fase normal. Este comportamento não é muito realista e por isso é conveniente introduzir centros de espalhamento na Hamiltoniana para observar o efeito sobre a condutividade a $\omega = 0$. O espalhamento de impurezas provoca uma incerteza sobre o momento, cujo efeito prático é “borrar” os pontos de Dirac [101]. Assim, as funções $\delta(\omega)$ são substituídas por uma função Lorenziana $(\tau/\pi)/(1+\omega^2\tau^2)$ com largura definida por τ . Isso pode ser feito introduzindo um potencial aleatório, local e isotrópico de espalhamento,

$$\langle V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}') \rangle = |V_0|^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

e calculando as correções de autoenergia dos elétrons, $\tilde{\omega}_n = \omega_n + i \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(i\omega_n)$. Em ordem mais baixa, a autoenergia Σ é dada em termos da função de Green [72],

$$\begin{aligned} \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(i\omega_n) &= |V_0|^2 \sum_{\mathbf{k}} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k}, i\tilde{\omega}_n) \\ &= |V_0|^2 \frac{v_F}{v_\Delta} \int d^2\bar{k} \frac{i\omega_n - \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(i\omega_n) + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}}}{\left[i\omega_n - \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(i\omega_n) \right]^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2}. \end{aligned} \quad (7.30)$$

Na fase normal CDW, o cálculo auto-consistente da auto-energia no limite de $i\omega_n \rightarrow 0$ é bastante simples, uma vez que os termos não diagonais não contribuem para a autoenergia. Isto pode ser facilmente verificado pela Eq. (7.30), notando que $\overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}} \propto \tau_0 \vec{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{k}}$ é igual a zero quando integrada no volume. Neste caso, vamos definir a quantidade igual ao inverso do tempo de decaimento $\Gamma = 1/(2\tau) = i\text{Im}[\text{Tr} \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(i\omega_n \rightarrow 0)]$ (com $\text{Re} \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(i\omega_n \rightarrow 0) = 0$), e que obedece à Eq. (7.30)

$$\Gamma = \Lambda \exp \left[-2\pi v_F v_\Delta / |V_0|^2 \right],$$

onde Λ é o momento de corte do cone. Tomando a continuação analítica $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$, a função espectral associada à função de Green nos dois casos é igual à

$$\overleftrightarrow{A}(\mathbf{k}, \omega) = \Gamma \frac{\omega^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 + \Gamma^2 + 2\omega v_F \tau_0 \vec{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{[(\omega - \omega_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma^2][(\omega + \omega_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma^2]}. \quad (7.31)$$

Como a desordem é isotrópica, as correções de vértice (que levam à Eq. de Boltzmann do transporte) são iguais a zero. A condutividade óptica (7.14) é dada em termos da função espectral acima por [98]

$$\sigma_{\perp}(\omega) = \frac{v_F^2 e^2}{\hbar \omega} \text{Tr} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \overleftrightarrow{A}(\mathbf{k}, \nu) \tau_0 \sigma_3 \overleftrightarrow{A}(\mathbf{k}, \nu + \omega) \tau_0 \sigma_3 [n(\nu) - n(\nu + \omega)], \quad (7.32)$$

Calculando o traço no limite de $\omega \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} \sigma_{\perp}(0) &= -4 \frac{v_F^2}{\hbar} e^2 \Gamma^2 \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\partial n(\nu)}{\partial \nu} \\ &\quad \times \frac{(\omega_{\mathbf{k}}^2 + \Gamma^2)(\nu^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 + \Gamma^2)}{[\omega_{\mathbf{k}}^2 + \Gamma^2][\omega_{\mathbf{k}}^2 + \Gamma^2][(\nu - \omega_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma^2][(\nu + \omega_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma^2]}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

À temperatura zero, a derivada na distribuição de Fermi é igual a $-\delta(\nu)$, e portanto:

$$\sigma_{\perp}(0) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \frac{v_F}{v_{\Delta}}.$$

Note que ao contrário do caso limpo, a resistividade com impurezas a $T = 0$ é finita e independe das características dos centros espalhadores. A condutividade neste caso tem um comportamento universal e mostra que a desordem gera uma densidade de estados finita nos nós, independente do modelo de espalhamento utilizado. Este resultado foi demonstrado por Lee [99] no contexto dos supercondutores com um parâmetro de ordem com simetria d e por Yang *et al.* [101] para a fase de pseudo-gap nos HTc, também com simetria d .

Capítulo 8

Efeito Meissner

Vamos calcular o efeito do campo magnético no limite não local.

8.1 Rigidez de London

A eletrodinâmica não local é descrita pelo limite de London $\mathbf{A}(\mathbf{k}) \rightarrow \mathbf{A}_0 = \text{const.}$, segundo a hipótese de que os campos variam muito lentamente em relação à escala típica do sistema, definida pelo comprimento de coerência ξ . Nesse limite, a corrente \mathbf{j} e o potencial vetor obedecem à equação de London

$$\langle j_i \rangle = j_i^{CM} + Q_{ij} A_j,$$

válida no calibre de Coulomb $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A} = 0$, onde \mathbf{j}^{CM} é a corrente associada ao momento do centro de massa do par. Para todos os efeitos, vamos descontar essa corrente e considerar somente a resposta ao campo magnético. Para calcular o Kernel de London Q_{ij} , ao invés de escrever o operador densidade de corrente (7.8), vamos propor um cálculo mais geral, estendendo a estrutura de banda da CDW além da aproximação do cone. Voltando ao cap. 3, vamos partir da Hamiltoniana CDW com uma estrutura de banda estendida

$$H_{CDW} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) [\epsilon_{\mathbf{k}} \sigma_3 + \Delta_{c\mathbf{k}} \sigma_1] \Psi_{\sigma}(\mathbf{k}),$$

com dispersões $\epsilon_{\mathbf{k}}$ e $\Delta_{c\mathbf{k}}$ quaisquer, porém *anti-simétricas* em relação aos nós da superfície de Fermi. A dispersão das quase-partículas no sistema normal tem a forma $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{c\mathbf{k}}^2}$. Introduzindo o campo magnético através da substituição de Peierls modificada (7.7), a expansão da função $\epsilon(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A})$ no potencial vetor deve ser separada nas ordens simétricas e anti-simétricas em k ,

$$\epsilon(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}) = [\epsilon^{(0)}(\mathbf{k}) + \epsilon^{(2)}(\mathbf{k}) + \dots] \tau_0 + [\epsilon^{(1)}(\mathbf{k}) + \epsilon^{(3)}(\mathbf{k}) + \dots] \tau_3.$$

O mesmo se aplica à dispersão da CDW $\Delta_c(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A})$. Por conveniência, vamos definir o momento $\tilde{k} \equiv \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \tau_3 \mathbf{A}$, que incorpora o campo magnético e a notação $\partial^i \equiv \frac{\partial}{\partial k_i}$ para as

derivadas no momento. As definições de covariância do Apêndice A.1 são desnecessárias aqui. Vamos considerar que i é apenas um índice, com $\partial_i = \partial^i \equiv \nabla_{\mathbf{k}}$ e empregar a notação de Einstein.

Na fase supercondutora, a Hamiltoniana generalizada tem a forma:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) [\epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}\tau_0\sigma_3 + \Delta_{c\tilde{\mathbf{k}}}\tau_0\sigma_1 + \Delta_s\tau_1\sigma_2] \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \left[\left(\epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A_i \partial^i \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 A_i A_j \partial^i \partial^j \epsilon_{\mathbf{k}} \right) \tau_0 \sigma_3 \right. \\ &\quad \left. + \left(\Delta_{c\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A_i \partial^i \Delta_{c\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 A_i A_j \partial^i \partial^j \Delta_{c\mathbf{k}} \right) \tau_0 \sigma_1 + \Delta_s \tau_1 \sigma_2 \right] \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) + O(A^3), \end{aligned} \quad (8.1)$$

com a dispersão total definida por $E_{\mathbf{k}}^2 = \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{c\mathbf{k}}^2 + \Delta_s^2$.

O operador densidade de corrente é dado por

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{j}_i(\mathbf{k}) &= -c \nabla_{\mathbf{A}} H \\ &= \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \left[\frac{e}{\hbar} \left(\partial^i \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A_j \partial^i \partial^j \epsilon_{\mathbf{k}} \right) \tau_0 \sigma_3 + \frac{e}{\hbar} \left(\partial^i \Delta_{c\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A_j \partial^i \partial^j \Delta_{c\mathbf{k}} \right) \tau_0 \sigma_1 \right] \Psi(\tilde{\mathbf{k}}). \end{aligned}$$

Calculando o valor esperado $\langle \overleftrightarrow{j}_i \rangle$ em primeira ordem em \mathbf{A} (ver detalhes no Apêndice D), o Kernel de London é igual a:

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= -2 \frac{e^2}{\hbar^2 c} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left[(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}})(\partial_j \epsilon_{\mathbf{k}}) + (\partial_i \Delta_{c\mathbf{k}})(\partial_j \Delta_{c\mathbf{k}}) \right] \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \partial_i \partial_j \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{\Delta_{c\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \partial_i \partial_j \Delta_{c\mathbf{k}} \right) [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] \right\}. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Tanto na fase normal CDW quanto na fase supercondutora, as propriedades não-locais válidas no limite hidrodinâmico em $q \rightarrow 0$ não dependem dos detalhes do momento de corte Λ , e por isso o podemos tomar o limite $\Lambda \rightarrow \infty$ sem que nenhum efeito adicional apareça no sistema. Entretanto, o método das funções de Green leva a alguns resultados espúrios no ultravioleta por não levar em conta a zona de Brillouin. Para ver isso, vamos considerar a Hamiltoniana do sistema normal dos elétrons na banda da CDW :

$$\begin{aligned} H_{CDW} &= \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) [\epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}\sigma_3 + \Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}\sigma_1] \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} E_{\tilde{\mathbf{k}}} \bar{\Psi}^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \sigma_3 \bar{\Psi}(\tilde{\mathbf{k}}), \end{aligned}$$

após uma diagonalização conveniente numa base de autoestados de partícula-buraco com autovalores $\pm E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$. Expandindo a Hamiltoniana até segunda ordem em A (vamos definir $\frac{e}{\hbar c} \rightarrow 1$ por simplicidade), o kernel de London associado à estrutura de banda da CDW é dado pela Eq. (8.2), bastando eliminar os termos em Δ_c na expressão e fazer a substituição

$\epsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow E_{\mathbf{k}}$. A corrente nesse caso é igual a:

$$\begin{aligned}
-\langle j_i^N \rangle &= A_j \sum_{\mathbf{k}} \left\{ (\partial_i E_{\mathbf{k}})(\partial_j E_{\mathbf{k}}) \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] + (\partial_i \partial_j E_{\mathbf{k}}) [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] \right\} \\
&A_j \sum_{\mathbf{k}} \{ (\partial_j E_{\mathbf{k}}) \partial_i [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] + (\partial_i \partial_j E_{\mathbf{k}}) [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] \} \\
&= A_j \sum_{\mathbf{k}} \partial_i \{ (\partial_j E_{\mathbf{k}}) [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] \}. \tag{8.3}
\end{aligned}$$

Pelo mesmo argumento, a Eq. (8.3) é igual a zero se $i \neq j$ ($i, j = 1, 2$), mas ela resulta num termo de superfície não nulo no outro caso quando $i = j$,

$$\langle j_i^N \rangle = A_j \delta_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \left[\frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_i} \tanh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right]_{k_i=-\infty}^{\infty}, \quad (i \neq z)$$

com $z = 1, 2$, que diverge no ultravioleta para qualquer dispersão monotonamente crescente, como no caso de elétrons livres. Naturalmente, a integrabilidade pode ser obtida introduzindo a periodicidade da zona de Brillouin nas bandas ϵ and Δ , de forma que $\langle j_i^N \rangle = 0$. Para curar estas divergências espúrias, vamos seguir o argumento de Landau [100]. Uma vez que o kernel em $\Delta_s = 0$ é zero porque não existem correntes diamagnéticas induzidas pelo campo, não há nenhum efeito físico em subtrair o kernel supercondutor do kernel na fase normal, resultando em

$$\langle j_i \rangle = [Q_{ij}(\Delta_s) - Q_{ij}(0)] A_j. \tag{8.4}$$

8.1.1 Comprimento de penetração

De acordo com a discussão apresentada na sec. 7.1, a ausência dos estados de alta energia da banda leva ao aparecimento de um efeito anômalo na região de baixas temperaturas, ligado à supressão do peso espectral diamagnético. Vamos investigar isso um pouco melhor dentro da aproximação do cone, $\epsilon_{\mathbf{k}} \sim \hbar v_F k_{\perp}$ e $\Delta_{c\mathbf{k}} \sim \hbar v_{\Delta} k_{\parallel}$. Integrando na zona de Brillouin $[-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}]$ na direção normal aos planos supercondutores, com d a distância entre os planos, vamos encontrar

$$\begin{aligned}
\langle j_{\perp} \rangle &= [Q_{\perp}(\Delta_s) - Q_{\perp}(0)] A_{\perp} \\
&= v_F^2 \beta \frac{e^2}{\hbar^2 c} \sum_{\mathbf{k}} \left[\operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) - \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right)_{\Delta_s=0} \right] A_{\perp} \\
&= -\frac{2e^2 v_F}{\pi d \hbar^2 v_{\Delta} c} \left\{ \Delta_s \frac{e^{\beta \Delta_s}}{e^{\beta \Delta_s} + 1} - \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{1 + e^{\beta \Delta_s}}{2} \right] \right\} A_{\perp}.
\end{aligned}$$

Na teoria de London, o kernel é escrito em termos do comprimento de penetração λ por

$$Q_{ij} = -\frac{c}{4\pi \lambda_i^2} \delta_{ij},$$

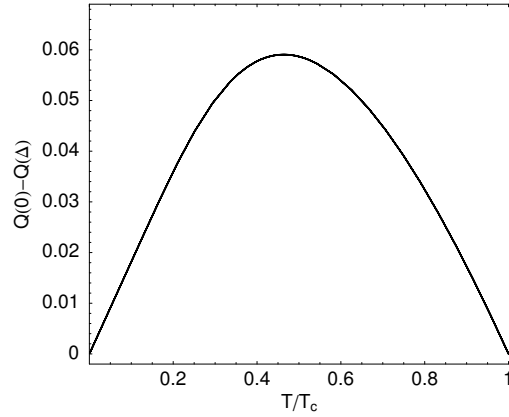


Figura 8.1: Comportamento do kernel de London [em unidades de $e^2 v_F / (2\pi d \hbar^2 v_\Delta c)$] com a temperatura na aproximação do cone.

e portanto

$$\lambda_{\perp}^2(\beta) = \frac{\hbar^2 c^2 v_{\Delta} d}{8e^2 v_F} \left\{ \Delta_s \frac{e^{\beta \Delta_s}}{e^{\beta \Delta_s} + 1} - \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{1 + e^{\beta \Delta_s}}{2} \right] \right\}^{-1}$$

$$\xrightarrow{\beta \rightarrow \beta_c} \frac{\hbar^2 c^2 v_{\Delta} d}{e^2 v_F} \frac{1}{\beta_c \Delta_s^2}.$$

O comprimento de penetração na direção λ_{\parallel} é simétrico, bastando substituir $v_F \leftrightarrow v_{\Delta}$. O limite de temperatura zero $\lambda_{\perp}^{-1}(\infty) = 0$ é obviamente incorreto, e indica a anomalia do peso espectral verificada pela regra de soma dos osciladores (ver Fig. 7.3), como mostra a Fig. 8.1. Perto da temperatura crítica, no entanto, o artifício que cura as divergências no ultra-violeta definido pela Eq. (8.4) emula o efeito diamagnético dos estados de alta energia, reproduzindo corretamente o limite de campo médio para o comprimento de penetração $\lambda \propto \Delta_s^{-1}$. Vamos retomar este tópico mais uma vez na sec. 9.7, quando analisarmos os efeitos do bolso.

Capítulo 9

Efeitos do bolso

A incorporação do bolso no modelo microscópico desenvolvido no capítulo 6 parece ser uma condição necessária para a descrição dos TMDs em bases mais reais. Conforme uma discussão feita no capítulo 4, tanto a dopagem quanto a transferência coerente de elétrons entre os planos induzem mudanças na densidade de estados na superfície de Fermi. Em outras palavras, esses efeitos deslocam o potencial químico dos pontos de Dirac, dando origem a um bolso. Introduzindo o termo de potencial químico

$$\begin{aligned} -\mu \sum_{\sigma,a} \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{a\sigma}(\mathbf{k}) &= -\mu \sum_a \left(\psi_{a\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k}) - \psi_{a\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \psi_{a\downarrow}(-\mathbf{k}) \right) - 2\mu \\ &= -\mu \Psi^\dagger(\mathbf{k}) \tau_3 \sigma_0 \Psi(\mathbf{k}) - 2\mu, \end{aligned} \quad (9.1)$$

na Hamiltoniana (6.7), ou seja:

$$\Psi^\dagger(\mathbf{k}) \left[\hbar v_F k_\perp \tau_0 \sigma_3 + \hbar v_0 k_\parallel \tau_0 \sigma_1 + \Delta_s \tau_1 \sigma_2 - \mu \tau_3 \sigma_0 \right] \Psi(\mathbf{k}),$$

o espectro de energia passa a ser

$$\pm E_{\mathbf{k}} \equiv \pm \hbar \omega_{\mathbf{k}, \pm \mu} = \pm \sqrt{(\hbar v_F \bar{k} \pm \mu)^2 + \Delta_s^2}. \quad (9.2)$$

$$\xrightarrow{\Delta_s \rightarrow 0} \begin{cases} \pm \hbar v_F \bar{k} + \mu & (\text{ramo tipo buraco}) \\ \pm \hbar v_F \bar{k} - \mu & (\text{ramo tipo partícula}). \end{cases} \quad (9.3)$$

Não é difícil ver que os dois ramos acima, no limite de gap zero, recobrem fisicamente os autovalores $\pm \hbar v_F \bar{k} - \mu$ do bolso no estado normal, sem o espaço de Nambu. Na verdade, o aparecimento do novo ramo (tipo *buraco*) na fase normal tem como origem a constante de energia -2μ da Eq. (9.1), desprezada na Hamiltoniana. Para verificar esta propriedade, vamos calcular a energia total do estado normal com o bolso (sem o spin), $E_N(\mu)$, e provar que $E_N(\mu) = E_N(-\mu)$,

exceto por uma constante irrelevante

$$-\sum_{\mathbf{k}} 2\mu = -2\alpha g_c^{-1} V \mu,$$

integrada no volume. Escrevendo a Hamiltoniana CDW na forma segundo quantizada (4.5), a energia total é

$$E_N(\mu) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[(\hbar v_F \bar{k} - \mu) \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_0 - (\hbar v_F \bar{k} + \mu) \langle b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_0 \right],$$

com a e b representando operadores de criação de partículas na banda de cima e de baixo do cone, respectivamente, onde

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle_0 &= \theta(\mu) n_{\mathbf{k}} \\ \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \rangle_0 &= \theta(-\mu) (1 - n_{\mathbf{k}}) + \theta(\mu), \end{aligned}$$

são as ocupações definidas em termos da distribuição de Fermi $n_{\mathbf{k}} = (e^{\beta \hbar v_F (\bar{k} - k_F^*)} + 1)^{-1}$. Assim,

$$\begin{aligned} E_N(\mu) &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (\hbar v_F \bar{k} - \mu) \theta(\mu) n_{\mathbf{k}} - (\hbar v_F \bar{k} + \mu) [\theta(-\mu) (1 - n_{\mathbf{k}}) + \theta(\mu)] \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \{ \hbar v_F \bar{k} [\theta(\mu) n_{\mathbf{k}} - \theta(-\mu) (1 - n_{\mathbf{k}}) - \theta(\mu)] \\ &\quad - \mu [\theta(\mu) n_{\mathbf{k}} + \theta(-\mu) (1 - n_{\mathbf{k}}) + \theta(\mu)] \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \{ \hbar v_F \bar{k} (n_{\mathbf{k}} - 1) - \mu [n_{\mathbf{k}} \sigma(\mu) + 1] \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \{ \hbar v_F \bar{k} (n_{\mathbf{k}} - 1) - |\mu| n_{\mathbf{k}} \} - \sum_{\mathbf{k}} \mu \\ &= E(-\mu) - \sum_{\mathbf{k}} 2\mu, \end{aligned} \tag{9.4}$$

provando a afirmação anterior.

A dispersão da fase supercondutora tem quatro ramos, indexados pelos dois ramos usuais \pm associados à abertura do gap, e dois ramos de partícula-buraco $\pm\mu$ relacionados ao bolso. Na fase normal, os ramos de partícula-buraco são fisicamente equivalentes, exceto por uma diferença de energia igual à energia do bolso. No caso em que o bolso é formado por buracos, o ramo físico que descreve qualitativamente as excitações de quase-partícula é aquele cujo cone tem o vértice acima da energia de Fermi, como indicado pela linha sólida na Fig. 9.1. Com a abertura do gap, a identificação dos ramos que descrevem fisicamente os processos de excitação através do gap é feita com aqueles que recuperam o ramo tipo buraco da fase normal no limite de gap zero (ver Fig. 9.1). Note que o gap de absorção óptica entre as duas bandas (representadas pela linha sólida) é $2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}$ e não $2\Delta_s$, como seria mais usual. As linhas tracejadas indicam portanto o ramo deslocado pela formação de um bolso de partículas na base do ramo de cima do

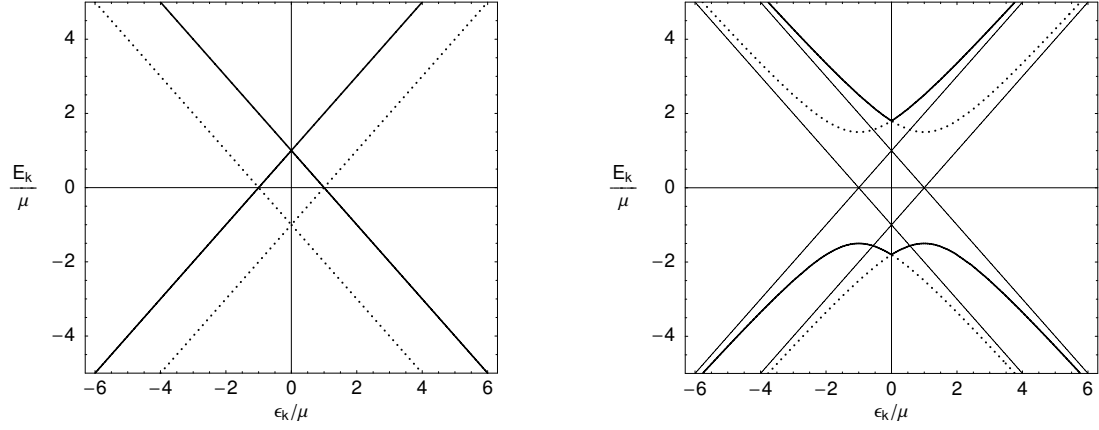


Figura 9.1: À esquerda: Dispersão dos férmions de Dirac no bolso. À direita: espectro com a abertura do gap para $\Delta_s = \frac{3}{2}\mu$. Cada uma das bandas tem dois ramos $\pm\mu$, indicados pelas linhas sólida e pontilhada.

cone. Os dois ramos devem ser fisicamente equivalentes entre si, a menos de uma constante de energia. Por conveniência, vamos assumir que $\mu > 0$ daqui em diante, uma vez que o caso $\mu < 0$ é simétrico.

9.1 Equação do gap

Definindo o tensor da dispersão

$$\overleftrightarrow{\omega}_{\mathbf{k}} \equiv v_F k_{\perp} \tau_0 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{\parallel} \tau_0 \sigma_1 + \hbar^{-1} \Delta_s \tau_1 \sigma_2 - \hbar^{-1} \mu \tau_3 \sigma_0,$$

vamos calcular o propagador do estado SC com o bolso usando o mesmo artifício utilizado na dedução da função de Green (6.9). Explorando a anti-comutatividade das matrizes de Pauli,

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{G}(\omega_n, \mathbf{k}) &= [i\omega_n - \overleftrightarrow{\omega}_{\mathbf{k}}]^{-1} \\ &= - (i\omega_n + \overleftrightarrow{\omega}) \frac{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}'^2 + 2\hbar^{-1}\mu (v_F k_{\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{\parallel} \tau_3 \sigma_1)}{[\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},\mu}^2][\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},-\mu}^2]} \end{aligned} \quad (9.5)$$

$$\begin{aligned} &= - (i\omega_n + \overleftrightarrow{\omega}) [\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}'^2 + 2\hbar^{-1}\mu (v_F k_{\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{\parallel} \tau_3 \sigma_1)] \\ &\quad \times \frac{1}{2(\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}'^2)} \left[\frac{1}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},\mu}^2} + \frac{1}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},-\mu}^2} \right], \end{aligned} \quad (9.6)$$

onde

$$\omega_{\mathbf{k}}'^2 = v_F^2 \bar{k}^2 + \hbar^{-2} (\Delta_s^2 + \mu^2).$$

Calculando o traço

$$\text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G} \tau_1 \sigma_2 \right] = -2 \hbar^{-1} \Delta_s \left[\frac{1}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},\mu}^2} + \frac{1}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},-\mu}^2} \right],$$

vamos encontrar uma equação do gap análoga à Eq. (6.10),

$$\begin{aligned} 2|\Delta_s| &= -\frac{g}{\hbar\beta} \sum_{\omega_n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\omega_n, \mathbf{k}) \tau_1 \sigma_2 \right] \\ &= \frac{2g}{\hbar\beta} |\Delta_s| \sum_{\omega_n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[\frac{1}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},\mu}^2} + \frac{1}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},-\mu}^2} \right] \\ &= \frac{gv_F}{v_\Delta} |\Delta_s| \left[\int_0^{s^+} \frac{d\bar{k}}{2\pi} \frac{\bar{k}}{E_{\mathbf{k},\mu}} \tanh\left(\beta \frac{E_{\mathbf{k},\mu}}{2}\right) + \int_0^{s^-} \frac{d\bar{k}}{2\pi} \frac{\bar{k}}{E_{\mathbf{k},-\mu}} \tanh\left(\beta \frac{E_{\mathbf{k},-\mu}}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (9.7)$$

O momento de corte s_\pm define as duas superfícies de energia constante,

$$\alpha^2 \equiv \hbar^2 v_F^2 \Lambda^2 = (\hbar v_F s_\pm \pm \mu)^2 + \Delta_s^2 = \text{const}. \quad (9.8)$$

Como foi discutido no cap. 6, este momento de corte não conserva o número de estados da fase normal. Ele será convenientemente empregado nas aplicações onde a conservação exata não é essencial. É preciso lembrar novamente que esta aproximação é correta se μ e Δ_s forem pequenos em comparação com a energia de corte do cone α , que é na verdade a região do espaço de parâmetros onde a contribuição dos estados de alta energia ($> \alpha$) pode ser ignorada.

9.1.1 Temperatura zero

Para analisar a equação do gap, vamos começar pelo limite $T \rightarrow 0$ para entender como o bolso afeta o ponto crítico quântico em $g = g_c$. Nesse limite, a equação do gap fica:

$$\begin{aligned} 2\Delta_s &= \frac{gv_F}{v_\Delta} \Delta_s \left[\int_0^{s^+} \frac{d\bar{k}}{2\pi} \frac{\bar{k}}{E_{\mathbf{k},\mu}} + \int_0^{s^-} \frac{d\bar{k}}{2\pi} \frac{\bar{k}}{E_{\mathbf{k},-\mu}} \right] \\ &= \frac{g}{2\pi \hbar^2 v_F v_\Delta} \Delta_s \left[2\alpha - 2\sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2} - \mu \ln \left(\frac{\sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2} - \mu}{\sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2} + \mu} \right) \right] \end{aligned} \quad (9.9)$$

Usando o método de reescalar todas as quantidades, vamos definir $x = \Delta_s/\mu$ e

$$h(g) = 2\pi \hbar^2 v_F v_\Delta \frac{(g_c^{-1} - g^{-1})}{\mu}.$$

A equação do gap invariante de escala é

$$F(\Delta_s/\mu, (g_c^{-1} - g^{-1})/\mu) = \sqrt{1+x^2} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sqrt{1+x^2} - 1}{\sqrt{1+x^2} + 1} \right) - h(g) = 0. \quad (9.10)$$

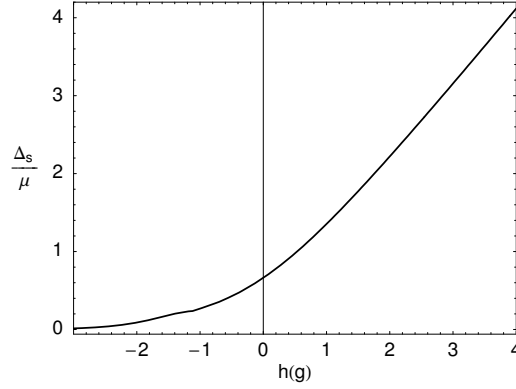


Figura 9.2: Reescalamento da equação do gap à temperatura zero. $h(g_c) = 0$ no acoplamento crítico g_c .

O gráfico da Eq. (9.10) mostra claramente que $\mu \gg \Delta_s(0, g, \mu)$ quando $g < g_c$ (setor de *acoplamento fraco*) e $\mu \ll \Delta_s(0, g, \mu)$ no limite oposto quando $g > g_c$ (setor de *acoplamento forte*). Para simplificar a notação, vamos denotar a função de temperatura zero $\Delta_s(0, g, \mu)$ por $\Delta_{0\mu}$. No limite de acoplamento forte, a Eq. (9.9) pode ser escrita como

$$1 = \frac{g}{2\pi\hbar^2 v_\Delta v_F} \left(\alpha - \Delta_s + \frac{\mu^2}{2\Delta_s} \right), \quad (\mu/\Delta_{0\mu} \ll 1)$$

cuja solução é

$$\Delta_s(0, g, \mu) \xrightarrow{g \gg g_c} \frac{\Delta_0}{2} \left[1 + \sqrt{1 + 2\mu^2/\Delta_0^2} \right], \quad (9.11)$$

onde $\Delta_0 \equiv 2\pi\hbar^2 v_\Delta v_F [g_c^{-1} - g^{-1}]$ é o gap do estado fundamental no caso $\mu = 0$.

