



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

*Estudo do modelo Kondo-Hubbard atrativo sobre uma
bicamada na aproximação de Hartree-Fock*

Éric Carvalho Rocha

Teresina-PI
Maio de 2016

Éric Carvalho Rocha

Estudo do modelo Kondo-Hubbard atrativo sobre uma bicamada na aproximação de Hartree-Fock

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Piauí - UFPI, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

José Pimentel de Lima (DF-UFPI)

Teresina-PI

Maio de 2016

Éric Carvalho Rocha

**Estudo do modelo Kondo-Hubbard atrativo sobre uma bicamada na aproximação de
Hartree-Fock**

Comissão Julgadora:

Prof. José Pimentel de Lima/UFPI
Orientador

Prof. Raimundo Rocha dos Santos/UFRJ

Prof. Valdemiro da Paz Brito/UFPI

Prof. Irismar Gonçalves da Paz/UFPI

Teresina-PI
Maio de 2016

Agradecimentos

À minha família: a minhas irmãs Debora e Cássia; e aos meus pais Ed Ary e Olga Sampaio por terem me proporcionado todas as condições físicas e psicológicas necessárias para a minha formação profissional e pessoal.

Aos meus amigos: Fabrício, Valber, Davyson, Rafael, Pedro, Kleuton e Anderson por todo este tempo de convivência compartilhados de forma descontraída; aos meus colegas do L.F.N.E (Tawan, Nubia, Luana, Maykon, José Valdo, Pedro e João Vitor) pelas críticas e discussões levantadas que foram essenciais para o meu desenvolvimento acadêmico.

Ao Natanael de Carvalho Costa, egresso deste PPGF/UFPI e doutorando na UFRJ, pela proposta do problema e por ter se mostrado sempre disposto e motivado a discutir temas importantes deste trabalho.

Ao professor José Pimentel de Lima, cuja competência me serve de inspiração para me tornar um professor responsável e dedicado com o desenvolvimento acadêmico. Agradeço também pelas inúmeras discussões desde os conceitos mais elementares da física até o desenvolvimento final deste trabalho. Muito obrigado.

À Capes pelo apoio financeiro e a UFPI pela estrutura física fornecida.

Resumo

Motivados pela rica variedade de fases apresentadas pelos carbetos de boro, neste trabalho objetivamos compreender a existência e/ou coexistência de fases supercondutoras e ordenamento magnético, em particular sobre uma estrutura de camadas. Iniciamos pelo estudo do modelo de Hubbard atrativo sobre uma bicamada na aproximação de Hartree-Fock, o que nos permitiu uma análise da indução de uma camada supercondutora sobre outra. Ainda na aproximação de Hartree-Fock, estudamos também o modelo de Kondo sobre uma bicamada, onde concluímos que as polarizações das camadas são independentes. Concluindo, fizemos o estudo do modelo Kondo-Hubbard atrativo sobre uma bicamada. Verificamos que há indução da supercondutividade de uma camada sobre a outra mesmo com a presença dos momentos locais.

Palavras-chave: Supercondutividade, modelo de Kondo-Hubbard atrativo, aproximação de Hartree-Fock.

Abstract

Motivated by the rich variety of phases presented by boron carbides, this study aimed to understand the existence and/or the coexistence of superconducting phases and magnetic ordering, in especial on a layer structure. We begin by studying the attractive Hubbard model on a bilayer in the Hartree-Fock approximation, which allowed us to analyze the induction of a superconducting layer over another layer. Still in the Hartree-Fock approximation, we also studied the Kondo model on a bilayer, where we concluded that the polarizations of the layers are independent. In conclusion, we study the attractive Kondo-Hubbard model on a bilayer. We found that there is induction of superconductivity of a layer on the other even with the presence of the local moments.

Keywords: Superconductivity, Kondo-Hubbard attractive model, Mean-Field approximation.

Sumário

Lista de Figuras	p. vii
1 Introdução	p. 1
2 Modelo de Hubbard Atrativo	p. 6
2.1 Modelo de Hubbard em uma monocamada	p. 6
2.2 Modelo de Hubbard em uma bicamada	p. 9
3 Modelo da Rede de Kondo	p. 20
3.1 Modelo da Rede de Kondo em uma monocamada	p. 21
3.2 Modelo da Rede de Kondo em uma bicamada	p. 25
4 Modelo Kondo-Hubbard Atrativo	p. 28
4.1 Modelo Kondo-Hubbard em uma monocamada	p. 28
4.2 Modelo Kondo-Hubbard em uma bicamada	p. 30
5 Conclusões e Perspectivas	p. 36
Apêndice A – Aproximação de Hartree-Fock: Modelo de Hubbard	p. 38
Apêndice B – Teorema de Feynman-Hellman	p. 40
Apêndice C – Modelo da rede de Kondo aproximação de Hartree-Fock	p. 42
Apêndice D – Modelo Kondo-Hubbard atrativo	p. 44
Referências Bibliográficas	p. 46

Lista de Figuras

1.1	Com a diminuição da temperatura a resistência de alguns metais diminui até um valor constante (curva em azul). Outros materiais tornam-se supercondutores abaixo de uma temperatura critica T_c (curva em verde). E em alguns metais, que apresentam impurezas magnéticas, a resistência apresenta um mínimo (curva em vermelho). Figura adaptada da Referência [1].	p. 1
1.2	Representação clássica de uma par de Copper.	p. 2
1.3	Estrutura cristalina de compostos $Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n}F_2$ para (a) $n=2$, (b) $n=3$ e (c) $n=4$. Figura adaptada da Referência [2].	p. 3
1.4	Esboço das estruturas cristalina dos RNi_2B_2C em (a). E em (b) a estrutura magnética para $R=Dy, Pr$ e Ho . Figura adaptada de Referência [3].	p. 3
1.5	Temperaturas T_N e T_c como função do fator de de Gennes. Figura adaptada da Referência [4].	p. 4
1.6	$T_c \times n$ (número de camadas). Figura adaptada da Referência [5].	p. 4
2.1	Parâmetro de estrutura supercondutora como função da atração local para uma monocamada no estado fundamental.	p. 9
2.2	$P \times U$ da monocamada (curva pontilhada). P_A e P_B como função de U_A com $U_B=2,0$	p. 13
2.3	$(n_A \text{ e } n_B) \times t_z$ com $n_c = 0,9$	p. 14
2.4	$(P_A \text{ e } P_B) \times t_z$ para a bicamada com $n_c = 0,9$	p. 14
2.5	$(P_A \text{ e } P_B) \times n_c$ com $U_A = 6$	p. 15
2.6	$n \times U_A$ com $U_B=0,1$	p. 15
2.7	$U_A \times P_B \times t_z$ com $n_c=0,9$	p. 16
2.8	$(P_A \text{ e } P_B) \times U_B$ com $t_z=1$ e $P \times U$ da monocamada.	p. 16
2.9	$P_A \times U_A$ com $U_B=0,1$	p. 17
2.10	$P_B \times U_A$ com $U_B=0,1$	p. 17
2.11	Diagrama de fase temperatura $\times U_A$ para $t_z = 1.0$ com P_A exibido em azul.	p. 18

2.12	Diagrama de fase temperatura $\times U_A$ para $t_z = 1.0$ com P_B exibido em azul.	p. 18
2.13	$P_A \times T$ com $U_A=4$, $U_B=0,1$ e $n_c = 0,9$	p. 19
3.1	Representação unidimensional de uma onda de <i>spin</i> espiral com interação antiferromagnética entre os elétrons c (em preto) e os momentos locais f (em vermelho).	p. 21
3.2	Monocamada com $n_c=0,9$. Parâmetros de ordem em função de J	p. 24
3.3	Monocamada com $n_c=0,9$. Vetor de onda magnética Q_y/π como função de J para $Q_x = \pi$	p. 24
3.4	Parâmetros de ordem como função de J_A/J_B para $J_B = 2,6$ e $t_z = 1$	p. 27
3.5	Vetor de onda Q_y/π como função de J_A/J_B com $J_B=2,6$ e $t_z = 1,0$	p. 27
4.1	Parâmetros de ordem como função de J	p. 30
4.2	Parâmetros de ordem como função de J	p. 31
4.3	$\Delta_A \times U_A$ com $U_B = 0,1$ para alguns valores de J_B	p. 33
4.4	$\Delta_B \times U_A$ com $U_B = 0,1$ para alguns valores de J_B	p. 33
4.5	$m_c \times U_A$ com $t_z = 1,0$ para alguns valores de J_B	p. 34
4.6	$(n_c^A \text{ e } n_c^B) \times U_A$ com $U_B = 0,1$ e $J_B = 0,45$	p. 34
4.7	Diagrama de fase $J_B \times U_A$ com $U_B = 0,1$. A linha representa uma transição de primeira ordem separando a fase AFM da fase AFM+SC.	p. 35

1 Introdução

A resistência elétrica de metais puros diminui à medida que baixamos a temperatura, devido às vibrações atômicas dificultarem a propagação dos elétrons. Portanto, seria razoável esperar que com a diminuição da temperatura a resistência fosse a zero. No entanto, quanto mais nos aproximamos da temperatura zero, metais como o cobre, o ouro e a prata têm sua resistência saturada a um valor não nulo mesmo às temperaturas acessíveis mais baixas [1], como esboçado na curva em azul da Figura 1.1. Esta resistência de saturação é atribuída a presença de defeitos estáticos no material [6].

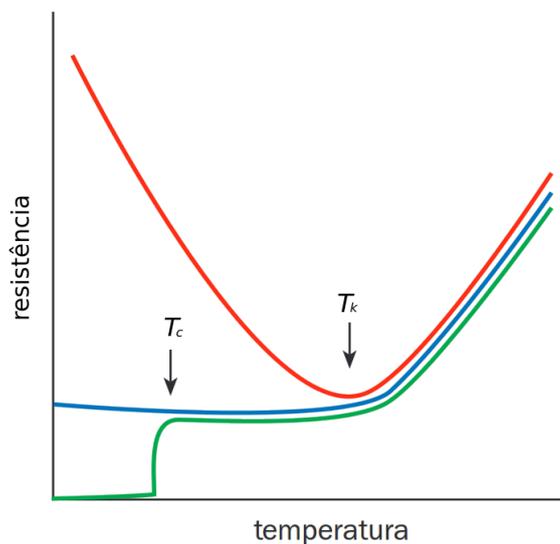


Figura 1.1: Com a diminuição da temperatura a resistência de alguns metais diminui até um valor constante (curva em azul). Outros materiais tornam-se supercondutores abaixo de uma temperatura crítica T_c (curva em verde). E em alguns metais, que apresentam impurezas magnéticas, a resistência apresenta um mínimo (curva em vermelho). Figura adaptada da Referência [1].

Para alguns materiais magnéticos como o cobalto e algumas ligas metálicas observamos um mínimo no valor da resistência, ou seja, a partir de um certo ponto a resistência aumenta enquanto a temperatura diminui, como esboçado na curva em vermelho da Figura 1.1. Este fenômeno é conhecido como efeito Kondo [7]. Este efeito somente surge quando há interação entre elétrons de condução (geralmente orbitais s, p ou d) e elétrons fortemente localizados (provenientes de orbitais f).

O aumento da resistência é atribuído a impurezas magnéticas que atuam como centros espalha-

dores, dificultando a propagação dos elétrons. Kondo mostrou que esta interação entre os momentos locais e os elétrons de condução é favorável ao alinhamento antiferromagnético (AFM). As impurezas magnéticas se acoplam com os elétrons de condução formando singletos localizados blindando as mesmas. Desta forma, o efeito Kondo normalmente compete com o magnetismo [8].

Há ainda metais e metaloides, como o alumínio, o chumbo e o mercúrio que perdem toda a sua resistência elétrica abaixo de uma temperatura de transição T_c , como esboçado na curva em verde da Figura 1.1. Este estado, conhecido como supercondutor (SC), foi descoberto em 1911, por Kamerlingh Onnes ao resfriar o mercúrio a uma temperatura de 4,2 K [9].

Foi somente em 1957 que a compreensão deste fenômeno foi atingida com a teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer (teoria BCS [10]). A teoria BCS estabelece a supercondutividade como um efeito causado pela atração efetiva entre elétrons. O mecanismo para esta atração se dá através dos fônons da rede, fazendo com que os elétrons se condensem em pares, chamados pares de Cooper, veja Figura 1.2. Este estado de elétrons emparelhados teria uma energia menor do que a energia de Fermi criando um *gap* que impede os elétrons de condução de sofrerem espalhamento pelas impurezas da rede.

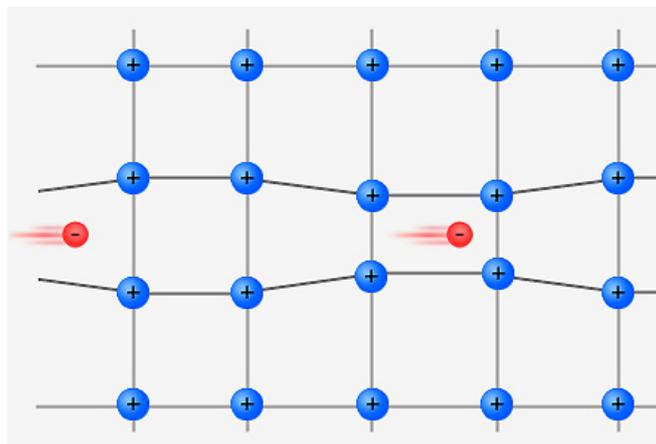


Figura 1.2: Representação clássica de uma par de Cooper.

Além da resistividade nula abaixo da temperatura T_c , uma das características mais interessantes a respeito da supercondutividade é um fenômeno conhecido como efeito Meissner. Este fenômeno consiste do diamagnetismo perfeito, ou seja, não existe campo magnético interno no material supercondutor, pois surgem correntes superficiais para cancelá-lo. A ausência de dissipação e o diamagnetismo perfeito tem estimulado a busca por materiais supercondutores em temperaturas mais elevadas.

A grande maioria dos materiais conhecidos até o final do século passado apresentavam supercondutividade competindo com o ordenamento magnético, uma vez que o magnetismo competia com a formação de elétrons emparelhados. Como é o caso de alguns cupratos [2, 11], compostos caracterizados por planos de CuO_2 , veja a Figura 1.3. Com a descoberta de supercondutividade em alguns compostos constituídos por elementos terra-rara, observou-se a coexistência entre estados SC e magnéticos. Uma classe de materiais de particular interesse para este trabalho consiste nos carbetos de

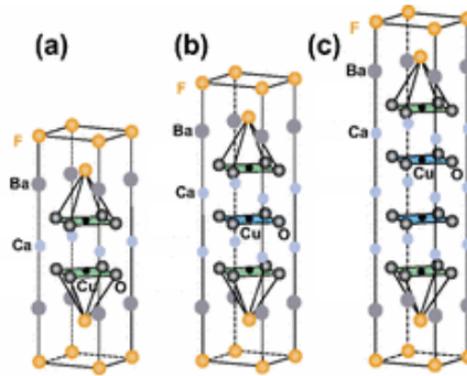


Figura 1.3: Estrutura cristalina de compostos $Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n}F_2$ para (a) $n=2$, (b) $n=3$ e (c) $n=4$. Figura adaptada da Referência [2].

boro, compostos que apresentam a composição química RT_2B_2C , onde R é um metal terra-rara e T um metal de transição.

Os RNi_2B_2C ($R = Y, Ce, Pr, Nd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm$ e Yb) apresentam uma estrutura cristalina de corpo centrado, Figura 1.4 (a), constituída de planos RC separados por camadas de Ni_2B_2 empilhados ao longo do eixo z [3]. Estes materiais apresentam uma grande variedade de ordenamentos magnéticos dependendo da escolha do elemento terra-rara. Por exemplo, para $R=Dy, Pr$ e Ho , o material apresenta camadas com ordenamento ferromagnético (FM) no plano $x-y$ e AFM no eixo z , como mostra a Figura 1.4 (b). No caso do Dy e do Ho a supercondutividade coexiste com o magnetismo, enquanto que o Pr não apresenta supercondutividade [4].

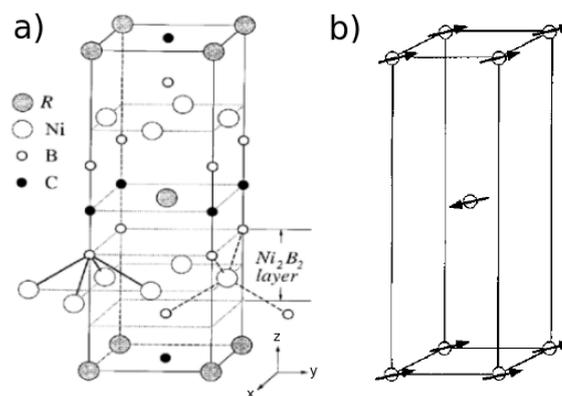


Figura 1.4: Esboço das estruturas cristalina dos RNi_2B_2C em (a). E em (b) a estrutura magnética para $R=Dy, Pr$ e Ho . Figura adaptada de Referência [3].

Os valores das temperaturas de transição supercondutora, T_c , e de ordenamento antiferromagnético, T_N , estão ilustrados na Figura 1.5. Observamos que para supercondutores AFM como o $TmNi_2B_2C$ e $ErNi_2B_2C$ a razão T_N/T_c é menor do que 1, é próxima de 1 para supercondutores que

apresentam um comportamento reentrante como o $HoNi_2B_2C$, e é maior do que 1 para o $DyNi_2B_2C$.