Apesar de rigorosamente válida para $g \gg g_c$, a aproximação de acoplamento forte $\mu/\Delta_{0\mu} \ll 1$ é boa para $g \geq g_c$ quando μ é pequeno em relação à energia de corte α do cone. A aproximação mostra desvios assintóticos no setor de acoplamento fraco, como mostra a Fig. 9.2. Neste limite, a equação do gap pode ser expandida em ordem mais baixa em x :

$$\begin{aligned} F(x, h(g)) &\xrightarrow{x \rightarrow 0} 1 + \ln\left(\frac{x}{2}\right) - h(g) \\ &= 1 + \ln\left(\frac{\Delta_s}{2\mu}\right) - 2\pi\hbar^2 v_F v_\Delta \frac{g_c^{-1} - g^{-1}}{\mu} = 0, \end{aligned}$$

resultando em

$$\begin{aligned} \Delta_s(0, g, \mu) &\xrightarrow{g \ll g_c} 2\mu e^{h(g, \mu) - 1} \\ &= 2\mu e^{2\pi\hbar^2 v_F v_\Delta (g_c^{-1} - g^{-1}) \mu^{-1} - 1} \quad (\Delta_{0\mu}/\mu \ll 1). \end{aligned} \quad (9.12)$$

O limite de acoplamento fraco por sua vez é também uma boa aproximação da solução exata

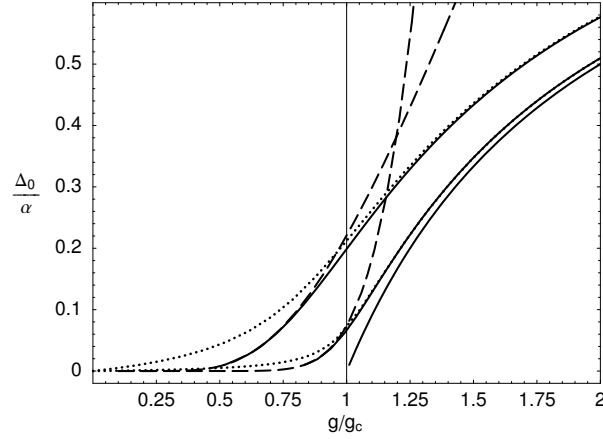


Figura 9.3: Dependência do gap à temperatura zero $\Delta_{0\mu}/\alpha$ com o acoplamento g . Gráficos para $\mu/\alpha = 0, 0.1$ e 0.3 . A linha sólida representa a solução numérica da equação do gap (9.10). A linha pontilhada corresponde à solução analítica em aproximação de acoplamento forte ($\mu \ll \Delta_{0\mu}$) e a linha tracejada à aproximação de acoplamento fraco ($\mu \gg \Delta_{0\mu}$).

para $g \leq g_c$ quando $\mu/\alpha \ll 1$, como indica a Fig 9.3. Essa nomenclatura para os dois regimes de acoplamento (basicamente $g \lesseqgtr g_c$) será utilizada frequentemente daqui em diante. Claramente, as propriedades das quase-partículas do modelo são fortemente influenciadas pelo regime de acoplamento, que separa o setor marginal ($g > g_c$) do setor de “líquido de Fermi” ($g < g_c$), quando o bolso reproduz em parte o papel da superfície de Fermi, reestabelecendo a densidade de estados nos nós.

9.1.2 Temperatura finita

Vamos retornar agora à Eq. (9.7). Definindo $y = \hbar v_F \bar{k}/\mu$, $x = |\Delta_s|/\mu$, $\delta = 2/(\beta\mu)$ e a função

$$1/f(g) = \frac{2\pi\hbar v \Delta v_F}{g\mu},$$

a equação do gap na forma invariante de escala é

$$\begin{aligned} G(|\Delta_s|/\mu, g\mu, g_c\mu, \beta\mu) &\equiv \frac{1}{f(g)} - \frac{1}{2} \int_0^{y^-} dy \frac{y}{\sqrt{(y-1)^2 + x^2}} \tanh\left(\delta^{-1} \sqrt{(y-1)^2 + x^2}\right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_0^{y^+} dy \frac{y}{\sqrt{(y+1)^2 + x^2}} \tanh\left(\delta^{-1} \sqrt{(y+1)^2 + x^2}\right) \\ &= 0, \end{aligned}$$

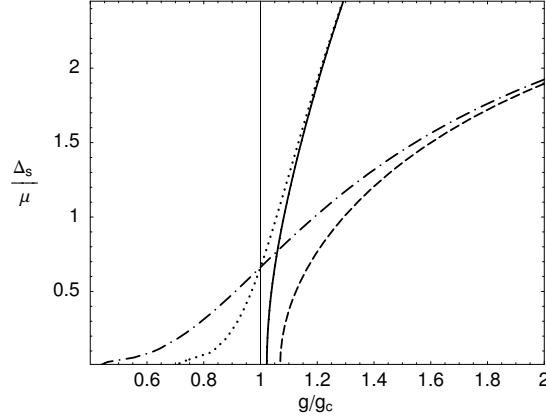


Figura 9.4: Reescalonamento da equação do gap à temperatura finita: Δ_s/μ vs. g/g_c . Linha tracejada ($\delta = 1, \mu/\alpha = 0.2$), sólida ($\delta = 1, \mu/\alpha = 0.1$), ponto-tracejada ($\delta = 0.01, \mu/\alpha = 0.2$) e pontilhada ($\delta = 0.01, \mu/\alpha = 0.1$).

onde y_{\pm} satisfaz a relação (9.8), que define a superfície de energia constante,

$$\frac{1}{f^2(g_c)} = (y_{\pm} \pm 1)^2 + x^2.$$

Manipulando a equação do gap (9.7) através da substituição de variável $\nu = \hbar v_F \bar{k} \pm \mu$, ela pode ser reescrita numa forma mais conveniente

$$\begin{aligned} 2\Delta_s &= \frac{g v_F |\Delta_s|}{2\pi \hbar v_{\Delta}} \left[\int_0^{s^+} d\bar{k} \frac{\bar{k}}{E_{\mathbf{k},\mu}} \tanh\left(\beta \frac{E_{\mathbf{k},\mu}}{2}\right) + \int_0^{s^-} d\bar{k} \frac{\bar{k}}{E_{\mathbf{k},-\mu}} \tanh\left(\beta \frac{E_{\mathbf{k},-\mu}}{2}\right) \right] \\ &= \frac{g |\Delta_s|}{2\pi \hbar^2 v_{\Delta} v_F} \left\{ \frac{4}{\beta} \ln \left[\cosh(\beta\alpha/2) \operatorname{sech}\left(\beta \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}/2\right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \mu \int_{-\mu}^{\mu} d\nu \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + \Delta_s^2}} \tanh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\nu^2 + \Delta_s^2}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (9.13)$$

No limite de acoplamento forte,

$$2\Delta_s \xrightarrow{\mu/\Delta_0 \rightarrow 0} \frac{g\Delta_s}{2\pi \hbar^2 v_{\Delta} v_F} \left\{ \frac{4}{\beta} \ln \left[\frac{\cosh(\beta\alpha/2)}{\cosh(\beta|\Delta_s|/2)} \right] + \frac{\mu^2}{|\Delta_s|} \tanh\left(\frac{\beta}{2} |\Delta_s|\right) \right\}.$$

ou equivalentemente

$$\cosh[\beta\Delta_s/2] e^{-\mu^2 \beta \tanh[\beta\Delta_s/2]/(4|\Delta_s|)} = \cosh[\pi \hbar^2 v_{\Delta} v_F \beta/g_c] e^{-\pi \hbar^2 v_{\Delta} v_F \beta/g}. \quad (9.14)$$

Numa primeira aproximação, vamos substituir o gap dentro da exponencial do potencial químico pela expressão do gap à temperatura zero $\Delta_{0\mu}$. Esta aproximação é bastante razoável,

uma vez que a razão $\tanh[\beta\Delta_s/2]/\Delta_s$ varia muito pouco com a temperatura, mesmo perto da temperatura crítica. Assim, a solução da equação do gap em acoplamento forte pode ser escrita numa boa aproximação como

$$\Delta_s(T, g, \mu) = \frac{2}{\beta} \cosh^{-1} \left[\cosh \left[\pi \hbar^2 v_\Delta v_F \beta / g_c \right] e^{-\pi \hbar^2 v_\Delta v_F \beta / g} e^{\mu^2 \beta \tanh[\beta\Delta_{0\mu}/2]/(4\Delta_{0\mu})} \right].$$

Como o esperado, este resultado recupera corretamente o limite de temperatura zero (9.11).

A análise das Fig. 9.3 e 9.5 mostra que o comportamento da transição de fase paramétrica no acoplamento g é fortemente influenciada pela competição entre os efeitos do bolso e da temperatura. À temperatura zero, o ponto crítico quântico em g_c ($\mu = 0$) é frustrado pelo aumento da densidade de estados do bolso para qualquer valor de μ finito. A $T \neq 0$, a transição paramétrica em g é reestabelecida em algum regime de acoplamento.

A dependência do gap no setor de acoplamento fraco pode ser determinada perto da transição de fase. Utilizando a expansão em termos de $\beta\Delta_s \ll 1$ da integral

$$\int_0^\mu d\nu \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + \Delta_s^2}} \tanh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\nu^2 + \Delta_s^2} \right] \sim \int_0^\mu d\nu \frac{1}{\nu} \tanh \left[\frac{\beta}{2} \nu \right] - \frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\beta^2 \Delta_s^2}{\pi^2}$$

no limite em que $\beta\mu \gg 1$ (os detalhes desta expansão podem ser encontrados na Ref. [18], p. 304), e em seguida expandindo a equação do gap (9.13) em β em torno de β_c , temos

$$\Delta_s(\beta \rightarrow \beta_c, \mu) \xrightarrow{\beta_c \mu \gg 1} \frac{1}{\beta_c} \left[\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} + \frac{1}{2\beta_c^2 \mu^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\beta - \beta_c}{\beta_c}}. \quad (9.15)$$

As expansões de acoplamento fraco acima são corretas na aproximação em que $\tanh(\beta\mu/2) \sim 1$, ou seja, tipicamente $\beta\mu \gtrsim 4$.

9.1.3 Temperatura crítica

Vamos analisar o regime crítico com um pouco mais detalhe. Retornando à Eq. (9.13), e tomando o limite de acoplamento forte $\beta_c \mu \rightarrow 0$, temos

$$\frac{2g_c}{g} \xrightarrow{\beta_c \mu \rightarrow 0} \frac{4}{\beta_c \alpha} \ln \left[\cosh \left(\frac{\beta_c \alpha}{2} \right) \right] + \frac{\mu^2 \beta_c}{2\alpha}.$$

Esta equação pode ser equivalentemente escrita como

$$1 = \cosh \left(\frac{\beta_c \alpha}{2} \right) e^{-\beta_c \alpha g_c / (2g)} e^{\frac{1}{8} \mu^2 \beta_c^2} \quad (9.16)$$

$$\xrightarrow{g > g_c} \frac{1}{2} \exp \left[\frac{\beta_c \alpha}{2} \left(1 - \frac{g_c}{g} \right) \right] e^{\frac{1}{8} \beta_c^2 \mu^2}.$$

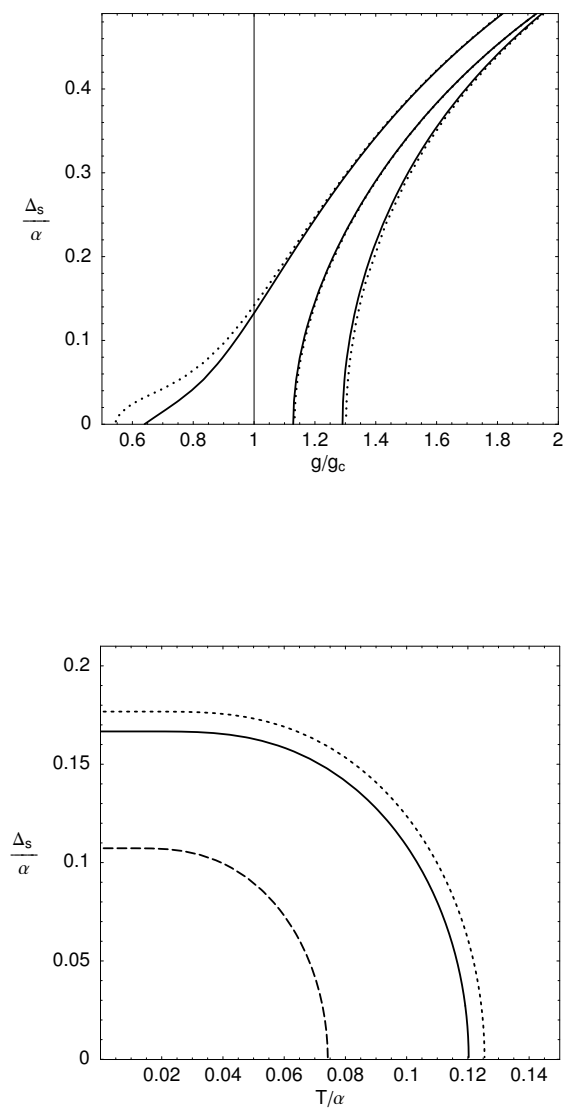


Figura 9.5: Acima: Gap $|\Delta_s|(T, g, \mu)$ em função do acoplamento g/g_c . Linha sólida: solução numérica da equação do gap; linha pontilhada: solução analítica em aproximação de acoplamento forte. Da esquerda para a direita: $k_B T/\alpha = 0.005, 0.1, 0.2$ e $\mu/\alpha = 0.2, 0.2, 0.1$, respectivamente. Abaixo: Dependência do gap com a temperatura. Escalas normalizadas pela energia de corte do cone α . Curva sólida: $\mu/\alpha = 0$, $g/g_c = 1.2$; pontilhada: $\mu/\alpha = 0.06$, $g/g_c = 1.2$; tracejada; $\mu/\alpha = 0.06$, $g/g_c = 1.1$.

Portanto, a temperatura crítica no bolso é

$$\frac{1}{\beta_c(\mu)} = \frac{\alpha}{2 \ln 4} \left[1 - \frac{g_c}{g} + \sqrt{\left(1 - \frac{g_c}{g}\right)^2 + \frac{\mu^2}{\alpha^2} \ln 4} \right]. \quad (9.17)$$

Note que a Eq. (9.16) é exatamente a Eq. (9.14) em T_c .

O resultado da teoria BCS é recuperado no limite oposto $\beta_c \mu \gg 1$, quando a escala de energia do gap é pequena em comparação com a energia do bolso, como num metal. Reescrevendo a equação do gap (9.7) na forma

$$\frac{2g_c}{g} = \frac{4}{\beta_c \alpha} \ln \left[\frac{\cosh(\beta_c \alpha/2)}{\cosh(\beta_c \mu/2)} \right] + \frac{2\mu}{\alpha} \left[\ln \left(\frac{\beta_c \mu}{2} \right) \tanh \left(\frac{\beta_c \mu}{2} \right) - \int_0^{\beta_c \mu/2} d\zeta \frac{\ln \zeta}{\cosh^2 \zeta} \right]$$

após uma integração por partes, então

$$\frac{2g_c}{g} \xrightarrow{\beta_c \mu \gg 1} 2 + \frac{2\mu}{\alpha} \left[\ln \left(\frac{\beta_c \mu \gamma}{\pi} \right) - 1 \right].$$

Esta equação implica que

$$\frac{1}{\beta_c} = \frac{\mu \gamma}{\pi} e^{\alpha(1-g_c/g)\mu^{-1}-1}, \quad (9.18)$$

onde $\ln \gamma \cong 0.577$ é a constante de Euler. Ao contrário da teoria BCS [15], a escala de energia do limite de acoplamento fraco é regulada pelo bolso e não pela frequência de Debye ω_D .

Finalmente, o limite de $\beta \rightarrow \beta_c$ da equação do gap (9.14) no setor de acoplamento forte é

$$\Delta_s(\beta, g, \mu) \xrightarrow{\beta \rightarrow \beta_c} 2 \left[\left(\frac{\Delta_0}{\beta_c} + \frac{\mu^2}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\beta - \beta_c}{\beta_c}}, \quad (9.19)$$

onde $\Delta_0 = \alpha(1 - g_c/g)$ é o gap à temperatura zero em $\mu = 0$.

9.2 Funções termodinâmicas

Introduzindo os dois novos ramos do bolso na função de partição (6.18)

$$Z = e^{-\beta \Omega} = e^{-\beta V g^{-1} \Delta_s^2} \prod_{\mathbf{k}, \gamma, \sigma} \left(1 + e^{-\beta \gamma E_{\mathbf{k}, \sigma \mu}} \right),$$

com $\gamma, \sigma = \pm 1$, o potencial termodinâmico $\Omega = \Omega_0 + g^{-1} V \Delta_s^2$ é igual a

$$\begin{aligned} \Omega_0(\beta) &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \ln [2 + 2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}, \sigma \mu})] \\ &= -\frac{V v_F}{\pi \beta v_\Delta} \sum_{\sigma} \int_0^\Lambda d\bar{k} \bar{k} \ln [2 + 2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}, \sigma \mu})], \end{aligned}$$

analogamente à energia livre (6.19), onde $g^{-1}V\Delta_s^2$ é o termo de campo médio da Hamiltoniana. Da mesma forma, a energia é dada por

$$\begin{aligned} E - g_c^{-1}V\alpha\mu &= \sum_{\mathbf{k}, \gamma, \sigma=\pm 1} \gamma E_{\mathbf{k}, \sigma\mu} n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma \\ &= -\frac{Vv_F}{2\pi v_\Delta} \sum_{\sigma} \int_0^\Lambda d\bar{k} \bar{k} E_{\mathbf{k}, \sigma\mu} \tanh \left[\frac{\beta E_{\mathbf{k}, \sigma\mu}}{2} \right]. \end{aligned}$$

onde $n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma = (e^{\gamma\beta E_{\mathbf{k}, \sigma\mu}} + 1)^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac indexada em σ e nos dois ramos do cone $\gamma = \pm 1$. Do ponto de vista qualitativo, essas funções não introduzem nenhuma novidade em relação ao caso $\mu = 0$ discutido no cap. 6.

Partindo da entropia do eletrônica do gás de Fermi,

$$S = -k_B \sum_{\mathbf{k}, \gamma, \sigma} \left[(1 - n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma) \ln(1 - n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma) + n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma \ln n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma \right],$$

agora somada em σ , o calor específico será

$$\begin{aligned} C_V &= -\beta \frac{dS}{d\beta} \\ &= -k_B \beta \sum_{\mathbf{k}, \gamma, \sigma} \gamma \frac{\partial n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma}{\partial E_{\mathbf{k}, \sigma\mu}} \left(E_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^2 + \frac{\beta}{2} \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \right). \end{aligned} \quad (9.20)$$

Este cálculo foi feito em detalhe na sec. 4.2.1. A variação do calor específico em relação à fase normal é

$$\begin{aligned} \Delta C(\beta, \mu) &= -k_B \frac{\beta^2}{2} \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \gamma \frac{\partial n_{\mathbf{k}, \sigma\mu}^\gamma}{\partial E_{\mathbf{k}, \sigma\mu}} \\ &\xrightarrow{\beta \rightarrow \beta_c} \frac{k_B \beta_c^3}{8\pi \hbar^2 v_\Delta v_F} \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \Big|_{\beta_c} V \int_0^\infty d\epsilon \epsilon \left[\operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta_c(\epsilon + \mu)}{2} \right) + \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta_c(\epsilon - \mu)}{2} \right) \right] \\ &\xrightarrow{\beta_c \mu \ll 1} \frac{k_B \beta_c}{2\pi \hbar^2 v_\Delta v_F} \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \Big|_{\beta_c} V \left(\ln 4 + \frac{\beta_c^2 \mu^2}{4} \right). \end{aligned} \quad (9.21)$$

O último limite é equivalente a dizer que a energia do bolso é pequena em comparação com as outras escalas de energia. A partir da Eq. (9.19), a derivada acima em T_c é igual a

$$\frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \Big|_{T_c} \xrightarrow{\beta_c \mu \ll 1} \frac{d}{d\beta} \left[4 \left(\Delta_0 + \frac{\beta_c \mu^2}{2} \right) (\beta_c^{-1} - \beta^{-1}) \right] = \frac{4}{\beta_c^2} \left(\Delta_0 + \frac{\beta_c \mu^2}{2} \right).$$

O salto no calor específico será

$$\Delta C(\beta_c) \cong \frac{4V}{g_c \alpha} \ln 4 k_B^3 T_c^2 \left(\ln 4 + \beta_c^2 \mu^2 \right). \quad (9.22)$$

Calculando o calor específico da fase normal C_{Vn} através da Eq. (9.20),

$$\begin{aligned} C_{Vn}(\beta) &= \frac{k_B \beta^2 V}{4\pi \hbar^2 v_\Delta v_F} \sum_\sigma \int_0^\alpha d\epsilon \epsilon (\epsilon + \sigma\mu)^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta(\epsilon + \sigma\mu)}{2}\right) \\ &= \frac{k_B V}{2\pi \hbar^2 v_\Delta v_F \beta^2} \left[\int_{\beta\mu}^\alpha d\nu \nu^3 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\nu}{2}\right) + \beta\mu \int_0^{\beta\mu} d\nu \nu^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\nu}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

À temperatura crítica, vamos encontrar

$$C_{Vn}(\beta_c) \xrightarrow{\beta_c \mu \ll 1} \frac{k_B V}{g_c \alpha \beta_c^2} \times \begin{cases} 18\zeta(3) & , \quad \mu\beta_c \ll 1 \\ \frac{2}{3}\pi^2 \beta_c \mu & , \quad \mu\beta_c \gg 1 \end{cases} . \quad (9.23)$$

Combinando as Eq. (9.22) e (9.23), o salto do calor específico no setor de acoplamento forte é igual a

$$\left. \frac{\Delta C_V}{C_{n,V}} \right|_{T_c} = \frac{2 \ln 4}{9\zeta(3)} \left(\ln 4 + \frac{\beta_c^2 \mu^2}{2} \right) \cong 0.35 \left(1 + \frac{\beta_c^2 \mu^2}{2 \ln 4} \right) . \quad (9.24)$$

No limite de acoplamento fraco, a derivada da Eq. (9.15) em T_c é dada por

$$\left. \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \right|_{T_c} \xrightarrow{\beta_c \mu \gg 1} \frac{1}{\beta_c^3} \left(\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} + \frac{1}{2\beta_c^2 \mu^2} \right)^{-1} .$$

A Eq. (9.21) nesse limite é

$$\Delta C_V(\beta, \mu) \xrightarrow{\beta_c \mu \gg 1} \frac{k_B V \beta_c^2 \mu}{2\pi \hbar^2 v_\Delta v_F} \left. \frac{d\Delta_s^2}{d\beta} \right|_{\beta_c} ,$$

e portanto o salto do calor específico para acoplamento fraco é igual a

$$\left. \frac{\Delta C_V}{C_{n,V}} \right|_{T_c} = \frac{3}{2\pi^2} \frac{1}{\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} + \frac{1}{2\beta_c^2 \mu^2}} \leq 1.43 . \quad (9.25)$$

As aproximações que levam à Eq. (9.25) no regime de acoplamento fraco são válidas para $\beta_c \mu \gtrsim 4$ [ver Eq. (9.15)], onde o salto do calor específico é $\gtrsim 1.1$ e converge para o valor BCS no limite de $\beta_c \mu \rightarrow \infty$. Mesmo no limite de acoplamento fraco, esses valores são bem menores que os resultados previstos por modelos de acoplamento forte *não marginais*, como na teoria supercondutora de Eliashberg [102]. A comparação com o valor observado no cristal de NbSe₂ ($\Delta C_V/C_n \sim 2$) indica que ali predomina o cenário usual de acoplamento forte no líquido de Fermi, como alguns autores sugeriram [40, 46, 20]. Já no TaSe₂, a natureza marginal das quase-partículas indica que a história pode ser diferente. Dentro desta perspectiva, o modelo proposto no cap. 3 sugere que o salto do calor específico é fortemente atenuado no limite marginal

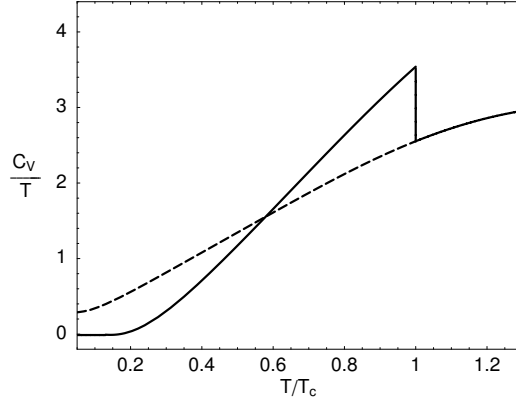


Figura 9.6: Calor específico vs temperatura para $g/g_c = 1.2$ e $\mu/\alpha = 0.05$ (acoplamento forte). C_v em unidades de $Vk_B\alpha g_c^{-1}$.

($\Delta C_V/C_n \sim 0.35$) e aumenta até o valor do limite BCS de líquido de Fermi, quando os bolsos são grandes em comparação com a energia do gap. Entretanto, à medida em que o tamanho do bolso cresce, o *ansatz* de emparelhamento baseado na formação de pares entre os nós da superfície de Fermi, assim como o papel da piezoelectricidade se tornam questionáveis. Por isso, o limite de acoplamento fraco deve ser encarado de forma puramente acadêmica.

9.3 Atenuação de ultra-som

A atenuação de ultra-som é proporcional à função espectral da susceptibilidade de carga definida pela Eq. (6.33)

$$\chi^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_3 \sigma_0 \right], \quad (9.26)$$

com a função de Green (9.5). O cálculo do traço da Eq. (9.26) e a soma sobre as frequências de Matsubara são feitos nos apêndices F.2 e G. A função espectral da susceptibilidade é dada por

$$\begin{aligned} \text{Im} \chi^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= -\frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=\pm 1} \\ &\left\{ (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(E_{+, -\sigma' \mu})) \left[1 + \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu (\epsilon_- - \epsilon_+) - \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} \right] \times \right. \\ &\quad \times \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu})] \\ &+ (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(E_{+, \sigma' \mu})) \left[1 + \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu (\epsilon_- + \epsilon_+) + \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} \right] \times \\ &\quad \times \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu})] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, -\sigma' \mu})) \left[1 - \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu (\epsilon_- - \epsilon_+) - \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} \right] \times \\
& \quad \times \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu})] \\
& + (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, \sigma' \mu})) \left[1 - \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu (\epsilon_- + \epsilon_+) + \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} \right] \times \\
& \quad \times \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \Big\} \tag{9.27}
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
\hbar\omega_{\mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2, \mu} & \rightarrow \hbar\omega_{\pm, \mu} = E_{\pm, \mu}, \\
\hbar v_F(\bar{\mathbf{k}} \pm \bar{\mathbf{q}}/2) & \rightarrow \vec{\epsilon}_{\pm}.
\end{aligned}$$

Pode-se recobrar o caso $\mu = 0$ (6.36) sem muito esforço. No limite de baixas frequências $\omega \ll 2\Delta_s$, temos

$$\begin{aligned}
\text{Im } \chi^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) & \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \frac{\pi}{2} \hbar\omega \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm 1} \left\{ \frac{\partial n(E_{-, \sigma \mu})}{\partial E_{-, \sigma \mu}} \left(1 + \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma \mu (\epsilon_- - \epsilon_+) - \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma \mu} E_{+, -\sigma \mu}} \right) \right. \\
& \quad \times \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \delta(E_{-, \sigma \mu} - E_{+, -\sigma \mu}) \\
& \quad + \frac{\partial n(E_{+, \sigma \mu})}{\partial E_{+, \sigma \mu}} \left(1 + \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma \mu (\epsilon_- + \epsilon_+) + \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma \mu} E_{+, -\sigma \mu}} \right) \\
& \quad \left. \times \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \delta(E_{-, \sigma \mu} - E_{+, \sigma \mu}) \right\}. \tag{9.28}
\end{aligned}$$

O restante do cálculo não é difícil, mas requer alguma atenção. É conveniente definir a quantidade útil

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 = \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2.$$

Vamos analisar como satisfazer o argumento das funções delta separadamente. Se $\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}} = \cos \theta$, a igualdade

$$E_{-, \sigma \mu} - E_{+, \sigma \mu} = (\epsilon_- - \epsilon_+)(\epsilon_- + \epsilon_+ + 2\sigma\mu) = 0$$

é satisfeita se $\epsilon_- = \epsilon_+$ (ie. $\theta = \pm \frac{\pi}{2}$) ou se $\epsilon_- + \epsilon_+ = 2\mu$ ($\sigma = -1$). No último caso, o ângulo θ_0 entre os vetores \mathbf{k} e \mathbf{q} satisfaz à relação $\cos \theta_0 = 2\sigma' \mu \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} / (\epsilon_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{q}})$, com $0 < \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 < \mu^2$ e $\sigma' = \pm 1$ indexando os dois ramos do cosseno. O argumento da outra função delta,

$$E_{-, \sigma \mu} - E_{+, -\sigma \mu} = (\epsilon_- + \epsilon_+)(\epsilon_- - \epsilon_+ + 2\sigma\mu) = 0,$$

é satisfeito somente se $\epsilon_+ - \epsilon_- = 2\sigma\mu$, ou equivalentemente para um certo ângulo θ_1 , onde $\cos\theta_1 = 2\sigma\mu\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}/(kq)$, com $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 > \mu^2$. Empregando a relação (E.6), as funções delta podem ser reescritas como

$$\begin{aligned}\delta(E_{-, \sigma\mu} - E_{+, \sigma\mu}) &= \left| \frac{E_{-, \sigma\mu}}{\epsilon_- + \sigma\mu} \frac{2\epsilon_-}{kq} \right| \delta\left(\theta \pm \frac{\pi}{2}\right) + \\ &\quad + \delta_{\sigma, -1} \theta (\mu - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) \left| \frac{E_{-, \sigma\mu}}{\epsilon_- + \sigma\mu} \frac{2\epsilon_-}{\epsilon_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{q}} \sin\theta_0} \right| \delta(\theta \pm \theta_0) \\ \delta(E_{-, \sigma\mu} - E_{+, -\sigma\mu}) &= \theta (\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \left| \frac{E_{-, \sigma\mu}}{\epsilon_- + \sigma\mu} \frac{2\epsilon_-}{\epsilon_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{q}} \sin\theta_1} \right| \delta(\theta \pm \theta_1).\end{aligned}$$

Além disso, notamos que

$$\epsilon_- = \begin{cases} |\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \sigma'\mu| & , \quad \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} < \mu \\ \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \sigma\mu & , \quad \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} > \mu \end{cases}$$

para os dois casos em que $\theta \neq \pm \frac{\pi}{2}$, e que

$$|\sin\theta_0| = |\sin\theta_1| = \frac{2}{\epsilon_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{q}}} \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2)(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2)}.$$

Definindo a quantidade $\tilde{E}^2 = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_s^2$, depois de alguma álgebra:

$$\begin{aligned}\text{Im}\chi^c(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0, \mu) &= \pi\hbar\omega \sum_{\mathbf{k}, \sigma=\pm 1} \left\{ \frac{\partial n(\tilde{E})}{\partial \tilde{E}} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_s^2}{\tilde{E}^2}\right) \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2}{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 - \mu^2} \right] \times \right. \\ &\quad \times \frac{\tilde{E}}{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \frac{\theta (\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) |\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \sigma\mu|}{\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2)(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2)}} \delta(\theta \pm \theta_1) \\ &\quad + \sum_{\sigma'} \frac{\partial n(\tilde{E})}{\partial \tilde{E}} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_s^2}{\tilde{E}^2}\right) \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2}{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 - \mu^2} \right] \times \\ &\quad \times \frac{\tilde{E}}{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \frac{\delta_{\sigma, -1} \theta (\mu - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) |\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \sigma'\mu|}{\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2)(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2)}} \delta(\theta \pm \theta_0) \\ &\quad + \frac{\partial n(E_{-, \sigma\mu})}{\partial E_{-, \sigma\mu}} \left(1 + \frac{(\epsilon_- + \sigma\mu)^2 - \Delta_s^2}{E_{-, \sigma\mu}^2}\right) \left[\frac{\sqrt{\epsilon_-^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2}}{\epsilon_{\mathbf{q}/2} \epsilon_-} \right] \times \\ &\quad \left. \times \frac{E_{-, \sigma\mu}}{\epsilon_- + \sigma\mu} \delta\left(\theta \pm \frac{\pi}{2}\right) \right\}.\end{aligned}$$

É imediato ver que os dois primeiros termos da soma em k são identicamente zero, uma vez que $\tilde{E}^2 = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_s^2$. Vamos mostrar mais tarde que o análogo desses dois termos com os fatores de coerência da interação de troca dão origem ao pico de Hebel-Slichter de NMR [15]. Integrando

na variável θ , o resultado final é

$$\text{Im } \chi^c(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0, \mu) = \frac{\hbar\omega}{\epsilon_{\mathbf{q}/2}} \frac{v_F}{\pi v_\Delta} \int_0^\Lambda d\bar{k} \bar{k} \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{\partial n(E_{-, \sigma\mu})}{\partial E_{-, \sigma\mu}} \frac{\epsilon_- + \sigma\mu}{\epsilon_- E_{-, \sigma\mu}} \sqrt{\epsilon_-^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2}. \quad (9.29)$$

A atenuação de ultra-som é portanto:

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{q}) &= - \lim_{\omega \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega} \chi^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) \right] \\ &\xrightarrow{q \rightarrow 0} - \frac{1}{v_F \bar{q}} \frac{\lambda_1^2}{\pi \hbar^2 v_\Delta v_F} \sum_{\sigma=\pm 1} \int_0^\alpha d\epsilon \frac{\epsilon}{E_{\sigma\mu}} (\epsilon + \sigma\mu) \frac{\partial n(E_{\sigma\mu})}{\partial E_{\sigma\mu}}. \end{aligned} \quad (9.30)$$

Este resultado é qualitativamente semelhante à Eq. (6.39). A formação do bolso não introduz nenhum efeito novo na atenuação de fônons pelos férmions de Dirac.

9.4 Relaxação de NMR

O termo de potencial químico estendido no espaço de Balian-Werthamer é

$$\begin{aligned} -\mu \sum_{\mathbf{k}, a, \sigma} \psi_{a, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{a, \sigma}(\mathbf{k}) &= -\mu \sum_{\mathbf{k}, a} \left[\psi_{a, \uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{a, \uparrow}(\mathbf{k}) - \psi_{a, \downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{a, \downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \right] - 2\mu \\ &= -\frac{\mu}{2} \sum_{\mathbf{k}, a} \left[\psi_{a, \uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{a, \uparrow}(\mathbf{k}) - \psi_{a, \downarrow}(-\mathbf{k}) \psi_{a, \downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \right. \\ &\quad \left. - \psi_{a, \uparrow}(-\mathbf{k}) \psi_{a, \uparrow}^\dagger(-\mathbf{k}) + \psi_{a, \downarrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{a, \downarrow}(\mathbf{k}) \right] - 2\mu \\ &= -\mu \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \Psi^\dagger(\mathbf{k}) \eta_0 \tau_3 \sigma_0 \Psi(\mathbf{k}) - 2\mu. \end{aligned}$$

O próximo passo é calcular a função de correlação spin-spin com (6.44) com μ finito

$$\chi_{ij}^s(\mathbf{q}, i\omega, \mu) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{1}{2}\text{B.Z.}} \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \eta_i \tau_0 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \eta_j \tau_0 \sigma_0 \right], \quad (9.31)$$

em termos da função de Green $\overset{\leftrightarrow}{G}(k, i\omega_n) = -[i\omega_n - \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}}]^{-1}$ definida pelo tensor dispersão

$$\overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}} = v_F k_\perp \eta_0 \tau_0 \sigma_3 + v_F k_\parallel \eta_0 \tau_0 \sigma_1 - \hbar^{-1} \Delta_s \eta_3 \tau_1 \sigma_2 - \mu \hbar^{-1} \eta_0 \tau_0 \sigma_3,$$

observando atentamente o sinal do termo em Δ_s . Note que o produto $\eta_i \tau_0 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{\omega} \eta_i \tau_0 \sigma_0 = \overset{\leftrightarrow}{\omega}$ para $i = 3$. Para $i = 1, 2$, a anti-comutatividade das matrizes η envolve a troca do sinal do termo do gap, fazendo $\Delta_s \rightarrow -\Delta_s$. Essa troca de sinal faz com que as direções x, y tenham os mesmos fatores de coerência da susceptibilidade de carga, ou seja:

$$\chi_{xx}^s(\mathbf{q}, i\omega, \mu) = \chi_{yy}^s(\mathbf{q}, i\omega, \mu) = \frac{1}{4} \chi^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu).$$

A direção z do espaço de spin, no entanto, preserva os fatores de coerência da interação de troca (como no caso $\mu = 0$, discutido no cap. 6). A função espectral da componente zz do tensor susceptibilidade envolve apenas uma troca de sinal $\Delta_s^2 \rightarrow -\Delta_s^2$ no fator de coerência, em comparação com o caso de carga (9.27). No região do infravermelho, $\omega < 2\Delta_s$:

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_{zz}^s(\mathbf{q}, \omega, \mu) = & -\frac{\pi}{16} \sum_{\mathbf{k}, \sigma=\pm 1} \\ & \left\{ [n(E_{-, \sigma\mu}) - n(E_{+, -\sigma\mu})] \left(1 + \frac{\mu^2 + \Delta_s^2 + \sigma\mu(\epsilon_- - \epsilon_+) - \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma\mu} E_{+, -\sigma\mu}} \right) \right. \\ & \times \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma\mu} - E_{+, -\sigma\mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma\mu} + E_{+, -\sigma\mu})] \\ & + [n(E_{-, \sigma\mu}) - n(E_{+, \sigma\mu})] \left(1 + \frac{\mu^2 + \Delta_s^2 + \sigma\mu(\epsilon_- + \epsilon_+) + \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma\mu} E_{+, \sigma\mu}} \right) \\ & \left. \times \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma\mu} - E_{+, \sigma\mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma\mu} + E_{+, \sigma\mu})] \right\}. \end{aligned}$$

A expressão final é imediata, partindo dos resultados calculados na seção anterior,

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_{zz}^s(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0, \mu) = & \frac{\hbar\omega v_F}{4\pi v_\Delta} \int_0^\Lambda d\bar{k} \bar{k} \left\{ \frac{\partial n(\tilde{E})}{\partial \tilde{E}} \frac{2\Delta_s^2}{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tilde{E}} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2}{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 - \mu^2} \right] \times \right. \\ & \times [\theta(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \theta(\mu - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) \mu] \frac{\theta[(\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2)(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2)]}{\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{q}/2}^2 - \mu^2)(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2)}} \\ & \left. + \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{\partial n(E_{-, \sigma\mu})}{\partial E_{-, \sigma\mu}} \frac{E_{-, \sigma\mu}}{(\epsilon_- + \sigma\mu)} \frac{\sqrt{\epsilon_-^2 - \epsilon_{\mathbf{q}/2}^2}}{\epsilon_{\mathbf{q}/2} \epsilon_-} \right\} \quad (9.32) \end{aligned}$$

Na fase supercondutora, a formação do bolso provoca uma divergência na densidade de estados da superfície de Fermi, que é responsável pelo aparecimento de um pequeno pico de Hebel-Slichter no inverso do tempo de decaimento de NMR (ver Fig. 9.7) no regime de acoplamento forte.

9.5 Condutividade óptica

A presença do bolso não afeta o operador de densidade de carga $\mathbf{j}(\mathbf{k}) = c \nabla_{\mathbf{A}} H$, calculado a partir do termo magnético da Hamiltoniana

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k}) [\hbar v_F k_\perp \tau_0 \sigma_3 + \hbar v_\Delta k_\parallel \tau_0 \sigma_1 + \Delta_s \tau_1 \sigma_2 - \mu \tau_3 \sigma_0] \Psi(\mathbf{k})$$

após a substituição de Peierls modificada (7.7). Como foi discutido, a nova versão dessa substituição leva em conta as características do espaço de Nambu combinadas com a simetria ímpar

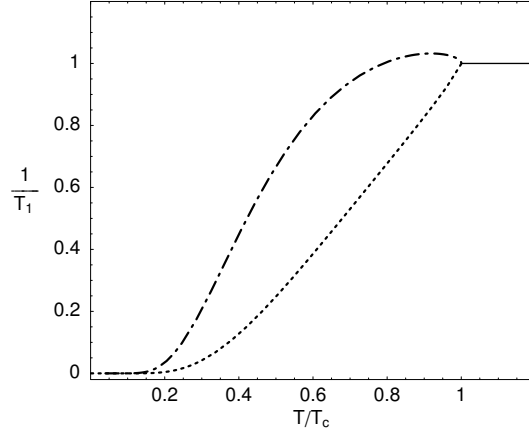


Figura 9.7: Taxa de relaxação de NMR vs. temperatura, para $\mu/\alpha = 0.05$ and $g/g_c = 1.1$. Curva tracejada: relaxação na direção $\hat{\mathbf{b}} = z$ (ou seja, $\chi_{xx} + \chi_{yy}$); ponto-tracejada: relaxação nas direções x e y .

da dispersão. Como no caso $\mu = 0$ [Eq. (7.9)], a função de correlação corrente corrente é

$$\begin{aligned}\Pi_{\perp}^{CC}(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= \frac{v_F^2 e^2}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \right] \\ \Pi_{\parallel}^{CC}(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= \frac{v_{\Delta}^2 e^2}{\hbar^2 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_1 \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_1 \right],\end{aligned}$$

onde $\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$ é a função de Green (9.5). Este cálculo foi feito em detalhe na sec. 9.3 e por isso não será necessário refazê-lo novamente. Comparando as funções de correlação acima com a Eq. (9.26), a parte imaginária de Π^{CC} é idêntica à Eq. (9.27), a menos de um fator, bastando fazer as substituições:

$$\vec{\epsilon}_{-} \cdot \vec{\epsilon}_{+} \rightarrow \begin{cases} \vec{\epsilon}_{-} \cdot \vec{\epsilon}_{+} & , \text{ na direção } \perp \\ -\vec{\epsilon}_{-} \cdot \vec{\epsilon}_{+} & , \text{ na direção } \parallel, \end{cases}$$

com $\vec{\epsilon}$ o vetor complexo definido na sec. 7.1.

Vamos tomar o limite de $q \rightarrow 0$. Nesse limite, $\vec{\epsilon}_{-} \cdot \vec{\epsilon}_{+}$ vai a zero quando integrado angularmente entre $[0, 2\pi]$ [ver Eq. (7.13)]. Assim, vamos encontrar

$$\begin{aligned}\frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{CC}(0, \omega, \mu) &= -\frac{\pi v_F^2 e^2}{2} \left\{ \delta(\omega) \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} \frac{n(E_{\sigma'\mu}) - n(E_{\sigma'\mu} + \sigma \hbar \omega)}{\sigma \hbar \omega} \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E_{\sigma'\mu}^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [n(E_{\mu}) - n(E_{-\mu})] \left(1 - \frac{\epsilon^2 + \Delta_s^2 - \mu^2}{E_{\mu} E_{-\mu}} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + E_{\mu} - E_{-\mu}) \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{\omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [n(E_\mu) - n(-E_{-\mu})] \left(1 + \frac{\epsilon^2 + \Delta_s^2 - \mu^2}{E_\mu E_{-\mu}} \right) \\
& \quad \times \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + E_\mu + E_{-\mu}) \\
& + \frac{1}{\omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma', \sigma} [n(E_{\sigma' \mu}) - n(-E_{+, \sigma' \mu})] \frac{\Delta_s^2}{E_{\sigma' \mu}^2} \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + 2E_{\sigma' \mu}) \left. \right\}. \quad (9.33)
\end{aligned}$$

O último termo pode ser integrado imediatamente usando a identidade

$$d\epsilon \epsilon = dE_{\sigma' \mu} E_{\sigma' \mu} \left(1 - \frac{\sigma' \mu}{\sqrt{E_{\sigma' \mu}^2 - \Delta_s^2}} \right).$$

As duas outras integrais nas funções delta são um pouco mais trabalhosas. Usando a definição $E_{\pm \mu}^2 = (\epsilon \pm \mu)^2 + \Delta_s^2 = E'^2 \pm 2\epsilon \mu$, para satisfazer o argumento da primeira função delta $\sigma \hbar \omega = E_{-\mu} - E_\mu$ (caso 1), é necessário garantir que

$$E_\mu E_{-\mu} = E'^2 - \frac{\hbar^2 \omega^2}{2} > 0, \quad (9.34)$$

e

$$-E_\mu E_{-\mu} = E'^2 - \frac{\hbar^2 \omega^2}{2} < 0 \quad (9.35)$$

no segundo caso, $\sigma \hbar \omega = -E_{-\mu} - E_\mu$. Como nos dois casos $E_\mu E_{-\mu} = \sqrt{E'^4 - 4\epsilon^2 \mu^2}$, substituindo esta relação nas Eq. (9.34) e (9.35), vamos encontrar

$$\epsilon(\omega) = -\sigma \frac{\hbar \omega}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2 \omega^2 - 4\mu^2 - 4\Delta_s^2}{\hbar^2 \omega^2 - 4\mu^2}} \equiv f^{-1}(\sigma \hbar \omega) > 0,$$

sob a condição de que a raiz seja real. Isso é verdade se $\hbar|\omega| < 2\mu$ (caso 1) ou se $\hbar|\omega| > 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}$ (caso 2). Com isso, podemos reescrever as deltas numa forma mais conveniente,

$$\sum_{\sigma} \sigma \delta(\sigma \hbar \omega - f(\epsilon)) = \frac{1}{|f'(\nu_0)|} [\delta(\epsilon + \nu_0) - \delta(\epsilon - \nu_0)], \quad (9.36)$$

onde

$$f'(\epsilon) = \begin{cases} E'_{-\mu} - E'_\mu & = \frac{(\epsilon - \mu)E_\mu - (\epsilon + \mu)E_{-\mu}}{E_\mu E_{-\mu}}, & \text{caso 1} \\ -E'_{-\mu} - E'_\mu & = -\frac{(\epsilon - \mu)E_\mu + (\epsilon + \mu)E_{-\mu}}{E_\mu E_{-\mu}}, & \text{caso 2,} \end{cases} \quad (9.37)$$

e

$$\nu_0 \equiv \frac{\hbar \omega}{2} \sqrt{1 - \frac{4\Delta_s^2}{\hbar^2 \omega^2 - 4\mu^2}}. \quad (9.38)$$

Substituindo as Eq. (9.34)–(9.37) na Eq. (9.33),

$$\begin{aligned}
\sigma_{\perp}(\omega, \mu) &= -\frac{v_F e^2}{2\hbar^2 v_{\Delta}} \delta(\omega) \sum_{\sigma'} \int d\epsilon \epsilon \frac{\partial n(E_{\sigma'\mu})}{\partial E_{\sigma'\mu}} \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E_{\sigma'\mu}^2}\right) \\
&\quad + \frac{2v_F e^2}{\hbar v_{\Delta}} \frac{\Delta_s^2}{\hbar^2 \omega^2} \left[n\left(-\frac{\hbar|\omega|}{2}\right) - n\left(\frac{\hbar|\omega|}{2}\right) \right] \\
&\quad \quad \quad \times \theta\left(\hbar|\omega| - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}\right) \\
&\quad + \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta} \hbar \omega} \left\{ \int d\epsilon \epsilon [n(E_{\mu}) - n(E_{-\mu})] \left(\mu^2 - \frac{\hbar^2 \omega^2}{4}\right) \right. \\
&\quad \quad \quad \times \frac{\theta\left(\mu - \frac{\hbar|\omega|}{2}\right)}{|(\epsilon - \mu)E_{\mu} - (\epsilon + \mu)E_{-\mu}|} [\delta(\epsilon + \nu_0) - \delta(\epsilon - \nu_0)] \\
&\quad \quad + \int d\epsilon \epsilon [n(E_{\mu}) - n(-E_{-\mu})] \left(\frac{\hbar^2 \omega^2}{4} - \mu^2\right) \\
&\quad \quad \quad \times \frac{\theta\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}\right)}{|(\epsilon - \mu)E_{\mu} + (\epsilon + \mu)E_{-\mu}|} [\delta(\epsilon + \nu_0) - \delta(\epsilon - \nu_0)] \left. \right\}, \\
&= \sigma_{\perp}^{DC}(\omega, \mu) + \sigma_{\perp}^{AC}(\omega, \mu)
\end{aligned}$$

Novamente, temos um termo de condutividade tipo Drude,

$$\sigma_{\perp}^{DC}(\omega, \mu) = -\frac{v_F e^2}{2\hbar^2 v_{\Delta}} \delta(\omega) \sum_{\sigma'} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E_{\sigma'\mu}^2}\right) \frac{\partial n(E_{\sigma'\mu})}{\partial E_{\sigma'\mu}}, \quad (9.39)$$

e um termo devido às excitações interbanda,

$$\begin{aligned}
\sigma_{\perp}^{AC}(\omega, \mu) &= \frac{2v_F e^2}{\hbar v_{\Delta}} \frac{\Delta_s^2}{\hbar^2 \omega^2} \left[n\left(-\frac{\hbar|\omega|}{2}\right) - n\left(\frac{\hbar|\omega|}{2}\right) \right] \theta\left(\hbar|\omega| - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}\right) \\
&\quad + \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta}} \hbar \omega \nu_0 \left(1 - \frac{4\mu^2}{\hbar^2 \omega^2}\right) \\
&\quad \quad \times \left[\theta\left(\mu - \frac{\hbar|\omega|}{2}\right) \frac{n(E_{0,\mu}) - n(E_{0,-\mu})}{|(|\nu_0| - \mu)E_{0,\mu} - (|\nu_0| + \mu)E_{0,-\mu}|} \right. \\
&\quad \quad \quad \left. - \theta\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}\right) \frac{n(E_{0,\mu}) - n(-E_{0,-\mu})}{|(|\nu_0| - \mu)E_{0,\mu} + (|\nu_0| + \mu)E_{0,-\mu}|} \right] \quad (9.40)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta}} \left\{ \left(1 - \frac{4\mu^2}{\hbar^2 \omega^2}\right) \frac{\hbar \omega \nu_0}{|(|\nu_0| - \mu)E_{0,\mu} + (|\nu_0| + \mu)E_{0,-\mu}|} + \frac{4\Delta_0^2}{\hbar^2 \omega^2} \right\} \\
&\quad \quad \times \theta\left(\hbar|\omega| - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}\right)
\end{aligned}$$

com $E_{0,\pm\mu}^2 = (|\nu_0| \pm \mu)^2 + \Delta_s^2$, e ν_0 definido pela Eq. (9.38).

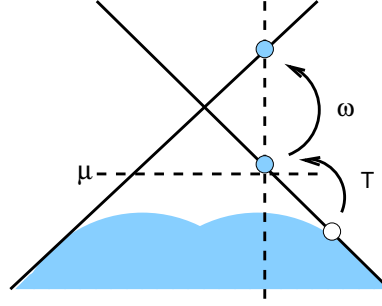


Figura 9.8: Representação esquemática do processo de absorção de fótons pelo canal de excitações térmicas do condensado, dentro da janela de absorção.

A expressão da condutividade inter-banda (9.40) é consideravelmente simplificada na fase normal CDW. Colocando o gap igual a zero, $\nu_0 \rightarrow \hbar\omega/2$ e $E_{0,\pm\mu} \rightarrow \left| \frac{\hbar|\omega|}{2} \pm \mu \right|$, resultando em

$$\begin{aligned} \sigma_{\perp}^{AC}(\omega, \mu) &\xrightarrow{\Delta_s=0} \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta}} \left[n\left(-\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) - n\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) \right] \\ &\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta}} \theta\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} - \mu\right). \end{aligned} \quad (9.41)$$

Neste limite ($\Delta_s = 0$), a parte de Drude é igual a

$$\begin{aligned} \sigma_{\perp}^{DC}(\omega, \mu) &= \frac{v_F e^2 \beta}{8\hbar^2 v_{\Delta}} \delta(\omega) \sum_{\sigma'} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon \operatorname{sech}^2\left(\beta \frac{\epsilon + \sigma' \mu}{2}\right) \\ &\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{v_F e^2}{2\hbar^2 v_{\Delta}} \mu \delta(\omega), \end{aligned} \quad (9.42)$$

Quando um fóton com energia $\hbar\omega$ incide sobre o cristal à temperatura zero, ele precisa ter a energia mínima $\hbar\omega_0 = 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}$ para vencer a barreira do gap de massa dos pares e da energia do bolso para ser absorvido (ver Fig. 9.1 e 9.8). O processo de absorção do fóton no limite limpo envolve a excitação de um elétron da banda de baixo do cone de Dirac para a banda de cima, num processo que transfere energia igual a $\hbar\omega$ mas não transfere momento. À temperatura finita, a quebra de simetria partícula-buraco permite que fótons com energia menor que a barreira do bolso 2μ promovam elétrons termicamente excitados (fora do condensado) na banda de baixo para a de cima, abrindo um novo canal de absorção óptica no infravermelho. Como no fenômeno da superfluidez do He líquido, o supercondutor é um líquido eletrônico formado por dois “fluidos”, um com elétrons no condensado e outro com elétrons normais [83]. Apesar do condensado ser formado por pares, as quase-partículas obedecem à estatística de Fermi-Dirac e existe uma correspondência um a um entre os estados excitados do supercondutor e do sistema normal [95]. As excitações térmicas promovem elétrons do condensado para estados desocupados acima da superfície de Fermi. O canal de absorção de fótons através de elétrons termicamente excitados

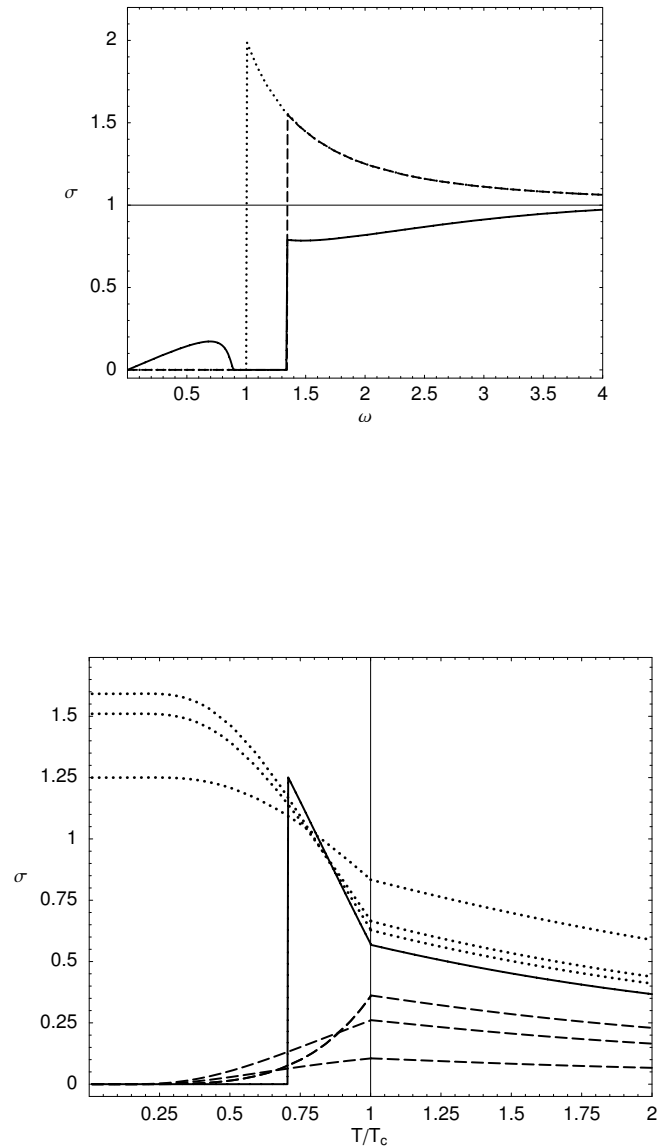


Figura 9.9: Em cima: condutividade óptica σ_{\perp} vs. frequência. Eixos: $v_F e^2 / (2\hbar v_{\Delta})$ vs. $\hbar^{-1} 2\Delta_s$. $\mu / (2\Delta_s) = 0.9$: linha tracejada ($T = 0$) e sólida ($k_B T = 1.2\Delta_s$). $\mu = 0$: pontilhada ($T = 0$). Em baixo: condutividade óptica σ_{\perp} vs. temperatura em unid. de $v_F e^2 / (2v_{\Delta})$, para $g/g_c = 1.1$ e $\mu/\alpha = 0.1$. Linhas tracejadas: canais térmicos de absorção de fótons ($0.4\Delta_0 < \hbar\omega < 1.4\Delta_0$); sólida: $\hbar\omega = 2.3\Delta_0$; pontilhadas: canais de absorção envolvendo elétrons do condensado ($2.8\Delta_0 < \hbar\omega < 4\Delta_0$).

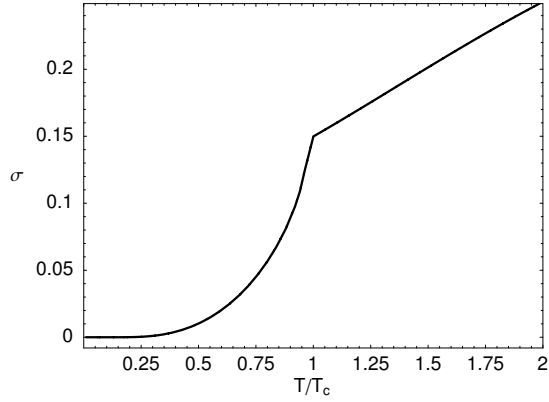


Figura 9.10: Condutividade de Drude integrada em ω em função da temperatura para $g/g_c = 1.1$ e $\mu/\alpha = 0.1$. Unidades de $v_F e^2 \alpha / (2\hbar^2 v_\Delta)$.

exige portanto que a energia do fóton incidente esteja dentro do intervalo $\hbar|\omega| \leq 2\mu$ (ver Fig 9.10). A dependência da condutividade óptica com a temperatura, segundo a Fig. 9.9, mostra claramente a distinção entre os dois canais de excitação. As curvas tracejadas representam os canais de excitações térmicas, que apresentam um comportamento com a temperatura semelhante à condutividade de Drude, indicada na Fig. 9.10. Já as curvas pontilhadas representam processos de absorção de fótons por elétrons do condensado.

A regra de soma f mostra o aparecimento de anomalias no peso espectral diamagnético na região de baixas temperaturas, conforme a discussão apresentada na sec. 7.1. Esse efeito é atenuado pelo aumento da densidade de estados nos pontos de Dirac, como indica a Fig. 9.11. No entanto, a contabilização correta desta parte do peso espectral depende da introdução dos estados de alta energia da banda.

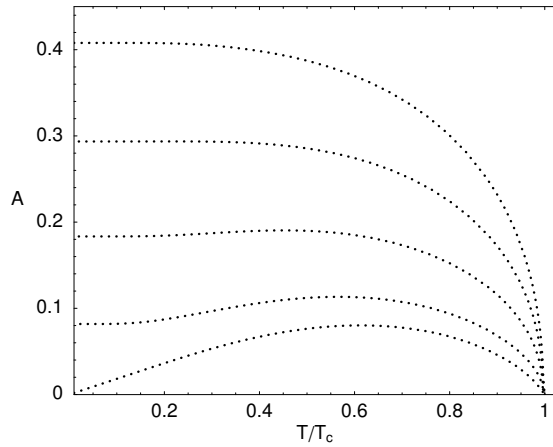


Figura 9.11: Peso espectral diamagnético em função da temperatura para $g/g_c = 1.1$. Curvas desenhadas para $0 \leq \mu/\alpha \leq 0.12$, de baixo para cima, em intervalos fixos de 0.03. A em unidades de $v_F e^2 \alpha / (2\hbar^2 v_\Delta)$.

9.6 Condutividade térmica

Assim como no caso elétrico, a forma do operador densidade de corrente térmica não é afetada pelo bolso e é dada pela Eq. (7.20). Partindo da função de correlação na direção \perp ,

$$\begin{aligned} \Pi_{\perp}^{EE}(\mathbf{q}, i\omega) = & \frac{v_F^2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k} + \mathbf{q}/2} \right. \\ & \left. \times \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k} - \mathbf{q}/2} \right], \end{aligned} \quad (9.43)$$

a função espectral associada é

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EE}(0, \omega) = & \frac{\pi}{2} v_F^2 \left\{ \delta(\omega) \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} E_{\sigma'\mu}^2 \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E_{\sigma'\mu}^2} \right) \frac{\partial n(E_{\sigma'\mu})}{\partial E_{\sigma'\mu}} \right. \\ & - \frac{1}{\omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [n(E_{\mu}) - n(E_{-\mu})] E_{\mu} E_{-\mu} \left(1 - \frac{\epsilon^2 + \Delta_s^2 - \mu^2}{E_{\mu} E_{-\mu}} \right) \\ & \quad \times \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + E_{\mu} - E_{-\mu}) \\ & + \frac{1}{\omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [n(E_{\mu}) - n(-E_{-\mu})] E_{\mu} E_{-\mu} \left(1 + \frac{\epsilon^2 + \Delta_s^2 - \mu^2}{E_{\mu} E_{-\mu}} \right) \\ & \quad \times \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + E_{\mu} + E_{-\mu}) \\ & \left. + \frac{\Delta_s^2}{\omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} [n(E_{\sigma'\mu}) - n(-E_{\sigma'\mu})] \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + 2E_{\sigma'\mu}) \right\}. \end{aligned} \quad (9.44)$$

O primeiro termo é a parte de Drude da condutividade. Os demais termos são semelhantes ao resultado da condutividade óptica na Eq. (9.33). O resultado final da integração é

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EE}(0, \omega, \mu) = & \frac{v_F}{2\hbar^2 v_{\Delta}} \delta(\omega) \sum_{\sigma'=\pm 1} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon E_{\sigma'\mu}^2 \left(1 - \frac{\Delta_s^2}{E_{\sigma'\mu}^2} \right) \frac{\partial n(E_{\sigma'\mu})}{\partial E_{\sigma'\mu}} \\ & - \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta}} \hbar \omega \nu_0 \left(1 - \frac{4\mu^2}{\hbar^2 \omega^2} \right) E_{0,\mu} E_{0,-\mu} \\ & \quad \times \left[\theta \left(\mu - \frac{\hbar|\omega|}{2} \right) \frac{n(E_{0,\mu}) - n(E_{0,-\mu})}{|(|\nu_0| - \mu) E_{0,\mu} - (|\nu_0| + \mu) E_{0,-\mu}|} \right. \\ & \quad \left. + \theta \left(\frac{\hbar|\omega|}{2} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} \right) \frac{n(E_{0,\mu}) - n(-E_{0,-\mu})}{|(|\nu_0| - \mu) E_{0,\mu} + (|\nu_0| + \mu) E_{0,-\mu}|} \right] \\ & + \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta}} \Delta_s^2 \left[n \left(-\frac{\hbar|\omega|}{2} \right) - n \left(\frac{\hbar|\omega|}{2} \right) \right] \theta \left(\hbar|\omega| - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} \right), \end{aligned} \quad (9.45)$$

seguindo as mesmas definições da seção anterior para $E_{0,\mu}$ e ν_0 .