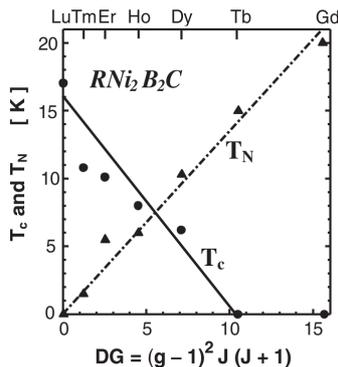


Figura 1.5: Temperaturas T_N e T_c como função do fator de de Gennes. Figura adaptada da Referência [4].

Técnicas experimentais de difração de nêutrons [12] e de difração de raios-X [13], indicam que o comportamento reentrante observado em alguns carbetos de Boro como o $HoNi_2B_2C$ e o $Er(Ni_{1-x}CO_x)_2B_2C$ é devido à interação entre a fase supercondutora e uma fase espiral magnética modulada. Nestes materiais, à medida que a temperatura é diminuída saímos de uma fase paramagnética para uma fase AFM comensurável passando por uma fase AFM modulada. Recentemente, trabalhos teóricos mostraram que o modelo da rede de Kondo apresenta, dentro de certas condições, fase espirais magnéticas que são até mais estáveis do que as fases FM e AFM comensurável [14]. Desta forma, o modelo de Kondo representa um bom candidato para a modelagem destes materiais.

Assim como os carbetos de boro, os cupratos também apresentam supercondutividade fortemente correlacionada com a estrutura de camadas [5]. Por exemplo, pode-se observar da Figura 1.6 que a temperatura de transição para os cupratos $HgBa_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+2+\delta}$ tem um pico em $n=3$ e cai abruptamente acima deste valor.

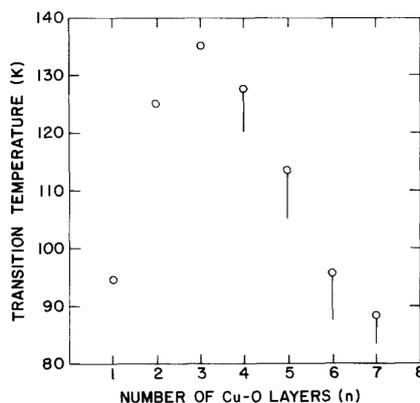


Figura 1.6: $T_c \times n$ (número de camadas). Figura adaptada da Referência [5].

O objetivo desta dissertação é estudar a física essencial por trás dos ordenamentos magnéticos e sua correlação com a supercondutividade nos carbetos de boro. Para isso, vamos fazer uma análise

teórica do modelo Kondo-Hubbard atrativo com foco na estrutura de uma bicamada. Resolveremos o modelo através de uma aproximação de Hartree-Fock [15, 16, 17] na rede quadrada.

O modelo de Hubbard [18] é um dos modelos comumente usados para descrever a correlação entre elétrons, necessária para se compreender a formação do emparelhamento eletrônico. Já o modelo de rede Kondo [19], aborda a interação entre os elétrons da banda de condução e os momentos locais, no limite de um momento magnético local por sítio. Este modelo é comumente utilizado para descrever a física de compostos de férmions pesados baseados em terra-raras e actínídeos.

Devido à grande quantidade de parâmetros envolvidos no modelo, vamos estudar separadamente o modelo de Hubbard no Capítulo 2, e o modelo de Kondo no Capítulo 3, a fim de identificarmos as variáveis essenciais. No Capítulo 4, estudamos o modelo Kondo-Hubbard atrativo sobre uma bicamada, e no Capítulo 5 apresentamos nossas conclusões.

2 Modelo de Hubbard Atrativo

Os carbetos de boro são constituídos de planos RC , que dificilmente apresentam supercondutividade [4], separados por camadas de Ni_2B_2 . Estes materiais tem suas propriedades fortemente correlacionadas com a estrutura de camadas. Por exemplo, entre as camadas de Ni_2B_2 , o RNi_2B_2C e o $RNiBC$ possuem uma e duas camadas de RC , respectivamente. O RNi_2B_2C pode exibir supercondutividade dependendo do R , porém o $RNiBC$ não exibe supercondutividade.

Resultados experimentais indicam correlação entre estados AFM e SC para estruturas multiplanares de cupratos dopados [20, 21]. Esta correlação é atribuída à força do acoplamento t_z entre as camadas. Portanto, para entender a relação entre antiferromagnetismo e supercondutividade em estruturas multiplanares, vamos investigar a relação de t_z e da densidade eletrônica n com as propriedades eletrônicas da rede.

Neste capítulo, consideramos um sistema de férmions itinerantes sobre um potencial atrativo que favorece o estado de *spins* emparelhados no mesmo sítio. Vamos estudar o modelo de Hubbard atrativo [22, 18] através da aproximação de Hartree-Fock em uma rede quadrada. Resolveremos o modelo de Hubbard em duas situações: para a monocamada e para a bicamada. Nosso principal interesse é analisar os efeitos que uma camada tem sobre a outra, no emparelhamento eletrônico.

2.1 Modelo de Hubbard em uma monocamada

A Hamiltoniana do modelo de Hubbard atrativo é definida como,

$$\begin{aligned}
 H &= H_{Hop} + H_{Hub} = \\
 &= -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} \left(c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c_{\mathbf{R}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma} \right) - U \sum_{\mathbf{R}} n_{\mathbf{R}\uparrow} n_{\mathbf{R}\downarrow},
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde o símbolo $\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle$ enfatiza que a soma é sobre os primeiros vizinhos de uma rede quadrada e $n_{\mathbf{R}\sigma} = c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma}$ é o operador número de férmions.

O primeiro termo da Hamiltoniana é referente à energia cinética, descrevendo a destruição de um elétron de *spin* σ na posição \mathbf{R}' e a criação no sítio \mathbf{R} e vice-versa. Esse termo é conhecido como termo de *hopping*. O segundo termo, representa o potencial atrativo entre elétrons, com $U > 0$. Ele

reduz a energia em $-U$ caso haja dupla ocupação em um sítio da rede; este termo nos conduzirá à supercondutividade.

Os estados possíveis do modelo são referentes às configurações dos íons da rede: o orbital em cada sítio pode estar vazio, preenchido por um elétron com *spin up* (ou *down*), ou duplamente ocupado por um par de elétrons com *spins* contrários.

Aproximação de Hartree-Fock

Resolveremos o modelo de Hubbard em uma monocamada através da aproximação de Hartree-Fock [15, 16, 17]. Esta subseção servirá, também, para apresentar o método que será usado ao longo de toda a dissertação.

Vamos fazer uma transformada de Fourier definida como

$$c_{\mathbf{R}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.2)$$

onde os \mathbf{k} 's são os vetores da rede recíproca. Assim, o termo de *hopping* fica,

$$H_{hop} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[(E_{k_x} + E_{k_y}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \right], \quad (2.3)$$

com $E_{k_s} = -2t\cos(k_s)$.

O termo de Hubbard será diagonalizado através de uma aproximação de Hartree-Fock, que consiste em substituir as interações entre os elétrons por campos efetivos, levando a uma situação de férmions não interagentes; veja o Apêndice A. Em seguida fazemos uma transformada de Fourier, e o termo de Hubbard em campo médio fica,

$$H_{hub} = -\frac{Un}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \Delta \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right) + \frac{NU n^2}{4} + \frac{N\Delta^2}{U}, \quad (2.4)$$

onde definimos n como a densidade eletrônica, dada por

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right), \quad (2.5)$$

e o parâmetro Δ , como,

$$\Delta = +\frac{|U|}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle = \frac{|U|}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle. \quad (2.6)$$

Devido à natureza bosônica do estado de dois férmions emparelhados, podemos dizer que Δ é um parâmetro que indica a criação de excitações bosônicas. Para comprovarmos isso, vamos analisar a formação de estados emparelhados, através da função de correlação de pares de dois orbitais de forma

semelhante ao feito na Referência [23],

$$P' = \left\langle c_{\mathbf{R}'\downarrow} c_{\mathbf{R}'\uparrow} c_{\mathbf{R}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\downarrow}^\dagger \right\rangle. \quad (2.7)$$

Após uma aproximação de Hartree-Fock e fazendo uma transformada de Fourier, definimos o seu fator de estrutura associado como,

$$P = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} P' \approx \left(\frac{1}{N} \sum_k \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right) \left(\frac{1}{N} \sum_k \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \right) = \frac{\Delta^2}{U^2}. \quad (2.8)$$

Para termos um controle sobre o preenchimento da banda, vamos acrescentar à Hamiltoniana o potencial químico na forma de um campo efetivo a ser determinado como um multiplicador de Lagrange, $-\mu(\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - Nn)$. Das equações 2.3 e 2.4 podemos escrever a Hamiltoniana de campo médio como,

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\left(E_{k_x} + E_{k_y} - \frac{Un}{2} - \mu \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \right] - \Delta \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right) + \frac{NUn^2}{4} + \frac{N\Delta^2}{U} + N\mu n. \quad (2.9)$$

Esta Hamiltoniana pode ser escrita em uma forma matricial usando uma base de espinores de Nambu, $\Psi^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix}$, ficando

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger \mathcal{H} \Psi + cte. = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & -\Delta \\ -\Delta & -A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + cte, \quad (2.10)$$

onde $A = (E_{k_x} + E_{k_y} - \frac{Un}{2} - \mu)$ e $cte. = \frac{NUn^2}{4} + \frac{N\Delta^2}{U} + N\mu n - N\frac{Un}{2} - N\mu + \sum_k (E_{k_x} + E_{k_y})$.

Para garantir que estamos encontrando as soluções mais estáveis, vamos minimizar o funcional da energia livre de Helmholtz em termos dos parâmetros μ e Δ , através do teorema de Feynman-Hellman (ver Apêndice B), impondo assim a restrição,

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial \mu} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial \Delta} \right\rangle = 0. \quad (2.11)$$

Para encontrarmos a densidade eletrônica, vamos escrever nossa Hamiltoniana em uma forma diagonal, por meio de uma mudança de base,

$$\begin{cases} \Psi_p = \sum_{q=1}^2 u_{p,q} \eta_{q,\mathbf{k}}, \\ \Psi_p^\dagger = \sum_{q=1}^2 u_{p,q}^* \eta_{q,\mathbf{k}}^\dagger. \end{cases} \quad (2.12)$$

Nesta base, escrevemos a densidade eletrônica como,

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{q,q'} \left[u_{1,q}^* u_{1,q} \langle \eta_{q,\mathbf{k}}^\dagger \eta_{q,\mathbf{k}} \rangle + u_{2,q} u_{2,q}^* \langle \eta_{q,\mathbf{k}} \eta_{q,\mathbf{k}}^\dagger \rangle \right]. \quad (2.13)$$

Usando a relação de anticomutação e lembrando que $\langle \eta_{p\mathbf{k}}^\dagger \eta_{p'\mathbf{k}} \rangle = \delta_{p,p'} f(E_p)$ onde $f(E_p)$ é a função distribuição de Fermi-Dirac ficamos com,

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_q \left[|u_{1,q}|^2 f(E_q) - |u_{2,q}^*|^2 f(E_q) \right] + |u_{2,q}^*|^2. \quad (2.14)$$

As equações 2.11 e 2.14 são usadas para encontrar os parâmetros Δ , μ e n_c de forma autoconsistente.

A Figura 2.1 apresenta $P \times U$ para uma monocamada com alguns valores de n e temperatura nula. O parâmetro P aumenta com o valor de U a partir de zero até um limite superior onde o sistema estará saturado de pares de Cooper.

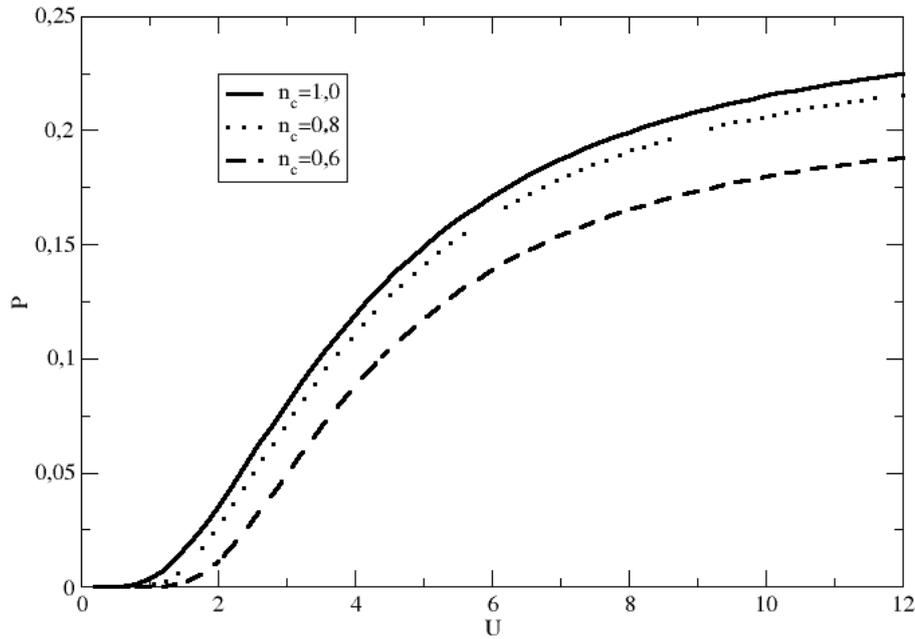


Figura 2.1: Parâmetro de estrutura supercondutora como função da atração local para uma monocamada no estado fundamental.

2.2 Modelo de Hubbard em uma bicamada

Agora vamos considerar o modelo de Hubbard sobre uma bicamada. Resolveremos o problema associando diferentes potenciais atrativos, U_A e U_B às camadas A e B, respectivamente. Em seguida

faremos $U_B \rightarrow 0$, para analisar os efeitos de indução de supercondutividade de uma camada sobre a outra.

A Hamiltoniana é dada por,

$$\begin{aligned}
H = -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} & \left(c_{A\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{R}'\sigma} + c_{A\mathbf{R}'\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{R}\sigma} + c_{B\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{R}'\sigma} + c_{B\mathbf{R}'\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{R}\sigma} \right) \\
& - t_z \sum_{\mathbf{R}, \sigma} \left(c_{A\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{R}\sigma} + c_{B\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{R}\sigma} \right) \\
& - U_A \sum_{\mathbf{R}} n_{A\mathbf{R}\uparrow} n_{A\mathbf{R}\downarrow} - U_B \sum_{\mathbf{R}} n_{B\mathbf{R}\uparrow} n_{B\mathbf{R}\downarrow}, \quad (2.15)
\end{aligned}$$

onde o símbolo $\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle$ enfatiza que a soma é sobre os primeiros vizinhos de uma rede quadrada, n_A e n_B são os operadores número de férmions relativos às camadas, e t_z representa o acoplamento entre os planos.

Vamos realizar uma transformada de Fourier, definida como,

$$c_{\alpha\mathbf{R}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.16)$$

onde α refere-se aos índices A e B das respectivas monocamadas.

Desta forma, o termo de *hopping* torna-se,

$$H_{\text{hopping}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[(E_{k_x} + E_{k_y}) \left(c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} + c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} \right) + \left(E_{k_z} c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} + E_{k_z}^* c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} \right) \right], \quad (2.17)$$

onde $E_{k_s} = -2t \cos(k_s)$ e $E_{k_z} = -t_z$.

Após desenvolvermos o termo de Hubbard, $H_{\text{hub}} = -U_A \sum_i c_{A\mathbf{R}\uparrow}^\dagger c_{A\mathbf{R}\uparrow} c_{A\mathbf{R}\downarrow}^\dagger c_{A\mathbf{R}\downarrow} - U_B \sum_i c_{B\mathbf{R}\uparrow}^\dagger c_{B\mathbf{R}\uparrow} c_{B\mathbf{R}\downarrow}^\dagger c_{B\mathbf{R}\downarrow}$, na aproximação de Hartree-Fock, de forma semelhante ao que foi feito para a monocamada, e em seguida fazendo uma transformada de Fourier, temos

$$\begin{aligned}
H_{\text{hub}} = & \frac{-U_A n_A}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} - \frac{U_B n_B}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} \\
& - \Delta_A \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{A-\mathbf{k}\downarrow} c_{A\mathbf{k}\uparrow} \right) - \Delta_B \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{B-\mathbf{k}\downarrow} c_{B\mathbf{k}\uparrow} \right) \\
& N \left(\frac{U_A n_A^2}{4} + \frac{U_B n_B^2}{4} \right) + N \left(\frac{\Delta_A^2}{U_A} + \frac{\Delta_B^2}{U_B} \right), \quad (2.18)
\end{aligned}$$

onde definimos as densidades eletrônicas n_A e n_B , e os parâmetros Δ_A e Δ_B para as camadas A e B,

respectivamente, como,

$$n_A = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\langle c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle c_{A-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{A-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right), \quad (2.19)$$

$$n_B = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\langle c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle c_{B-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{B-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right), \quad (2.20)$$

$$\Delta_A = + \frac{|U_A|}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle, \quad (2.21)$$

$$\Delta_B = + \frac{|U_B|}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (2.22)$$

Após a inclusão do termo de potencial químico na forma de um campo efetivo a ser determinado como um multiplicador de Lagrange, $-\mu [\sum_{i\sigma} (c_{Ai\sigma}^\dagger c_{Ai\sigma} + c_{Bi\sigma}^\dagger c_{Bi\sigma}) - 2Nn_c]$, para ambas as camadas, a Hamiltoniana de campo médio pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} H_{MF} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[(E_{kx} + E_{ky} - \mu - \frac{U_A n_A}{2}) c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} + (E_{kx} + E_{ky} - \mu - \frac{U_B n_B}{2}) c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} \right. \\ & \left. + (E_{kz} c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} + E_{kz}^* c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma}) \right] \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_A (c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{A-\mathbf{k}\downarrow} c_{A\mathbf{k}\uparrow}) + \Delta_B (c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{B-\mathbf{k}\downarrow} c_{B\mathbf{k}\uparrow}) \right] \\ & + N \left(\frac{U_A n_A^2}{4} + \frac{U_B n_B^2}{4} \right) + N \left(\frac{\Delta_A^2}{U_A} + \frac{\Delta_B^2}{U_B} \right) + 2N\mu n_c, \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde fixamos um n_c que representa a densidade eletrônica média global, dada por

$$n_c = \frac{(n_a + n_b)}{2}. \quad (2.24)$$

Como antes, a Hamiltoniana pode ser escrita na forma matricial usando uma base de espinores de Nambu, $\Psi^\dagger = (c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{A-\mathbf{k}\downarrow}, c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{B-\mathbf{k}\downarrow})$. Assim, obtemos,

$$H_{MF} = \Psi^\dagger \mathcal{H} \Psi + cte. \quad (2.25)$$

com

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} A_1 & -\Delta_A & E_{kz} & 0 \\ -\Delta_A & -A_1 & 0 & -E_{kz}^* \\ E_{kz}^* & 0 & A_2 & -\Delta_B \\ 0 & -E_{kz} & -\Delta_B & -A_2 \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

onde $A_1 = (E_{kx} + E_{ky} - \mu - \frac{U_A n_A}{2})$ e $A_2 = (E_{kx} + E_{ky} - \mu - \frac{U_B n_B}{2})$. Na equação 2.25 a constante é

escrita como,

$$\begin{aligned} cte. = & N \left(\frac{U_A n_A^2}{4} + \frac{U_B n_B^2}{4} \right) + N \left(\frac{\Delta_A^2}{U_A} + \frac{\Delta_B^2}{U_B} \right) + 2N\mu n_c - 2N\mu \\ & - N \left(\frac{U_A n_A}{2} + \frac{U_B n_B}{2} \right) + 2 \sum_{\mathbf{k}} (E_{kx} + E_{ky}). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Com isto, seguimos o mesmo procedimento mencionado na seção anterior para diagonalizar a Hamiltoniana e obter os parâmetros n_a , n_b , Δ_a e Δ_b , autoconsistentemente.