O cálculo da condutividade termoelétrica é também bastante semelhante. A parte imaginária

da função de correlação termoelétrica:

$$\Pi_{\perp}^{EC}(\mathbf{q}, i\omega, \mu) = \frac{v_F^2 e}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \right]$$

no limite $q = 0$ é igual a

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EC}(0, \omega, \mu) &= -\frac{\pi e v_F^2}{4\hbar^2 \omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm 1} \\ &\quad \left\{ [n(E_{\mu}) - n(E_{-\mu})] (E_{\mu} - E_{-\mu}) \left(1 - \frac{\epsilon^2 + \Delta_s^2 - \mu^2}{E_{\mu} E_{-\mu}} \right) \right. \\ &\quad \times \delta(\sigma \hbar \omega + E_{\mu} - E_{-\mu}) \\ &\quad + [n(E_{\mu}) - n(-E_{-\mu})] (E_{\mu} + E_{-\mu}) \left(1 + \frac{\epsilon^2 + \Delta_s^2 - \mu^2}{E_{\mu} E_{-\mu}} \right) \\ &\quad \times \delta(\sigma \hbar \omega + E_{\mu} + E_{-\mu}) \\ &\quad \left. + \sum_{\sigma' = \pm 1} [n(E_{\sigma'\mu}) - n(-E_{\sigma'\mu})] \frac{2\Delta_s^2}{E_{\sigma'\mu}} \delta(\sigma \hbar \omega + 2E_{\sigma'\mu}) \right\} \quad (9.46) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{v_F e^2}{4v_{\Delta}} \hbar \omega |\nu_0| \left(1 - \frac{4\mu^2}{\hbar^2 \omega^2} \right) \\ &\quad \times \left[\theta \left(\mu - \frac{\hbar|\omega|}{2} \right) [E_{0,\mu} - E_{0,-\mu}] \right. \\ &\quad \times \frac{n(E_{0,\mu}) - n(E_{0,-\mu})}{|(|\nu_0| - \mu)E_{0,\mu} - (|\nu_0| + \mu)E_{0,-\mu}|} \\ &\quad - \theta \left(\frac{\hbar|\omega|}{2} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} \right) [E_{0,\mu} + E_{0,-\mu}] \\ &\quad \left. \times \frac{n(E_{0,\mu}) - n(-E_{0,-\mu})}{|(|\nu_0| - \mu)E_{0,\mu} + (|\nu_0| + \mu)E_{0,-\mu}|} \right] \\ &\quad + \frac{v_F e^2}{2\hbar v_{\Delta}} \frac{2\Delta_s^2}{\hbar \omega} \left[n \left(-\frac{\hbar|\omega|}{2} \right) - n \left(\frac{\hbar|\omega|}{2} \right) \right] \theta \left(\hbar|\omega| - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} \right). \quad (9.47) \end{aligned}$$

Note que a condutividade termoelétrica não tem contribuição de Drude. Com isso, a condutividade térmica definida na Eq. (7.4) pode ser calculada a partir das Eq. (9.44), da condutividade óptica (9.40) e da condutividade termoelétrica

$$S_{\perp}(\omega) = -\frac{1}{T} \frac{\text{Im} \Pi_{\perp}^{EC}(0, \omega)}{\text{Im} \Pi_{\perp}^{CC}(0, \omega)}.$$

Com a quebra da simetria de partícula-buraco provocada pelo bolso, a corrente térmica do par partícula-buraco gerado pela excitação de um elétron do condensado via absorção um fóton passa a ser dada por $E_{\mathbf{k},-\mu}(\mathbf{k}) + (E_{\mathbf{k},\mu})(-\mathbf{k})$, que é igual a $-2\mu\mathbf{k}$ na fase normal. Com isso as quase-partículas são capazes de transportar calor numa taxa que é da ordem da energia do bolso.

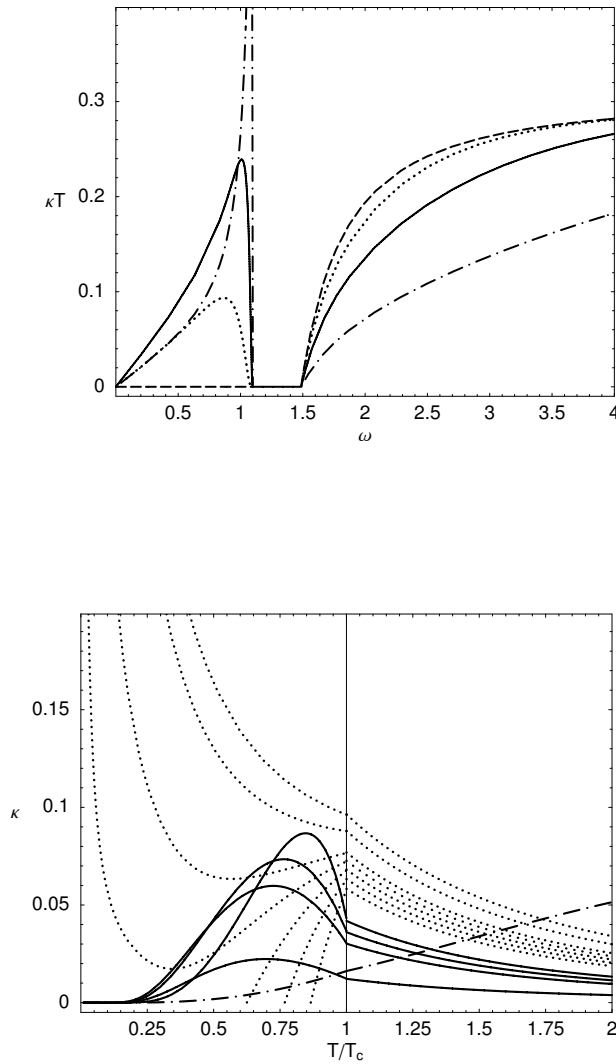


Figura 9.12: Acima: Condutividade térmica $\times T$ em função da frequência. Unidades de $(2v_F/v_\Delta)\Delta_s^2$ vs. $2\Delta_s/\hbar$, com $\mu/(2\Delta_s) = 1.1$. Linha tracejada: limite de $T \rightarrow 0$; pontilhada: $k_B T = \frac{1}{2}\Delta_s$; sólida: $k_B T = \Delta_s$; ponto-tracejada: $k_B T = \frac{5}{2}\Delta_s$. Abaixo: Dependência da condutividade térmica (unid. de $k_B v_F \alpha / (2v_\Delta)$) com a temperatura para $g/g_c = 1.1$ e $\mu/\alpha = 0.1$. Linhas sólidas: canais térmicos de excitação de quase-partícula ($0.4\Delta_0 < \omega < 1.4\Delta_0$); pontilhadas: canais de excitação a partir dos elétrons do condensado ($1.6\Delta_0 < \omega < 4\Delta_0$). Linha ponto-tracejada: termo de Drude integrado em ω , em unidades de $\frac{1}{5}k_B v_F \alpha^2 / (2v_\Delta)$;

Um segundo efeito está ligado aos canais de excitação térmica do infravermelho para $\hbar\omega < 2\mu$, conforme a discussão da seção anterior. A dependência desses canais com a temperatura é representada pelas linhas sólidas na Fig. 9.12. As linhas pontilhadas indicam processos de excitação que envolvem a quebra de pares do condensado. Note pela Fig. 9.11 que a $T = 0$ a condutividade térmica é zero para $\hbar|\omega| < 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}$ e que acima da energia do gap óptico ela passa a ser infinita.

9.6.1 Condutividade térmica na fase normal de CDW

Vamos verificar as propriedades do transporte do sistema CDW normal. No limite de gap zero $\Delta_s = 0$, a função espectral termoelétrica (9.47) é dada simplesmente por

$$\frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EC}(0, \omega, \mu) = \frac{v_F e}{2\hbar v_{\Delta}} \frac{\hbar\omega}{2} \left[n\left(-\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) - n\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) \right].$$

Comparando com a condutividade óptica da fase normal (9.41), o coeficiente termoelétrico é igual a

$$S_{\perp}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2eT},$$

como no caso com simetria de partícula-buraco ($\mu = 0$). Voltando à Eq. (9.45), tomando o limite $\Delta_s \rightarrow 0$,

$$\frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{\perp}^{EE}(0, \omega, \mu) = \frac{v_F}{2\hbar v_{\Delta}} \left[\left(\frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 - \mu^2 \right] \left[n\left(-\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) - n\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) \right].$$

A condutividade térmica é portanto:

$$\kappa(\omega, \mu) = \kappa^{DC}(\omega, \mu) + \kappa^{AC}(\omega, \mu),$$

com

$$\begin{aligned} \kappa^{DC}(\omega, \mu) &= -\frac{v_F}{2\hbar^2 v_{\Delta} T} \delta(\omega) \sum_{\sigma'=\pm 1} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon E_{\sigma'\mu}^2 \frac{\partial n(E_{\sigma'\mu})}{E_{\sigma'\mu}} \\ &\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{\pi^2}{6} \frac{v_F k_B}{v_{\Delta} \hbar^2 \beta} \mu \delta(\omega), \end{aligned} \quad (9.48)$$

e

$$\begin{aligned} \kappa^{AC}(\omega, \mu) &= \mu^2 \frac{v_F}{2\hbar v_{\Delta} T} \left[n\left(-\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) - n\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} + \mu\right) \right] \\ &= \mu^2 \frac{v_F}{2\hbar v_{\Delta} T} \theta\left(\frac{\hbar|\omega|}{2} - \mu\right). \end{aligned} \quad (9.49)$$

Comparando as Eq. (9.48) e (9.42), é imediato ver que a parte de Drude obedece à lei de

Wiedemann-Franz geral

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\kappa^{DC}(0, \mu)}{T \sigma^{DC}(0, \mu)} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2,$$

exatamente como num metal.

O limite anômalo da condutividade óptica verificado pela inversão dos limites em ω e T [Eq. (7.29)] no caso $\mu = 0$ é removido pela escala de energia do bolso, como pode ser observado pelo limite DC das Eq. (9.41) e (9.49).

9.6.2 Efeitos de centros espalhadores na fase normal CDW

Vamos considerar o efeito da desordem através de centros espalhadores que introduzem uma correção de autoenergia na forma $\Gamma = -\text{Im}\Sigma(i\omega_n)$, igual ao inverso do tempo de decaimento $\frac{1}{2\tau}$ das quase-partículas. A função espectral associada à função de Green (9.5) é dada por

$$\overset{\leftrightarrow}{A}(\mathbf{k}, \omega) = -\text{Im} \left[\frac{(\omega + i\Gamma + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}}) [(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_{\mathbf{k}}'^2 + 2\mu v_F \tau_0 \vec{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{k}}]}{[(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_{\mathbf{k}, \mu}^2][(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_{\mathbf{k}, -\mu}^2]} \right].$$

Usando a equação da condutividade óptica no regime de impurezas [Eq. (7.32)] no limite de frequência zero,

$$\begin{aligned} \sigma_{\perp}(0, T) &= -\frac{v_F^2 e^2}{\hbar} \text{Tr} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \overset{\leftrightarrow}{A}(\mathbf{k}, \nu) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{A}(\mathbf{k}, \nu) \tau_0 \sigma_3 \frac{\partial n_F(\nu)}{\partial \nu} \\ &\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{v_F^2 e^2}{\hbar} \text{Tr} \sum_{\mathbf{k}} \overset{\leftrightarrow}{A}(\mathbf{k}, 0) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{A}(\mathbf{k}, 0) \tau_0 \sigma_3. \end{aligned}$$

À temperatura zero, a função espectral é dada por

$$\overset{\leftrightarrow}{A}(\mathbf{k}, 0) = \Gamma \frac{\omega_{\mathbf{k}}'^2 + \Gamma^2 - 2\mu v_F \vec{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{[\omega_{\mathbf{k}, \mu}^2 + \Gamma^2][\omega_{\mathbf{k}, -\mu}^2 + \Gamma^2]},$$

Neste caso, a parte de Drude da condutividade é igual a

$$\sigma_{\perp}(0, T = 0) = \frac{e^2 v_F}{4\pi^2 \hbar v_{\Delta}} \left[1 + \frac{\Gamma^2 + \mu^2}{\Gamma \mu} \arctan \left[\frac{\mu}{\Gamma} \right] \right]. \quad (9.50)$$

Quando $2\mu\tau \gg 1$, a condutividade é proporcional ao tempo de decaimento [101],

$$\sigma_{\perp}(0, T = 0) = \frac{e^2 v_F}{4\pi \hbar v_{\Delta}} \mu \tau.$$

Vamos observar o comportamento da resistividade $\rho = \sigma^{-1}(0, T)$ através de dois modelos. No modelo I, a intensidade dos centros espalhadores é independente da temperatura, como acontece no espalhamento por impurezas. No modelo II, as quase-partículas decaem mais rapidamente à

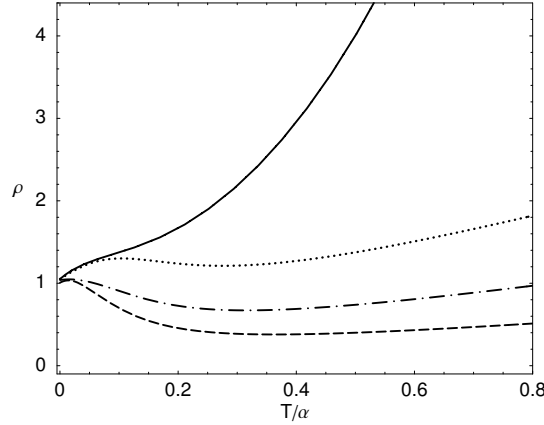


Figura 9.13: Resistividade da fase normal CDW ($\Delta_s = 0$) em função da temperatura. ρ em unidades de $2\pi^2\hbar v_\Delta/(e^2 v_F)$ e T normalizado pela energia de corte α . Modelo II: curva sólida ($1/(2\tau_0) = 0.3\alpha$, $\eta = 2$, $\mu = 0.1\alpha$) em valores típicos para o TaSe₂ [23]; modelo I: curva pontilhada ($\Gamma = 0.3\alpha$, $\mu = 0.1\alpha$), ponto-tracejada ($\Gamma = 0.2\alpha$, $\mu = 0.01\alpha$) e tracejada ($\Gamma = 0.1\alpha$, $\mu = 0.01\alpha$).

medida em que a temperatura aumenta, de acordo com o resultado obtido pelo cálculo da auto-energia através da teoria do grupo de renormalização [ver Eq. (3.7)], com $\Gamma = 1/(2\tau_0) + \eta T$. No segundo modelo, vamos ignorar as correções no espectro vindas da parte real da autoenergia. A Fig. 9.14 mostra que o modelo II descreve bem o comportamento metálico do TaSe₂ num grande intervalo de temperatura, até a região da energia de corte do cone, α . A justificativa empírica desse comportamento foi discutida na sec. 2.2., baseada no efeito da desordem da CDW sobre o transporte eletrônico. Utilizando os valores próprios do TaSe₂, $1/(2\tau_0) = 0.3\alpha \sim 20$ meV e $\eta = 2$, a energia do bolso (tipicamente $\mu \lesssim 0.1\alpha \sim 6$ meV) teria pouco efeito sobre a resistividade, inclusive no limite de $T \rightarrow 0$. As curvas dos modelo I e II, podem ser divididas em dois grupos: para $\Gamma \gtrsim \mu$, onde o limite de temperatura zero da resistividade converge para um valor constante dado pelo inverso da Eq. (9.50) em $\mu \rightarrow 0$, e o limite oposto, $\Gamma \lesssim \mu$ onde a resistividade em $T = 0$ é proporcional ao inverso do tempo de decaimento.

9.7 Efeito Meissner

Para calcular o kernel de London a partir da Hamiltiniana do bolso,

$$H = \Psi^\dagger(\mathbf{k}) [\hbar v_F k_\perp \tau_0 \sigma_3 + \hbar v_\Delta k_\parallel \tau_0 \sigma_1 + \Delta_s \tau_1 \sigma_2 - \mu \tau_3 \sigma_0] \Psi(\mathbf{k}),$$

vamos seguir a mesma receita do caso $\mu = 0$ discutido no Cap. 8. O operador da densidade de corrente não sofre nenhuma mudança em função do bolso, e por isso, a densidade de corrente é

igual a

$$\begin{aligned} \langle j_i \rangle(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left[\frac{e}{\hbar} \left(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A^j \partial_i \partial_j \epsilon_{\mathbf{k}} \right) \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_0 \sigma_3 \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{e}{\hbar} \left(\partial_i \Delta_{c\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A^j \partial_i \partial_j \Delta_{c\mathbf{k}} \right) \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_0 \sigma_1 \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle \right], \end{aligned} \quad (9.51)$$

em primeira ordem em \mathbf{A} . Expandindo o valor esperado,

$$\text{Tr} \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_\mu \sigma_\nu \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle = \frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \sum_{\omega_n} \tau_\mu \sigma_\nu \overset{\leftrightarrow}{G}_0 \left[1 - \frac{e}{\hbar^2 c} \overset{\leftrightarrow}{G}_0 (\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}} \tau_0 \sigma_3 + \partial_i \Delta_{c\mathbf{k}} \tau_0 \sigma_1) A_i \right] + O(A^2),$$

a partir da função de Green (9.5),

$$\overset{\leftrightarrow}{G}_0 = - \left(i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega} \right) \frac{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}'^2 + 2\hbar^{-1}\mu (\epsilon_{\mathbf{k}} \tau_3 \sigma_3 + \Delta_{c\mathbf{k}} \tau_3 \sigma_1)}{(\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},\mu}^2)(\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},-\mu}^2)},$$

os termos de ordem zero são iguais a:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_0 \sigma_3 \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle_0 &= \frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \sum_{\omega_n} \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{G}_0 \\ &= - \frac{4\epsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar\beta} \sum_{\omega_n} \frac{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}'^2 - 2\hbar^{-2}\mu^2}{(\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},\mu}^2)(\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},-\mu}^2)} \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=\pm 1} [n(E_{\mathbf{k},\sigma'\mu}) - n(-E_{\mathbf{k},\sigma'\mu})] \frac{\mu\sigma' + E_{0\mathbf{k}}}{E_{0\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},\sigma'\mu}}, \end{aligned} \quad (9.52)$$

$$\text{Tr} \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_0 \sigma_1 \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle_0 = \Delta_{c\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=\pm 1} [n(E_{\mathbf{k},\sigma'\mu}) - n(-E_{\mathbf{k},\sigma'\mu})] \frac{\mu\sigma' + E_{0\mathbf{k}}}{E_{0\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},\sigma'\mu}}. \quad (9.53)$$

com $E_{0\mathbf{k}}^2 \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{c\mathbf{k}}^2$. Em primeira ordem, vamos encontrar

$$\text{Tr} \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_0 \sigma_3 \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle_1 = - \frac{e}{\hbar^2 c} A_i \partial_i \epsilon_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[(\overset{\leftrightarrow}{G}_0)^2 \right].$$

O traço acima foi basicamente calculado para a função de susceptibilidade do bolso, no apêndice F.2. O resultado é igual a:

$$\text{Tr} \left[(\overset{\leftrightarrow}{G}_0)^2 \right] = \frac{4}{\hbar^6} \frac{[E'^2 - \hbar^2 \omega_n^2][\hbar^2 \omega_n^2 + E'^2]^2 - 4\mu^2 E_0^2 (3\hbar^2 \omega_n^2 + E'^2)}{((\omega_n^2 + \omega_\mu^2)(\omega_n^2 + \omega_{-\mu}^2)[\omega_n^2 + \omega_\mu^2][\omega_n^2 + \omega_{-\mu}^2])}.$$

Definindo

$$f(z) = [E'^2 + z^2][z^2 - E'^2]^2 + 4\mu^2 E_0^2 (3z^2 - E'^2),$$

a soma nas frequências de Matsubara é feita através da identidade (E.6),

$$\begin{aligned}
\text{Tr}\langle\Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})\tau_0\sigma_3\Psi(\tilde{\mathbf{k}})\rangle_1 &= -\frac{4e}{\hbar^2c}A^i(\partial_i\epsilon_{\mathbf{k}})\oint dz n(z)\frac{f(z)}{((z+E_\mu)^2(z-E_\mu)^2(z+E_{-\mu})^2(z-E_{-\mu})^2)} \\
&= \frac{4e}{\hbar^2c}A^i(\partial_i\epsilon_{\mathbf{k}})\sum_{\sigma,\sigma'=\pm 1}\frac{\partial}{\partial z}\left[n(z)\frac{f(z)}{\left[(z+\sigma E_{\sigma'\mu})(z^2-E_{-\sigma'\mu}^2)\right]^2}\right]_{z=\sigma E_{\sigma'\mu}} \\
&= -\frac{e}{\hbar^2c}A^i(\partial_i\epsilon_{\mathbf{k}})\sum_{\sigma'=\pm 1}\frac{\partial}{\partial E_{\sigma\mu}}[n(E_{\sigma'\mu})-n(-E_{\sigma'\mu})]. \tag{9.54}
\end{aligned}$$

A passagem da penúltima linha é um cálculo direto, utilizando as relações:

$$\begin{aligned}
f(\sigma E_{\sigma'\mu}) &= 16\mu^2 E_0^2 E_{\sigma'\mu}^2 \\
f'(\sigma E_{\sigma'\mu}) &= 16\mu E_0 E_{\sigma'\mu}(E_{\sigma'\mu}^2 + \sigma'\mu\epsilon),
\end{aligned}$$

Do mesmo modo, o outro valor esperado é

$$\text{Tr}\langle\Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})\tau_0\sigma_1\Psi(\tilde{\mathbf{k}})\rangle_1 = -\frac{e}{\hbar^2c}A^i\partial_i\Delta_{c\mathbf{k}}\sum_{\sigma'=\pm 1}\frac{\partial}{\partial E_{\sigma\mu}}[n(E_{\sigma'\mu})-n(-E_{\sigma'\mu})]. \tag{9.55}$$

Substituindo as Eq. (9.52)–(9.55) na Eq. (9.51), vamos encontrar

$$\begin{aligned}
Q_{ij} &= \frac{e^2}{\hbar^2c}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\sigma=\pm 1}\left\{((\partial_i\epsilon_{\mathbf{k}})(\partial_j\epsilon_{\mathbf{k}}) + (\partial_i\Delta_{c\mathbf{k}})(\partial_j\Delta_{c\mathbf{k}}))\frac{\beta}{2}\text{sech}^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},\sigma\mu}}{2}\right)\right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k},\sigma\mu}}\partial_i\partial_j\epsilon + \frac{\Delta_{c\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k},\sigma\mu}}\partial_i\partial_j\Delta_{c\mathbf{k}}\right)\frac{\sigma\mu + E_{0\mathbf{k}}}{E_{0\mathbf{k}}}\tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},\sigma\mu}}{2}\right)\right\}, \tag{9.56}
\end{aligned}$$

Para analisar o comportamento do peso espectral associado ao efeito Meissner dentro da aproximação do cone $\epsilon_{\mathbf{k}} \sim \hbar v_F k_\perp$ e $\Delta_{c\mathbf{k}} \sim \hbar v_\Delta k_\parallel$. Vamos calcular a equação de London em dois limites, perto da transição e à temperatura zero. Incluindo a zona de Brillouin $[-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}]$ na direção normal aos planos, o kernel de London é igual a

$$\begin{aligned}
Q_\perp(\Delta_s) &= v_F^2 \frac{\beta}{2} \frac{e^2}{\hbar^2c} \sum_{\mathbf{k},\sigma=\pm 1} \text{sech}^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},\sigma\mu}}{2}\right) \\
&= -\frac{1}{d} \frac{e^2 v_F}{\pi \hbar^2 v_\Delta c} \left\{ \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} \left(1 + \frac{\exp[\beta\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}]}{1 + \exp[\beta\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}]} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{2}{\beta} \ln \left[1 + e^{\beta\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}} \right] - \frac{\beta\mu}{2} \int_0^\mu d\nu \text{sech}^2\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\nu^2 + \Delta_s^2}\right) \right\} \tag{9.57}
\end{aligned}$$

Em $T = 0$, o kernel é dado por

$$Q_\perp(\Delta_s) - Q_\perp(0) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} -\frac{\mu}{d} \frac{e^2 v_F}{\pi \hbar^2 v_\Delta c},$$

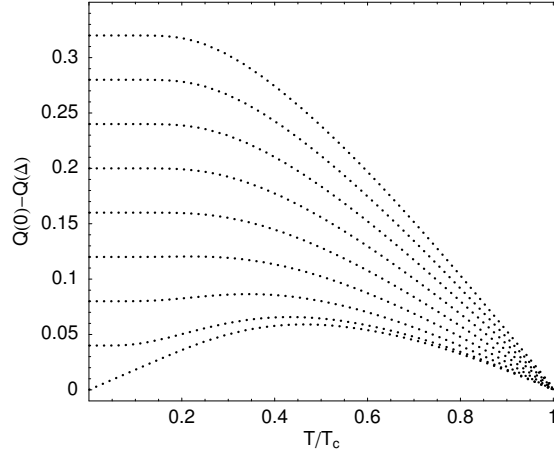


Figura 9.14: Dependência do kernel de London $-[Q(\Delta_s) - Q(0)]$ com a temperatura na aproximação do cone ($g/g_c = 1.1$). Curvas entre $0 \leq \mu/\alpha \leq 0.16$, de baixo para cima, em intervalos fixos de 0.02. Unidades de $e^2 v_F \alpha / (2\pi d \hbar^2 v_{\Delta} c)$.

confirmando o comportamento observado pela regra de soma (ver Fig. 9.11).

No outro extremo, é interessante calcular o comprimento de penetração perto de T_c no regime marginal ($g > g_c$). No limite de acoplamento forte,

$$\mu \int_0^{\mu} d\nu \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\nu^2 + \Delta_s^2} \right) \xrightarrow{g \gg g_c} \mu^2 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\beta \Delta_s}{2} \right).$$

Tomando agora o limite $\Delta_s \rightarrow 0$ na Eq. (9.57), vamos encontrar

$$Q_{\perp}(\Delta_s) - Q_{\perp}(0) \xrightarrow{\beta \rightarrow \beta_c} -\frac{\beta_c}{4} \frac{v_F e^2}{\pi \hbar^2 v_{\Delta} c} \left[1 + \mu^2 \frac{\beta_c^2}{4} \right] \Delta_s^2.$$

Finalmente, o comprimento de penetração é igual a:

$$\lambda^2(\beta) \xrightarrow{\beta \rightarrow \beta_c} \frac{\hbar^2 v_{\Delta} c^2}{v_F e^2} \left[1 - \mu^2 \frac{\beta_c^2}{4} \right] \frac{1}{\beta_c \Delta_s^2}, \quad (9.58)$$

em acordo qualitativo com o resultado usual de campo médio.

A Fig. 9.14 mostra a evolução em μ da dependência do kernel de London com a temperatura. Claramente, o limite $\mu \rightarrow 0$ exhibe a supressão anômala observada na Fig. 9.11 para o peso espectral do diamagnetismo em $T = 0$, indicando a falta dos estados de alta energia na banda. Como foi discutido no cap. 7, a aproximação do cone parece ser satisfatória na descrição de propriedades de campo zero, como a condutividade, absorção e processos em geral que envolvem transições entre estados de quase-partículas, em torno da superfície de Fermi. A descrição do diamagnetismo num sistema marginal, entretanto, é bem mais complicada que no líquido de Fermi, porque exige a contabilização de estados mais afastados na banda. Pensando em termos

de uma teoria supercondutora marginal em acoplamento forte, a abertura do gap deve trazer esses estados diamagnéticos para dentro da região do cone de forma a “compensar” o efeito da baixa densidade de estados na superfície de Fermi e com isso aumentar o peso espectral ligado à formação das supercorrentes. De qualquer forma, a Eq. (9.56) é a expressão geral do kernel de London para uma estrutura de banda CDW que quebra a simetria de inversão da rede.

9.8 Resumo dos efeitos do bolso

Reconhecendo que os resultados deste capítulo são bastante densos e talvez merecessem uma análise mais pormenorizada, vamos entender um pouco melhor os efeitos causados pela introdução do bolso comparando com o caso $\mu = 0$. Em primeiro lugar, o efeito mais óbvio da quebra da simetria de partícula-buraco no sistema se reflete no comportamento da densidade de estados, tanto na fase normal quanto na fase supercondutora. Por este aspecto, a densidade de estados passa a se comportar como num líquido de Fermi, ou seja,

$$\rho_{E,\sigma}(k) \propto \frac{\bar{k} E_{\mathbf{k},\sigma\mu}}{\bar{k} - \sigma k_F^*}$$

é suave e finito na superfície de Fermi do bolso k_F^* (definido no cap. 4 como a energia de Fermi do bolso, $\mu = \hbar v_F k_F^*$) na fase normal e diverge em $\bar{k} = \sigma k_F^*$ na fase SC. Quando μ é finito porém pequeno em comparação com as demais escalas de energia (Δ_s e a energia de corte α), os nós da superfície de Fermi ainda são bem definidos e o MFL prevalece sobre o caráter de líquido de Fermi. O reescalamiento de todas as escalas de energia por μ (ver sec. 9.1) mostra claramente que os dois limites satisfazem a equação do gap (9.7) dependendo unicamente do regime de acoplamento. O limite de líquido de Fermi corresponde ao regime BCS de acoplamento fraco (afinal, o modelo de campo médio adotado guarda muitas semelhanças com o modelo BCS, exceto pelas simetrias da rede e do emparelhamento), enquanto que o regime marginal pertence ao setor de acoplamento forte. A escala de acoplamento é definida em relação ao acoplamento crítico g_c do ponto crítico quântico verificado no caso $\mu = 0$.

O salto do calor específico na transição de fase normal-SC acompanha o regime de acoplamento. No limite marginal, ele é fortemente suprimido e mostra um valor universal, $\Delta C_V / C_{nV} \sim 0.35$, válido para o MFL com supercondutividade tipo s . O limite oposto recupera o resultado BCS, como esperado. Ainda tratando do problema da densidade de estados, o calor específico mostrado na Fig. 9.6 apresenta um *crossover* na escala de energia do bolso para o sistema CDW normal, representado pela linha tracejada, indicando que $C_{nV} \propto \mu T$ no limite de baixas temperaturas. Finalmente, a Fig. 9.7 mostra que o setor de acoplamento forte permite o aparecimento de um pequeno pico de Hebel-Slichter de NMR.

O segundo efeito da introdução do bolso, este mais interessante, é a criação de um novo canal de absorção de fótons por excitações térmicas, levando à formação de um pico anômalo para a condutividade óptica no infravermelho (ver Fig. 9.9). O canais usuais de absorção de fótons pela

quebra de pares do condensado têm uma borda de absorção na energia do gap óptico entre as duas bandas do espectro, $\hbar\omega_0 = 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}$, como indicado na Fig. 9.1. A distinção entre os dois canais de absorção pode ser feita tomando o limite de temperatura zero (ver Fig. 9.9, em baixo). Nesse limite, obviamente não há estados excitados mas apenas processos de absorção que arrancam elétrons do condensado. Os dois canais portanto se comportam de maneiras diferentes com a temperatura. O canal térmico é favorecido com o aumento da temperatura enquanto que os canais do condensado são mais eficientes à temperatura zero. Alguns dos canais de quebra de pares próximos à borda de absorção, no entanto, são abruptamente suprimidos pela redução da temperatura, como indica a linha sólida na Fig. 9.9 (em baixo). A razão está ligada ao alargamento do gap óptico $\hbar\omega_0 = 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2(T)}$ entre duas bandas a medida em que a temperatura diminui, deslocando a borda de absorção na direção do ultravioleta. Para alguns desses canais ligados à absorção de fótons com energia $\hbar\omega$, há uma temperatura T_0 em que $\omega < \omega_0(T)$ para $T < T_0$.

Com relação à condutividade térmica, ela sofre efeitos dramáticos ligados à formação do bolso. Como foi discutido no cap. 7, o par partícula-buraco é capaz de transportar energia somente quando existe uma quebra de simetria que desloca o potencial químico do vértice do cone de Dirac, privilegiando as partículas ou os buracos. Assim, não há corrente térmica no caso em que $\mu = 0$, uma vez que neste caso, a corrente de energia do par partícula-buraco é zero. Com a quebra desta simetria, a condutividade térmica reproduz qualitativamente os mesmos canais de excitação da condutividade óptica, e também apresenta um pico no infravermelho, mas não uma borda de absorção (ver Fig. 9.11). Para $\mu = 0$, não apenas a condutividade térmica é zero, como também os canais térmicos de absorção se fecham. É curioso que no caso com simetria de partícula-buraco (no limite limpo), não existe nenhuma probabilidade de que um fóton com energia menor que o gap seja absorvido, mesmo a temperatura finita ou perto da temperatura crítica. A razão é indicada pictoricamente na Fig. 9.8. O preenchimento completo da banda de baixo do cone (ver Fig. 7.1) proíbe a absorção de um fóton por processos que conservam energia e momento.

É importante mencionar que a possível realização experimental do MFL nos TMDs é baseada principalmente nas características do cristal TaSe₂, onde as escalas de energia na fase supercondutora são da ordem de 10^4 vezes menores que o gap CDW, que define a energia de corte α válida na aproximação do cone. O conjunto dessas propriedades, seja a $\mu = 0$ ou finito (o que é mais provável), permite encontrar assinaturas que caracterizem o cristal. O trabalho experimental será certamente um grande desafio, dada a dificuldade de propor experimentos viáveis a temperaturas tão baixas.

Capítulo 10

Conclusões

Neste trabalho, investigamos a supercondutividade nos TMDs tanto do ponto de vista das excitações coletivas quanto das excitações de partícula buraco, estas segundo um modelo microscópico que descreve com sucesso algumas das características observadas na fase normal de CDW. O estudo dos modos coletivos foi delineado a partir de uma ação semiclássica geral, válida para supercondutores com uma forte anisotropia axial, como acontece em cristais formados por um conjunto de planos supercondutores fracamente acoplados. O procedimento é semelhante ao modelo efetivo de Lawrence-Doniach para um sistema infinito de planos. Apesar do interesse evidente nos TMDs, o cálculo é suficientemente geral e pode ser aplicado a qualquer sistema de planos supercondutores a temperatura zero, com ou sem quebra da simetria de inversão da rede.

Demonstramos pelo ponto de vista da eletrodinâmica que a supercondutividade e a piezoelectricidade podem coexistir. Quando o acoplamento piezoelétrico g é menor que um valor crítico g_c , os elétrons apresentam blindagem metálica com o momento de Thomas-Fermi reduzido. Acima do acoplamento crítico, o sistema não é blindado e uma modulação de carga de longo alcance deve aparecer como resposta a um desbalanço local e quase-estático de carga, que poderia ser criado, por exemplo, através de uma deformação adiabática na superfície do cristal. A partir deste cálculo, concluímos que a piezoelectricidade está possivelmente ligada ao mecanismo de formação das faixas de carga nos TMDs. Além disso, investigamos a possibilidade do surgimento de modos normais à temperatura zero, como consequência do acoplamento dos modos ópticos de plasmon (que dominam o espectro de excitações de baixa energia) aos graus de liberdade dos fônons e à fase do parâmetro de ordem superconductor. O aparecimento do modo óptico nas flutuações de carga está ligado à presença de uma densidade de estados finita na superfície de Fermi, mesmo que pequena. Existem vários mecanismos que poderiam produzir o aumento da densidade de estados via a formação de bolsos, pensando num cenário marginal onde as excitações de quase-partícula de baixa energia são confinadas à vizinhança dos nós da superfície de Fermi. Além do mecanismo mais óbvio, a dopagem, os bolsos podem ser induzidos por termos de transferência coerente de elétrons entre planos (*hopping*) e pelo efeito da desordem.

Na fase distorcida, o parâmetro de ordem da CDW quebra a simetria de inversão da rede

nos TMDs. O modelo microscópico adotado é baseado numa estrutura de banda de CDW que “veste” os elétrons na vizinhança dos nós com uma dispersão de férmions de Dirac. Os pares do condensado são formados a partir do acoplamento piezoelétrico entre os férmions de Dirac mediado por fônons virtuais acústicos. De acordo com o *ansatz* de emparelhamento adotado, o acoplamento acontece através da superestrutura da CDW, e por isso os elétrons do par são acoplados entre dois nós ligados por um vetor de onda de CDW. Esta hipótese provoca uma quebra adicional na simetria de inversão temporal da fase supercondutora, que pode ser testada por experimentos de NMR. A intensidade de atenuação prevista em função das direções de NMR nos planos supercondutores segue o padrão de simetria da amplitude do gap da tripla-CDW. Nenhuma anisotropia do tipo é observada no 2H-NbSe₂, indicando que ali talvez os bolsos sejam grandes demais para que os elétrons sintam os fônons acústicos. De qualquer forma, o acoplamento elétron-fônon parece ter um papel especialmente importante nos cristais de Nb, mais do que talvez as propriedades eletrônicas, distanciando a descrição de um cenário tipicamente marginal. Esta teoria precisa ainda ser testada no cristal de 2H-TaSe₂, que parece ser, ao que tudo indica, um candidato bem mais promissor. Até onde sei, as características da fase supercondutora desses cristais continuam pouco conhecidas, em grande parte pela baixa temperatura de transição, cerca de 100 vezes menor que nos cristais de Nb.

O comportamento da equação do gap é bastante interessante. No caso com simetria de partícula-buraco, um ponto crítico quântico é observado no regime de acoplamento crítico ($g = g_c$). Quando esta simetria é quebrada, o gap Δ_s é fortemente reescalado pelo potencial químico μ em função do acoplamento g e o ponto crítico quântico é frustrado. O fluxo de reescalamto da razão Δ_s/μ aponta para dois regimes de acoplamento distintos: (i) limite de líquido de Fermi para acoplamento fraco em $g < g_c$, onde a razão flui para zero à medida em que $g \rightarrow 0$ e (ii) limite marginal de acoplamento forte para $g > g_c$ em que $\Delta_s/\mu \gg 1$. O salto do calor específico $\Delta C_V/C_n$ é fortemente atenuado no caso marginal ($\Delta C_V/C_n \sim 0.35$), dada a baixa densidade de estados em torno dos nós.

A estrutura de banda induzida pela CDW produz uma série de efeitos anômalos sobre as propriedades de transporte. Diferentemente de supercondutores tradicionais com uma única banda, o espectro da condutividade óptica e térmica apresenta um pico intermediário no infravermelho associado aos canais de absorção de fótons por excitações de quase-partícula do tipo *intra-banda*, dentro de uma janela de absorção limitada superiormente pela energia do bolso. Além disso, os canais de excitação *inter-banda* levam ao aparecimento de fatores de coerência finitos no limite de transferência de momento zero: ou seja, probabilidades finitas de transição entre dois estados mapeados pelo espaço de pares no limite limpo, ao contrário de uma teoria tipo BCS convencional. Os fatores de coerência da condutividade óptica tem uma simetria anômala (tipo I) induzida pela quebra da simetria de inversão espacial do gap CDW. Esta propriedade tem implicações importantes sobre o peso espectral diamagnético. A constatação da ausência (ou supressão) do diamagnetismo a $T = 0$ pela contabilização da regra de soma de osciladores (7.17) mostra que não é suficiente incluir os estados do topo da banda, que satisfazem à aproximação

do cone, para descrever corretamente as propriedades de campo magnético finito. No TaSe₂, a redução da temperatura provoca uma redistribuição do peso espectral da fase normal CDW, que se desloca do infravermelho médio para a região de Drude, ou seja, para o topo da banda. Possivelmente, a abertura do gap supercondutor no sistema real exige que a redistribuição espectral se estenda para o resto da banda, atraindo estados diamagnéticos de alta energia, que vão além da aproximação do cone, para o infravermelho. O cálculo do comprimento de penetração requer mais detalhes sobre a estrutura eletrônica de banda do material, especialmente a baixas temperaturas, onde o peso espectral ligado ao diamagnetismo é maior. Perto da transição de fase, entretanto, esses estados podem ser introduzidos à mão através do procedimento que é normalmente utilizado para curar divergências do kernel de London no ultravioleta, quando calculado por métodos que ignoram a periodicidade da zona de Brillouin.

Ainda existem várias questões experimentais em aberto em relação aos TMDs. A origem da instabilidade de CDW, a simetria e a extensão do recobrimento do gap sobre a superfície de Fermi são questões para as quais não existe ainda uma resposta. Do ponto de vista teórico, não se sabe ao certo qual seria o papel do regime de acoplamento forte sobre a formação da CDW.

A Hamiltoniana da ordem de CDW proposta neste trabalho despreza efeitos de interação entre as quase-partículas (éxcitons) assim como possíveis interações das quase-partículas com as flutuações quânticas da CDW. Certamente há vários outros refinamentos possíveis para o modelo. A proposta original do trabalho, entretanto, era verificar as propriedades essenciais contidas num modelo mínimo que incorporasse a marginalidade do sistema. Longe de encerrar este problema, esperamos que esta abordagem contribua para o entendimento da supercondutividade em alguns sistemas de baixa dimensão.

Apêndice A

Definições

A.1 Eletromagnetismo

A notação da primeira metade do cap. 5 é baseada na métrica $g^{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1)$, onde os vetores seguem a regra

$$v^\mu \equiv (v_0, v^i) = (v_0, -\mathbf{v}) = g^{\mu\nu} v_\nu,$$

e as derivadas

$$\partial^\mu \equiv (\partial^0, \partial^i) = (\partial^0, \nabla) = g^{\mu\nu} \partial_\nu.$$

A identidade é portanto $g^{\mu\nu} g_{\nu\lambda} = \delta^\mu_\lambda = \mathbf{1}$. Entre alguns operadores úteis, estão o Dalemberiano, definido por:

$$\square \equiv \partial^\mu \partial_\mu = \partial^0 \partial_0 + \partial^i \partial_i = \partial^0 \partial_0 - \nabla^2,$$

e o divergente:

$$\partial^\mu v_\mu \equiv \partial^0 v_0 + \partial^i v_i = \partial^0 v_0 + \nabla \cdot \mathbf{v}.$$

O tensor eletromagnético no vácuo $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ pode ser definido equivalentemente como

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -B_z & B_y \\ -E_y & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}.$$

A.2 Matrizes de Pauli

As matrizes de Pauli σ_i , (com $i = 1, 2, 3$) são matrizes unitárias representadas por

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Elas seguem a álgebra anti-comutativa

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0,$$

com $i \neq j$ e obedecem à propriedade cíclica

$$\sigma_i \sigma_j = i \epsilon_{ijk} \sigma_k,$$

definindo o operador antisimétrico ϵ_{ijk} , que vale 1 sob permutações pares da tripla $(i, j, k) = (1, 2, 3)$ e -1 sob permutações ímpares.

A.3 Funções de Green

A função de Green não interagente ordenada no tempo (imaginário) é definida por

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \tau) &= -\langle T_\tau [\Psi_\alpha(\mathbf{k}, \tau) \Psi_\beta^\dagger(\mathbf{k}, 0)] \rangle \\ &= -\theta(\tau) \langle \Psi_\alpha(\mathbf{k}, \tau) \Psi_\beta^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle + \theta(-\tau) \langle \Psi_\beta^\dagger(\mathbf{k}, 0) \Psi_\alpha(\mathbf{k}, \tau) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

com a função degrau

$$\theta(x) \equiv \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

As representações no tempo imaginário e nas frequências de Matsubara são ligadas pela transformada de Fourier:

$$\overleftrightarrow{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_n\tau} \overleftrightarrow{G}(\mathbf{k}, \tau) \quad (\text{A.2})$$

$$\overleftrightarrow{G}(\mathbf{k}, \tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n\tau} \overleftrightarrow{G}(\mathbf{k}, i\omega_n), \quad (\text{A.3})$$

onde ω_n são as frequências de Matsubara fermiônicas, $e^{i\beta\hbar\omega_n} = -1$. Dada uma Hamiltoniana quadrática na forma

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_\beta^\dagger \omega_{\beta\alpha} \Psi_\alpha,$$

a evolução temporal dos espinores fermiônicos é descrita por

$$\Psi_\alpha(\mathbf{k}, \tau) = e^{-\tau\omega_{\alpha\gamma}} \Psi_\gamma(\mathbf{k}) \quad (\text{A.4})$$

$$\Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{k}, \tau) = e^{\tau\omega_{\alpha\gamma}} \Psi_\gamma^\dagger(\mathbf{k}). \quad (\text{A.5})$$

Definindo a estatística fermiônica

$$\langle \Psi_\mu^\dagger \Psi_\nu \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{\mu\nu}} + 1} \equiv n(\omega_{\mu\nu}), \quad (\text{A.6})$$

e substituindo as Eq. (A.4), (A.6) na Eq. (A.1), isto é,

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \tau) &= -e^{-\tau\omega_{\alpha\gamma}} \left[\theta(\tau) \langle \Psi_\gamma \Psi_\beta^\dagger \rangle - \theta(-\tau) \langle \Psi_\beta^\dagger \Psi_\gamma \rangle \right] \\ &= -e^{-\tau\omega_{\alpha\gamma}} [\theta(\tau) - n(\omega_{\beta\gamma})], \end{aligned}$$

a função de Green associada na representação de momento será

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= -[1 - n(\omega_{\beta\gamma})] \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{(i\omega_n - \omega_{\alpha\gamma})\tau} \\ &= -[1 - n(\omega_{\beta\gamma})] \frac{e^{\beta\hbar(i\omega_n - \omega_{\beta\gamma})} - 1}{i\omega_n - \omega_{\beta\alpha}} \\ &= \frac{1}{i\omega_n - \omega_{\beta\alpha}}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \overset{\leftrightarrow}{\omega}}.$$

A.4 Teorema de Noether

Nas teorias de campos em geral, as leis de conservação resultam das simetrias do sistema. A conexão entre as simetrias e as quantidades conservadas é sumarizada pelo teorema de Noether [69]. Dada uma transformação contínua infinitesimal sobre o campo ϕ

$$\phi(x) \rightarrow \phi'(x) = \phi(x) + \varepsilon \Delta \phi(x), \quad (\text{A.7})$$

onde ε é um parâmetro infinitesimal e $\Delta \phi$ é a variação sobre a configuração do campo, esta transformação corresponde a uma simetria se a Lagrangeana for invariante a menos de um termo de “superfície”

$$\mathcal{L}(x) \rightarrow \mathcal{L}(x) + \varepsilon \partial_\mu \mathcal{J}^\mu(x),$$

para alguma quantidade \mathcal{J} , de forma que a ação $S = \int d^4x \mathcal{L}$ continue invariante. Calculando explicitamente a variação da Lagrangeana a partir da transformação (A.7),

$$\varepsilon \Delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} (\varepsilon \Delta \phi) + \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) \partial_\mu (\varepsilon \Delta \phi) \quad (\text{A.8})$$

$$= \varepsilon \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \Delta \phi \right) \quad (\text{A.9})$$

após uma integração por partes no segundo termo da Eq. (A.8), seguida pela substituição da equação de Euler-Lagrange,

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0.$$

O termo remanescente na Eq. (A.9) é portanto igual a $\partial_\mu \mathcal{J}^\mu$, de onde se conclui que a quantidade conservada é

$$\Phi^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \Delta \phi - \mathcal{J}^\mu, \quad (\text{A.10})$$

de forma que $\partial_\mu \Phi^\mu = 0$.

Considerando o caso de um sistema com invariância translacional $x^\mu \rightarrow x^\mu - a^\mu$, a Lagrangeana deve se transformar do mesmo modo,

$$\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} + a^\mu \partial_\mu \mathcal{L} = \mathcal{L} + a^\nu \partial_\mu (\delta^\mu_\nu \mathcal{L}).$$

A quantidade conservada nesse caso é o tensor de *momento-energia*

$$T^\mu_\nu \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \partial_\nu \phi - \delta^\mu_\nu \mathcal{L},$$

definido pela Eq. (7.18).

Apêndice B

Acoplamento elétron-fônon

Vamos calcular o acoplamento elétron-fônon g_λ na aproximação de *tight-binding* e demonstrar a validade da Eq. (3.1). Considere uma rede de íons localizados em $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_i^0 + \mathbf{u}_i$, onde \mathbf{R}_i^0 é a posição de equilíbrio do i -ésimo íon e \mathbf{u}_i o deslocamento provocado pelos fônons da rede. A interação dos elétrons com os íons pode ser genericamente escrita na forma

$$\begin{aligned} H_{e-i} &= \sum_{ij} V_{e-i}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) \\ &\sim \sum_{ij} V_{e-i}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0) - \sum_{ij} \mathbf{u}_j \cdot \nabla V_{e-i}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0), \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

onde \mathbf{r}_i é o vetor posição do i -ésimo elétron. Fazendo a segunda quantização do campo de fônons,

$$\vec{\phi}_i = i \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\mathbf{k}, \lambda}}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} (a_{\mathbf{k}, \lambda} + a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i^0},$$

onde $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* = -\mathbf{e}_{-\mathbf{k}, \lambda}$ é o vetor de polarização dos fônons, M é a massa dos íons e N o número de íons da rede, a interação elétron-fônon é dada por

$$\begin{aligned} H_{e-p} &= - \sum_{ij} \vec{\phi}_j \cdot \nabla \hat{V}_{e-i}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0) \\ &= -i \sum_j \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\mathbf{k}, \lambda}}} (a_{\mathbf{k}, \lambda} + a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i^0} \times \\ &\quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \cdot \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{V}_{e-i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \Psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Introduzindo a segunda quantização dos campos fermiônicos,

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{k}}$$

e aplicando o teorema de Block

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j^0} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

na Eq. (B.2), a interação elétron-fônon pode ser escrita na forma

$$H_{e-p} = \sum_{\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}} g_{\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \left(a_{\mathbf{q}, \lambda} + a_{-\mathbf{q}, \lambda}^{\dagger} \right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}, \quad (\text{B.3})$$

onde

$$g_{\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{e}_{\lambda, \mathbf{q}} \cdot \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \nabla V_{e-i} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{B.4})$$

é o acoplamento elétron-fônon.

Utilizando a aproximação de *tight-binding*

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j W(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j},$$

onde $W(\mathbf{r}) = W^*(\mathbf{r})$ define a função de onda dos elétrons localizados em torno do j -ésimo íon, basta substituir a definição acima na expressão

$$\begin{aligned} v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} &= \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \nabla V_{e-i} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{i, j} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j)} \int d\mathbf{r} W(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \nabla V_{e-i} W(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \\ &\sim \int d\mathbf{r} W^2(\mathbf{r}) \nabla V_{e-i}(\mathbf{r}) + \sum_{\vec{\delta}} \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}} + e^{-i\mathbf{k}'\cdot\vec{\delta}} \right) \int d\mathbf{r} W(\mathbf{r}) W(\mathbf{r} - \vec{\delta}) \nabla V_{e-i}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.5}) \end{aligned}$$

fazendo uma expansão de primeira ordem sobre a soma nos sítios da rede, onde o vetor $\vec{\delta}$ representa os primeiros íons vizinhos ao elétron na posição \mathbf{r} . No caso em que $V_{e-i}(\mathbf{r}) = V_{e-i}(r)$ é um potencial central, a função de onda $W(-\mathbf{r}) = \pm W(\mathbf{r})$ tem paridade definida, e por isso

$$\int d\mathbf{r} W^2(\mathbf{r}) \nabla V_{e-i}(\mathbf{r}) = 0.$$

Notando que $\nabla V_{e-i}(r) = \frac{\mathbf{r}}{r} \partial_r V_{e-i}(r)$, então

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} W(\mathbf{r}) W(\mathbf{r} - \vec{\delta}) \frac{\mathbf{r}}{r} \partial_r V_{e-i}(r) &\sim - \int d\mathbf{r} \frac{\mathbf{r}}{r} W(\mathbf{r}) \vec{\delta} \cdot \nabla W(\mathbf{r}) \partial_r V_{e-i}(r) \\ &= \frac{\vec{\delta}}{\delta^2} \int d\mathbf{r} W(\mathbf{r}) (\vec{\delta} \cdot \mathbf{r}) (\vec{\delta} \cdot \nabla W(\mathbf{r})) \partial_r V_{e-i}(r) \\ &= \vec{\delta} f(\delta), \end{aligned}$$

onde a função $f(\delta)$ é invariante sob rotações em $\vec{\delta}$.

Voltando à Eq. (B.5), temos

$$v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} = \sum_{\vec{\delta}} \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}} + e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\vec{\delta}} \right) \vec{\delta} a(\delta),$$

e portanto o acoplamento elétron-fônon em *tight-binding* é finalmente dado por

$$g_{\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = -i \sqrt{\frac{2\hbar}{NM\omega_{\mathbf{q}}}} \sum_{\vec{\delta}} \mathbf{e}_{\lambda, \mathbf{q}} \cdot \vec{\delta} f(\delta) \sin\left(\frac{\mathbf{q}}{2} \cdot \vec{\delta}\right) \cos\left[\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}\right) \cdot \vec{\delta}\right],$$

demonstrando a Eq. (3.1).

B.1 Linhas nodais

As linhas nodais correspondem às direções em \mathbf{k} na zona de Brillouin em que o acoplamento dos elétrons com os fônons longitudinais, $g_L(\mathbf{k}, \mathbf{Q}_i)$, é igual a zero. Neste caso, o vetor de polarização dos fônons é paralelo ao vetor de onda da CDW, $\mathbf{e}_{\lambda} = \hat{\mathbf{Q}}_i$, onde

$$\begin{aligned} \vec{\delta}_1 &= \frac{a}{2} \left(\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y} \right) \\ \vec{\delta}_2 &= \frac{a}{2} \left(\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y} \right) \\ \vec{\delta}_3 &= a\hat{y}, \end{aligned}$$

definem os três vetores de uma base hexagonal no espaço real, e

$$\mathbf{Q}_i = \frac{\mathbf{b}_i}{3},$$

é o vetor de CDW definido a partir da base hexagonal no espaço recíproco,

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \hat{x} \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{4\pi}{2\sqrt{3}a} \left(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y} \right) \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{4\pi}{2\sqrt{3}a} \left(-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y} \right). \end{aligned}$$

Considere a direção de CDW \mathbf{Q}_1 . É conveniente calcular os seguintes produtos:

$$\vec{\delta}_1 \cdot \mathbf{Q}_1 = Q_1 a \cos \frac{\pi}{6}, \quad \vec{\delta}_2 \cdot \mathbf{Q}_1 = -Q_1 a \cos \frac{\pi}{6}, \quad \vec{\delta}_3 \cdot \mathbf{Q}_1 = 0.$$

Assim, se $\mathbf{k} \cdot \mathbf{Q}_1 = kQ_1 \cos \theta$, então

$$\begin{aligned}
 g_L(\mathbf{k}, \mathbf{Q}_1) &\propto a \cos \frac{\pi}{6} \sin \left(\frac{Q_1 a}{2} \cos \frac{\pi}{6} \right) \times \\
 &\quad \left\{ \cos \left[ka \cos \theta \cos \frac{\pi}{6} + \frac{Q_1 a}{2} \cos \frac{\pi}{6} + ka \sin \theta \sin \frac{\pi}{6} \right] \right. \\
 &\quad \left. + \cos \left[ka \cos \theta \cos \frac{\pi}{6} + \frac{Q_1 a}{2} \cos \frac{\pi}{6} - ka \sin \theta \sin \frac{\pi}{6} \right] \right\} \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Notando que a igualdade $\cos(u + v) + \cos(u - v) = 0$ é satisfeita quando

$$\cos u \cos v = 0,$$

então

$$\begin{aligned}
 u &= ka \cos \theta \cos \frac{\pi}{6} + \frac{Q_1 a}{2} \cos \frac{\pi}{6} = (2m + 1) \frac{\pi}{2} \\
 v &= ka \sin \theta \sin \frac{\pi}{6} = (2n + 1) \frac{\pi}{2}.
 \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
 \cos \theta &= \frac{1}{k} \left[-\frac{Q_1}{2} + \frac{(2m + 1)\pi}{2a'} \right] = \frac{1}{k} \left[\frac{Q_1}{4} + \frac{m\pi}{a'} \right] \\
 \sin \theta &= \frac{1}{k} \frac{(2n + 1)\pi}{a'},
 \end{aligned}$$

com $a' = a\frac{\sqrt{3}}{2}$ o parâmetro de rede projetado na direção \mathbf{Q}_1 . As demais direções nodais indicadas na Fig. 3.1 aparecem por simetria.