Resultados para temperatura nula

Na Figura 2.2 comparamos as curvas $P \times U$ da monocamada e as curvas $(P_A \text{ e } P_B) \times U_A$ da bicamada para $U_B = 2,0$. À medida que U_A vai aumentando, aparece uma região comum para as curvas de P_A e P . Podemos compreender isto olhando a Figura 2.3, que apresenta a curva $(n_A \text{ e } n_B) \times t_z$ para diversos valores de U_A : vemos que quando U_A cresce a densidade eletrônica vai a zero na camada B, e portanto, o sistema comporta-se semelhantemente a uma monocamada.

Para podermos analisar o efeito de indução no emparelhamento eletrônico faremos $U_B \ll U_A$. Na Figura 2.4 exibimos $(P_A \text{ e } P_B) \times t_z$ para a bicamada com $n_c = 0,9$. Vemos que P_A tem seu valor máximo quando o acoplamento entre os planos é nulo e vai a zero quando o acoplamento cresce. Como era de se esperar, P_B cresce inicialmente, pois os elétrons estão migrando da camada A para a camada B. Porém, também vai a zero para t_z grande, pois a energia envolvida no acoplamento entre as camadas se torna da ordem da energia de formação de um par de Cooper. Na Figura 2.7 exibimos as curvas $P_B \times t_z$ para U_A variando entre 2 e 6 com $U_B=0,1$. Com isto, fica mais evidente que a faixa de t_z com $P_B \neq 0$ aumenta com U_A .

Na Figura 2.5 exibimos o comportamento de $(P_A \text{ e } P_B) \times n_c$ com $U_A = 6$ para $t_z=3,0$. A curva apresenta um máximo próximo de $n_c \approx 0,55$ e decresce acima deste valor. Na Figura 2.6 exibimos o comportamento de $n \times U_A$ com $n_c = 0,9$ para vários valores de t_z . Vemos que para U_A grande a densidade eletrônica fica praticamente constante, porém como visto na Figura 2.3 isto apenas acontece quando o acoplamento entre os planos é fraco.

Na Figura 2.8 exibimos o comportamento de $(P_A \text{ e } P_B) \times U_B$ para $U_B=4$ com $t_z=1$ e $P \times U$ da monocamada com $n_c=0,9$. Esta Figura ilustra o caráter indutivo na formação de pares de Cooper, que uma camada tem sobre a outra produzindo $P_b \neq 0$ mesmo para $U_B=0$. Estes resultados estão de acordo com os obtidos através de Monte Carlo e por teoria de perturbação nas Referências [23, 24].

Nas Figuras 2.9 e 2.10 exibimos $P \times U_A$ com $n_c=0,9$ para vários valores de t_z . Concluímos que os maiores valores de P_A são observados na situação de acoplamento fraco. Na ausência de acoplamento entre os planos, não há formação de pares de Cooper na camada B, reforçando que o caráter indutivo observado na Figura 2.8 é uma consequência do acoplamento entre os planos.

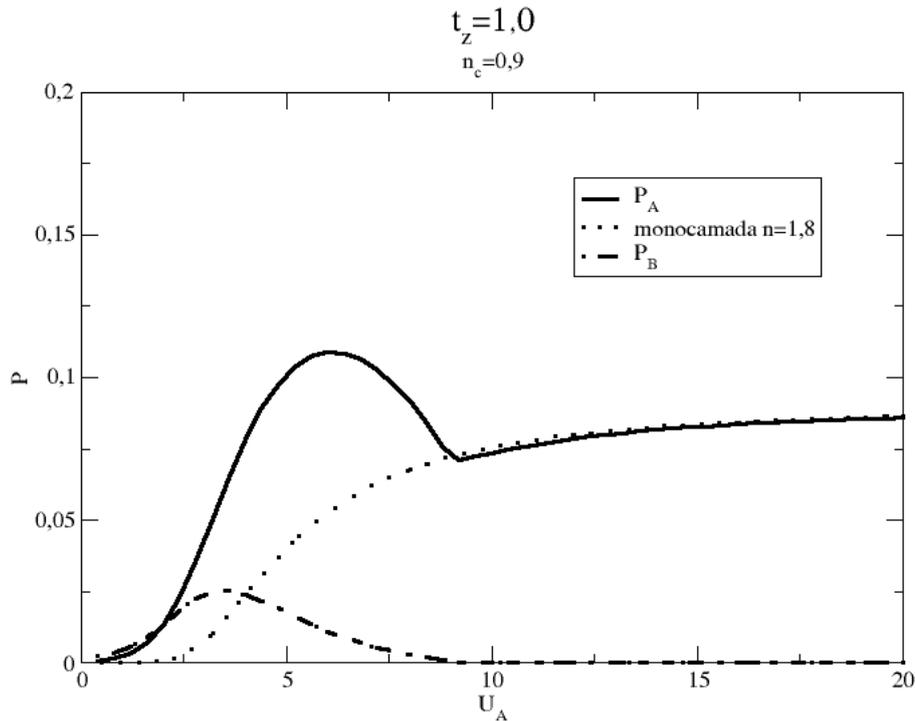


Figura 2.2: $P \times U$ da monocamada (curva pontilhada). P_A e P_B como função de U_A com $U_B=2,0$.

Resultados para temperatura não nula

Quando aumentamos a temperatura a formação de pares de Cooper vai a zero em ambas as camadas pois, a agitação térmica diminui os efeitos do acoplamento elétron-fônon. Nas Figuras 2.11 e 2.12 exibimos um diagrama de fase $T \times U_A$ para $n_c=1,0$, $t_z=1,0$ e $U_B=0,01$. E na Figura 2.13, exibimos $P \times T$ para vários valores de t_z com U_A e U_B constantes. Estes resultados mostram que para aumentar a formação de pares de Cooper é necessário aumentar U_A e diminuir o acoplamento entre os planos, uma vez que, com $U_B \rightarrow 0$ temos que $P_A \gg P_B$.

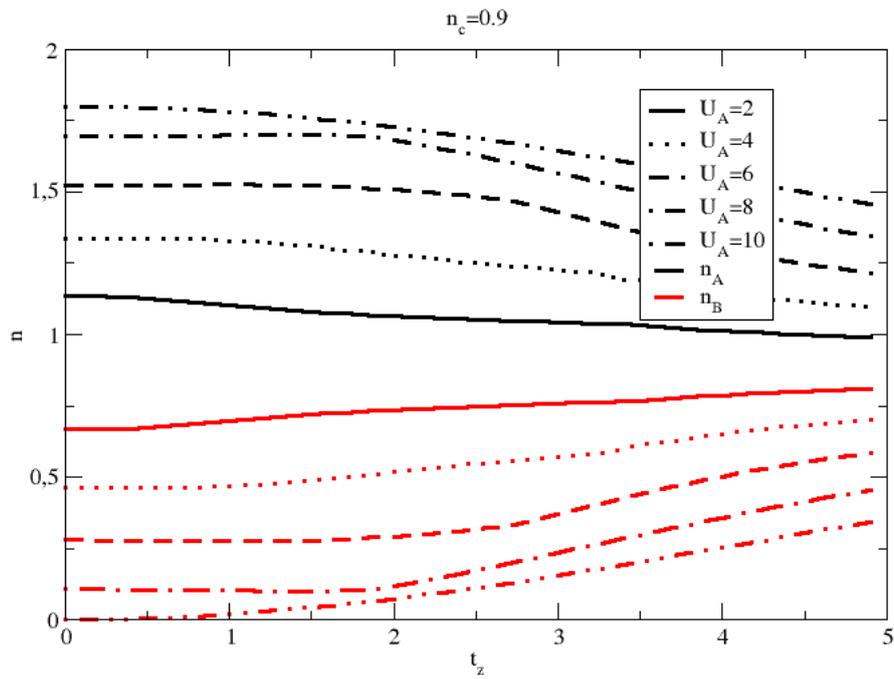


Figura 2.3: $(n_A e n_B) \times t_z$ com $n_c = 0,9$.

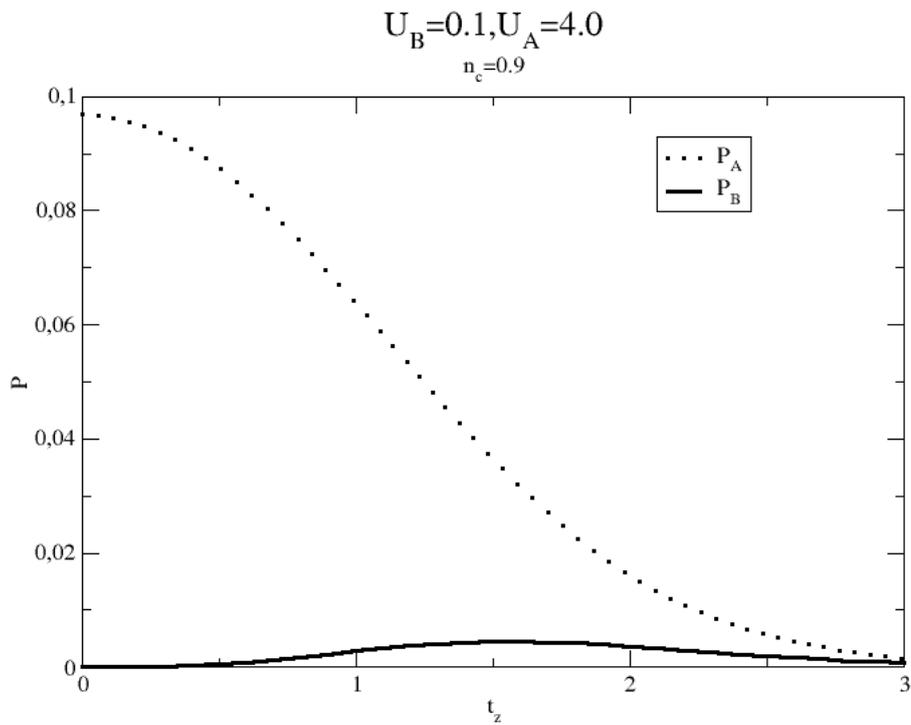


Figura 2.4: $(P_A e P_B) \times t_z$ para a bicamada com $n_c = 0,9$.

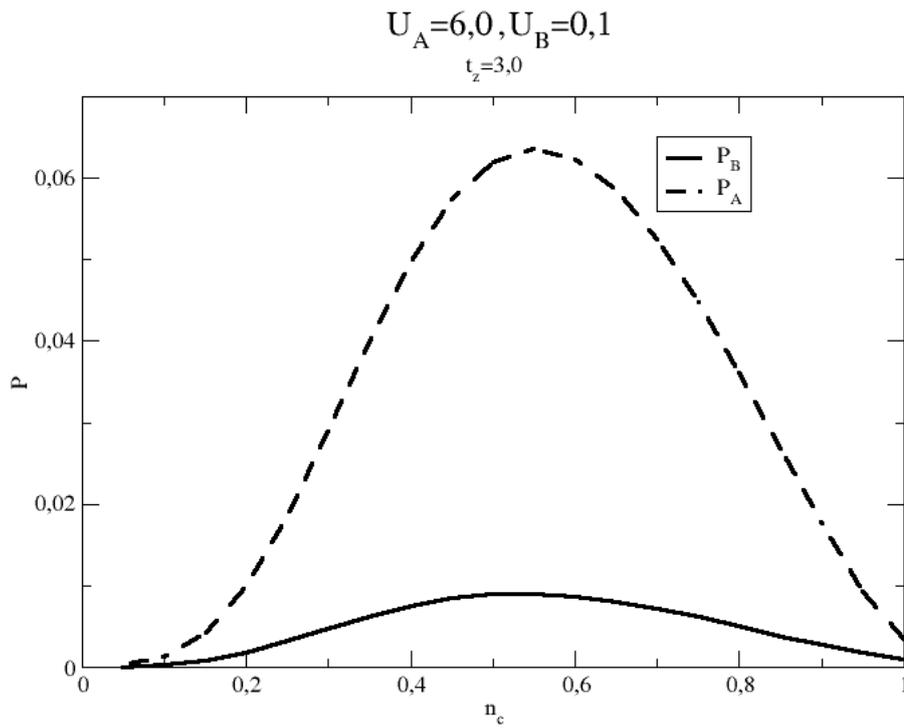


Figura 2.5: $(P_A e P_B) \times n_c$ com $U_A = 6$.

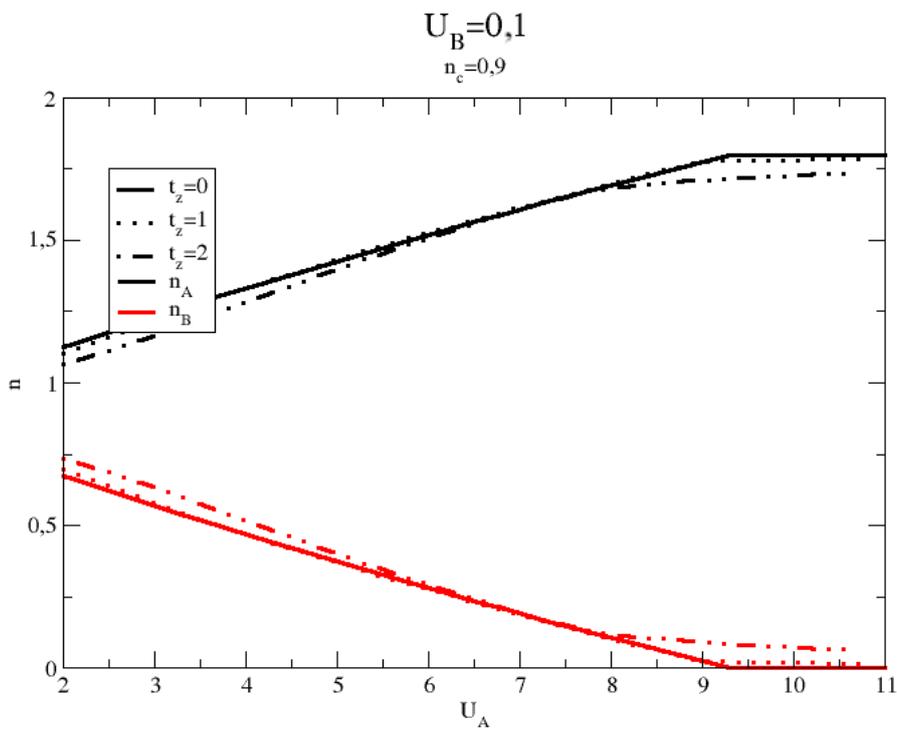


Figura 2.6: $n \times U_A$ com $U_B=0,1$.

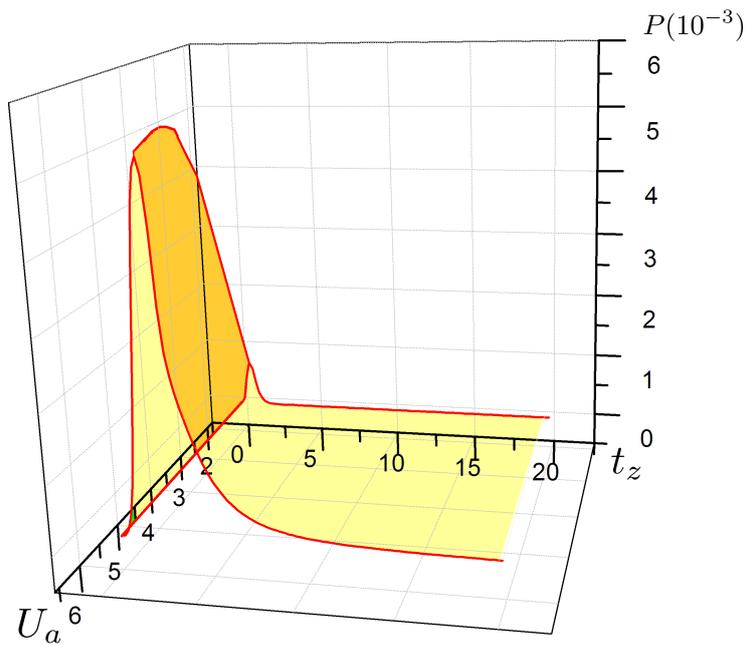


Figura 2.7: $U_A \times P_B \times t_z$ com $n_c=0,9$.

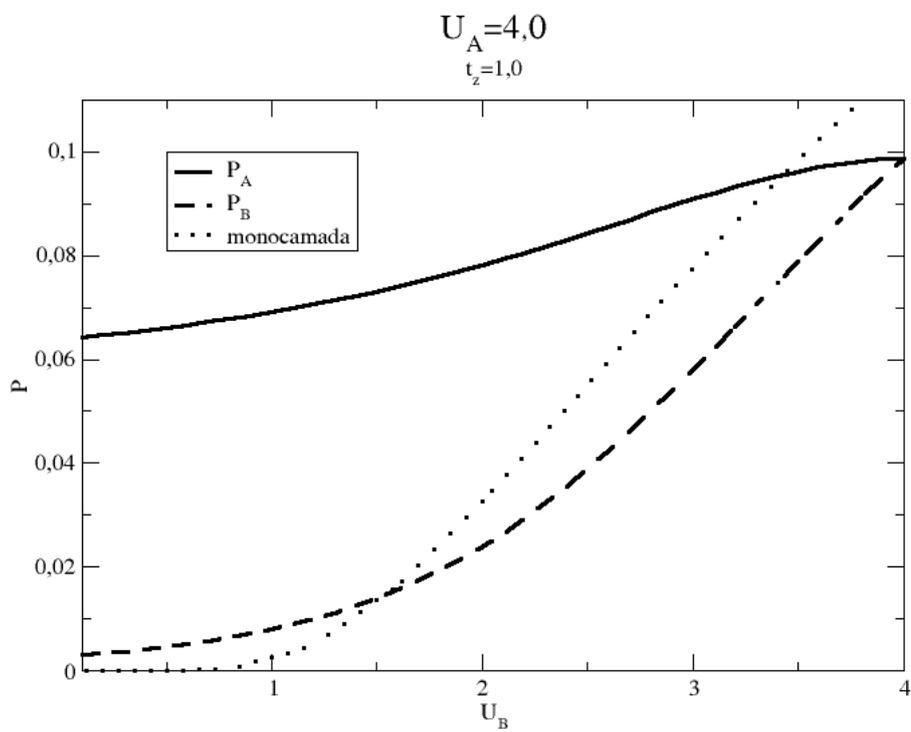


Figura 2.8: $(P_A \text{ e } P_B) \times U_B$ com $t_z=1$ e $P \times U$ da monocamada.

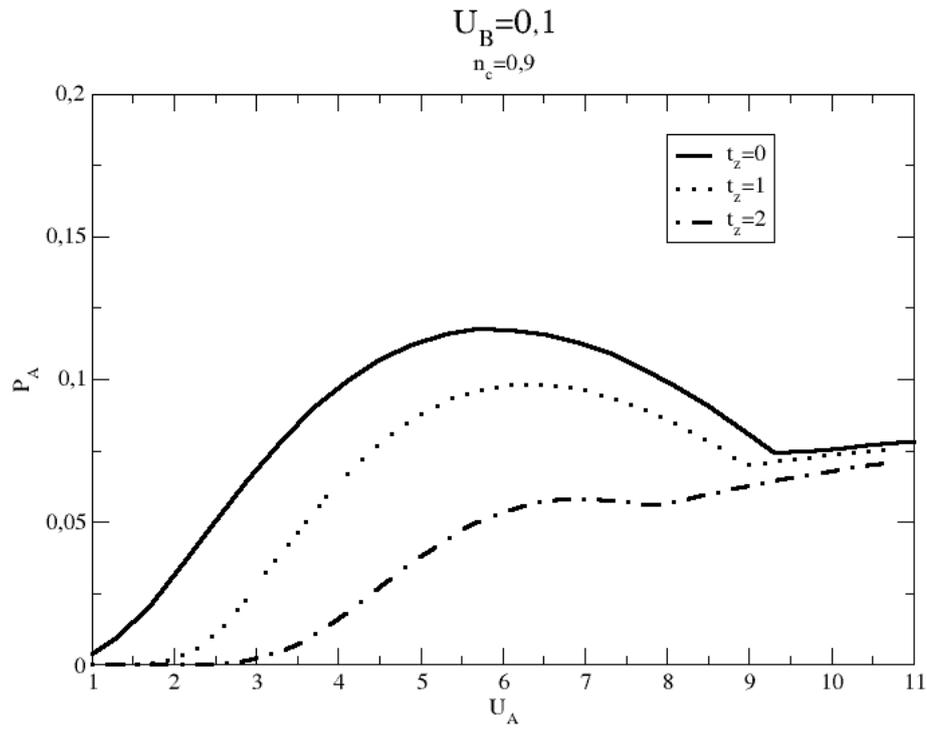


Figura 2.9: $P_A \times U_A$ com $U_B=0,1$.

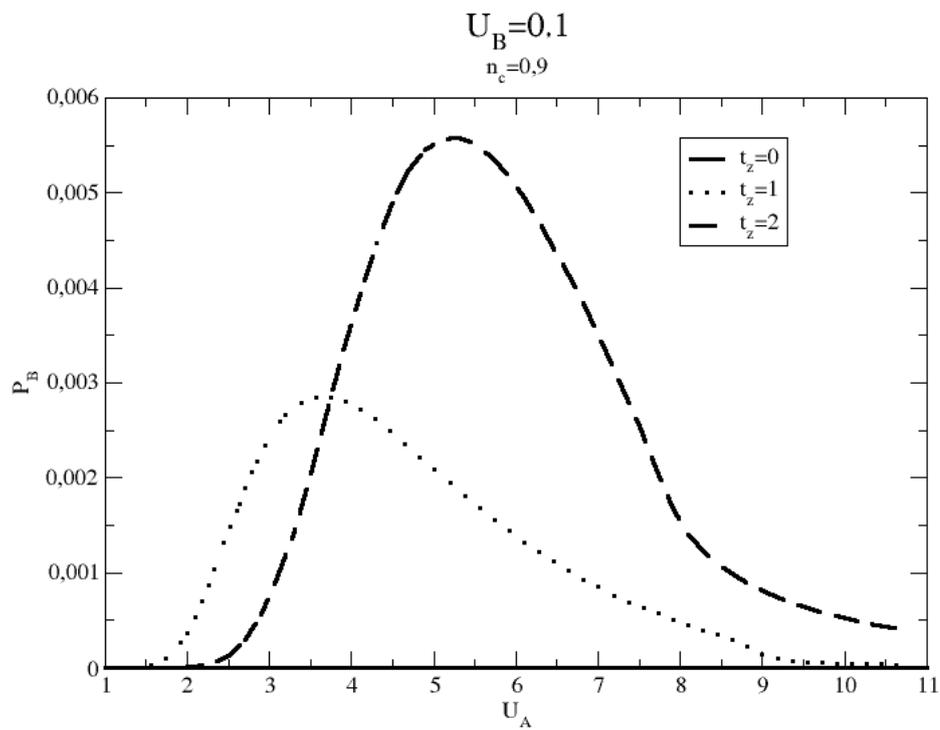


Figura 2.10: $P_B \times U_A$ com $U_B=0,1$.

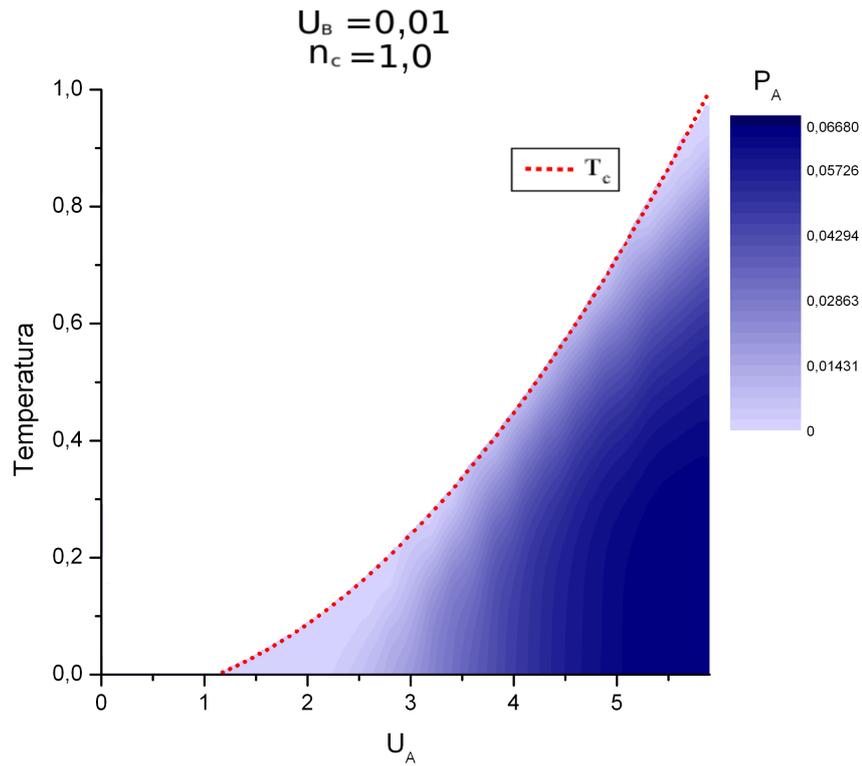


Figura 2.11: Diagrama de fase temperatura $\times U_A$ para $t_z = 1.0$ com P_A exibido em azul.

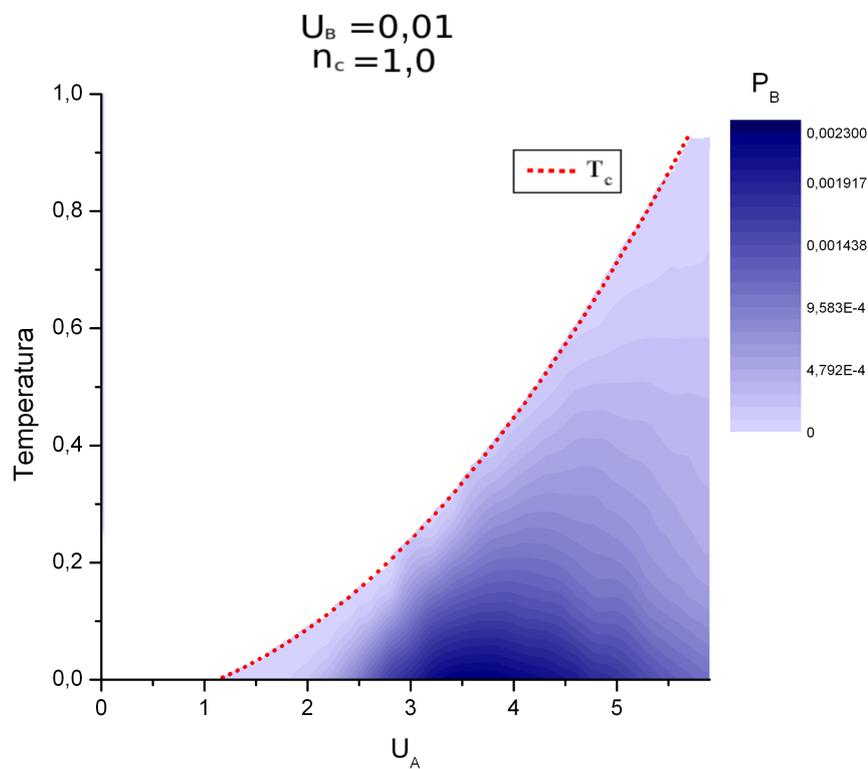


Figura 2.12: Diagrama de fase temperatura $\times U_A$ para $t_z = 1.0$ com P_B exibido em azul.

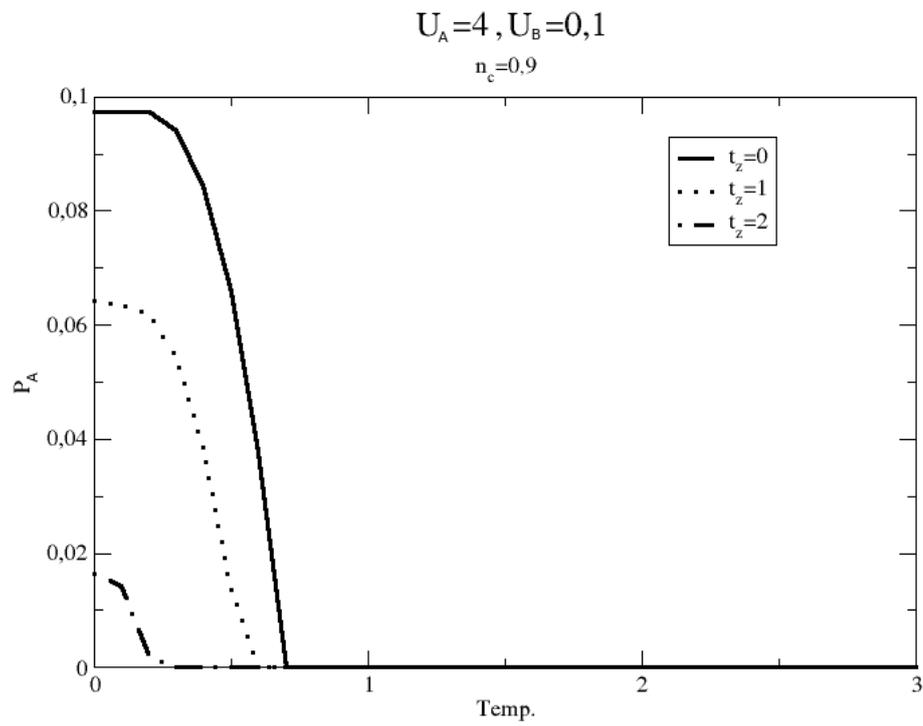


Figura 2.13: $P_A \times T$ com $U_A=4, U_B=0,1$ e $n_c = 0,9$.

3 *Modelo da Rede de Kondo*

Alguns materiais cristalinos apresentam ordenamentos magnéticos modulados [25]. Trabalhos experimentais mostram que os carbetos de boro apresentam uma grande variedade de ordenamentos magnéticos modulados, comensuráveis e incomensuráveis, coexistindo com supercondutividade. Estes ordenamentos magnéticos variam de acordo com a escolha particular do metal de transição e do metal terra-rara. Por exemplo, técnicas de espalhamento de nêutrons mostram que o comportamento reentrante do $HoNi_2B_2C$ é devido à interação entre as fases supercondutora, espiral magnética e antiferromagnética [26].

Como dito na introdução desta dissertação, os carbetos de boro RT_2B_2C apresentam uma grande variedade de ordenamentos magnéticos possíveis, dependendo da escolha do elemento terra-rara R e do metal de transição T. Um modelo comumente usado para descrever a interação entre os elétrons itinerantes (oriundos dos orbitais s, p e d) e os elétrons fortemente correlacionados (provenientes do orbital f presente no elemento terra-rara) é o modelo de Kondo. Como veremos, este é um caso limite do modelo utilizado aqui para descrever a coexistência de supercondutividade e ordenamento magnético.

As fases espirais magnéticas são caracterizadas por um vetor de onda \mathbf{Q} , perpendicular ao plano de rotação dos spin; ver a Figura 3.1. A Referência [14] considerou modelo da rede de Kondo, sobre uma abordagem de um ordenamento espiral magnético, através de uma aproximação de Hartree-Fock. O modelo apresenta fases espirais magnéticas que, dentro de certas condições, podem ser até mais estáveis que os modos ferromagnéticos e antiferromagnéticos.

Desta forma, neste capítulo, vamos analisar a interação de elétrons localizados com os elétrons itinerantes através do modelo da rede de Kondo [1, 27, 28], em uma rede quadrada. O estudo será feito via aproximação de Hartree-Fock para o caso de uma monocamada e de uma bicamada.

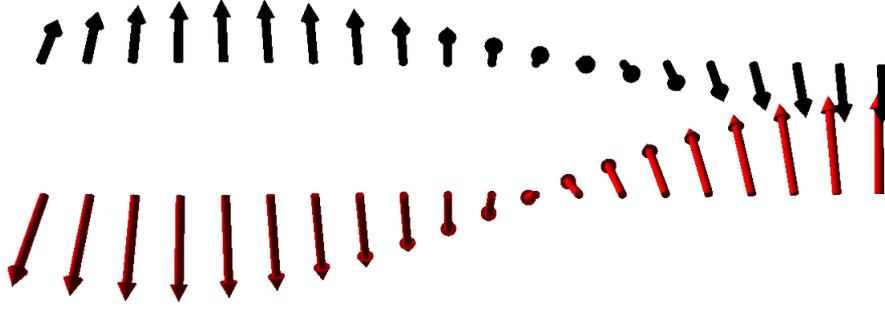


Figura 3.1: Representação unidimensional de uma onda de *spin* espiral com interação antiferromagnética entre os elétrons c (em preto) e os momentos locais f (em vermelho).

3.1 Modelo da Rede de Kondo em uma monocamada

A Hamiltoniana do modelo da rede de Kondo é definida como

$$H = -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c_{\mathbf{R}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma}) + J \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f, \quad (3.1)$$

onde \mathbf{S}^c representa os operadores de *spin* dos elétrons de condução, \mathbf{S}^f são os operadores dos momentos magnéticos locais em um dado sítio e \mathbf{R} é o vetor que localiza os sítios da rede. O primeiro termo da Hamiltoniana representa a energia cinética e o segundo termo representa a interação AFM entre os elétrons de condução e os momentos locais da rede com $J > 0$.