Apêndice C

Excitações de plasmon

C.1 Função dielétrica

A frequência dos modos coletivos Ω_p é determinada através dos zeros da função dielétrica,

$$\epsilon(\Omega_p, \mathbf{k}) = \frac{V_0(\mathbf{k})}{V_{ef}(\Omega_p, \mathbf{k})} = 0. \quad (\text{C.1})$$

Proibindo o espalhamento eletrônico entre planos diferentes, os efeitos de muitos corpos sobre as interações de carga em todo o espaço são introduzidos pela susceptibilidade retardada χ ,

$$\begin{aligned} V_{ef}(\omega, \mathbf{k}) &= V_0(\mathbf{k}) + V_0(\mathbf{k}) \chi^R(\omega, \mathbf{q}) V_0(\mathbf{k}) \\ &= V_0(\mathbf{k}) + V_0(\mathbf{k}) \chi^{0R}(\omega, \mathbf{q}) V_{ef}(\omega, \mathbf{k}), \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

em aproximação de RPA, com $\mathbf{k} = (q, k_z)$, q o momento na direção dos planos, k_z a direção normal a eles e χ^{0R} a susceptibilidade retardada não interagente. Disso resulta a equação de Dyson,

$$V_{ef}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{V_0(\mathbf{k})}{1 - V_0(\mathbf{k}) \chi^{0R}(\omega, \mathbf{q})},$$

onde V_0 é o potencial de Coulomb não interagente num sistema infinito de planos carregados e com distância de separação d ,

$$\begin{aligned} V_0(k) &= \frac{e^2}{\epsilon_0} d \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int d^2R \frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{R^2 + (ld)^2}} e^{-ik_z ld} \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0} d \sum_l e^{-ik_z ld} \int_0^{\infty} dR \frac{R}{\sqrt{R^2 + (ld)^2}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-iqR \cos \theta} \\ &= 2\pi d \frac{e^2}{q} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{-ik_z lc} e^{-q|l|d} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2\pi d \frac{e^2}{\epsilon_0 q} \left(1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \cos(k_z l d) e^{-q l d} \right) \\
&= 2\pi d \frac{e^2}{\epsilon_0 q} \frac{\sinh(qd)}{\cosh(qd) - \cos(k_z d)}.
\end{aligned}$$

Pela definição da Eq. (C.1), a função dielétrica é portanto

$$\epsilon(\Omega_p, \mathbf{k}) \equiv 1 - V_0(\mathbf{k}) \Pi^{0R}(\Omega_p, \mathbf{q}). \quad (\text{C.3})$$

C.2 Relações de Kramers-Kronig

Em termos gerais, dada uma função $g(\omega)$ analítica na parte superior do plano complexo e que vai a zero no limite em que $|\omega| \rightarrow \infty$ (o que garante que g não tem polos e nem ramos de descontinuidade acima do eixo real), essa função deve satisfazer a relação de Kramers-Kronig [98],

$$g(\omega) = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' g(\omega') \frac{1}{\omega' - \omega},$$

onde \mathcal{P} é a parte principal da integral. No caso das funções de susceptibilidade χ , a primeira condição, que garante a analiticidade da função acima do eixo real, é satisfeita pela parte retardada χ^R , cujos polos estão na parte inferior do plano. A segunda hipótese, da convergência, é em geral garantida por leis de conservação baseadas em regras de soma. As relações de Kramer-Kronig são usualmente escritas em termos da parte real e imaginária de χ^R ,

$$\text{Re} \chi^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im} \chi^R(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega} \quad (\text{C.4})$$

$$\text{Im} \chi^R(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Re} \chi^R(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega}. \quad (\text{C.5})$$

C.3 Função espectral interbanda

A intenção deste apêndice é calcular a integral (4.14):

$$\begin{aligned}
\text{Im} \chi_{inter}^{0R}(q) &= -\frac{\pi}{d \hbar v_{\Delta}} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(1 - \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}})}{k |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \theta(k - k_F^*) \times \\
&\quad \times [\delta(\nu - k - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|) - \delta(\nu + k + |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|)]. \quad (\text{C.6})
\end{aligned}$$

Vamos considerar o caso $\nu > 0$. O argumento da primeira função delta será zero se $\nu \geq \bar{q}$. Respeitando essa desigualdade, podemos escrever que $(\nu - k)^2 = k^2 + \bar{q}^2 + 2k\bar{q} \cos \theta$, ou de forma

equivalente

$$\nu^2 - \bar{q}^2 - 2k(\nu + \bar{q} \cos \theta) = 0. \quad (\text{C.7})$$

Em seguida, definindo

$$k = f^{-1}(\nu) \equiv \frac{\nu^2 - \bar{q}^2}{2(\nu + \bar{q} \cos \theta)}, \quad (\text{C.8})$$

se

$$\begin{aligned} \delta(\nu - k - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|) &= \delta(\nu - f(k)) \\ &= \delta(f(f^{-1}(\nu)) - f(k)) \\ &= \delta(f(a) - f(k)) \\ &= \frac{1}{|f'(a)|} \delta(a - k), \end{aligned}$$

onde

$$\nu = f(a) \equiv a + \sqrt{a^2 + \bar{q}^2 + 2a\bar{q} \cos \theta}, \quad (\text{C.9})$$

então

$$f'(a) = 1 + \frac{a + \bar{q} \cos \theta}{|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}|}, \quad (\text{C.10})$$

com $\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{k}}$. Portanto,

$$\text{Im } \chi_{inter}^{0R}(\mathbf{q}, \nu) = \frac{\pi}{c \hbar v_{\Delta}} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(\frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}})}{k |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} - 1 \right) \frac{|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}|}{\|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}\| + a + \bar{q} \cos \theta} \theta(k - k_F^*) \delta(k - a) \quad (\text{C.11})$$

Normalizando todos os momentos pelo momento de corte Λ , a função degrau acima implica em $k_F^* \leq k \leq 1$. Isto dá origem à desigualdade

$$k_F^* \leq \frac{\nu^2 - \bar{q}^2}{2(\nu + \bar{q} \cos \theta)} \leq 1.$$

Uma vez que $\nu \geq \bar{q}$, como mostrado antes,

$$2\nu + 2\bar{q} \cos \theta \geq \nu^2 - \bar{q}^2 \geq 2k_F^*(\nu + \bar{q} \cos \theta), \quad (\text{C.12})$$

ou seja

$$\cos \theta \geq \frac{\nu^2 - 2\nu - \bar{q}^2}{2\bar{q}} \equiv \alpha \quad (\text{C.13})$$

$$\cos \theta \leq \frac{\nu^2 - 2k_F^* \nu - \bar{q}^2}{2k_F^* \bar{q}} \equiv \beta. \quad (\text{C.14})$$

A desigualdade (C.13) define um limite inferior de integração na variável angular θ quando

$\nu > 2 - \bar{q}$, enquanto que a Eq. (C.14) leva a um limite superior quando $\nu < 2k_F + \bar{q}$. Como $-1 \leq \cos \theta \leq 1$, a Eq. (C.12) implica na relação

$$2\nu + 2\bar{q} \geq \nu^2 - \bar{q}^2 \geq 2k_F^*(\nu - \bar{q})$$

que será verdadeira sempre que

$$\gamma \leq \nu \leq 2 + \bar{q},$$

onde

$$\gamma = \begin{cases} \bar{q}, & \text{se } \bar{q} > k_F \\ 2k_F - \bar{q}, & \text{se } \bar{q} < k_F. \end{cases}$$

Existem portanto três diferentes domínios de integração em θ ,

$$\Omega = \begin{cases} \alpha \leq \cos \theta \leq 1 & , & \text{se } 2 - \bar{q} < \nu \leq 2 + \bar{q} \\ -1 \leq \cos \theta \leq 1 & , & \text{se } 2k_F^* + \bar{q} \leq \nu \leq 2 - \bar{q} \\ -1 \leq \cos \theta \leq \beta & , & \text{se } \gamma \leq \nu < 2k_F^* + \bar{q}. \end{cases} \quad (\text{C.15})$$

Com isso, já temos tudo o que é necessário para calcular a integral (C.11). Notando da Eq. (C.19) que

$$|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}| = \nu - a,$$

e da Eq. (C.8) que

$$a = \frac{\nu^2 - \bar{q}^2}{2(\nu + \bar{q} \cos \theta)},$$

basta manipular a integral para encontrar

$$\begin{aligned} \text{Im}\Pi_1^{0R}(q) &= \frac{\pi s}{d \hbar v_\Delta} \int_0^1 \frac{dk}{2\pi} \int_\Omega \frac{d\theta}{2\pi} k \left(\frac{k + \bar{q} \cos \theta - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|}{|\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \times \\ &\quad \times \frac{|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}|}{|a + a\bar{q} \cos \theta + |\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}||} \delta(k - a) \\ &= -\frac{s}{8\pi d \hbar v_\Delta} (\nu^2 - \bar{q}^2) \int_\Omega d\theta \frac{\bar{q}^2 \sin^2 \theta}{(\nu + \bar{q} \cos \theta)^3} \\ &= -\frac{s}{4\pi d \hbar v_\Delta} (\nu^2 - \bar{q}^2) \begin{cases} \int_\alpha^1 du \frac{\bar{q}^2 \sqrt{1-u^2}}{(\nu + \bar{q}u)^3} & , & 2 - \bar{q} < \nu \leq 2 + \bar{q} \\ \int_{-1}^1 du \frac{\bar{q}^2 \sqrt{1-u^2}}{(\nu + \bar{q}u)^3} & , & 2k_F^* + \bar{q} \leq \nu \leq 2 - \bar{q} \\ \int_{-1}^\beta du \frac{\bar{q}^2 \sqrt{1-u^2}}{(\nu + \bar{q}u)^3} & , & \gamma \leq \nu < 2k_F^* + \bar{q}. \end{cases} \end{aligned}$$

Essa integral é tabelada na Ref. [74], utilizando a substituição de variável $z = \nu + \bar{q}u$. Após alguma manipulação algébrica,

$$\text{Im } \chi_a^{0R}(q) = -\frac{s}{8\pi d \hbar v_\Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\nu^2 - \bar{q}^2}} \times \begin{cases} \frac{2-\nu}{\bar{q}} \sqrt{1 - \left(\frac{2-\nu}{\bar{q}}\right)^2} + \left[\frac{\pi}{2} + \arcsin\left(\frac{2-\nu}{\bar{q}}\right)\right] & , 2 - \bar{q} < \nu \leq 2 + \bar{q} \\ \pi & , 2k_F^* + \bar{q} \leq \nu \leq 2 - \bar{q} \\ \frac{\nu - 2k_F^*}{\bar{q}} \sqrt{1 - \left(\frac{\nu - 2k_F^*}{\bar{q}}\right)^2} + \left[\arcsin\left(\frac{\nu - 2k_F^*}{\bar{q}}\right) + \frac{\pi}{2}\right] & , \nu \leq \nu < 2k_F^* + \bar{q} \end{cases}$$

e zero do contrário.

C.4 Função espectral intrabanda

Para calcular a integral (4.20)

$$\text{Im } \Pi_2^{0R} = -\frac{1}{\hbar v_\Delta d} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(1 + \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}})}{k|\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|}\right) \theta(k_F^* - k) \theta(|\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| - k_F) \times \\ \times [\delta(\nu + k - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|) - \delta(\nu + |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| - k)], \quad (\text{C.16})$$

vamos tomar o caso $\nu > 0$, que satisfaz apenas o argumento da primeira função delta. Não é difícil perceber que a desigualdade $\nu \leq \bar{q}$ deve ser sempre satisfeita nesse caso. Desse modo,

$$\nu^2 - \bar{q}^2 - 2k(\bar{q} \cos \theta - \nu) = 0. \quad (\text{C.17})$$

Vamos repetir o mesmo argumento anterior. Definindo

$$k = g^{-1}(\nu) \equiv \frac{\nu^2 - \bar{q}^2}{2(\bar{q} \cos \theta - \nu)}, \quad (\text{C.18})$$

se

$$\begin{aligned} \delta(\nu + k - |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|) &= \delta(\nu - g(k)) \\ &= \delta(g(g^{-1}(\nu)) - f(k)) \\ &= \delta(g(a) - g(k)) \\ &= \frac{1}{|g'(a)|} \delta(a - k), \end{aligned}$$

onde

$$\nu = g(a) \equiv -a + \sqrt{a^2 + \bar{q}^2 + 2a\bar{q} \cos \theta}, \quad (\text{C.19})$$

então

$$g'(a) = -1 + \frac{a + \bar{q} \cos \theta}{|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}|}, \quad (\text{C.20})$$

com $\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{k}}$. Assim,

$$\begin{aligned} \text{Im } \Pi_2^{0R}(q) = & -\frac{\pi}{c \hbar v_\Delta} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(1 + \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}})}{k |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \frac{|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}|}{|a + \bar{q} \cos \theta - |\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}||} \times \\ & \times \theta(k_F - k) \theta(|\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}| - k_F^*) \delta(k - a) \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

Notando da Eq. (C.16) que $k_F^* - \nu \leq k \leq k_F^*$ ($\nu \leq \bar{q}$), então

$$k_F^* - \nu \leq \frac{\bar{q}^2 - \nu^2}{\nu - \bar{q} \cos \theta} \leq k_F^*. \quad (\text{C.22})$$

com $\nu - \bar{q} \cos \theta > 0$. O lado direito da desigualdade (C.22) pode ser reescrito como

$$\cos \theta \leq \frac{\nu^2 - \bar{q}^2 + 2k_F^* \nu}{2k_F^* \bar{q}} \equiv \beta. \quad (\text{C.23})$$

É direto verificar que $\beta \leq 1$ sempre que $\nu \leq \bar{q}$ e que $\beta > -1$ para $\nu > \bar{q} - 2k_F^*$. Se $\nu < k_F^*$, o lado direito da Eq. (C.22) implica em

$$\cos \theta \geq \frac{\nu^2 - \bar{q}^2 + 2(k_F^* - \nu)\nu}{2(k_F^* - \nu)\bar{q}} \equiv \alpha \quad (\text{C.24})$$

Esta última desigualdade representa uma restrição para o limite inferior de $\cos \theta$ quando $\alpha > -1$, o que é verdade sempre que $0 \leq \nu \leq 2k_F^* - \bar{q}$. Com esses resultados, identificamos três domínios de integração distintos:

1. $\alpha > -1$ e $\nu < k_F^*$

$$\Omega_1 \equiv \alpha \leq \cos \theta \leq \beta,$$

com

$$\begin{aligned} 0 \leq \nu \leq 2k_F^* - \bar{q} & \quad (\alpha > -1) \\ \bar{q} - 2k_F^* \leq \nu & \quad (\beta > -1), \end{aligned}$$

o que é equivalente a $0 \leq \nu < \gamma'$, onde

$$\gamma' = \begin{cases} \bar{q}, & \text{se } \bar{q} \leq k_F^* \\ 2k_F^* - \bar{q}, & \text{se } k_F^* < \bar{q} < 2k_F^* \end{cases}. \quad (\text{C.25})$$

2. $\alpha < -1$ e $\nu \leq k_F^*$

$$\Omega_2 \equiv -1 \leq \cos \theta \leq \beta.$$

Este domínio é limitado pelas desigualdades

$$\begin{aligned} 2k_F^* - \bar{q} &\leq \nu & (\alpha < -1) \\ \bar{q} - 2k_F^* &\leq \nu & (\beta > -1). \end{aligned}$$

Lembrando que $\nu \leq \bar{q}$, isto emplica que $\gamma' \leq \nu < k_F^*$, onde

$$\gamma^{(2)} = \begin{cases} 2k_F^* - \tilde{q}, & \text{se } k_F^* < \tilde{q} \leq 2k_F^* \\ \tilde{q} - 2k_F^*, & \text{se } 2k_F^* < \tilde{q} \leq 3k_F^* \end{cases} \quad (\text{C.26})$$

3. $\nu > k_F^*$

$$\Omega_3 \equiv -1 \leq \cos \theta \leq \beta.$$

Uma vez que $\bar{q} - 2k_F^* \leq \nu$ ($\beta > -1$), e $\nu \leq \bar{q}$, este domínio é válido para $\gamma^{(3)} \leq \nu \leq \bar{q}$, onde

$$\gamma^{(3)} = \begin{cases} k_F^*, & \text{se } \bar{q} \leq 3k_F^* \\ \bar{q} - 2k_F^*, & \text{se } \bar{q} \geq 3k_F^* \end{cases}. \quad (\text{C.27})$$

Os três domínios podem ser reagrupados em

$$\Omega \equiv \begin{cases} -1 \leq \cos \theta \leq \beta, & \text{se } \gamma' \leq \nu \leq \bar{q} \\ \alpha \leq \cos \theta \leq \beta, & \text{se } 0 \leq \nu < \gamma'' \end{cases}, \quad (\text{C.28})$$

onde

$$\gamma'' = \begin{cases} 2k_F^* - \bar{q}, & \text{se } k_F^* \leq \bar{q} \leq 2k_F^* \\ \bar{q} - 2k_F^*, & \text{se } \bar{q} \geq 2k_F^* \end{cases}. \quad (\text{C.29})$$

Voltando à Eq. (C.21),

$$\begin{aligned} \text{Im } \Pi_2^{0R}(q) &= -\frac{\pi}{d\hbar v_\Delta} \int_0^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \int_\Omega \frac{d\theta}{2\pi} k \left(\frac{\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}} \cos \theta + |\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|}{|\mathbf{k} + \bar{\mathbf{q}}|} \right) \frac{|\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}|}{|a + \bar{\mathbf{q}} \cos \theta - |\mathbf{a} + \bar{\mathbf{q}}||} \delta(k - a) \\ &= \frac{1}{4\pi d\hbar v_\Delta} (\bar{q}^2 - \nu^2) \int_\Omega d\theta \frac{\tilde{q} \sin^2 \theta}{(\tilde{q} \cos \theta - \nu)^3} \\ &= \frac{1}{4\pi d\hbar v_\Delta} (\bar{q}^2 - \nu^2) \begin{cases} \int_{-1}^\beta du \frac{\tilde{q}^2 \sqrt{1-u^2}}{(\tilde{q}u - \nu)^3}, & \text{se } \gamma' \leq \nu \leq \bar{q} \\ \int_\alpha^\beta du \frac{\tilde{q}^2 \sqrt{1-u^2}}{(\tilde{q}u - \nu)^3}, & \text{se } 0 \leq \nu \leq \gamma'' \end{cases}. \end{aligned}$$

Esta integral é semelhante ao caso tratado na seção anterior e pode ser encontrada na Ref.

[74], fazendo a substituição de variável $z = \bar{q}u - \nu$. O resultado final é

$$\text{Im } \Pi_2^{0R}(q) = \frac{1}{8\pi d\hbar v \Delta} \frac{\bar{q}^2}{\sqrt{\bar{q}^2 - \nu^2}} \begin{cases} -\Gamma(-\nu), & \text{se } \gamma' \leq \nu \leq \tilde{q} \\ \Gamma(\nu) - \Gamma(-\nu), & \text{se } 0 \leq \nu \leq \gamma'' \end{cases}, \quad (\text{C.30})$$

onde

$$\Gamma(\nu) = \frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}} \sqrt{\left(\frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}}\right)^2 - 1} - \ln \left[\frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}} + \sqrt{\left(\frac{2k_F^* - \nu}{\bar{q}}\right)^2 - 1} \right].$$

Apêndice D

Modos normais

D.1 Minimização variacional

A dedução das equações (5.10)–(5.16) vem da aplicação da equação de Euler-Lagrange aos campos A^μ , X^i , ρ_s , φ e Λ . Vamos começar com os potenciais A^μ , escrevendo

$$\partial^\beta \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial^\beta A^\alpha)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A^\alpha} = 0. \quad (\text{D.1})$$

Calculando primeiro o termo \mathcal{L}_{el} em (5.5),

$$\begin{aligned} \partial^\beta \left[\frac{\partial}{\partial (\partial^\beta A^\alpha)} (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}) \right] &= \partial^\beta \left[\frac{\partial}{\partial^\beta A^\alpha} \left\{ (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) (\partial^\lambda A^\sigma - \partial^\sigma A^\lambda) \right\} g_{\lambda\mu} g_{\sigma\nu} \right] \\ &= \partial^\beta \left[(\partial^\lambda A^\sigma - \partial^\sigma A^\lambda) (\delta_\beta^\mu \delta_\alpha^\nu - \delta_\beta^\nu \delta_\alpha^\mu) \right. \\ &\quad \left. + (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) (\delta_\beta^\lambda \delta_\alpha^\sigma - \delta_\beta^\sigma \delta_\alpha^\lambda) \right] g_{\lambda\mu} g_{\sigma\nu} \\ &= \partial^\beta [(\partial_\beta A_\alpha - \partial_\alpha A_\beta) - (\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha) \\ &\quad + (\partial_\beta A_\alpha - \partial_\alpha A_\beta) - (\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha)] \\ &= 4 \partial^\beta F_{\beta\alpha} \\ &= 4 (\square A_\alpha - \partial_\alpha \partial^\beta A_\beta) \\ &= 4 (\square A_\alpha - \partial_\alpha (\partial^0 A_0)), \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

no calibre transversal. Os outros termos da Lagrangeana que envolvem campos eletromagnéticos são a parte supercondutora, cuja substituição no lado esquerdo da Eq. (D.1) é igual a

$$-\frac{\partial}{\partial A^\alpha} [\mathcal{L}_{GL}] = \frac{e^* \Phi_0^2}{m^* c} (\hbar \nabla \varphi - \frac{e^*}{c} A_i) \delta_\alpha^i - \frac{e^* \Psi_0^2}{m^* v_s^2} (\hbar c \partial^0 \varphi + e^* \phi) \delta_\alpha^0, \quad (\text{D.3})$$

o termo de acoplamento piezoelétrico,

$$\begin{aligned} \partial^\beta \left[\frac{\partial}{\partial(\partial^\beta A^\alpha)} (\Delta^i_j X_i (\partial^0 A^j - \partial^j A^0)) \right] &= \Delta^i_j \partial^\beta \left[X_i (\delta_\beta^0 \delta_\alpha^j - \delta_\beta^j \delta_\alpha^0) \right] \\ &= \Delta^i_j (\partial^0 X_i \delta_\alpha^j - \partial^j X_i \delta_\alpha^0), \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

e o vínculo representado pela equação de Poisson (5.9), que envolve a aplicação da equação de Euler-Lagrange em segunda ordem,

$$\begin{aligned} -\partial^\gamma \partial_\beta \left[\frac{\partial}{\partial(\partial^\gamma \partial_\beta A^\alpha)} (-\Lambda \partial^i \partial_i A^0) \right] &= \partial^\gamma \partial_\beta \left[\delta_\gamma^i \delta_i^\beta \delta_\alpha^0 \Lambda \right] \\ &= \partial^i \partial_i \Lambda \delta_\alpha^0. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Juntando os termos (D.2), (D.3), (D.4) e (D.5) a equação que minimiza a parte eletromagnética é

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4\pi} [\square A_\alpha - \partial_\alpha (\partial^0 A_0)] - \Delta^i_j \partial^j X_i \delta_\alpha^0 + \Delta^i_j \partial^0 X_i \delta_\alpha^j \\ + \frac{e^* \Phi_0^2}{m^* c} (\hbar \nabla \varphi - \frac{e^*}{c} A_i) \delta_\alpha^i - \frac{e^*}{m^* v_s^2} \Phi_0^2 (\hbar c \partial^0 \varphi + e^* \phi) \delta_\alpha^0 + \partial^i \partial_i \Lambda \delta_\alpha^0 = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Note que para $\alpha = i$ (com $i = 1, 2, 3$) a equação acima é exatamente a equação de Maxwell não homogênea

$$-\square \mathbf{A} - \partial_0 \nabla \phi + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_s = 0,$$

definindo a supercorrente

$$\mathbf{j}_s = \frac{e^* \Phi_0^2}{m^*} \left[\hbar \nabla \varphi - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right] + c \delta \partial_0 \mathbf{X}. \quad (\text{D.7})$$

Para $\alpha = 0$ a Eq.(D.6) corresponde à equação de Poisson

$$\nabla^2 \phi + 4\pi \rho_s = 0$$

com a densidade de carga definida por

$$\rho_s = -\frac{e^* \Phi_0^2}{m^* v_s^2} (\hbar c \partial_0 \varphi + e^* \phi) - \delta \nabla \cdot \mathbf{X} - \nabla^2 \Lambda.$$

As outras equações são:

$$\begin{aligned} \partial^\beta \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial^\beta \rho_s)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho_s} &= \frac{1}{2} \frac{c^2}{\omega_p^2} \partial^\beta \left[\frac{\partial}{\partial^\beta \rho_s} \Omega \partial^0 \rho_s \partial^0 \rho_s \right] + \Omega \rho_s - 4\pi \Lambda \\ &= \frac{1}{2} \frac{c^2 \Omega}{\omega_p^2} \partial^\beta [\partial^0 \rho_s \delta_\beta^0 + \partial^0 \rho_s \delta_\beta^0] + \Omega \rho_s - 4\pi \Lambda \\ &= \Omega [c^2 \omega_p^{-2} \partial_0^2 \rho_s + \rho_s] - 4\pi \Lambda = 0 \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

para a densidade de carga, atuando sobre o termo de plasmon e sobre o vínculo (5.9),

$$\begin{aligned}
\partial^\beta \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{GL}}{\partial (\partial^\beta \varphi)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}_{GL}}{\partial \varphi} &= -\frac{\hbar \Phi_0^2}{m^*} \partial^\beta \left(-\hbar \partial_i \varphi - \frac{e^*}{c} A_i \right) \delta_\beta^i + \frac{\hbar \Phi_0^2 c}{m^* v_s^2} \partial^\beta [\hbar c \partial_0 \varphi + e^* \phi] \delta_\beta^0 \\
&= -\frac{\hbar^2 \Phi_0^2}{m^*} \nabla^2 \varphi + \frac{\hbar \Phi_0^2 c}{m^* v_s^2} [\hbar c (\partial^0)^2 \varphi + e^* \partial^0 \phi] \\
&= -\frac{\hbar^2 \Phi_0^2}{m^*} \left[\nabla^2 \varphi - \frac{c^2}{v_s^2} (\partial^0)^2 \varphi - \frac{c e^*}{\hbar v_s^2} \partial^0 \phi \right] = 0, \tag{D.9}
\end{aligned}$$

para a fase do parâmetro de ordem supercondutor φ e

$$\begin{aligned}
\partial^\beta \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial^\beta X^\alpha)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial X^\alpha} &= \frac{1}{2} \kappa \partial^\beta \left[\frac{\partial}{\partial^\beta X^\alpha} \left(c^2 \partial^0 X^i \partial^0 X^j - v_{ph}^2 \partial^k X^i \partial^l X^j g_{kl} \right) g_{ij} \right] \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial X^\alpha} \left[\Delta^i_j X^k F^{0j} g_{ik} \right] \\
&= \kappa \left(c^2 \partial_0^2 X_i - v_{ph}^2 \nabla^2 X_i \right) \delta_\alpha^i - \delta_{i\alpha} \Delta^i_j F^{0j} = 0, \tag{D.10}
\end{aligned}$$

para a deformação do cristal X .

D.2 Modos quase-estáticos

Partindo da densidade de carga (5.22)

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = 8\pi \frac{\Lambda(\mathbf{k})}{\Omega} \delta(\omega). \tag{D.11}$$

para $\Lambda(\mathbf{k})$ não identicamente zero e substituindo esse resultado na equação de Poisson (5.10) com uma carga de prova na origem, vamos encontrar

$$\begin{aligned}
\phi(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{4\pi}{k^2} (\rho_s(\omega, \mathbf{k}) + 2\pi Q \delta(\omega)) \\
&= \frac{4\pi}{k^2} \left(8\pi \frac{\Lambda(\mathbf{k})}{\Omega} + 2\pi Q \right) \delta(\omega) \\
&= 4\pi Q(\mathbf{k}) \frac{1}{k^2} \delta(\omega). \tag{D.12}
\end{aligned}$$

Em seguida, vamos resolver a Eq. (5.18)

$$\left(-\tilde{k}^2 + \frac{\omega^2}{v_s^2} \right) \varphi(\omega, \mathbf{k}) - i \frac{e^*}{\hbar c} \left(\frac{c\omega}{v_s^2} \phi(\omega, \mathbf{k}) + \tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\omega, \mathbf{k}) \right) = 0$$

e a componente z da Eq. (5.11),

$$\frac{\omega}{c} k_z \phi(\omega, \mathbf{k}) + \left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 - \frac{4\pi}{c^2} \tau \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} \right) A_z(\omega, \mathbf{k}) + \frac{4\pi}{c} \frac{e^* \Phi_0^2}{m^*} i \tau k_z \hbar \varphi(\omega, \mathbf{k}) = 0.$$

Percebendo que $\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{A} + k_z(\tau^2 - 1)A_z = k_z(\tau^2 - 1)A_z$, então

$$\begin{aligned} \left(\frac{\omega^2}{v_s^2} - \tilde{k}^2 \right) \varphi(\omega, \mathbf{k}) &= i \frac{e^*}{\hbar c} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\omega, \mathbf{k}) \\ &= i \frac{e^*}{\hbar c} (\tau^2 - 1) k_z A_z(\omega, \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Existem dois cenários de soluções dependendo do segundo membro da Eq. (D.13) ser ou não identicamente zero. *Suponha* que $(\tau^2 - 1)k_z A_z \neq 0$. Nesse caso,

$$\varphi(\omega, \mathbf{k}) = i \frac{e^* v_s^2}{\hbar c} (\tau^2 - 1) \frac{k_z A_z(\omega, \mathbf{k})}{\omega^2 - v_s^2 \tilde{k}^2}, \quad (\text{D.14})$$

onde A_z satisfaz à Equação:

$$A_z(\omega, \mathbf{k}) \left[\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 - \frac{4\pi e^{*2} \Phi_0^2}{c^2 m^*} \left(\tau + \tau(\tau^2 - 1) \frac{v_s^2 k_z^2}{\omega^2 - v_s^2 \tilde{k}^2} \right) \right] = 0, \quad (\text{D.15})$$

Esta equação será verdadeira em todo o espaço k se

$$A_z(\omega, \mathbf{k}) = A_{z0}(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_0), \quad (\text{D.16})$$

com ω_0 o zero da expressão (D.15). Em seguida, vamos resolver a equação para as componentes \vec{A} na Eq. (5.18),

$$\begin{aligned} \frac{\omega}{c} \vec{q} \phi(\omega, \mathbf{k}) + \left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 \right) \vec{A}(\omega, \mathbf{k}) + \frac{4\pi e^* \Phi_0^2}{c m^*} i \vec{q} \hbar \varphi(\omega, \mathbf{k}) \\ - \frac{4\pi e^{*2} \Phi_0^2}{c^2 m^*} \vec{A}(\omega, \mathbf{k}) + \frac{4\pi}{c} i \omega \delta \vec{X}(\omega, \mathbf{k}) = 0 \end{aligned}$$

e a equação dos fônons (5.20),

$$\kappa (-\omega^2 + \omega_{ph}^2) \vec{X}(\omega, \mathbf{k}) - i \delta \left[\vec{q} \phi(\omega, \mathbf{k}) + \frac{\omega}{c} \vec{A}(\omega, \mathbf{k}) \right] = 0.$$

As soluções são:

$$\vec{A}(\omega, \mathbf{k}) = -4\pi i \frac{\hbar e^* \Phi_0^2}{m^* c} \vec{q} \frac{\varphi(\omega, \mathbf{k})}{\mathcal{I}(\omega, \mathbf{k})} \quad (\text{D.17})$$

$$\vec{X}(\omega, \mathbf{k}) = -i \frac{\delta}{\kappa} \frac{4\pi \vec{q}}{\omega^2 - \omega_{ph}^2} \left[\frac{\mathcal{P}(\mathbf{k})}{k^2} \delta(\omega) - i \frac{\omega}{c} \frac{\hbar e^* \Phi_0^2}{m^* c} \frac{\varphi(\mathbf{k}, \omega)}{\mathcal{I}(\omega, \mathbf{k})} \right]. \quad (\text{D.18})$$

onde

$$\mathcal{I}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\omega^2}{c^2} - k^2 - \frac{4\pi e^{*2} \Phi_0^2}{c^2 m^*} + \frac{4\pi}{c^2} \frac{(\delta \omega)^2}{\kappa (\omega^2 - \omega_{ph}^2)},$$

Substituindo a Eq. (C.13) na Eq. (D.17) e aplicando o calibre transversal,

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A} &= k_z A_z(\omega, \mathbf{k}) + q^2 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* c^2} (\tau^2 - 1) \frac{v_s^2 k_z}{\omega^2 - v_s^2 \tilde{k}^2} \frac{A_z(\mathbf{k})}{\mathcal{I}(\omega, \mathbf{k})} \\ &= A_z(\omega, \mathbf{k}) \left[k_z + q^2 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* c^2} (\tau^2 - 1) \frac{v_s^2 k_z}{\omega^2 - v_s^2 \tilde{k}^2} \frac{1}{\mathcal{I}(\omega, \mathbf{k})} \right] \\ &= 0. \end{aligned}$$

A solução de menor energia que satisfaz a igualdade acima é

$$A_z(\omega, \mathbf{k}) = A_{z0}(\bar{q}) \delta(k_z) \delta(\omega - \omega_0), \quad (\text{D.19})$$

e portanto $k_z A_z = 0$, contrariando a hipótese inicial da Eq. (C.14). Isso significa que a componente z do potencial vetor se desacopla da fase φ , e portanto $\varphi(\omega, \mathbf{k}) = \varphi'(\hat{\mathbf{k}}) \delta(\omega - v_s \tilde{k})$. Voltando à Eq. (D.17) e aplicando novamente a condição de calibre, é trivial ver que $\varphi'(\hat{\mathbf{k}}) = \varphi_0(k_z) \delta(q)$. Tomando a transformada de Fourier da equação de carga (5.12),

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) + \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* v_s^2} [\hbar i \omega \varphi(\omega, \mathbf{k}) + e^* \phi(\omega, \mathbf{k})] + i \delta \bar{q} \cdot \vec{X}(\omega, \mathbf{k}) - k^2 \Lambda(\mathbf{k}) \delta(\omega) = 0,$$

e substituindo as Eq. (D.11), (D.12) e (D.18), não é difícil ver que a dinâmica da fase do parâmetro de ordem é completamente suprimida, ou seja,

$$\varphi(\omega, \mathbf{k}) = \varphi_0(\hat{\mathbf{k}}) \delta(k) \delta(\omega),$$

satisfazendo a equação de vórtice para campo zero $\nabla^2 \varphi = 0$. A parte estática da equação da carga satisfaz à equação:

$$\frac{2\pi \Lambda(\mathbf{k})}{\Omega} \left(1 + \frac{k_0^2}{k^2} \right) + \frac{k_0^2}{k^2} Q = 0, \quad (\text{D.20})$$

onde

$$k_0^2 = 4\pi \left(\frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* v_s^2} - \frac{\delta^2}{\kappa v_{ph}^2} \right) \quad (\text{D.21})$$