Para colocar a Hamiltoniana em uma base fermiônica, realizamos a transformada,

$$\mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta = \pm} f_{\mathbf{R}\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} f_{\mathbf{R}\beta}, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta = \pm} c_{\mathbf{R}\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{\mathbf{R}\beta}, \quad (3.3)$$

onde $f_{\mathbf{R}\alpha}^\dagger$ ($f_{\mathbf{R}\alpha}$) e $c_{\mathbf{R}\alpha}^\dagger$ ($c_{\mathbf{R}\alpha}$), representam os operadores de criação (aniquilação) de elétrons no sítio \mathbf{R} e *spin* $\alpha = \pm$, para os elétrons locais e de condução, respectivamente. Em seguida, fazendo a aproximação de Hartree-Fock (ver Apêndice C), a Hamiltoniana fica,

$$\begin{aligned} H_{MF} = & -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c_{\mathbf{R}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma}) + J \sum_{\mathbf{R}} (\mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f \cdot \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c \rangle + \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f \rangle \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c) \\ & + \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{R}} (\mathbf{V}_{\mathbf{R}c} \cdot \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}f} \rangle + \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}c} \rangle \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{R}f}) - \frac{3J}{2} \sum_{\mathbf{R}} (V_{\mathbf{R}c}^0 \langle V_{\mathbf{R}f}^0 \rangle + \langle V_{\mathbf{R}c}^0 \rangle V_{\mathbf{R}f}^0) \\ & - \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{R}} \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}c} \rangle \cdot \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}f} \rangle + \frac{3J}{2} \sum_{\mathbf{R}} \langle V_{\mathbf{R}c}^0 \rangle \langle V_{\mathbf{R}f}^0 \rangle - J \sum_{\mathbf{R}} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f \rangle \cdot \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c \rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Nesta equação a hibridização, interação entre os momentos locais e os elétrons da banda de

condução, é definida como,

$$V_{\mathbf{R}c}^0 = V_{\mathbf{R}f}^{0\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta = \pm} c_{\mathbf{R}\alpha}^\dagger \mathbb{I}_{\alpha, \beta} f_{\mathbf{R}\beta}, \quad (3.5)$$

$$\mathbf{V}_{\mathbf{R}c} = \mathbf{V}_{\mathbf{R}f}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta = \pm} c_{\mathbf{R}\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha, \beta} f_{\mathbf{R}\beta}. \quad (3.6)$$

Para analisar as fases helicoidais magnéticas, definimos o valor médio de S_i de forma semelhante ao feito na Referência [14],

$$\langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f \rangle = m_f (\cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}), \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}), 0), \quad (3.7)$$

$$\langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c \rangle = -m_c (\cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}), \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}), 0), \quad (3.8)$$

onde $\mathbf{Q} = (Q_x, Q_y)$ é o vetor de onda magnético e m_c (m_f) são as amplitudes da magnetização. O sinal de menos na equação 3.8 reflete o acoplamento AFM entre os elétrons de condução e os momentos locais.

Vamos fazer o valor médio dos termos de hibridização iguais a

$$\langle V_{\mathbf{R}c}^0 \rangle = \langle V_{\mathbf{R}f}^{0\dagger} \rangle = -V, \quad (3.9)$$

$$\langle \vec{V}_{\mathbf{R}c} \rangle = \langle \vec{V}_{\mathbf{R}f}^\dagger \rangle = +V' (\cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}), \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}), 0). \quad (3.10)$$

Para podermos controlar as densidades eletrônicas vamos incluir na Hamiltoniana 3.4 os termos dos potenciais químicos $-\mu(\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - Nn_c)$ e $\varepsilon_f(\sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - Nn_f)$. Os campos μ e ε_f são encontrados de maneira autoconsistente. Assim, ficamos com

$$\begin{aligned} H_{MF} = & -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c_{\mathbf{R}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma}) + J \sum_{\mathbf{R}} (\mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f \cdot \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c \rangle + \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f \rangle \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c) \\ & + \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{R}} (\mathbf{V}_{\mathbf{R}c} \cdot \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}f} \rangle + \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}c} \rangle \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{R}f}) - \frac{3J}{2} \sum_{\mathbf{R}} (V_{\mathbf{R}c}^0 \langle V_{\mathbf{R}f}^0 \rangle + \langle V_{\mathbf{R}c}^0 \rangle V_{\mathbf{R}f}^0) \\ & - \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{R}} \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}c} \rangle \cdot \langle \mathbf{V}_{\mathbf{R}f} \rangle + \frac{3J}{2} \sum_{\mathbf{R}} \langle V_{\mathbf{R}c}^0 \rangle \langle V_{\mathbf{R}f}^0 \rangle - J \sum_{\mathbf{R}} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f \rangle \cdot \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c \rangle \\ & - \mu \left(\sum_{\mathbf{R}\sigma} c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma} \right) + \varepsilon_f \left(\sum_{\mathbf{R}\sigma} f_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{R}\sigma} \right) + N(n_c \mu - n_f \varepsilon_f), \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde definimos as densidades eletrônicas para os momentos locais e para os elétrons de condução como

$$n_c = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}\sigma} \langle c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma} \rangle, \quad (3.12)$$

$$n_f = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}\sigma} \langle f_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{R}\sigma} \rangle. \quad (3.13)$$

Estamos restringindo a rede a ter somente um momento local por sítio ($n_f = 1$). As equações 3.12 e

3.13 são usadas como restrições no método de multiplicadores de Lagrange.

Fazendo uma transformada de Fourier para os elétrons c e f ,

$$c_{\mathbf{R}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.14)$$

$$f_{\mathbf{R}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.15)$$

a Hamiltoniana de campo médio 3.11 fica,

$$\begin{aligned} H_{MF} = & \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \\ & - \frac{Jm_c}{2} \sum_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + H.c.) + \frac{Jm_f}{2} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + H.c.) + \varepsilon_f \sum_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\uparrow} + H.c.) \\ & + \frac{3JV}{4} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + H.c.) + \frac{J}{4} V' \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\uparrow} + H.c.) \\ & + JN \left(m_f m_c + \frac{3}{2} V^2 - \frac{1}{2} V'^2 \right) + N(\mu n_c - \varepsilon_f n_f), \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))$, $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -2t(\cos(k_x + Q_x) + \cos(k_y + Q_y))$ e $H.c.$ é o conjugado hermitiano da expressão anterior.

A Hamiltoniana pode ser escrita na forma matricial usando uma base de espinores de Nambu, $\Psi^{\dagger} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger}, f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger})$. Desta forma, ficamos com

$$H_{MF} = \Psi^{\dagger} \mathcal{H} \Psi + cte. \quad (3.17)$$

onde

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu & \frac{1}{2} Jm_f & \frac{3}{4} JV & \frac{1}{4} JV' \\ \frac{1}{2} Jm_f & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu & \frac{1}{4} JV' & \frac{3}{4} JV \\ \frac{3}{4} JV & \frac{1}{4} JV' & \varepsilon_f & -\frac{1}{2} Jm_c \\ \frac{1}{4} JV' & \frac{3}{4} JV & -\frac{1}{2} Jm_c & \varepsilon_f \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Na equação 3.17 a constante é dada por,

$$cte. = JN \left(m_f m_c + \frac{3}{2} V^2 - \frac{1}{2} V'^2 \right) + N(\mu n_c - \varepsilon_f n_f). \quad (3.19)$$

Na Figura 3.2, exibimos os parâmetros de ordem e o vetor de onda magnético q_y como função de J (fixamos $q_x = \pi$). No regime de acoplamento fraco, J próximo de zero, a magnetização local se mantém constante com o aumento do acoplamento, ao passo que a polarização de condução aumenta. Nessa região não há hibridização, e portanto, não há o efeito Kondo. Na região entre $J \approx 2,8$ e $J \approx 3,0$, há uma competição entre o magnetismo e o efeito Kondo. Acima deste intervalo o efeito Kondo destrói a magnetização. O vetor de onda, Figura 3.3 mostra que a fase é AFM na região acima de $J \approx 2,8$.

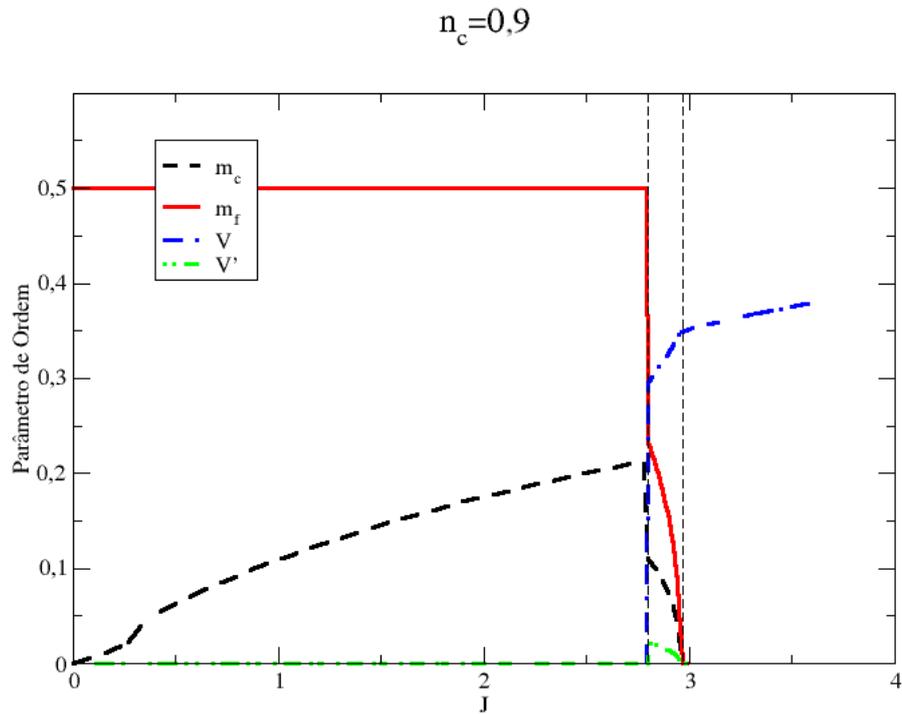


Figura 3.2: Monocamada com $n_c=0,9$. Parâmetros de ordem em função de J .

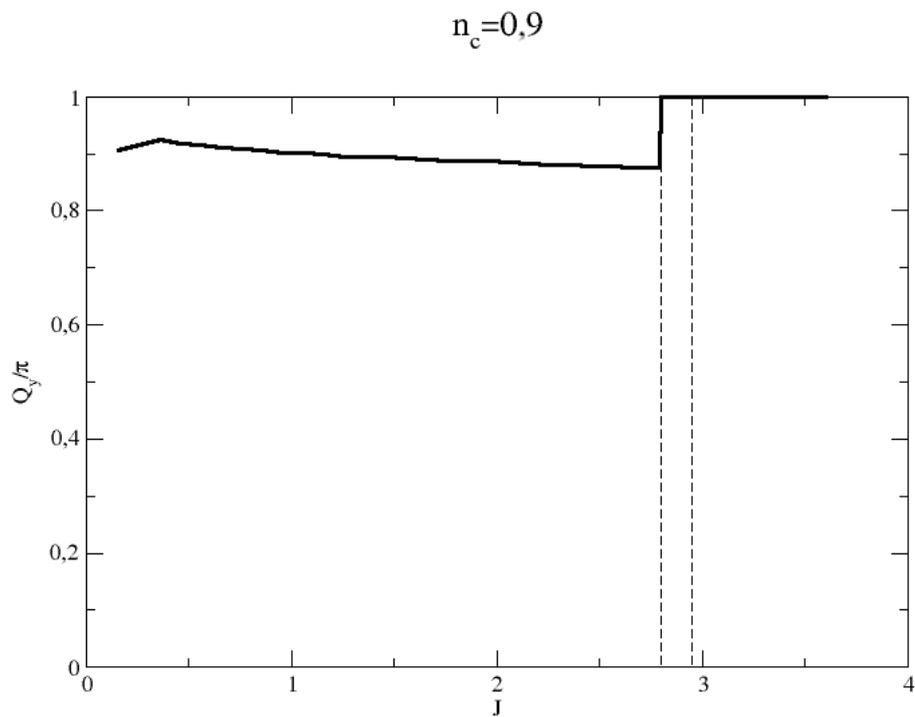


Figura 3.3: Monocamada com $n_c=0,9$. Vetor de onda magnética Q_y/π como função de J para $Q_x = \pi$.

3.2 Modelo da Rede de Kondo em uma bicamada

Agora vamos considerar o modelo da rede de Kondo em uma bicamada. Seguindo o mesmo procedimento adotado na primeira seção deste capítulo, a Hamiltoniana é expressa como,

$$H = H_{hop} + H_{Kondo}, \quad (3.20)$$

onde,

$$\begin{aligned} H_{hop} = & \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}\uparrow} + c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}\uparrow}) \\ & + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu) (c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}) \\ & - t_z \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}\uparrow} + c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}\uparrow} + c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \right) \\ & + \epsilon_f \sum_{\mathbf{k}} \left(f_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}\uparrow} + f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}\uparrow} + f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \right) \\ & + 2N(n_c \mu - \epsilon_f n_f) \end{aligned} \quad (3.21)$$

e

$$\begin{aligned} H_{Kondo} = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(J_A m_c^A (f_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}\uparrow}) + J_B m_c^B (f_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}\uparrow}) \right) \\ & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(+J_A m_f^A (c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}\uparrow}) + J_B m_f^B (c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}\uparrow}) \right) \\ & + \frac{3J_A V_A}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}\uparrow} + c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}\uparrow} \right) \\ & + \frac{3J_B V_B}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}\uparrow} + c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}\uparrow} \right) \\ & + \frac{J_A V_A'}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{A\mathbf{k}\uparrow} + f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}\uparrow} + f_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \right) \\ & + \frac{J_B V_B'}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{B\mathbf{k}\uparrow} + f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}\uparrow} + f_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \right) \\ & + J_A N (m_f^A m_c^A + \frac{3}{2} V_A^2 - \frac{1}{2} V_A'^2) + J_B N (m_f^B m_c^B + \frac{3}{2} V_B^2 - \frac{1}{2} V_B'^2). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Na equação 3.21 acrescentamos um potencial químico μ para a banda de condução e um potencial químico ϵ_f para os momentos locais.

Escrevemos a Hamiltoniana na forma matricial usando uma base de espinores de Nambu, $\Psi^\dagger = (c_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, f_{A\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, f_{A\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, c_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, f_{B\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, f_{B\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger)$, de tal forma que,

$$H_{MF} = H_{hop} + H_{Kondo} = \Psi^\dagger \mathcal{H} \Psi + cte. \quad (3.23)$$

onde

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu & \frac{1}{2}J_A m_f^A & \frac{3}{4}J_A V_A & \frac{1}{4}J_A V'_A & -t_z & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}J_A m_f^A & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu & \frac{1}{4}J_A V'_A & \frac{3}{4}J_A V_A & 0 & -t_z & 0 & 0 \\ \frac{3}{4}J_A V_A & \frac{1}{4}J_A V'_A & \varepsilon_f & -\frac{1}{2}J_A m_c^A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4}J_A V'_A & \frac{3}{4}J_A V_A & -\frac{1}{2}J_A m_c^A & \varepsilon_f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_z & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu & \frac{1}{2}J_B m_f^B & \frac{3}{4}J_B V_B & \frac{1}{4}J_B V'_B \\ 0 & -t_z & 0 & 0 & \frac{1}{2}J_B m_f^B & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu & \frac{1}{4}J_B V'_B & \frac{3}{4}J_B V_B \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3}{4}J_B V_B & \frac{1}{4}J_B V'_B & \varepsilon_f & -\frac{1}{2}J_B m_c^B \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}J_B V'_B & \frac{3}{4}J_B V_B & -\frac{1}{2}J_B m_c^B & \varepsilon_f \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Nesta equação, a constante é dada por,

$$\begin{aligned} cte. = & +J_A N(m_f^A m_c^A + \frac{3}{2}V_A^2 - \frac{1}{2}V'^2_A) \\ & +J_B N(m_f^B m_c^B + \frac{3}{2}V_B^2 - \frac{1}{2}V'^2_B) + 2N(n_c \mu - n_f \varepsilon_f). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Para verificar como a polarização em uma camada afeta a polarização na outra camada, calculamos os parâmetros de ordem variando J_A com J_B fixo, Figuras 3.4 e 3.5. Vemos que quando J_A se aproxima de zero a polarização na camada A vai a zero, e portanto, não há efeitos de indução na polarização. Nessa região não foi observada hibridização. A polarização local para as camadas A e B tem seu valor fixo 0,5. O vetor de onda varia com J_A em uma fase incomensurável do tipo $\mathbf{Q} = (\pi, q)$.

Agora estamos aptos a considerar o estudo do modelo Kondo-Hubbard atrativo em uma bicamada, o que faremos no próximo capítulo.

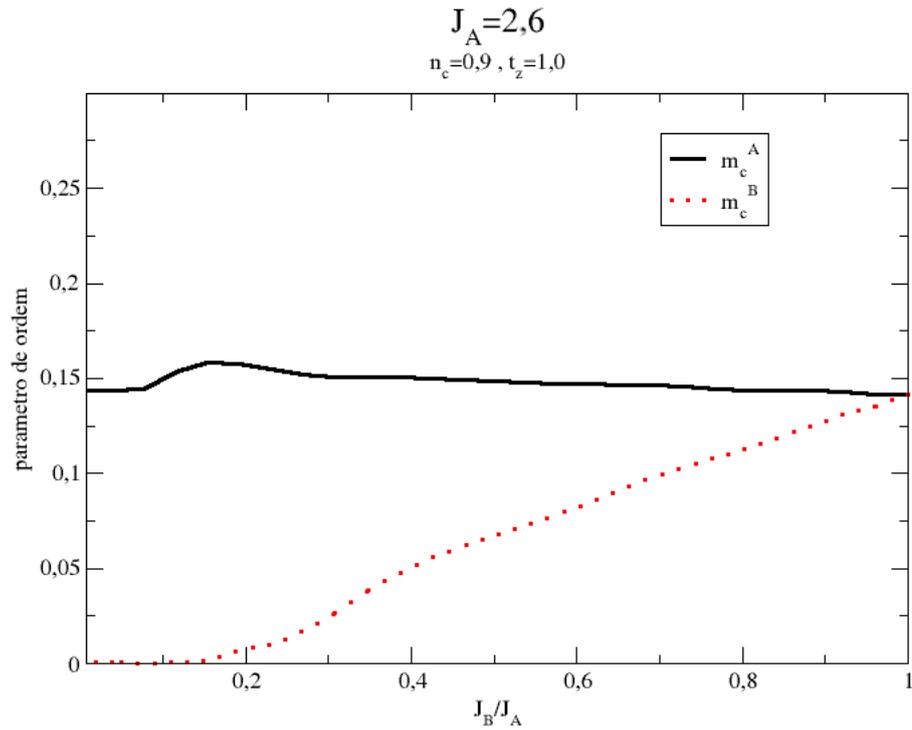


Figura 3.4: Parâmetros de ordem como função de J_A/J_B para $J_B = 2,6$ e $t_z = 1$.

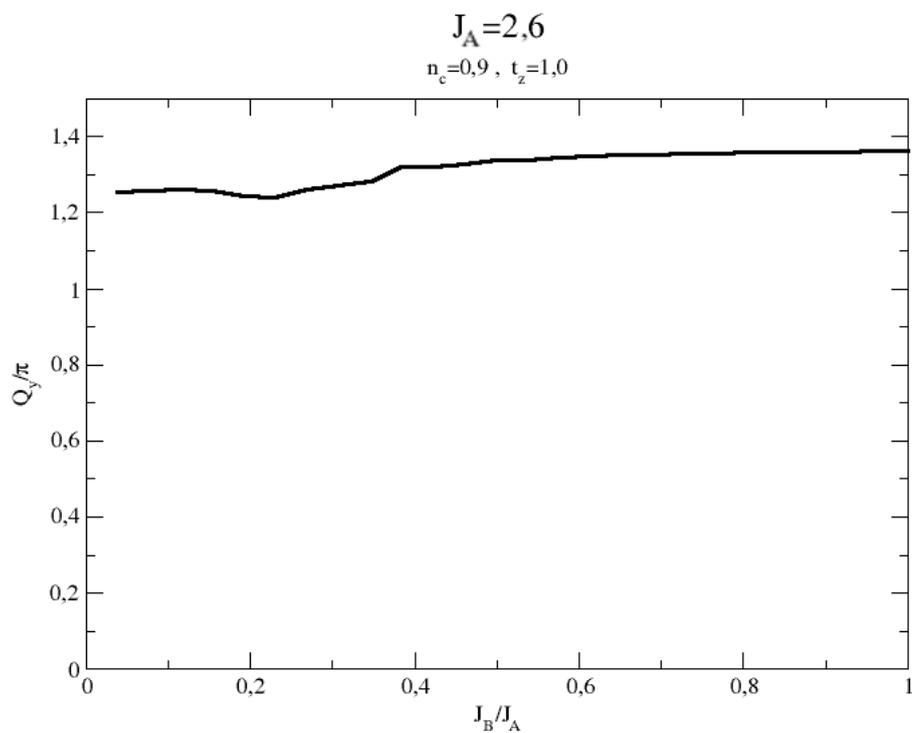


Figura 3.5: Vetor de onda Q_y/π como função de J_A/J_B com $J_B=2,6$ e $t_z = 1,0$.

4 *Modelo Kondo-Hubbard Atrativo*

Nos capítulos anteriores analisamos o emparelhamento dos elétrons itinerantes e a presença dos momentos magnéticos localizados em etapas necessárias. No entanto, os carbetos de boro apresentam supercondutividade fortemente influenciada pela presença dos momentos locais, ver Figura 1.5. Portanto, para melhorarmos nosso tratamento com relação aos carbetos de boro, vamos estudar o modelo Kondo-Hubbard atrativo [29] sobre uma estrutura de camadas, o que nos permitirá estudar a atuação que os momentos locais tem sobre o emparelhamento eletrônico.

Visando aprimorar a modelagem dos carbetos de boro RT_2B_2C , analisaremos o emparelhamento eletrônico na bicamada e a presença dos momentos locais concentrados em uma das camadas. Na camada equivalente ao plano TB , fizemos o termo de Hubbard diferente de zero, e na camada equivalente ao plano RC , fizemos o termo de Kondo diferente de zero e o termo de Hubbard aproximadamente zero. Com isto, observamos o comportamento dos parâmetros Δ , m_c , Q e m_f com os termos de Kondo e Hubbard.

Estudaremos o modelo Kondo-Hubbard atrativo através de uma aproximação de Hartree-Fock em uma rede quadrada. O capítulo está dividido em duas seções: uma para a monocamada e outra para a bicamada.

4.1 *Modelo Kondo-Hubbard em uma monocamada*

Vamos considerar o modelo Kondo-Hubbard atrativo em uma monocamada na rede quadrada, com a Hamiltoniana dada por,

$$H = H_{hub} + H_{kondo}, \quad (4.1)$$

com

$$H_{kondo} = -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c_{\mathbf{R}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}\sigma}) + J \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^c \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^f, \quad (4.2)$$

e

$$H_{hub} = -U \sum_{\mathbf{R}} n_{\mathbf{R}\uparrow} n_{\mathbf{R}\downarrow}. \quad (4.3)$$

Repetiremos os mesmos procedimentos já descritos nos capítulos anteriores: para fermionizar os

operadores \mathbf{S} usamos as equações 3.2 e 3.3; fazendo uma aproximação de Hartee-Fock descrita nas equações 3.4 e A.6; e aplicando uma transformada de Fourier definida nas equações 3.14 e 3.15, a Hamiltoniana pode ser escrita como,

$$\begin{aligned}
H = \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \frac{Un}{2} \right) c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right. \\
+ \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu - \frac{Un}{2} \right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + \left(\frac{Jm_f}{2} - Um_c \right) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + H.c.) \\
- \Delta (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + H.c.) - \frac{Jm_c}{2} (f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + H.c.) + \varepsilon_f (f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\uparrow} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}) \\
\left. + \frac{3}{4} JV (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + H.c.) + \frac{JV'}{4} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\uparrow} + H.c.) \right] \\
+ JN(m_f m_c + \frac{3}{2} V^2 - \frac{1}{2} V'^2) + N(\mu n_c - \varepsilon_f n_f) + N \left(\frac{Un^2}{4} - Um_c^2 + \frac{\Delta^2}{U} \right). \quad (4.4)
\end{aligned}$$

Como vimos no Capítulo 3, as hibridizações 3.9 e 3.10, competem com a supercondutividade. Nosso interesse é analisar a influência dos momentos locais sobre o emparelhamento eletrônico. Assim, vamos nos limitar à região onde não há competição entre o efeito Kondo e a supercondutividade, ou seja, faremos $V = V' = 0$. Além disto, fixaremos $Q_x = \pi$ e a componente Q_y poderá variar.

Para garantir que estamos encontrando as soluções mais estáveis, minimizamos o funcional da energia livre de Helmholtz F em termos dos parâmetros Δ , m_c , m_f , μ , ε_f , n_c e Q_y impondo a restrição,

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial F}{\partial \Delta} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial m_c} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial m_f} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial \mu} \right\rangle = \\
\left\langle \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_f} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial n_c} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial Q_y} \right\rangle = 0. \quad (4.5)
\end{aligned}$$

Na Figura 4.1, exibimos o comportamento dos parâmetros de ordem Δ , m_c e m_f como função de J para a monocamada. Vemos que a polarização de condução aumenta com o valor de J e que o parâmetro Δ diminui com o mesmo. Na Figura 4.2, exibimos os parâmetros de ordem Δ , m_c e m_f como função de U . O parâmetro Δ cresce com o valor de U , enquanto que m_c diminui com o mesmo. Concluímos que mesmo nos limitando a regiões onde não há hibridização, o termo de Kondo afeta o emparelhamento eletrônico assim como o termo de Hubbard influencia a polarização. Com isto, na próxima seção, analisaremos como a estrutura de camadas poderá afetar o modelo.

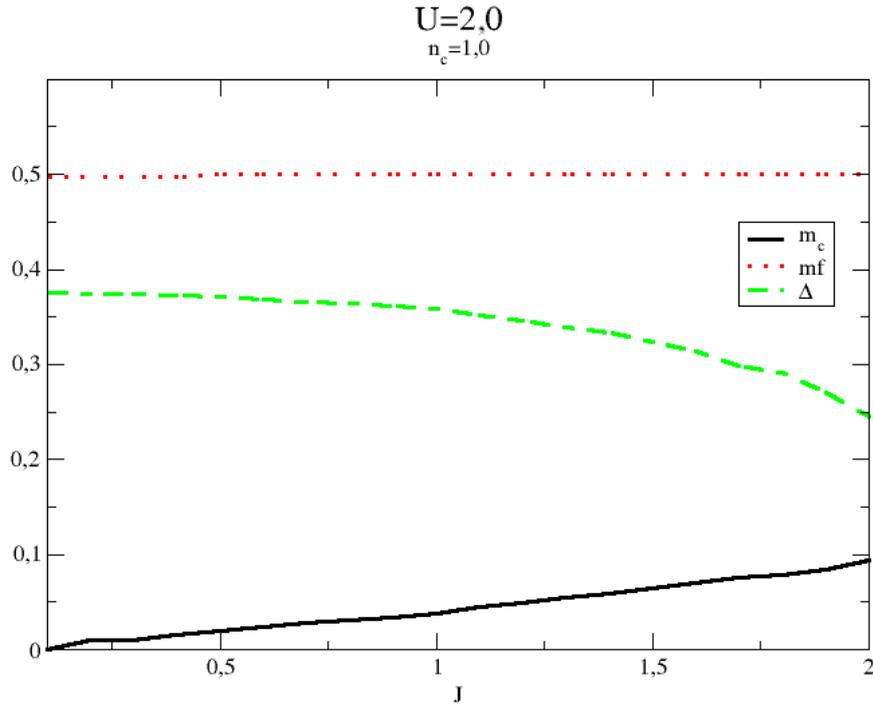


Figura 4.1: Parâmetros de ordem como função de J.

4.2 Modelo Kondo-Hubbard em uma bicamada

Nesta seção estudamos o modelo Kondo-Hubbard atrativo em uma bicamada na rede quadrada. A Hamiltoniana do modelo é dada por,

$$H = \sum_{\alpha} \left(-t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} (c_{\alpha \mathbf{R} \sigma}^{\dagger} c_{\alpha \mathbf{R}' \sigma} + c_{\alpha \mathbf{R}' \sigma}^{\dagger} c_{\alpha \mathbf{R} \sigma}) + J \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\alpha \mathbf{R}}^c \cdot \mathbf{S}_{\alpha \mathbf{R}}^f - U \sum_{\mathbf{R}} n_{\alpha \mathbf{R} \uparrow} n_{\alpha \mathbf{R} \downarrow} \right) - t_z \sum_{\mathbf{R}, \alpha} (c_{A \mathbf{R} \sigma}^{\dagger} c_{B \mathbf{R} \sigma} + c_{B \mathbf{R} \sigma}^{\dagger} c_{A \mathbf{R} \sigma}), \quad (4.6)$$

onde t_z é o acoplamento entre os planos e α é referente às camadas A e B.

Vimos no capítulo anterior que não há efeito de indução na polarização devido ao termo de Kondo. Portanto, faremos a polarização na camada A igual a zero pois, assim, diminuimos o número de campos efetivos. Além disto, como pretendemos modelar os carbetos de boro, vamos fazer com que somente a camada B tenha elétrons do tipo f.

Desta forma, fermionizando os operadores \mathbf{S} usamos as equações 3.2 e 3.3; fazendo uma aproximação de Hartee-Fock descrita nas equações 3.4 e A.6; e aplicando uma transformada de Fourier definida nas equações 3.14 e 3.15, a Hamiltoniana torna-se,

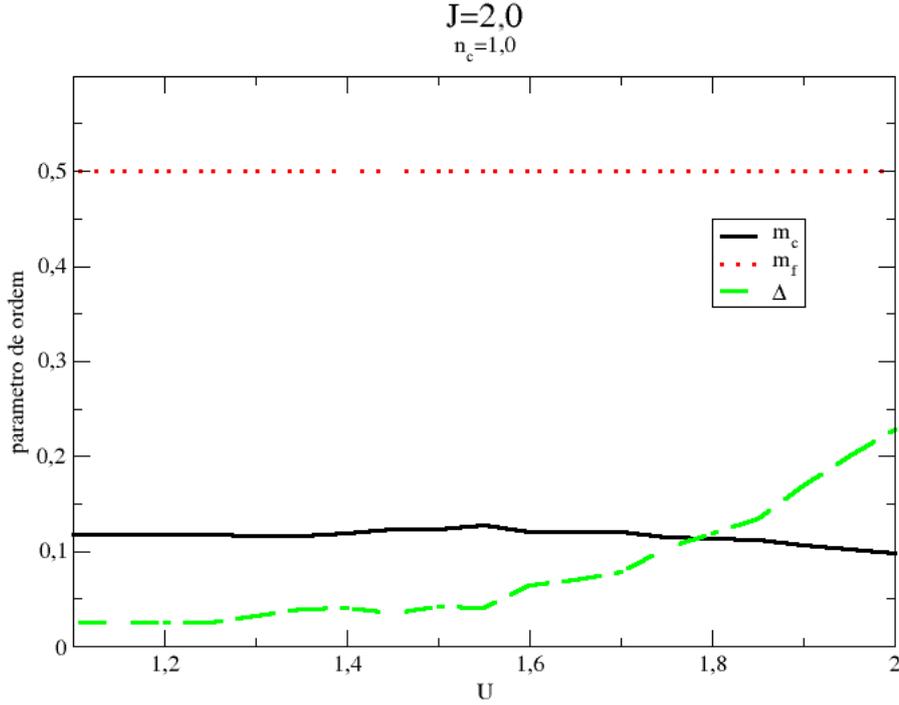


Figura 4.2: Parâmetros de ordem como função de J.

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \left[\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \frac{U_{\alpha} n_{\alpha}}{2} \right) c_{\alpha \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{\alpha \mathbf{k} \uparrow} + \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu - \frac{U_{\alpha} n_{\alpha}}{2} \right) c_{\alpha \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow}^{\dagger} c_{\alpha \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow} \right. \\
& \left. - \Delta_{\alpha} (c_{\alpha \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{\alpha-\mathbf{k} \downarrow}^{\dagger} + H.c.) \right] + 2JN(m_f m_c + \frac{3}{2}V^2 - \frac{1}{2}V'^2) \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\frac{J_B m_f}{2} - U_B m_c \right) (c_{B \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow} + H.c.) - \frac{J_B m_c}{2} (f_{B \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} f_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow} + H.c.) \right. \\
& \left. + \varepsilon_f (f_{B \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} f_{B \mathbf{k} \uparrow} + f_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow}^{\dagger} f_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow}) \right] + 2N(\mu n_c - \varepsilon_f n_f) \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{3}{4} J_B V (c_{B \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} f_{B \mathbf{k} \uparrow} + c_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow}^{\dagger} f_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow} + H.c.) + \frac{J_B V'}{4} (c_{B \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} f_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow} + c_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow}^{\dagger} f_{B \mathbf{k} \uparrow} + H.c.) \right] \\
& - t_z \sum_{\mathbf{k}} (c_{A \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{B \mathbf{k} \uparrow} + c_{A \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow}^{\dagger} c_{B \mathbf{k}+\mathbf{Q} \downarrow} + H.c.) + N \left(\frac{U_A n_A^2}{4} + \frac{U_B n_B^2}{4} - (U_A + U_B) m_c^2 + \frac{\Delta_A^2}{U_A} + \frac{\Delta_B^2}{U_B} \right). \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Em seguida, escrevemos a Hamiltoniana na forma matricial usando uma base de espinores de Nambu com doze componentes descrita no Apêndice D. Para garantir que estamos encontrando as soluções mais estáveis, vamos minimizar o funcional da energia livre de Helmholtz F em termos dos parâme-

tros $\Delta_A, \Delta_B, m_c, m_f, \mu, \varepsilon_f, n_c$ e Q_y impondo a restrição,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial F}{\partial \Delta_A} \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial F}{\partial \Delta_B} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial m_c} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial m_f} \right\rangle = \\ \left\langle \frac{\partial F}{\partial \mu} \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_f} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial n_c} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial Q_y} \right\rangle = 0. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Como podemos constatar nas Figuras 4.3 e 4.4, há uma mudança de regime nos parâmetros de ordem, indicando uma transição de fase nessa região. Na Figura 4.5 exibimos as polarizações como função de U_A para alguns valores de J_B . Vemos que U_A diminui o valor da polarização. A Figura 4.6 exibe as densidades eletrônicas das camadas A e B. Os elétrons migram da camada B para a camada A à medida que U_A cresce. Construímos um diagrama de fase para $J_B \times U_A$ com $U_B = 0, 1$, Figura 4.7. O diagrama apresenta uma fase magnética comensurável com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ dividida em duas regiões distintas: uma AFM e uma AFM+SC. Para $J_B > 1, 0$, a região onde existe supercondutividade é muito pouco afetada pelo valor de J_B . No entanto, para $J_B < 1, 0$ a supercondutividade torna-se cada vez mais acessível, com valores menores de U_A .