é o comprimento de Thomas-Fermi reescalado pelo acoplamento piezoelétrico δ . A solução da Eq. (D.20) para $Q = 0$ é,

$$\Lambda(\mathbf{k}) = \Lambda_0(\hat{\mathbf{k}}) \delta(k^2 + k_0^2). \quad (\text{D.22})$$

Para Q diferente de zero, a solução tem a forma,

$$\frac{\Lambda(\mathbf{k})}{\Omega} = - \frac{Q k_0^2}{k^2 + k_0^2}. \quad (\text{D.23})$$

cuja solução de carga dá exatamente a distribuição de Thomas-Fermi para a blindagem do

potencial de Coulomb:

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = -2\pi \frac{Q k_0^2}{k^2 + k_0^2} \delta(\omega). \quad (\text{D.24})$$

D.3 Modos dinâmicos

Vamos derivar as Eq. (5.26)–(5.30) e por último demonstrar a Eq. (5.31). Começando pela solução tipo plasmon da densidade de carga

$$\rho_s(\omega, \mathbf{k}) = \rho_0(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})), \quad (\text{D.25})$$

para uma função geral $\rho_0(\mathbf{k})$ e substituindo na equação de Poisson (5.10), temos

$$\phi(\omega, \mathbf{k}) = 4\pi \frac{\rho_0(\mathbf{k})}{k^2} \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})). \quad (\text{D.26})$$

Em seguida, vamos resolver separadamente a componente z das Eq. (5.11) e (5.19),

$$\frac{\omega}{c} k_z \phi(\omega, \mathbf{k}) + \left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 - \frac{4\pi}{c^2} \tau \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} \right) A_z(\omega, \mathbf{k}) + \frac{4\pi}{c} \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} i \tau k_z \hbar \varphi(\omega, \mathbf{k}) = 0,$$

e a equação em φ (5.18)

$$\left(-\tilde{k}^2 + \frac{\omega^2}{v_s^2} \right) \varphi(\omega, \mathbf{k}) - i \frac{e^*}{\hbar c} \left(\frac{c\omega}{v_s^2} \phi(\omega, \mathbf{k}) + \tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\omega, \mathbf{k}) \right) = 0.$$

Notando que $\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{A}} = k_z(\tau^2 - 1)A_z$, para $\rho_0(\mathbf{k})$ não identicamente nulo, a componente z do potencial vetor satisfaz:

$$A_z(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{4\pi}{c} \frac{\omega k_z}{k^2} \frac{\rho_0(\mathbf{k})}{\mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) \times \left[1 - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* v_s^2} \frac{\tau}{\mathcal{G}(\omega, \mathbf{k})} \left(1 - \frac{v_s^2 (\tau^2 - 1) k_z^2}{c^2 \mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \right) \right]. \quad (\text{D.27})$$

enquanto a fase do parâmetro de ordem obedece à solução

$$\varphi(\omega, \mathbf{k}) = 4\pi i \frac{\omega e^* \rho_0(\mathbf{k})}{\hbar v_s^2 k^2} \frac{1}{\mathcal{G}(\omega, \mathbf{k})} \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) \times \left[1 - (\tau^2 - 1) \frac{v_s^2 k_z^2}{c^2 \mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \right], \quad (\text{D.28})$$

onde:

$$\mathcal{F}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\omega^2}{c^2} - k^2 - \frac{4\pi}{c^2} \tau \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*}$$

e

$$\mathcal{G}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\omega^2}{v_s^2} - \tilde{k}^2 - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* c^2} \frac{k_z^2}{\mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \tau (\tau^2 - 1).$$

A solução dos outros graus de liberdade saem da equação dos fônons (5.20)

$$\vec{X}(\omega, \mathbf{k}) = -i \frac{\delta}{\kappa} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{ph}^2} \left(\vec{q} \phi(\omega, \mathbf{k}) + \frac{\omega}{c} \vec{A}(\omega, \mathbf{k}) \right)$$

e da combinação das componentes no plano das Eq. (5.11) e (5.19),

$$\begin{aligned} \left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 - \frac{4\pi e^{*2} \Phi_0^2}{c^2 m^*} \right) \vec{A}(\omega, \mathbf{k}) + \frac{\omega}{c} \vec{q} \phi(\omega, \mathbf{k}) \\ + \frac{4\pi e^* \Phi_0^2}{c m^*} i \vec{q} \hbar \varphi(\omega, \mathbf{k}) + \frac{4\pi}{c} i \omega \delta \vec{X}(\omega, \mathbf{k}) = 0. \end{aligned}$$

O cálculo é direto, e resulta nas soluções

$$\vec{A}(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{4\pi}{c} \omega \vec{q} \frac{\rho_0(\mathbf{k})}{k^2} \frac{\mathcal{D}(\omega, \mathbf{k})}{\mathcal{E}(\omega, \mathbf{k})} \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) \quad (\text{D.29})$$

$$\vec{X}(\omega, \mathbf{k}) = -4\pi i \frac{\delta}{\kappa} \frac{\vec{q}}{k^2} \frac{\rho_0(\mathbf{k})}{(\omega^2 - \omega_{ph}^2)} \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) \left[1 - \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\mathcal{D}(\omega, \mathbf{k})}{\mathcal{E}(\omega, \mathbf{k})} \right]. \quad (\text{D.30})$$

onde definimos:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\omega, \mathbf{k}) &= 1 + 4\pi \frac{\delta^2}{\kappa} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{ph}^2} - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* v_s^2} \frac{1}{\mathcal{G}(\omega, \mathbf{k})} \\ &\quad \times \left[1 - (\tau^2 - 1) \frac{v_s^2}{c^2} \frac{k_z^2}{\mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \right] \\ \mathcal{E}(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{\omega^2}{c^2} - k^2 - \frac{4\pi e^{*2} \Phi_0^2}{c^2 m^*} + \frac{4\pi}{c^2} \frac{(\delta \omega)^2}{\kappa (\omega^2 - \omega_{ph}^2)}. \end{aligned}$$

O próximo passo é substituir esses resultados na equação da densidade de carga supercondutora (5.12)

$$\rho_0(\omega, \mathbf{k}) + \frac{e^* \Phi_0^2}{m^* v_s^2} [\hbar i \omega \varphi(\omega, \mathbf{k}) + e^* \phi(\omega, \mathbf{k})] + i \delta \vec{q} \cdot \vec{X}(\omega, \mathbf{k}) = 0,$$

que resulta em

$$\begin{aligned}
& \rho_0(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) \left\{ 1 - \frac{4\pi e^{*2} \Phi_0^2}{k^2 m^* v_s^2} \left[\frac{\omega^2}{v_s^2} \frac{1}{\mathcal{G}(\omega, \mathbf{k})} \right. \right. \\
& \quad \times \left. \left. \left(1 - (\tau^2 - 1) \frac{v_s^2}{c^2} \frac{k_z^2}{\mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \right) - 1 \right] \right. \\
& \quad \left. + 4\pi \frac{\delta^2}{\kappa} \frac{1}{k^2} \frac{q^2}{(\omega^2 - \omega_{ph}^2)} \left[1 - \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\mathcal{D}(\omega, \mathbf{k})}{\mathcal{E}(\omega, \mathbf{k})} \right] \right\} \\
& = 0
\end{aligned} \tag{D.31}$$

Aplicando o calibre transverso às Eq. (D.27) e (D.29),

$$\begin{aligned}
\mathbf{k} \cdot \mathbf{A} &= -\frac{4\pi}{c} \frac{\omega}{k^2} \rho_0(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) \\
& \times \left\{ \frac{k_z^2}{\mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \left[1 - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^* v_s^2} \frac{\tau}{\mathcal{G}(\omega, \mathbf{k})} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \times \left(1 - (\tau^2 - 1) \frac{v_s^2}{c^2} \frac{k_z^2}{\mathcal{F}(\omega, \mathbf{k})} \right) \right] + q^2 \frac{\mathcal{D}(\omega, \mathbf{k})}{\mathcal{E}(\omega, \mathbf{k})} \right\} \\
& = 0
\end{aligned} \tag{D.32}$$

é fácil concluir que $\rho_0(\mathbf{k})$ tem a forma

$$\rho_0(\mathbf{k}) = \rho(\hat{q}) \delta(q - q_0) \delta(k_z - k_{z0}),$$

onde q_0 and k_{z0} são os zeros das Eq. (D.32) e (D.31). No limite não relativístico $v_F/c \rightarrow 0$, vamos encontrar os limites: $\mathcal{F}(\omega_p, \mathbf{k}) \sim \mathcal{E}(\omega_p, \mathbf{k}) \rightarrow -k^2$ e

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\omega, \mathbf{k}) &\rightarrow \frac{\omega^2}{v_s^2} - \tilde{k}^2 \\
\mathcal{D}(\omega, \mathbf{k}) &\rightarrow 1 - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} \frac{1}{\omega^2 - v_s^2 \tilde{k}^2} + 4\pi \frac{\delta^2}{\kappa} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{ph}^2}.
\end{aligned}$$

Nesta aproximação, as Eq. (D.32) e (D.31) são simplificadas, respectivamente, nas duas equações

$$\begin{aligned}
& \left(k^2 + 4\pi \frac{\delta^2}{\kappa} \frac{q^2}{\omega^2 - \omega_{ph}^2} - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} \frac{q^2 + \tau k_z^2}{\omega^2 - v_s^2 \tilde{k}^2} \right) \rho_s(\omega, \mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) = 0 \\
& \left(k^2 + 4\pi \frac{\delta^2}{\kappa} \frac{q^2}{\omega^2 - \omega_{ph}^2} - 4\pi \frac{e^{*2} \Phi_0^2}{m^*} \frac{\tilde{k}^2}{\omega^2 - v_s^2 \tilde{k}^2} \right) \rho_s(\omega, \mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_p(\mathbf{k})) = 0.
\end{aligned}$$

Comparando ambas e lembrando que $\tilde{k}^2 = q^2 + \tau^2 k_z^2$, conclui-se que $\tau(1 - \tau)k_z^2 = 0$. Para $\tau \neq 0, 1$, é imediato ver que $k_{z0} = 0$. Substituindo esse resultado em uma das expressões acima e integrando em ω , vamos encontrar finalmente a relação (5.31), $\mathcal{D}(\omega_p, q_0) = 0$.

Apêndice E

Kernel de London

O cálculo do kernel de London Q_{ij} no MFL ($\mu = 0$) é feito a partir da Hamiltoniana estendida (8.1), cujo operador densidade de corrente é dado por

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{j}_i(\mathbf{k}) &= -c\nabla_{\mathbf{A}} H \\ &= \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \left[\frac{e}{\hbar} \left(\partial^i \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A_j \partial^i \partial^j \epsilon_{\mathbf{k}} \right) \tau_0 \sigma_3 + \frac{e}{\hbar} \left(\partial^i \Delta_{c\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A_j \partial^i \partial^j \Delta_{c\mathbf{k}} \right) \tau_0 \sigma_1 \right] \Psi(\tilde{\mathbf{k}}). \end{aligned}$$

O valor esperado é igual a

$$\begin{aligned} \langle \overleftrightarrow{j}_i \rangle(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left[\frac{e}{\hbar} \left(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A^j \partial_i \partial_j \epsilon_{\mathbf{k}} \right) \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_0 \sigma_3 \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{e}{\hbar} \left(\partial_i \Delta_{c\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} A^j \partial_i \partial_j \Delta_{c\mathbf{k}} \right) \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_0 \sigma_1 \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle \right], \quad (\text{E.1}) \end{aligned}$$

e será calculado em primeira ordem em \mathbf{A} . Não é difícil verificar que a equação do gap não é afetada pelo campo magnético nessa ordem.

Expandindo a função de Green (6.9),

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{G}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n) &= [i\omega_n - \hbar^{-1} (\epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_3 + \Delta_{c\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_1 + \Delta_s \tau_1 \sigma_2)]^{-1} \\ &\sim \frac{1}{\overleftrightarrow{G}_0^{-1} + \frac{e}{\hbar^2 c} A^i (\partial_i \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_3 + \partial_i \Delta_{c\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_1)} \\ &= \overleftrightarrow{G}_0 \left[1 - \frac{e}{\hbar^2 c} \overleftrightarrow{G}_0 A^i (\partial_i \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_3 + \partial_i \Delta_{c\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_1) A_i \right], \end{aligned}$$

os valores esperados da Eq. (E.1) são descritos em primeira ordem por

$$\begin{aligned} \text{Tr} \langle \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \tau_\mu \sigma_\nu \Psi(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle &= \frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \sum_{\omega_n} \tau_\mu \sigma_\nu \overleftrightarrow{G}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n) \\ &= \frac{1}{\hbar\beta} \text{Tr} \sum_{\omega_n} \tau_\mu \sigma_\nu \overleftrightarrow{G}_0 \left[1 - \frac{e}{\hbar^2 c} \overleftrightarrow{G}_0 A^i (\partial_i \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_3 + \partial_i \Delta_{c\tilde{\mathbf{k}}} \tau_0 \sigma_1) \right] + O(A^2) \quad (\text{E.2}) \end{aligned}$$

Para encontrar o Kernel, basta calcular as médias acima. Os termos de ordem zero são:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}\langle\Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})\tau_0\sigma_3\Psi(\tilde{\mathbf{k}})\rangle_0 &= \frac{1}{\hbar\beta}\text{Tr}\sum_{\omega_n}\tau_0\sigma_3\overset{\leftrightarrow}{G}_0 \\
&= -\frac{4}{\hbar\beta}\sum_{\omega_n}\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\omega_n^2+E_0^2} \\
&= \frac{2\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}[n(E_{\mathbf{k}})-n(-E_{\mathbf{k}})] , \tag{E.3}
\end{aligned}$$

e

$$\text{Tr}\langle\Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})\tau_0\sigma_1\Psi(\tilde{\mathbf{k}})\rangle_0 = \frac{2\Delta_{c\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}[n(E_{\mathbf{k}})-n(-E_{\mathbf{k}})] . \tag{E.4}$$

após a soma sobre as frequências de Matsubara.

A contribuição de primeira ordem é igual a

$$\begin{aligned}
\text{Tr}\langle\Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})\tau_0\sigma_3\Psi(\tilde{\mathbf{k}})\rangle_1 &= \frac{e}{\hbar^3 c \beta} \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[\tau_0\sigma_3(\overset{\leftrightarrow}{G}_0)^2 A_i (\partial^i \epsilon_{\mathbf{k}}\tau_0\sigma_3 + \partial^i \Delta_{c\mathbf{k}}\tau_0\sigma_1) \right] \\
&= \frac{e}{\hbar^3 c \beta} A^i(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}}) \sum_{\omega_n} \frac{(i\omega_n)^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2}{[(i\omega_n)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2]^2} \\
&= -4 \frac{e}{\hbar c} A^i(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}}) \frac{1}{2\pi} \oint dz n(z) \frac{z^2 + E_{\mathbf{k}}^2}{(z + E_{\mathbf{k}})^2(z - E_{\mathbf{k}})^2} , \tag{E.5}
\end{aligned}$$

com o contorno de integração definido no sentido horário.

Utilizando a identidade:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi} \oint dz \frac{f(z)}{(z - z_0)^2} &= \frac{\partial}{\partial z_0} \left[\frac{1}{2\pi} \oint dz \frac{f(z)}{z - z_0} \right] \\
&= -f'(z_0) , \tag{E.6}
\end{aligned}$$

a Eq. (E.5) resulta em

$$\begin{aligned}
\text{Tr}\langle\Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})\tau_0\sigma_3\Psi(\tilde{\mathbf{k}})\rangle_1 &= 4 \frac{e}{\hbar c} A^i(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}}) \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{\partial}{\partial z} \left[n(z) \frac{z^2 + E_{\mathbf{k}}^2}{(z + \sigma E_{\mathbf{k}})^2} \right]_{z=\sigma E_{\mathbf{k}}} \\
&= 2 \frac{e}{\hbar c} A^i(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}}) \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] . \tag{E.7}
\end{aligned}$$

Equivalentemente,

$$\text{Tr}\langle\Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})\tau_0\sigma_1\Psi(\tilde{\mathbf{k}})\rangle_1 = 2 \frac{e}{\hbar c} A^i(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}}) \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] . \tag{E.8}$$

Substituindo as Eq. (E.3), (E.4), (E.7) e (E.8) na Eq. (E.1) o Kernel de London é igual a:

$$Q_{ij} = -2 \frac{e^2}{\hbar^2 c} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}})(\partial_j \epsilon_{\mathbf{k}}) + (\partial_i \Delta_{c\mathbf{k}})(\partial_j \Delta_{c\mathbf{k}})] \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] \right. \\ \left. + \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \partial_i \partial_j \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{\Delta_{c\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \partial_i \partial_j \Delta_{c\mathbf{k}} \right) [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})] \right\}, \quad (\text{E.9})$$

notando que o termo de ordem zero em \mathbf{A}

$$j_0 = \frac{e}{\hbar} \left(\partial_i \epsilon_{\mathbf{k}} \frac{2\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} + \partial_i \Delta_{c\mathbf{k}} \frac{2\Delta_{c\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) [n(E_{\mathbf{k}}) - n(-E_{\mathbf{k}})]$$

é igual a zero pela simetria da soma em k .

Apêndice F

Cálculos de traço

F.1 Traço da polarização de corrente térmica

Vamos calcular o traço da função de polarização Π^{EE} (7.21),

$$\text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} \right],$$

dada em termos da função de Green (6.9). Definindo como usual $\overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}/2} \rightarrow \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\pm}$, o numerador resulta em

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[\left(i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \right) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \left((i\omega_n + i\omega) + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right] \\ = & \text{Tr} \left\{ \left[-\omega_n(\omega_n + \omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- (i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_{\mathbf{1}} \right. \\ & + \left[\overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_{\mathbf{2}} + \left[i\omega_n \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_{\mathbf{3}} \\ & \left. + \left[(i\omega_n + \omega) \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_{\mathbf{4}} \right\}. \end{aligned}$$

Calculando os termos 1 e 2, temos

$$\begin{aligned} -\omega_n(\omega_n + \omega) \text{Tr} \left[\tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_1 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right] &= -\omega_n(\omega_n + \omega) \left[v_F^2 k_{\perp} k_{\perp} - v_{\Delta}^2 k_{\parallel} k_{\parallel} - \hbar^{-2} \Delta_s^2 \right] \\ &= -\omega_n(\omega_n + \omega) \hbar^{-2} \left[\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{F.1})$$

e

$$\text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_0 \sigma_3 \right] = \hbar^{-4} \left[(\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2)^2 - (\vec{\epsilon}_+ \times \vec{\epsilon}_-)^2 - \underline{\epsilon}_{\mathbf{q}}^2 \Delta_s^2 \right]. \quad (\text{F.2})$$

O traço dos outros dois termos é igual a zero,

$$\text{Tr} \left[i\omega_n \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right] = \text{Tr} \left[(i\omega_n + \omega) \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right] = 0.$$

Somando as Eq. (F.1) e (F.2), o traço da expressão (7.21) é igual a

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_1 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_1 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} \right] \\ &= \frac{\hbar^{-2} \left[(\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2)^2 - (\vec{\epsilon}_+ \times \vec{\epsilon}_-)^2 - \underline{\epsilon}_q^2 \Delta_s^2 \right] - \omega_n(\omega_n + \omega) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ - \Delta_s^2]}{[\omega_n^2 + \omega_-^2] [(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2]} . \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

Vamos também calcular o traço da função de polarização termoelétrica Π^{EC} (7.3)

$$\text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \right] .$$

Como antes, temos quatro termos

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[\left(i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \right) \tau_0 \sigma_3 \left((i\omega_n + i\omega) + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right] \\ &= \text{Tr} \left\{ \left[-\omega_n(\omega_n + \omega) (i\omega_n + i\omega) \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_1 \right. \\ & \quad \left. \left[\overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_2 + \left[i\omega_n \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_3 \right. \\ & \quad \left. + \left[(i\omega_n + \omega) \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \right]_4 \right\} . \end{aligned}$$

Como esperado, os termos 1 e 2 são zero, enquanto os outros dão

$$4\hbar^{-2} \left[i\omega_n(\underline{\epsilon}_+^2 - \Delta_s^2) + i(\omega_n + \omega)(\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2) \right] .$$

Portanto,

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_0 \sigma_3 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_0 \sigma_3 \right] \\ &= \frac{4\hbar^{-2} \left[i\omega_n(\underline{\epsilon}_+^2 - \Delta_s^2) + i(\omega_n + \omega)(\vec{\epsilon}_+ \cdot \vec{\epsilon}_- + \Delta_s^2) \right]}{[\omega_n^2 + \omega_-^2] [(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^2]} . \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

F.2 Traço da susceptibilidade de carga no bolso

Vamos calcular o traço da susceptibilidade (9.26):

$$\text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, i\omega_n + i\omega) \tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, i\omega_n) \tau_3 \sigma_0 \right] ,$$

onde

$$\overset{\leftrightarrow}{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = - \left(i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega} \right) \frac{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k}}'^2 + 2\hbar^{-1}\mu (v_F k_{\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{\parallel} \tau_3 \sigma_1)}{[\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},\mu}^2] [\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{k},-\mu}^2]}$$

é a função de Green no bolso definida pela Eq. (9.5). O traço do numerador é igual a

$$\begin{aligned}
& \text{Tr} \left\{ \left(i\omega_n + \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \right) \left[\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}'^2 + 2\hbar^{-1} \mu \left(v_F k_{-\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{-\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right] \times \right. \\
& \quad \left. \times \left(i(\omega_n + \omega) + \tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_3 \sigma_0 \right) \left[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{\mathbf{k}}'^2 + 2\hbar^{-1} \mu \left(v_F k_{+\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{+\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right] \right\} \\
= & \text{Tr} \left\{ \left[\left[i\omega_n (\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}'^2) \right]_{\mathbf{1}} + \left[2\hbar^{-1} \mu \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \left(v_F k_{-\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{-\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right]_{\mathbf{2}} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left[i\omega_n 2\hbar^{-1} \mu \left(v_F k_{-\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{-\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right]_{\mathbf{3}} + \left[\overset{\leftrightarrow}{\omega}_- (\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}'^2) \right]_{\mathbf{4}} \right] \times \right. \\
& \quad \left. \times \left[\left[i(\omega_n + \omega) \left((\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}'^2 \right) \right]_{\mathbf{1}'} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left[2\hbar^{-1} \mu \tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_3 \sigma_0 \left(v_F k_{+\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{+\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right]_{\mathbf{2}'} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left[i(\omega_n + \omega) 2\hbar^{-1} \mu \left(v_F k_{+\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{+\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right]_{\mathbf{3}'} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left[\tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_3 \sigma_0 \left((\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}'^2 \right) \right]_{\mathbf{4}'} \right] \right\} .
\end{aligned}$$

Os termos de traço diferente de zero são as combinações de produtos diretos $i - i'$ (com $i = 1 \dots 4$) e os termos cruzados $2 - 4'$ e $4 - 2'$.

O traço das combinações $1 - 1'$, $3 - 3'$ e $4 - 4'$ é dado por

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [(1 - 1') + (3 - 3') + (4 - 4')] &= 4 \left[\hbar^{-2} (\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2) - \omega_n (\omega_n + \omega) \right] \\
& \quad \times (\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}'^2) \left((\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}'^2 \right) \\
& \quad - 16\hbar^{-4} \mu^2 \omega_n (\omega_n + \omega) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ .
\end{aligned} \tag{F.5}$$

O traço da combinação $2 - 2'$ é um pouco mais trabalhoso. O resultado final é igual a

$$\text{Tr} [2 - 2'] = 16\hbar^{-6} \mu^2 \left[\epsilon_-^2 \epsilon_+^2 + \epsilon_- \cdot \vec{\epsilon}_+ (\mu^2 - \Delta_s^2) \right] . \tag{F.6}$$

Por último, os traços dos dois termos cruzados são

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [4 - 2'] &= 2\hbar^{-1} \mu (\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}'^2) \text{Tr} \left[\tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \left(v_F k_{+\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{+\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right] \\
&= -8\hbar^{-4} \mu^2 (\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}'^2) (\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) ,
\end{aligned} \tag{F.7}$$

e

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [2 - 4'] &= 2\hbar^{-1} \mu \left((\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}'^2 \right) \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{\omega}_- \tau_3 \sigma_0 \overset{\leftrightarrow}{\omega}_+ \tau_3 \sigma_0 \left(v_F k_{-\perp} \tau_3 \sigma_3 + v_{\Delta} k_{-\parallel} \tau_3 \sigma_1 \right) \right] \\
&= -8\hbar^{-4} \mu^2 \left((\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}'^2 \right) (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) .
\end{aligned} \tag{F.8}$$

Rearranjando os termos (F.5) e (F.6), a contribuição dos termos diretos à susceptibilidade

será denotada por $\chi_{D_1} + \chi_{D_2}$, onde

$$\begin{aligned} \chi_{D_1}^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= \frac{4}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} [\hbar^{-2}(\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2) - \omega_n(\omega_n + \omega)] \times \\ &\times \frac{[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^{\prime 2}] [\omega_n^2 + \omega_-^{\prime 2}]}{(\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}^2)(\omega_n^2 + \omega_{-, -\mu}^2)[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}^2][(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, -\mu}^2]} \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

$$\begin{aligned} \chi_{D_2}^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= \frac{16\mu^2}{\hbar^5\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{[\hbar^{-2}(\mu^2 - \Delta_s^2) - \omega_n(\omega_n + \omega)] \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \hbar^{-2}\epsilon_-^2\epsilon_+^2}{(\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}^2)(\omega_n^2 + \omega_{-, -\mu}^2)[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}^2][(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, -\mu}^2]} . \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

Os termos cruzados são:

$$\begin{aligned} \chi_C^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= -\frac{8\mu^2}{\hbar^5\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) (\omega_n^2 + \omega_-^{\prime 2}) + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) ((\omega_n + \omega)^2 + \omega_-^{\prime 2})}{(\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}^2)(\omega_n^2 + \omega_{-, -\mu}^2)[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}^2][(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, -\mu}^2]} , \end{aligned} \quad (\text{F.11})$$

de forma que a susceptibilidade é a soma destas três partes,

$$\chi^c = \chi_{D_1}^c + \chi_{D_2}^c + \chi_C^c .$$

Apêndice G

Função espectral da susceptibilidade de carga no bolso

Neste apêndice, vamos calcular explicitamente a parte imaginária da susceptibilidade de carga (9.27) na presença do bolso. Por simplicidade, vamos calcular separadamente os termos (F.9), (F.10) e (F.11) derivados no cálculo do traço no apêndice F.2., para então somá-los, ou seja, $\chi^c = \chi_{D_1}^c + \chi_{D_2}^c + \chi_C^c$.