Em síntese, concluímos que mesmo na ausência das hibridizações ($V = V' = 0$), há uma competição entre a supercondutividade e o ordenamento magnético, uma vez que o termo de Hubbard afeta a polarização e o termo de Kondo influencia na supercondutividade. Além disto, constatamos o efeito de indução da supercondutividade mesmo com a presença dos momentos locais.

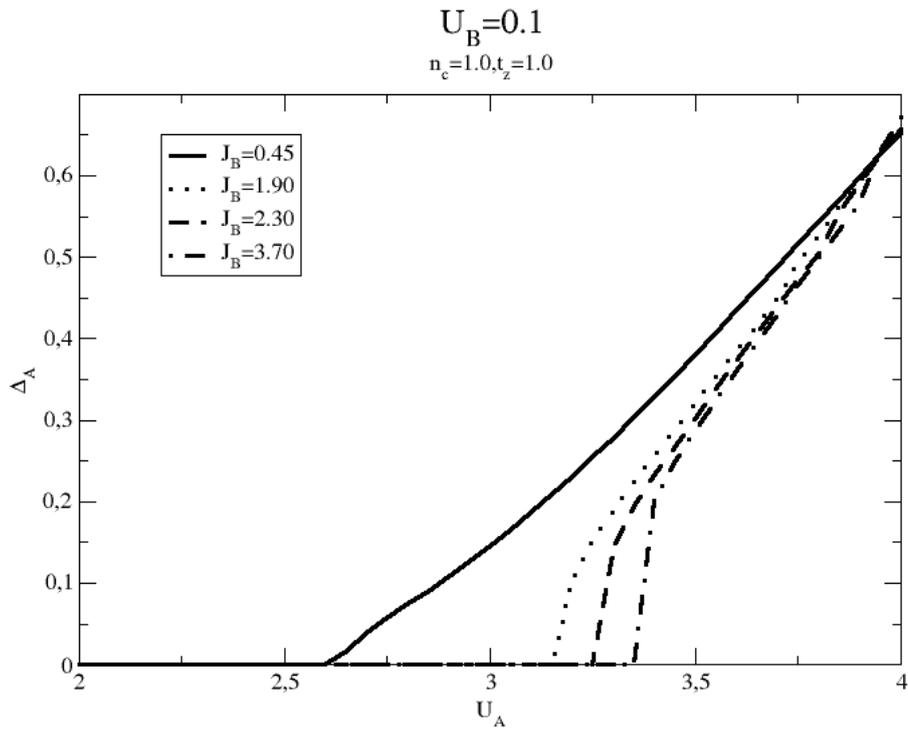


Figura 4.3: $\Delta_A \times U_A$ com $U_B = 0, 1$ para alguns valores de J_B .

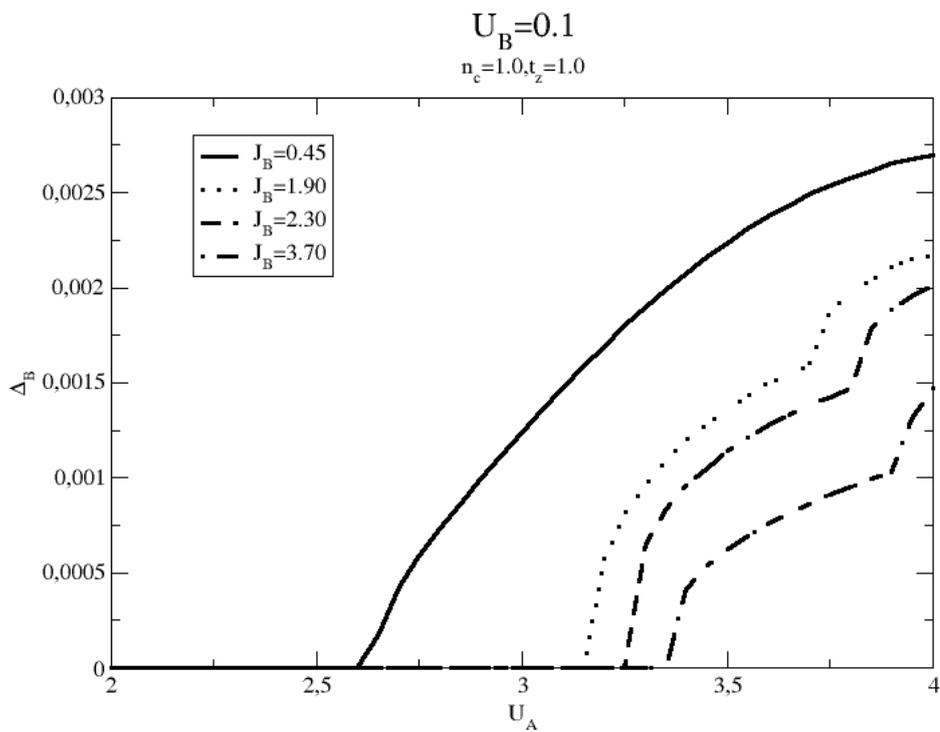


Figura 4.4: $\Delta_B \times U_A$ com $U_B = 0, 1$ para alguns valores de J_B .

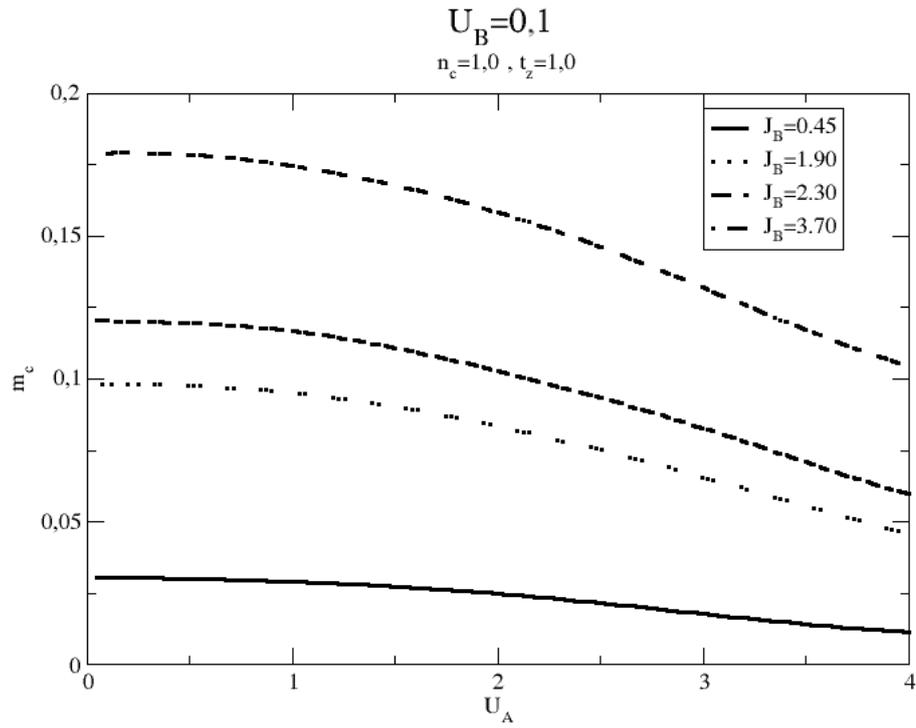


Figura 4.5: $m_c \times U_A$ com $t_z = 1,0$ para alguns valores de J_B .

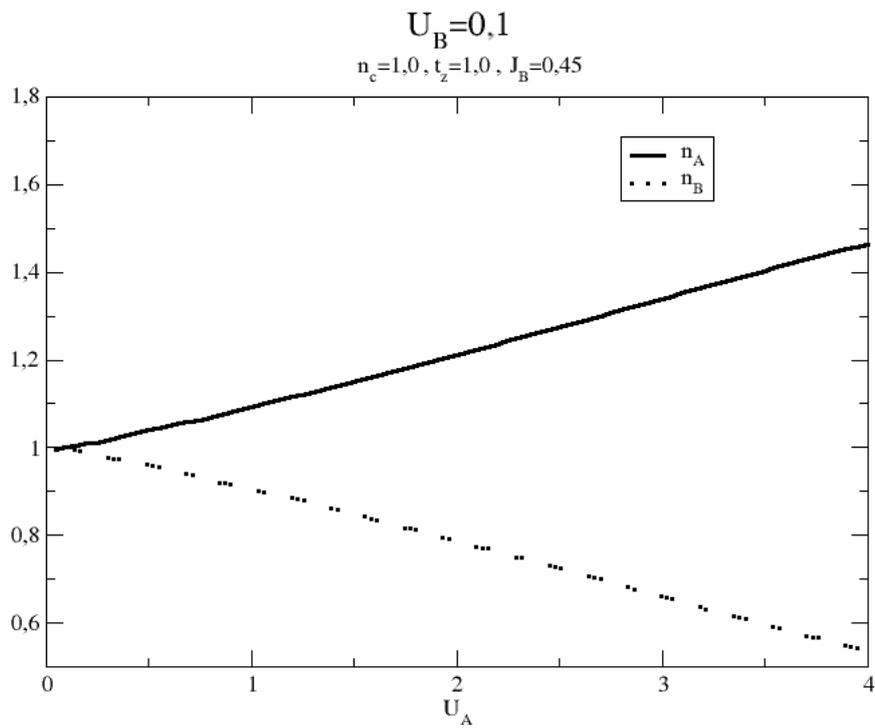


Figura 4.6: $(n_c^A \text{ e } n_c^B) \times U_A$ com $U_B = 0,1$ e $J_B = 0,45$.

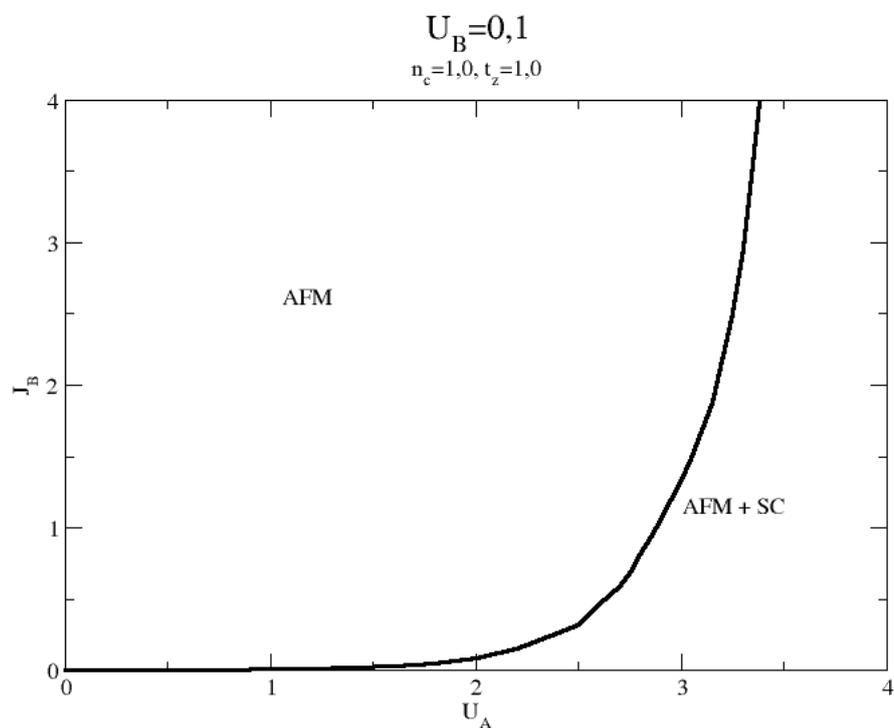


Figura 4.7: Diagrama de fase $J_B \times U_A$ com $U_B = 0,1$. A linha representa uma transição de primeira ordem separando a fase AFM da fase AFM+SC.

5 *Conclusões e Perspectivas*

Embora exista uma literatura considerável visando entender a coexistência entre supercondutividade e ordenamento magnético nos carbetos de boro, ainda não há uma teoria totalmente estabelecida, fundamentada em primeiros princípios, para a compreensão deste fenômeno.

Paiva *et al* [22], analisaram o modelo de Hubbard atrativo em uma super-rede sobre uma perspectiva unidimensional. A influência da interação dos elétrons itinerantes com os momentos locais não foi considerada. O principal resultado obtido, em comparação com o experimento, é a possibilidade de prever que tipos de carbetos de boro poderiam tornar-se supercondutores.

Visando estudar os ordenamentos magnéticos possíveis dos carbetos de boro Costa *et al* [14], analisaram o modelo da rede de Kondo dentro de uma aproximação de Hartee-Fock, em uma abordagem de um ordenamento espiral magnético, em três dimensões. Os resultados mostram, entre outras coisas, que existem fases magnéticas coexistindo com o efeito de blindagem eletrônica.

Bertussi *et al* [29] estudaram a influência dos momentos locais e do emparelhamento eletrônico através do modelo Kondo-Hubbard atrativo em uma dimensão usando o método DMRG. Obtiveram um rico diagrama de fase onde supercondutividade e ordenamento magnético podem coexistir para uma enorme variedade de parâmetros. O modelo Kondo-Hubbard atrativo mostra-se adequado em modelar a física essencial por trás dos carbetos de boro.

Como foi descrito em [22] e em trabalhos experimentais [3, 4], a estrutura de camadas tem um papel essencial na modelagem dos carbetos de boro. Portanto, visando compreender como a distribuição de camadas influencia na supercondutividade e ordenamento magnético, analisamos o modelo Kondo-Hubbard atrativo em uma bicamada.

Observamos os efeitos de indução do modelo de Hubbard e Kondo separadamente. Para o modelo de Hubbard a presença de elétrons emparelhados em uma camada induz a formação de pares na camada adjacente. Por outro lado, a polarização em uma camada não induz polarização na camada adjacente. Por fim, consideramos a presença dos efeitos do emparelhamento eletrônico e da interação dos elétrons itinerantes com os momentos locais. Fixamos termos de Hubbard distintos para ambas as camadas e o termo de Kondo presente somente em uma delas. Na camada equivalente ao plano RC, o termo de Hubbard é fixado aproximadamente zero e o termo de Kondo diferente de zero. E na camada

equivalente ao plano TB, há somente o termo de Hubbard. Dentre os valores trabalhados, observamos a presença de duas fases: ambas com um ordenamento do tipo AFM e com supercondutividade apenas em uma delas. Observamos que como o magnetismo e a supercondutividade residem em camadas diferentes, os efeitos do termo de Kondo sobre os parâmetros de ordem são bastante atenuados em comparação com a monocamada. No entanto, a indução no emparelhamento eletrônico observada pelo termo de Hubbard continua sendo significativa mesmo na presença do momento local.

Nesta dissertação estudamos o modelo Kondo-Hubbard atrativo sem considerar a presença das hibridizações. Elas são importantes quando há um forte acoplamento entre os elétrons itinerantes e os momentos locais, como acontece em materiais com o comportamento de férmions pesados. Portanto, uma das perspectivas do nosso trabalho é analisar também o comportamento do modelo Kondo-Hubbard atrativo considerando as hibridizações.

APÊNDICE A – Aproximação de Hartree-Fock: Modelo de Hubbard

Em aplicações práticas de segunda quantização, muitas vezes necessitamos calcular médias de longos produtos de operadores de criação e aniquilação. Porém, precisamos colocar estes produtos em uma forma quadrática para podermos escrevê-los como matrizes. Isto é feito através da aproximação de Hartree-Fock. Consideremos uma Hamiltoniana que é dada pelo produto de dois operadores $H_{AB} = AB$, então a aproximação de campo médio é feita considerando o operador como sendo seu valor médio mais um desvio d . Assim temos,

$$\begin{aligned} d_A &= A - \langle A \rangle, \\ d_B &= B - \langle B \rangle, \end{aligned} \tag{A.1}$$

e portanto,

$$d_A d_B = AB - B\langle A \rangle - A\langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle, \tag{A.2}$$

desprezando o termo com o produto dos desvios temos a Hamiltoniana de Hartree-Fock para H_{AB} ,

$$H_{AB} \approx H_{AB}^{HF} = A\langle B \rangle + B\langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle. \tag{A.3}$$

Este procedimento é bastante simplificada pelo teorema de Wick [15, 16]. De acordo com este teorema o produto de um número par de operadores pode ser reescrito com a soma de todas as possíveis contrações entre os operadores. Por exemplo, para um operador quártico, temos que

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} &\approx c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \\ &+ c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \\ &- \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} - \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Com isto, vamos tratar o termo de Hubbard,

$$H_{hub} = -U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \tag{A.5}$$

fazendo uma aproximação de campo médio A.4 e uma transformada de Fourier 2.2 à equação A.5 é

transformada em,

$$\begin{aligned}
 H_{hub} \approx & -U \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\frac{n}{2} + m^z \right) c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \left(\frac{n}{2} - m^z \right) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - \left(\frac{n}{2} + m^z \right) \left(\frac{n}{2} - m^z \right) \right. \\
 & - (m^x - im^y) c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - (m^x + im^y) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + (m^x + im^y)(m^x - im^y) \\
 & \left. + \frac{\Delta}{U} (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) - \frac{\Delta^2}{U^2} \right]. \tag{A.6}
 \end{aligned}$$

onde definimos as magnetizações médias por sítio da seguinte forma,

$$m_x = \frac{1}{2} (\langle c_{\mathbf{R}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{R}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\downarrow} \rangle), \tag{A.7}$$

$$m_y = \frac{i}{2} (\langle c_{\mathbf{R}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\downarrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{R}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\uparrow} \rangle), \tag{A.8}$$

$$m_z = \frac{1}{2} (\langle c_{\mathbf{R}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{R}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\downarrow} \rangle). \tag{A.9}$$

No Capítulo 2 trabalhamos o caso em que não há orientação magnética média preferencial, portanto, fazendo $m^x = m^y = m^z = 0$ desta forma ficamos com,

$$H_{hub} = -\frac{Un}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \Delta \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}) + \frac{NUn^2}{4} + \frac{N\Delta^2}{U}. \tag{A.10}$$

Finalmente, para podermos garantir que estamos encontrando as soluções mais estáveis devemos impor que as derivadas da energia livre em função dos parâmetros de ordem sejam zero, ver Apêndice B.

APÊNDICE B – Teorema de Feynman-Hellman

Neste apêndice vamos enunciar o teorema de Feynman-Hellmann e faremos uma rápida demonstração, para um maior rigor ver a Referência [30].

Considere uma Hamiltoniana H com autovetores $|\psi(\lambda)\rangle$ e com autovalores E_λ que dependem de um parâmetro arbitrário λ . Então,

$$H|\psi(\lambda)\rangle = E_\lambda|\psi(\lambda)\rangle, \quad (\text{B.1})$$

$$\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1. \quad (\text{B.2})$$

Assim temos que,

$$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda} (\langle\psi|H_\lambda|\psi\rangle) = \quad (\text{B.3})$$

$$= \langle\psi|\frac{dH_\lambda}{d\lambda}|\psi\rangle + \langle\psi|H_\lambda|\frac{d\psi}{d\lambda}\rangle + \langle\frac{d\psi}{d\lambda}|H_\lambda|\psi\rangle. \quad (\text{B.4})$$

Assim, os ultimos dois termos da equação B.4 são

$$\langle\psi|H_\lambda|\frac{d\psi}{d\lambda}\rangle + \langle\frac{d\psi}{d\lambda}|H_\lambda|\psi\rangle = E_\lambda \frac{d}{d\lambda} \langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 0. \quad (\text{B.5})$$

E finalmente ficamos com a equação que resulta do teorema de Feynman-Hellmann,

$$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \langle\psi|\frac{dH_\lambda}{d\lambda}|\psi\rangle. \quad (\text{B.6})$$

Por exemplo, vamos supor que desejamos minimizar a energia livre de Helmholtz, em relação a um parâmetro arbitrário λ . Como estamos trabalhando usando segunda quantização nossa energia livre fica,

$$F = -K_B T \sum_k \ln(1 + e^{-\beta\epsilon_k}). \quad (\text{B.7})$$

Derivando em relação a λ ,

$$\frac{dF}{d\lambda} = -K_B T \sum_k \left[\frac{-\beta e^{-\beta\epsilon_k}}{1 + e^{-\beta\epsilon_k}} \right] \left(\frac{d\epsilon_k}{d\lambda} \right), \quad (\text{B.8})$$

agora usamos a relação B.6, a derivada mostra-se como

$$\frac{dF}{d\lambda} = \sum_k \langle \psi_k | \frac{dH_\lambda}{d\lambda} | \psi_k \rangle f(\epsilon_k), \quad (\text{B.9})$$

sendo $f(\epsilon_k)$ a função número d partículas da estatística de férmions.

Concluindo, podemos dizer que o Teorema de Feynman-Hellman relaciona a derivada, em λ , da energia total com o valor médio da derivada, também em λ , da Hamiltoniana.

APÊNDICE C – Modelo da rede de Kondo aproximação de Hartree-Fock

Neste apêndice faremos uma aproximação de campo médio para o modelo da rede de Kondo.

Usando as relações 3.2 e 3.3 o produto interno $\mathbf{S}^f \cdot \mathbf{S}^c$ pode ser escrito em termos de operadores quárticos,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^f \cdot \mathbf{S}^c &= +S_x^f S_x^c + S_y^f S_y^c + S_z^f S_z^c = \\ &+ \frac{1}{4} \left(+ (f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow} + f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}) (c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow}) \right. \\ &\quad + (f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow} - f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}) (c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} - c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}) \\ &\quad \left. + (f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}) (c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} - c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow}) \right). \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Fazendo a aproximação de Hartree-Fock para colocarmos C.1 em termos de operadores quadráticos, ficamos com,

$$\begin{aligned} S_z^f S_z^c &\approx S_z^f \langle S_z^c \rangle + S_z^c \langle S_z^f \rangle - \langle S_z^f \rangle \langle S_z^c \rangle + \frac{1}{2} \langle V_c^x \rangle V_f^x + \frac{1}{2} \langle V_f^x \rangle V_c^x - \frac{1}{2} \langle V_f^x \rangle \langle V_c^x \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \langle V_c^y \rangle V_f^y + \frac{1}{2} \langle V_f^y \rangle V_c^y - \frac{1}{2} \langle V_f^y \rangle \langle V_c^y \rangle - \frac{1}{2} \langle V_c^z \rangle V_f^z - \frac{1}{2} \langle V_f^z \rangle V_c^z + \frac{1}{2} \langle V_f^z \rangle \langle V_c^z \rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \langle V_c^0 \rangle V_f^0 - \frac{1}{2} \langle V_f^0 \rangle V_c^0 + \frac{1}{2} \langle V_f^0 \rangle \langle V_c^0 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

e para as componentes x e y temos,

$$\begin{aligned} S_x^f S_x^c + S_y^f S_y^c &\approx S_x^f \langle S_x^c \rangle + S_x^c \langle S_x^f \rangle - \langle S_x^f \rangle \langle S_x^c \rangle + S_y^f \langle S_y^c \rangle + S_y^c \langle S_y^f \rangle - \langle S_y^f \rangle \langle S_y^c \rangle \\ &\quad + \langle V_c^z \rangle V_f^z + \langle V_f^z \rangle V_c^z - \langle V_f^z \rangle \langle V_c^z \rangle - \langle V_c^0 \rangle V_f^0 - \langle V_f^0 \rangle V_c^0 + \langle V_f^0 \rangle \langle V_c^0 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

onde definimos,

$$V_c^0 = V_f^{0\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta = \pm} c_{\alpha}^{\dagger} \mathbb{I}_{\alpha, \beta} f_{\beta}, \quad (\text{C.4})$$

$$\mathbf{V}_c = \mathbf{V}_f^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta = \pm} c_{\alpha}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha, \beta} f_{\beta}. \quad (\text{C.5})$$

Assim, somando C.2 com C.3 o produto interno C.1 fica,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^f \cdot \mathbf{S}^c \approx \mathbf{S}^f \cdot \langle \mathbf{S}^c \rangle + \langle \mathbf{S}^f \rangle \cdot \mathbf{S}^c - \langle \mathbf{S}^f \rangle \cdot \langle \mathbf{S}^c \rangle + \frac{1}{2} \langle \mathbf{V}_f \rangle \cdot \mathbf{V}_c + \frac{1}{2} \langle \mathbf{V}_c \rangle \cdot \mathbf{V}_f - \frac{1}{2} \langle \mathbf{V}_f \rangle \cdot \langle \mathbf{V}_c \rangle \\ - \frac{3}{2} \langle V_f^0 \rangle \cdot V_c^0 - \frac{3}{2} \langle V_c^0 \rangle \cdot V_f^0 + \frac{3}{2} \langle V_f^0 \rangle \langle V_f^0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Substituindo C.6 na 3.1, obtemos a Hamiltoniana de Hartree-Fock,

$$\begin{aligned} H_{MF} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + J \sum_i (\mathbf{S}_i^f \cdot \langle \mathbf{S}_i^c \rangle + \langle \mathbf{S}_i^f \rangle \cdot \mathbf{S}_i^c) + \frac{J}{2} \sum_i (\mathbf{V}_i^c \cdot \langle \mathbf{V}_i^f \rangle + \langle \mathbf{V}_i^c \rangle \cdot \mathbf{V}_i^f) \\ - \frac{3J}{2} \sum_i (\langle V_{ic}^0 \rangle \langle V_{if}^0 \rangle + \langle V_{ic}^0 \rangle V_{if}^0) - \frac{J}{2} \sum_i \langle V_{ic}^0 \rangle \cdot \langle \bar{V}_i^f \rangle + \frac{3J}{2} \sum_i \langle V_{ic}^0 \rangle \langle V_{if}^0 \rangle - J \sum_i \langle \mathbf{S}_i^f \rangle \cdot \langle \mathbf{S}_i^c \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

APÊNDICE D – Modelo Kondo-Hubbard atrativo

Neste apêndice, exibiremos a Hamiltoniana principal desta dissertação. A Hamiltoniana do modelo Kondo-Hubbard bicamada é definido como,

$$H = \sum_{\alpha} \left(-t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} (c_{\alpha \mathbf{R} \sigma}^{\dagger} c_{\alpha \mathbf{R}' \sigma} + c_{\alpha \mathbf{R}' \sigma}^{\dagger} c_{\alpha \mathbf{R} \sigma}) + J \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\alpha \mathbf{R}}^c \cdot \mathbf{S}_{\alpha \mathbf{R}}^f - U \sum_{\mathbf{R}} n_{\alpha \mathbf{R} \uparrow} n_{\alpha \mathbf{R} \downarrow} \right) - t_z \sum_{\mathbf{R}, \alpha} (c_{A \mathbf{R} \sigma}^{\dagger} c_{B \mathbf{R} \sigma} + c_{B \mathbf{R} \sigma}^{\dagger} c_{A \mathbf{R} \sigma}), \quad (\text{D.1})$$

onde α refere-se aos índices A e B das respectivas monocamadas.

Vamos fermionizar os operadores \mathbf{S} usamos as equações 3.2 e 3.3; fazemos uma aproximação de Hartee-Fock descrita nas equações 3.4 e A.6; e aplicando uma transformada de Fourier definida nas equações 3.14 e 3.15. Escrevemos a Hamiltoniana na forma matricial usando o espinor de Nambu,

$$\Psi^{\dagger} = (c_{A \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger}, c_{A - \mathbf{k} \downarrow}, c_{A \mathbf{k} + \mathbf{q} \downarrow}^{\dagger}, c_{A - \mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow}, c_{B \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger}, c_{B - \mathbf{k} \downarrow}, c_{B \mathbf{k} + \mathbf{q} \downarrow}^{\dagger}, c_{B - \mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow}, f_{B \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger}, f_{B - \mathbf{k} \downarrow}, f_{B \mathbf{k} + \mathbf{q} \downarrow}^{\dagger}, f_{B - \mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow}), \quad (\text{D.2})$$

Assim, podemos escrever a Hamiltoniana,

$$H_{MF} = \sum_k \Psi^{\dagger} \mathcal{H} \Psi + cte. \quad (\text{D.3})$$

onde \mathcal{H} é dado pela equação D.5 e a constante é escrita como,

$$\begin{aligned} cte. = & +2J_B N \left(m_f^B m_c^B + \frac{3}{2} V_B^2 - \frac{1}{2} V_B'^2 \right) + N(4\mu n_c - 2\varepsilon_f n_f) \\ & + 2N \left(\frac{U_A n_c^2}{4} + \frac{\Delta_A^2}{U_A} - U_A (m_c^A)^2 \right) + 2N \left(\frac{U_B n_c^2}{4} + \frac{\Delta_B^2}{U_B} - U_B (m_c^B)^2 \right) \\ & + \sum_{\mathbf{k}} (2\varepsilon_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}} + 2\varepsilon_{-\mathbf{k}} - 2\bar{\mu}_A - 2\bar{\mu}_B + 2\varepsilon_f). \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

$$\text{e } \bar{\mu}_{\alpha} = \mu + \frac{1}{2} U_{\alpha} n_{\alpha}.$$

Referências Bibliográficas

- [1] L. Kouwenhoven and L. Glazman, “Revival of the kondo effect,” *Physics World*, vol. 14, no. 1, p. 33, 2001.
- [2] S. Shimizu, T. Sakaguchi, H. Mukuda, Y. Kitaoka, P. Shirage, Y. Kodama, and A. Iyo, “Uniform mixing of antiferromagnetism and high- T_c superconductivity in multilayer copper oxides $Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n}F_2$ ($n=2, 3, 4$) with apical fluorines: ^{63}Cu -NMR/NQR and ^{19}F -NMR studies,” *Physical Review B*, vol. 79, no. 6, p. 064505, 2009.
- [3] J. Lynn, S. Skanthakumar, Q. Huang, S. Sinha, Z. Hossain, L. Gupta, R. Nagarajan, and C. Godart, “Magnetic order and crystal structure in the superconducting RNi_2B_2C materials,” *Physical Review B*, vol. 55, no. 10, p. 6584, 1997.
- [4] K. Müller and V. Narozhnyi, “Interaction of superconductivity and magnetism in borocarbide superconductors,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 64, no. 8, p. 943, 2001.
- [5] B. Scott, E. Suard, C. Tsuei, D. Mitzi, T. McGuire, B.-H. Chen, and D. Walker, “Layer dependence of the superconducting transition temperature of $HgBa_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+2+\delta}$,” *Physica C: Superconductivity*, vol. 230, no. 3, p. 239, 1994.
- [6] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [7] J. Kondo, “Resistance minimum in dilute magnetic alloys,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 32, no. 1, p. 37, 1964.
- [8] B. Coqblin, M. D. Nunez-Regueiro, A. Theumann, J. R. Iglesias, and S. Magalhaes, “Theory of the kondo lattice: competition between kondo effect and magnetic order,” *Philosophical Magazine*, vol. 86, no. 17-18, p. 2567, 2006.
- [9] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2005.
- [10] G. Grosso and G. Parravicini, *Solid State Physics*. Academic Press, 2005.
- [11] D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois, and A.-M. Tremblay, “Competition between antiferromagnetism and superconductivity in High- T_c Cuprates,” *Physical Review Letters*, vol. 94, no. 15, p. 156404, 2005.
- [12] A. Goldman, C. Stassis, P. Canfield, J. Zarestky, P. Dervenagas, B. Cho, D. Johnston, and B. Sternlieb, “Magnetic pair breaking in $HoNi_2B_2C$,” *Physical Review B*, vol. 50, no. 13, p. 9668, 1994.
- [13] H. Schmidt and H. Braun, “Superconductivity, magnetism, and their coexistence in $R(Ni_{1-x}Co_x)_2B_2C$ ($R = Lu, Tm, Er, Ho, Dy$),” *Physical Review B*, vol. 55, no. 13, p. 8497, 1997.
- [14] N. d. C. Costa, J. P. de Lima, and R. R. d. Santos, “Spiral magnetic phases on the kondo lattice model: A hartree-fock approach,” *arXiv preprint arXiv:1506.00890*, 2015.

- [15] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. OUP Oxford, 2004.
- [16] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*. Courier Corporation, 2012.
- [17] H. N. Nazareno, *Mecânica Estatística e Funções de Green*. Ed. da Universidade de Brasília, 1986.
- [18] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 276, p. 238, The Royal Society, 1963.
- [19] P. Coleman, *Heavy Fermions: Electrons at the Edge of Magnetism*. Wiley Online Library, 2007.
- [20] S. Shimizu, S.-i. Tabata, S. Iwai, H. Mukuda, Y. Kitaoka, P. M. Shirage, H. Kito, and A. Iyo, “High-temperature superconductivity and antiferromagnetism in multilayer cuprates: ^{63}Cu and ^{19}F NMR on five-layer $\text{Ba}_2\text{Ca}_4\text{Cu}_5\text{O}_{10}(\text{F},\text{O})_2$,” *Physical Review B*, vol. 85, p. 024528, Jan 2012.
- [21] S. Shimizu, S. Iwai, S.-i. Tabata, H. Mukuda, Y. Kitaoka, P. M. Shirage, H. Kito, and A. Iyo, “Planar CuO_2 hole density in high- T_c cuprates determined by NMR knight shift: ^{63}Cu NMR on bilayered $\text{Ba}_2\text{CaCu}_2\text{O}_4(\text{F},\text{O})_2$ and three-layered $\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_6(\text{F},\text{O})_2$,” *Physical Review B*, vol. 83, p. 144523, Apr 2011.
- [22] T. Paiva, M. El Massalami, and R. R. dos Santos, “A layering model for superconductivity in the borocarbides,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 15, no. 46, p. 7917, 2003.
- [23] A. Zujev, R. T. Scalettar, G. G. Batrouni, and P. Sengupta, “Pairing correlations in the two-layer attractive hubbard model,” *New Journal of Physics*, vol. 16, no. 1, p. 013004, 2014.
- [24] N. A. Kamar and N. Vidhyadhiraja, “Proximity effects in a superconductor-normal metal bilayer system,” *arXiv preprint arXiv:1403.1972*, 2014.
- [25] Y. A. Izyumov, “Modulated, or long-periodic, magnetic structures of crystals,” *Physics-Uspekhi*, vol. 27, no. 11, pp. 845–867, 1984.
- [26] T. Grigereit, J. Lynn, Q. Huang, A. Santoro, R. Cava, J. Krajewski, and W. Peck Jr, “Observation of oscillatory magnetic order in the antiferromagnetic superconductor $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$,” *Physical Review Letters*, vol. 73, no. 20, p. 2756, 1994.
- [27] K. G. Wilson, “The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 47, no. 4, p. 773, 1975.
- [28] A. Avella and F. Mancini, *Strongly Correlated Systems*. Springer, 2012.
- [29] P. R. Bertussi, A. L. Malvezzi, T. Paiva, and R. R. Dos Santos, “Kondo–attractive-hubbard model for the ordering of local magnetic moments in superconductors,” *Physical Review B*, vol. 79, no. 22, p. 220513, 2009.
- [30] R. P. Feynman, “Forces in molecules,” *Physical Review*, vol. 56, no. 4, p. 340, 1939.