χ_{D_1}

Calculando a soma sobre as frequências de Matsubara

$$\begin{aligned} \chi_{D_1}^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= \frac{4}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} [\hbar^{-2}(\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2) - \omega_n(\omega_n + \omega)] \times \\ &\quad \times \frac{[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_+^{\prime 2}] [\omega_n^2 + \omega_-^{\prime 2}]}{(\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}^2) (\omega_n^2 + \omega_{-, -\mu}^2) ((\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}^2) ((\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, -\mu}^2)} \end{aligned}$$

em torno dos polos $\pm\omega_{-, \pm\mu}$ e $\pm\omega_{+, \pm\mu} - \omega$ no eixo real,

$$\begin{aligned} \chi_{D_1}^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= 4 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \{ \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu}(E_{-, \sigma' \mu} + i\sigma \hbar \omega)] \times \\ &\quad \times \frac{1}{8\mu \epsilon_- E_{-, \sigma' \mu}} [2\sigma' \mu \epsilon_- [(E_{-, \sigma' \mu} + i\sigma \hbar \omega)^2 - E_+^{\prime 2}]] \times \\ &\quad \times \frac{1}{2E_{+, \mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu}} \right] \times \\ &\quad \times \frac{1}{2E_{+, -\mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\mu}} \right] \end{aligned}$$

$$+ \sigma \sigma' n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{+, \sigma' \mu}(E_{+, \sigma' \mu} - i\sigma \hbar \omega)] \times \quad (\text{G.1})$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{1}{8\mu\epsilon_+ E_{+, \sigma' \mu}} [2\sigma' \mu \epsilon_+ [(E_{+, \sigma' \mu} - i\sigma \hbar \omega)^2 - E_-'^2]] \times \\ & \times \frac{1}{2E_{-, \mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, \mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, \mu}} \right] \times \\ & \times \frac{1}{2E_{-, -\mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, -\mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, -\mu}} \right] \}. \quad (\text{G.2}) \end{aligned}$$

Fazendo a continuação analítica para o eixo real $i\omega \rightarrow \omega + i\delta$, a parte imaginária é

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_{D_1}^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= 4 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \\ & \{ \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu}(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})] \times \\ & \times \frac{1}{4\mu\epsilon_- E_{-, \sigma' \mu}} [2\sigma' \mu \epsilon_- [(E_{-, \sigma' \mu} + \sigma \hbar \omega)^2 - E_+'^2]] \times \\ & \times \left[-\frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, -\mu}^2]} - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu})}{2E_{+, -\mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} \right. \\ & \left. + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, -\mu}^2]} + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\mu})}{2E_{+, -\mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} \right] \\ & + \sigma \sigma' n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{+, \sigma' \mu}(E_{+, \mu} - \sigma \hbar \omega)] \times \\ & \times \frac{1}{4\mu\epsilon_+ E_{+, \sigma' \mu}} [2\sigma' \mu \epsilon_+ [(E_{+, \sigma' \mu} - \sigma \hbar \omega)^2 - E_-'^2]] \times \\ & \times \left[\frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, -\mu}^2]} + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, -\mu})}{2E_{-, -\mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} \right. \\ & \left. - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, -\mu}^2]} - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, -\mu})}{2E_{-, -\mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} \right] \\ & = -\pi \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \{ \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \mu}] \times \\ & \times \frac{\sigma'}{4E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \mu}} \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}) \\ & + \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\mu}] \times \\ & \times \frac{\sigma'}{4E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\mu}} \sigma \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\sigma\sigma'n(\sigma E_{+,\sigma'\mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{+,\sigma'\mu}E_{-,\mu}] \times \\
& \quad \times \frac{\sigma'}{4E_{+,\sigma'\mu}E_{-,\mu}} \sigma \delta(\sigma\hbar\omega - E_{+,\sigma'\mu} + E_{-,\mu}) \\
& -\sigma\sigma'n(\sigma E_{+,\sigma'\mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 + E_{+,\sigma'\mu}E_{-,-\mu}] \times \\
& \quad \times \frac{\sigma'}{4E_{+,\sigma'\mu}E_{-,-\mu}} \sigma \delta(\sigma\hbar\omega - E_{+,\sigma'\mu} + E_{-,-\mu}) , \\
& -\sigma\sigma'n(\sigma E_{-,\sigma'\mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-,\sigma'\mu}E_{+,\mu}] \times \\
& \quad \times \frac{\sigma'}{4E_{-,\sigma'\mu}E_{+,\mu}} \sigma \delta(\sigma\hbar\omega + E_{-,\sigma'\mu} + E_{+,\mu}) \\
& -\sigma\sigma'n(\sigma E_{-,\sigma'\mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-,\sigma'\mu}E_{+,-\mu}] \times \\
& \quad \times \frac{\sigma'}{4E_{-,\sigma'\mu}E_{+,-\mu}} \sigma \delta(\sigma\hbar\omega + E_{-,\sigma'\mu} + E_{+,-\mu}) \\
& +\sigma\sigma'n(\sigma E_{+,\sigma'\mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 - E_{+,\sigma'\mu}E_{-,\mu}] \times \\
& \quad \times \frac{\sigma'}{4E_{+,\sigma'\mu}E_{-,\mu}} \sigma \delta(\sigma\hbar\omega - E_{+,\sigma'\mu} - E_{-,\mu}) \\
& +\sigma\sigma'n(\sigma E_{+,\sigma'\mu}) [\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2 - E_{+,\sigma'\mu}E_{-,-\mu}] \times \\
& \quad \times \frac{\sigma'}{4E_{+,\sigma'\mu}E_{-,-\mu}} \sigma \delta(\sigma\hbar\omega - E_{+,\sigma'\mu} - E_{-,-\mu}) ,
\end{aligned}$$

que pode ser reagrupado em

$$\begin{aligned}
\text{Im } \chi_{D_1}^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= -\frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k}, \sigma'=\pm 1} \\
& \left\{ [n(E_{-,\sigma'\mu}) - n(E_{+,-\sigma'\mu})] \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2}{E_{-,\sigma'\mu}E_{+,-\sigma'\mu}} \right) \right. \\
& \quad \times [\delta(\hbar\omega + E_{-,\sigma'\mu} - E_{+,-\sigma'\mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-,\sigma'\mu} + E_{+,-\sigma'\mu})] \\
& \quad + [n(E_{-,\sigma'\mu}) - n(E_{+,\sigma'\mu})] \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2}{E_{-,\sigma'\mu}E_{+,-\sigma'\mu}} \right) \\
& \quad \times [\delta(\hbar\omega + E_{-,\sigma'\mu} - E_{+,\sigma'\mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-,\sigma'\mu} + E_{+,\sigma'\mu})] \left. \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, -\sigma' \mu})] \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} \right) \\
 & \quad \times [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu})] \\
 & + [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, \sigma' \mu})] \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \mu^2 - \Delta_s^2}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} \right) \\
 & \quad \times [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \}.
 \end{aligned} \tag{G.3}$$

 $\chi_{D_2}^c$

Somando o termo (F.10) nas frequências de Matsubara,

$$\begin{aligned}
 \chi_{D_2}^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) & = \frac{16\mu^2}{\hbar^5 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{[\hbar^{-2}(\mu^2 - \Delta_s^2) - \omega_n(\omega_n + \omega)] \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \hbar^{-2} \epsilon_-^2 \epsilon_+^2}{(\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}^2)(\omega_n^2 + \omega_{-, -\mu}^2)[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}^2][(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, -\mu}^2]} \\
 & = 16\mu^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \\
 & \quad \left\{ \sigma \sigma' \frac{n(\sigma E_{-, \sigma' \mu})}{4\mu \epsilon_- E_{-, \sigma' \mu}} [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu}(E_{-, \sigma' \mu} + i\sigma \hbar\omega)) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \times \right. \\
 & \quad \times \frac{1}{2E_{+, \mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu}} \right] \times \\
 & \quad \times \frac{1}{2E_{+, -\mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\mu}} \right] \\
 & \quad + \sigma \sigma' \frac{n(\sigma E_{+, \sigma' \mu})}{4\mu \epsilon_+ E_{+, \sigma' \mu}} [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{+, \sigma' \mu}(E_{+, \sigma' \mu} - i\sigma \hbar\omega)) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \times \\
 & \quad \times \frac{1}{2E_{-, \mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, \mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, \mu}} \right] \\
 & \quad \times \frac{1}{2E_{-, -\mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, -\mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, -\mu}} \right] \left. \right\}
 \end{aligned}$$

Fazendo a continuação analítica,

$$\begin{aligned}
\text{Im } \chi_{D_2}^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) &= 16\mu^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \\
&\left\{ \sigma \sigma' \frac{n(\sigma E_{-, \sigma' \mu})}{4\mu \epsilon_- E_{-, \sigma' \mu}} [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu}(E_{-, \sigma' \mu} + i\sigma \hbar \omega)) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \right. \\
&\times \left[-\frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} \right. \\
&\left. \left. + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, -\mu}^2]} + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} \right] \right. \\
&+ \sigma \sigma' \frac{n(\sigma E_{+, \sigma' \mu})}{4\mu \epsilon_+ E_{+, \sigma' \mu}} [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{+, \sigma' \mu}(E_{+, \sigma' \mu} - i\sigma \hbar \omega)) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \\
&\times \left[\frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, -\mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} \right. \\
&\left. - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, -\mu}^2]} - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, -\mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} \right] \\
&= -\pi \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \\
&\quad \left\{ \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \times \right. \\
&\quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \mu}} \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}) \\
&\quad - \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \times \\
&\quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\mu}} \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu}) \\
&\quad - \sigma \sigma' n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu} E_{-, \mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \times \\
&\quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{+, \sigma' \mu} E_{-, \mu}} \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, \mu}) \\
&\quad + \sigma \sigma' n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) \times [(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma' \mu} E_{-, -\mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2] \times \\
&\quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{+, \sigma' \mu} E_{-, -\mu}} \delta(\sigma \hbar \omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, -\mu})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\sigma\sigma'n(\sigma E_{-, \sigma'\mu}) \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-, \sigma'\mu} E_{+, \mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2 \right] \times \\
 & \quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{-, \sigma'\mu} E_{+, \mu}} \delta(\sigma\hbar\omega + E_{-, \sigma'\mu} + E_{+, \mu}) \\
 & + \sigma\sigma'n(\sigma E_{-, \sigma'\mu}) \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-, \sigma'\mu} E_{+, -\mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2 \right] \times \\
 & \quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{-, \sigma'\mu} E_{+, -\mu}} \delta(\sigma\hbar\omega + E_{-, \sigma'\mu} + E_{+, -\mu}) \\
 & + \sigma\sigma'n(\sigma E_{+, \sigma'\mu}) \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-, \sigma'\mu} E_{-, \mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2 \right] \times \\
 & \quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{+, \sigma'\mu} E_{-, \mu}} \delta(\sigma\hbar\omega - E_{+, \sigma'\mu} - E_{-, \mu}) \\
 & - \sigma\sigma'n(\sigma E_{+, \sigma'\mu}) \times \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-, \sigma'\mu} E_{-, -\mu}) \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+ + \epsilon_-^2 \epsilon_+^2 \right] \times \\
 & \quad \times \frac{\sigma}{4\epsilon_- \epsilon_+ E_{+, \sigma'\mu} E_{-, -\mu}} \delta(\sigma\hbar\omega - E_{+, \sigma'\mu} - E_{-, -\mu}) \Big\} .
 \end{aligned}$$

Reagrupando os termos, temos:

$$\begin{aligned}
 \text{Im } \chi_{D_2}^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= -\frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k}, \sigma'=\pm 1} \\
 & \left\{ - [n(E_{-, \sigma'\mu}) - n(E_{+, -\sigma'\mu})] \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma'\mu} E_{+, -\sigma'\mu}) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} + \epsilon_- \epsilon_+ \right] \right. \\
 & \quad \times \frac{1}{E_{-, \sigma'\mu} E_{+, -\sigma'\mu}} [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma'\mu} - E_{+, -\sigma'\mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma'\mu} + E_{+, -\sigma'\mu})] \\
 & + [n(E_{-, \sigma'\mu}) - n(E_{+, \sigma'\mu})] \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 + E_{-, \sigma'\mu} E_{+, \sigma'\mu}) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} + \epsilon_- \epsilon_+ \right] \\
 & \quad \times \frac{1}{E_{-, \sigma'\mu} E_{+, \sigma'\mu}} [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma'\mu} - E_{+, \sigma'\mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma'\mu} + E_{+, -\sigma'\mu})] \Big\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, -\sigma' \mu})] \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} + \epsilon_- \epsilon_+ \right] \\
& \times \frac{1}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu})] \\
& - [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, \sigma' \mu})] \left[(\mu^2 - \Delta_s^2 - E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}) \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} + \epsilon_- \epsilon_+ \right] \\
& \times \frac{1}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu})]
\end{aligned} \tag{G.4}$$

χ_C^c

A soma nas frequências de Matsubara do último termo

$$\chi_C^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) = -\frac{8\mu^2}{\hbar^5 \beta} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) (\omega_n^2 + \omega_-'^2) + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) ((\omega_n + \omega)^2 + \omega_-'^2)}{(\omega_n^2 + \omega_{-, \mu}^2)(\omega_n^2 + \omega_{-, -\mu}^2)[(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, \mu}^2][(\omega_n + \omega)^2 + \omega_{+, -\mu}^2]}$$

resulta em

$$\begin{aligned}
\chi_C^c(\mathbf{q}, i\omega, \mu) & = 4 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \\
& \left\{ \sigma n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_- + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) ((E_{-, \sigma' \mu} + i\sigma \hbar\omega)^2 - E_+'^2)}{2E_{-, \sigma' \mu} (4\sigma' \mu \epsilon_-)} \right. \\
& \times \frac{1}{2E_{+, \mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu}} \right] \times \\
& \times \frac{1}{2E_{+, -\mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\mu}} \right] \\
& + \sigma n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) ((E_{+, \sigma' \mu} - i\sigma \hbar\omega)^2 - E_-'^2) + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_+}{2E_{+, \sigma' \mu} (4\sigma' \mu \epsilon_+)} \\
& \times \frac{1}{2E_{-, \mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, \mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, \mu}} \right] \times \\
& \times \frac{1}{2E_{-, -\mu}} \left[\frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} - E_{-, -\mu}} - \frac{1}{i\sigma \hbar\omega - E_{+, \sigma' \mu} + E_{-, -\mu}} \right] \left. \right\}.
\end{aligned}$$

A parte imaginária da expressão acima é dada por

$$\begin{aligned}
\text{Im } \chi_C^e(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= 8\mu^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} \\
&\left\{ \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_- + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) ((E_{-, \sigma' \mu} + \sigma \hbar \omega)^2 - E_+^2)}{2E_{-, \sigma' \mu} (4\mu \epsilon_-)} \right. \\
&\quad \times \left[-\frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu})}{2E_{+, -\mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} \right. \\
&\quad \left. \left. \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu})}{2E_{+, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\mu})}{2E_{+, -\mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{+, \mu}^2]} \right] \right. \\
&+ \sigma \sigma' n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_+ + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) ((E_{+, \sigma' \mu} - \sigma \hbar \omega)^2 - E_-^2)}{2E_{+, \sigma' \mu} (4\mu \epsilon_+)} \\
&\quad \times \left[\frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} + \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{+, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} - \frac{\sigma \pi \delta(\sigma \hbar \omega - E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu})}{2E_{-, \mu} [(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu})^2 - E_{-, \mu}^2]} \right] \right\} \\
&= 8\pi \mu^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma'} \\
&\quad \left\{ \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_- + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\mu \epsilon_+}{2E_{-, \sigma' \mu} (4\mu \epsilon_-)} \times \right. \\
&\quad \times \frac{-\sigma}{2E_{+, \mu} (4\mu \epsilon_+)} [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu})] \\
&\quad + \sigma \sigma' n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_- - (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\mu \epsilon_+}{2E_{-, \sigma' \mu} (4\mu \epsilon_-)} \times \\
&\quad \times \frac{-\sigma}{2E_{+, \mu} (-4\mu \epsilon_+)} [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu})] \\
&\quad + \sigma \sigma' n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) \frac{(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\mu \epsilon_- + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_+}{2E_{+, \sigma' \mu} (4\mu \epsilon_+)} \times \\
&\quad \times \frac{\sigma}{2E_{-, \mu} (4\mu \epsilon_-)} [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega - E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \\
&\quad + \sigma \sigma' n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) \frac{-(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\mu \epsilon_- + (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma' \mu \epsilon_+}{2E_{+, \sigma' \mu} (4\mu \epsilon_+)} \times \\
&\quad \times \frac{\sigma}{2E_{-, \mu} (-4\mu \epsilon_-)} [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega - E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \left. \right\}
\end{aligned}$$

Notando que:

$$(\epsilon_+^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\mu\epsilon_- \pm (\epsilon_-^2 + \vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+) 2\sigma'\mu\epsilon_+ = 2\mu(\epsilon_+ \pm \sigma'\epsilon_-)(\epsilon_- \epsilon_+ \pm \sigma'\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+),$$

então

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_C^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= -\frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma, \sigma'} \\ &\left\{ n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) \mu \frac{\epsilon_+ + \sigma' \epsilon_-}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \mu}} \left(1 + \sigma' \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \right. \\ &\quad \times [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \mu})] \\ &- n(\sigma E_{-, \sigma' \mu}) \mu \frac{\epsilon_+ - \sigma' \epsilon_-}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\mu}} \left(1 - \sigma' \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \\ &\quad \times [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\mu})] \\ &- n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) \mu \frac{\epsilon_- + \sigma' \epsilon_+}{E_{+, \sigma' \mu} E_{-, \mu}} \left(1 + \sigma' \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \\ &\quad \times [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega - E_{-, \mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \\ &+ n(\sigma E_{+, \sigma' \mu}) \mu \frac{\epsilon_- - \sigma' \epsilon_+}{E_{+, \sigma' \mu} E_{-, -\mu}} \left(1 - \sigma' \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \\ &\quad \times [\delta(\sigma \hbar \omega + E_{-, -\mu} - E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\sigma \hbar \omega - E_{-, -\mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \left. \right\} \end{aligned}$$

Reagrupando os termos, vamos encontrar

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_C^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= -\frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=\pm 1} \\ &\left\{ [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(E_{+, -\sigma' \mu})] \frac{\sigma' \mu (\epsilon_- - \epsilon_+)}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \right. \\ &\quad \times [\delta(\hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar \omega - E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu})] \\ &+ [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(E_{+, \sigma' \mu})] \frac{\sigma' \mu (\epsilon_+ + \epsilon_-)}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \times \\ &\quad \times [\delta(\hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar \omega - E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu})] \\ &- [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, -\sigma' \mu})] \frac{\sigma' \mu (\epsilon_- - \epsilon_+)}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \\ &\quad \times [\delta(\hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar \omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu})] \\ &- [n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, \sigma' \mu})] \frac{\sigma' \mu (\epsilon_+ + \epsilon_-)}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) \times \\ &\quad \times [\delta(\hbar \omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar \omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \left. \right\}. \quad (\text{G.5}) \end{aligned}$$

Finalmente, somando as Eq. (G.3), (G.4) e (G.5)

$$\begin{aligned}
 \text{Im } \chi^c(\mathbf{q}, \omega, \mu) &= \text{Im } \chi_{D_1}^c + \text{Im } \chi_{D_2}^c + \text{Im } \chi_C^c \\
 &= -\frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=\pm 1} \\
 &\quad \left\{ (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(E_{+, -\sigma' \mu})) \left[1 + \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu(\epsilon_- - \epsilon_+) - \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} \right] \times \right. \\
 &\quad \times \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu})] \\
 &\quad + (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(E_{+, \sigma' \mu})) \left[1 + \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu(\epsilon_- + \epsilon_+) + \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} \right] \times \\
 &\quad \times \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu})] \\
 &\quad + (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, -\sigma' \mu})) \left[1 - \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu(\epsilon_- - \epsilon_+) - \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, -\sigma' \mu}} \right] \times \\
 &\quad \times \left(1 - \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, -\sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, -\sigma' \mu})] \\
 &\quad + (n(E_{-, \sigma' \mu}) - n(-E_{+, \sigma' \mu})) \left[1 - \frac{\mu^2 - \Delta_s^2 + \sigma' \mu(\epsilon_- + \epsilon_+) + \epsilon_- \epsilon_+}{E_{-, \sigma' \mu} E_{+, \sigma' \mu}} \right] \times \\
 &\quad \times \left(1 + \frac{\vec{\epsilon}_- \cdot \vec{\epsilon}_+}{\epsilon_- \epsilon_+} \right) [\delta(\hbar\omega + E_{-, \sigma' \mu} + E_{+, \sigma' \mu}) - \delta(\hbar\omega - E_{-, \sigma' \mu} - E_{+, \sigma' \mu})] \left. \right\},
 \end{aligned}$$

resultando na Eq. (9.27).

Referências Bibliográficas

- [1] R. L. Withers, e J. A. Wilson, J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 4809 (1986).
- [2] J. A. Wilson, e A. D. Yoffe, Adv. Phys. **18**, 193 (1969); J. A. Wilson, F. J. DiSalvo e S. Mahajan, Adv. Phys. **24**,117 (1975).
- [3] J. P. Tidman, O. Singh, e A. E. Curzon, Philos. Mag. **30**, 1191 (1974).
- [4] D. A. Whitney, R. M. Fleming, e R. V. Coleman, Phys. Rev. B **15**, 3405 (1977).
- [5] R. M. Fleming, D. E. Moncton, D. B. McWhan, e F. J. DiSalvo, Phys. Rev. Lett. **45**, 576 (1980).
- [6] D. B. McWhan, J. D. Axe, e R. Youngblood, Phys. Rev. B **24**, 5391 (1981).
- [7] T. Valla, A. V. Fedorov, P. D. Johnson, J. Xue, K. E. Smith, e F. J. DiSalvo, Phys. Rev. Lett. **85**, 4759 (2000).
- [8] R. A. Klemm, Physica C **341**, 839 (2000).
- [9] C. W. Chu, V. Diatshenko, C. Y. Huang, e F. J. DiSalvo, Phys. Rev. B **15**, 1340 (1977).
- [10] A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **86**, 4382 (2001).
- [11] D. E. Moncton, J. D. Axe, e F. J. DiSalvo, Phys. Rev. B **16**, 801 (1977).
- [12] D. Pines, e J. R. Schrieffer, Il Nuovo Cim. X, 3458 (1958).
- [13] C. M. Varma, J. Low Temperature Phys. **126**, 901 (2002).
- [14] B. Uchoa, A. H. Castro Neto, e G. G. Cabrera, Phys. Rev. B **69**, 144512 (2004).
- [15] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity* (McGraw-Hill, New York, 1996).
- [16] E. Ehrenfreund, A. C. Gossard, F. R. Gambele, e T. H. Geballe, J. Appl. Phys. **42**, 1491 (1971).
- [17] P. B. Littlewood, e C. M. Varma, Phys. Rev B **46**, 405 (1992); C. M. Varma, P. B. Littlewood, e S. Schimtt-Rink, Phys. Rev Lett. **63**, 1996 (1989); **64**, 497(E) (1990).

- [18] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, e I. E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics* (Prentice Hall, New Jersey, 1964).
- [19] T. Yokoya, T. Kiss, A Chainani, S. Shin, M. Nohara, e H. Takagi, *Science* **294**, 2518 (2001).
- [20] P. Garoche, J. J. Veyssié, P. Manuel, e P. Moliné, *Solid State Comm.* **19**, 455 (1976); R. E. Schwall, G. R. Stewart, e T. H. Geballe, *J. Low Temp. Phys.* **22**, 557 (1976).
- [21] E. Boaknin, M. A. Tanatar, J. Paglione, F. Ronning, R. W. Hill, M. Sutherland, L. Taillefer, J. Sonier, S. M. Hayden, e J. W. Brill, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 117003 (2003).
- [22] J. Callaway, *Quantum theory of the solid state* (Academic Press, New York, 1974), vol. 2, cap. 6.
- [23] T. Valla, A. V. Fedorov, P. D. Johnson, B. O. Wells, S. L. Hulbert, Q. Li, G. D. Gu, e N. Koshizuka, *Science* **285**, 2110 (1999).
- [24] R. A. Cowley, *Adv. Phys.* **29**, 1 (1980).
- [25] O. Seifarth, S. Gliemann, M. Skiboski e L. Kipp, *J. Electron Spectrosc.* **137**, 675 (2004); R. Liu, W. C. Tonjes, V. A. Greanya, C. G. Olson e R. F. Frindt, *Phys. Rev. B* **61**, 5212 (2000).
- [26] B. Dardel, M. Grioni, P. Weibel, Y. Baer, e F. Lévy, *J. Phys. C* **5**, 6111 (1993).
- [27] R. Corcoran *et al.*, *J. Phys. C* **6**, 4479 (1994).
- [28] G. Wexler e A. M. Wooley, *J. Phys. C* **9**, 1185 (1976).
- [29] S.-K. Chan, e V. Heine, *J. Phys. F* **3**, 795 (1973).
- [30] J. A. Wilson, *Phys. Rev. B* **15**, 5748 (1977).
- [31] T. M. Rice, e G. M. Scott, *Phys. Rev. Lett* **35**, 120 (1975); L. VanHove, *Phys. Rev.* **89**, 1189 (1953).
- [32] V. Vescoli, L. Degiorgi, H. Berger, e L. Forró, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 453 (1998).
- [33] M. D. Núñez-Regueiro, J. M. Lopez-Castillo, e C. Ayache, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1931 (1985).
- [34] W. Sacks, D. Roditchev, e J. Klein, *Appl. Phys. A* **66**, 925 (1998).
- [35] B. Giambattista, A. Johnson, W. McNairy, C. G. Slough, e R. Coleman, *Phys. Rev B* **38**, 3545 (1988); R. Thompson, U. Walter, E. Ganz, J. Clark, A. Zettl, P. Rauch, e F. DiSalvo, *Phys. Rev B*, **38**, 10734 (1988).
- [36] C. Wang, B. Giambattista, C. Slough, R. Coleman, e M. Subramanian, *Phys. Rev B* **42**, 8890 (1990).

- [37] K. Rossnagel *et al.*, Phys. Rev. B **64**, 235119 (2001).
- [38] Th. Straub, Th. Finteis, R. Claessen, P. Steiner, S. Hufner, P. Blaha, C.S. Oglesby, e E. Bucher, Phys. Rev. Lett. **82**, 4504 (1999).
- [39] W. C. Tonjes, V. A. Greanya, Rong Liu, C. G. Olson, e P. Moliné, Phys. Rev B **63**, 235101 (1999).
- [40] R. A. Craven, e S. F. Meyer, Phys. Rev. B **16**, 4583 (1977).
- [41] T. Valla, A. V. Fedorov, P. D. Johnson, P-A. Glans, C. McGuinness, K. E. Smith, E. Y. Andrei, e H. Berger, Phys. Rev Lett. **92**, 86401 (2004).
- [42] T. Kiss, T. Yokoya, A. Chainani, S. Shin, T. Hanaguri, M. Nohara, e H. Takagi, cond-mat/0310326.
- [43] B. P. Gorshunov, A. A. Volkov, G. V. Kozlov, L. Degiorgi, A. Blank, T. Csiba, M. Dressel, A. Schwartz, e G. Gruner, Phys. Rev. Lett. **73**, 308 (1994).
- [44] S. V. Dordevic, E. J. Singley, D. N. Basov, S. Komiyama, Y. Ando, E. Bucher, C. C. Homes, e M. Strongin, Phys. Rev. B, **65**, 135511 (2002).
- [45] S. V. Dordevic, D. N. Basov, R. C. Dynes, B. Ruzicla, V. Vescoli, L. Degiorgi, H. Berger, R. Gaál, L. Forró, e E. Bucher, Eur. Phys. J. B **33**, 15 (2003).
- [46] N. Kobayashi, K. Noto, e Y. Muto, J. Low Temp. Phys. **27**, 217 (1977); D. Sanchez, A. Junod, J. Muller, H. Berger, e F. Lévy, Physica B **204**, 167 (1995).
- [47] S. Wada, J. Phys. Soc. Jap. **40**, 1263 (1976); J. Phys. Soc. Jap. **42**, 764 (1977).
- [48] W. L. McMillan, Phys. Rev. B **14**, 1496 (1976); Phys. Rev B **12**, 2042 (1975).
- [49] A. E. Jacobs, e M. B. Walker, Phys. Rev B **26**, 206 (1982); M. B. Walker, Phys. Rev B **26**, 6208 (1982).
- [50] K. Ishida, Y. Niino, G.-Q. Zheng, Y. Kitaoka, K. Asayama, e T. Ohtani, J. Phys. Soc. Jap. **65**, 2341 (1996).
- [51] L. Balents, M. P. A. Fisher, e C. Nayak, Int. J. Mod. Phys. B **12**, 1033 (1998); L. Balents, M. P. A. Fisher, e C. Nayak, Phys. Rev. B **60**, 1654 (1999); C. Nayak, Phys. Rev B **62**, 4880 (2000).
- [52] P. B. Littlewood and C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. **47**, 811 (1981); Phys. Rev. B **26**, 4883 (1982).
- [53] B. M. Powell, P. Martel, e A. D. B. Woods, Phys. Rev. **171**, 727 (1968).

- [54] C. M. Varma, e W. Weber, Phys. Rev. Lett. **39**, 1094 (1977);
- [55] G. D. Mahan, em *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*, editado por J. T. Devreese (North-Holland, Amsterdam, 1971), p.553.
- [56] T. Ohsaku, Phys. Rev B **66**, 054518 (2002); T. Ohsaku, Phys. Rev. B **65**, 024512 (2002); K. Capelle e K. U. Gross, Phys. Rev. B, **59**, 7155 (1999).
- [57] A. W. Overhauser, Phys. Rev. **167**, 691 (1968).
- [58] O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory* (Springer, Berlim,1978), p.228.
- [59] P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 46 (1959).
- [60] P. W. Anderson, Phys. Rev. B **30**, 4000 (1984).
- [61] E. Bauer *et al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 027003 (2004).
- [62] P. Frigeri, D. F. Agterberg, A. Koga e M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **92**, 097001 (2004). P. A. Frigieri, D. F. Agterberg e M. Sigrist, cond-mat/0405179.
- [63] M. Vojta, Y. Zhang, e S. Sachdev, Phys. Rev. B **62**, 6721 (2000).
- [64] J. M. Kosterlitz, e D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [65] Y. Izyumov, e Y. N. Skryabin, *Statistical mechanics of magnetically ordered systems* (Consultants Bureau, New York, 1988).
- [66] M. Gurvitch, J. M. Valles Jr. , A. M. Cucolo, R. C. Dynes, J. P. Garno, L. F. Schneemeyer, e J. V. Waszczak, Phys. Rev. Lett. **63**, 1008 (1989); M. Lee, M. Naito, A. Kapitulnik, e M. R. Beasley, Solid State Commun. **70**, 449 (1989).
- [67] K. Kamarás *et al.*, Phys. Rev. Lett. **64**, 84 (1990); R. T. Collins, Z. Sclessinger, F. Holtzberg, P. Chaudhari, e C. Feild, Phys. Rev. B **39**, 6571 (1989).
- [68] A. E. Ruckenstein, e C. V. Varma, Physica C **185**, 134 (1991).
- [69] M. E. Peskin, e D. V. Schroeder, *An introduction to quantum field theory* (Addison Wesley, Reading Mass.,1995), cap. 2 e 3.
- [70] D. P. DiVincenzo, e E. J. Mele, Phys. Rev. B **29**, 1685 (1984).
- [71] D. Bohm, e D. Pines, Phys. Rev. **92**, 609 (1953); D. Pines, Phys. Rev. **92**, 626 (1953).
- [72] A. L. Fetter, e J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [73] K. W. -K. Shung, Phys. Rev. B **34** 979 (1986).

- [74] I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series and products* (Academic Press, 1980) ed. 4, .p 84.
- [75] L. Balents, M. P. A. Fisher, e C. Nayak, *Int. Jou. Mod. Phys. B* **12**, 1033 (1998).
- [76] J. Gonzalez, F. Guinea, e M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3589 (1996).
- [77] P. Hawrylak, G. Eliasson, e J. J. Quinn, *Phys. Rev. B* **37**, 10187 (1988).
- [78] J. González, F. Guinea, e M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. B* **63**, 134421 (2001).
- [79] N. J. Doran, B. Ricco, D. J. Titterington, e G. Wexler, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, 685 (1978).
- [80] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, New York, 1975).
- [81] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids* (Addison-Wesley, Redwood City, 1963), cap. 3.
- [82] A. J. Leggett, *Phys.Rev.* **140** , A1869 (1965).
- [83] J. Bardeen, *Phys. Rev. Lett.* **1**, 399 (1958).
- [84] S. Weinberg, *Nucl. Phys. B* **413**, 567 (1994).
- [85] C. J. Pethick, e H. Smith, *Ann. Phys.* **119**, 133 (1979).
- [86] E. Abrahams, e T. Tsuneto, *Phys. Rev.* **152**, 416 (1966).
- [87] R. D. Parks, *Superconductivity* (Marcel Dekker Inc., New York, 1969) vol. 1, cap.2 e 6.
- [88] P. Bak, e D. Mukamel, *Phys. Rev. B* **19**, 1604 (1979).
- [89] K. K. Fung, S. McKernan, J. W. Steeds, e J. A. Wilson, *J. Phys. C:Solid State Phys.* **14**, 5417 (1981); C. H. Chen, J. M. Gibson, e R. M. Fleming, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 723 (1981).
- [90] K. Yamaya, e T. Sambongi, *J. Phys. Soc. Japan* **32**, 1150 (1972).
- [91] D. Matthey, S. Gariglio, e J. -M. Triscone, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3758 (2003); C. H. Ahn, S. Gariglio, P. Paruch, T. Tybell, L. Antognazza, e J.-M. Triscone, *Science* **284**, 1152 (1999).
- [92] D. B. McWhan, R. M. Fleming, e D. E. Moncton e F. J. DiSalvo, *Phys. Rev Lett.* **45**, 269 (1980);
- [93] R. Balian, e N. R. Werthamer, *Phys. Rev.* **131**, 1553 (1963).
- [94] J. R. Schrieffer, *Theory of superconductivity* (Benjamin Inc., New York, 1964), cap. 3.
- [95] J. Bardeen, L. N. Cooper, e J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [96] L. N. Cooper, *Phys. Rev* **104**, 1189 (1956).

- [97] J. Bardeen, Phys. Rev. **97**, 1724 (1953).
- [98] G. D. Mahan, *Many-particle physics* (Plenum, New York, 1981).
- [99] P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **71**, 1887 (1993).
- [100] L. D. Landau, E. M. Lifshitz e L. P. Pitaevskii, *Statistical physics* (Pergamon, Oxford, 1980) vol. 2, p. 213.
- [101] X. Yang, e C. Nayak, Phys. Rev. B **65**, 64523 (2002).
- [102] G. M. Eliashberg, Sov. Phys. JETP **11**, 696 (1960).