



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
INSTITUTO DE FÍSICA

SUPERCONDUTORES BIDIMENSIONAIS DESORDENADOS

GUSTAVO JOSÉ FARIAS

Orientador: Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda
Co-Orientadora: Prof^a. Dr^a. Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Cuiabá, Fevereiro de 2009.

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
INSTITUTO DE FÍSICA

SUPERCONDUTORES BIDIMENSIONAIS DESORDENADOS

GUSTAVO JOSÉ FARIAS

Dissertação apresentada ao Departamento de Física da
Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos
requisitos para obtenção do título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda
Co-Orientadora: Prof^a. Dr^a. Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Cuiabá, Fevereiro de 2009.

Aos meus pais, que sempre me incentivaram.

"O universo não foi feito à medida do ser humano, mas tampouco lhe é adverso: é-lhe indiferente."

Carl Sagan

Agradecimentos

A Deus;

Aos meus pais Marco e Terezinha, minha irmã Daniela e minha família, pelo apoio e incentivo, os quais nunca me faltaram perante minhas escolhas;

À Heloísa pelo carinho e companhia durante estes anos;

Ao professor Alberto pela orientação e amizade desde a iniciação científica;

Aos professores Raimundo Rocha dos Santos e Thereza Cristina de Lacerda Paiva pela orientação, paciência e atenção;

A todos os professores do Mestrado em Física da UFMT, que muito contribuíram para minha formação;

A todos os amigos, e amigos do mestrado;

Ao George e Eduardo pela hospedagem no Rio;

À CAPES pelo apoio financeiro;

E às demais pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Resumo

Motivados pelo comportamento de filmes finos supercondutores desordenados, investigamos os efeitos de impurezas no modelo de Hubbard atrativo bidimensional, a fim de determinar o quanto de desordem podemos acrescentar em um material sem que ele perca totalmente suas características supercondutoras. A desordem no modelo é facilmente implementada atribuindo-se um valor nulo para a atração efetiva entre elétrons ($U = 0$), em uma certa fração f dos sítios de uma rede quadrada, desfavorecendo a formação de pares nestes sítios. Para a realização dos cálculos foram utilizadas simulações de Monte Carlo Quântico, no preenchimento de banda $\langle n \rangle = 0.875$ e para o valor da atração $U = 6$. Através do cálculo do fator de estrutura de pares locais (P_s), e utilizando a teoria de escala para sistemas de tamanho finito (*finite-size scaling*), obtemos o comportamento do gap supercondutor no estado fundamental ($T = 0$) à medida em que aumentamos a desordem no modelo. Isto fornece uma estimativa para a fração crítica de desordem f_c , acima da qual o material já não é mais supercondutor. Argumentos de universalidade nos permitiram fazer cálculos a temperatura finita e estimar o comportamento da temperatura crítica como função da desordem. Concluímos que T_c como função de f é uma função monotonicamente decrescente, ao contrário do que acontece na banda semi-cheia.

Cuiabá

Fevereiro de 2009

Abstract

Motivated by the behaviour of superconducting thin films, we investigate the effects of impurities in the two-dimensional attractive Hubbard model, in order to determine how much disorder we can add to a material until superconductivity is totally suppressed. The disorder in the model is easily implemented by assigning a null value to the effective on-site attraction between electrons ($U = 0$), on a fraction f of sites of a square lattice chosen at random, thus disfavouring the formation of pairs in these sites. The calculations were performed through Quantum Monte Carlo simulations, for electronic density $\langle n \rangle = 0.875$ and for the attraction $U = 6$. We have calculated the equal-time pair structure factor (P_s), and using finite-size scaling arguments, we obtain the behaviour of the superconductor gap in the ground state ($T = 0$), in a proportion of f . This provides us with estimative for the critical fraction of disorder, above which the material loses its superconducting properties. Universality arguments allowed us to estimate the critical temperature as a function of disorder. We conclude that T_c as function of f is a decreasing monotonic function, unlike what happens in the half-filled band case.

Cuiabá

February 2009

Índice

Introdução	1
1 Supercondutividade	3
1.1 Propriedades básicas dos supercondutores	3
1.2 Supercondutores Desordenados	6
2 O Modelo de Hubbard	10
2.1 Modelo de Hubbard Atrativo	10
2.2 Modelo de Hubbard Atrativo Desordenado	20
3 Método de Monte Carlo Quântico	24
3.1 Monte Carlo Quântico: Preliminares	24
3.2 A Simulação	29
4 Resultados	31
4.1 Propriedades do estado fundamental ($T = 0$)	32
4.2 Propriedades a temperatura finita	40
Conclusões	46
Referências	47

Lista de Figuras

1.1	Resistividade versus temperatura para o composto de mercúrio [13].	4
1.2	Efeito Meissner [13].	4
1.3	$H_c(T)$ versus temperatura [13].	5
1.4	Deposição de átomos supercondutores em um substrato [14].	6
1.5	Dimensões de um filme fino.	7
1.6	Temperatura crítica supercondutora como função da desordem, representada pela resistência da folha R_{\square} , para um filme fino de $\text{Mo}_{77}\text{Ge}_{23}$. Os pontos azuis são os dados experimentais e a curva vermelha representa o tratamento teórico, baseado em modelos perturbativos da interação Coulombiana [2]. . .	8
1.7	R_{\square} versus temperatura para várias espessuras de deposição em um filme de Bi. Há uma transição supercondutor-isolante no ponto crítico $h/4e^2$ [2]. . . .	9
2.1	P_s e $C(\pi, \pi)$ versus $\langle n \rangle$ para redes 4×4 e 6×6 , $U = -4$, $t=1$ e $\beta = 10$ [6]. .	15
2.2	P_s e $C(\pi, \pi)$ versus β para redes 4×4 , 6×6 e 8×8 , $U = -4$, $t=1$ e $\langle n \rangle = 0.87$ [6].	16
2.3	Extrapolações para P_s e $C(\pi, \pi)$ na banda semi-cheia (\square) e em $\langle n \rangle = 0.5$ (P_s (\blacksquare) e $C(\pi, \pi)$ (\bullet)) [23].	18
2.4	Comparativo entre uma Transição de Kosterlitz-Thouless representada pelo gráfico (a) e uma transição normal representada pelo gráfico (b) [32].	19
2.5	Diagrama de fases do modelo de Hubbard atrativo em $d = 2$ [22].	20
2.6	Representação esquemática da implementação da desordem em uma rede bidimensional.	21

2.7	Temperatura crítica como função da fração crítica c para vários valores de U em cálculos de campo médio [12].	22
2.8	f_c como função de U , obtido através de Monte Carlo Quântico [8].	23
4.1	P_s em função de β	33
4.2	Extrapolação de P_s com $1/L$ para a fração de desordem $f = 7/32$	35
4.3	Extrapolação de P_s com $1/L$ para a fração de desordem $f = 4/16$	35
4.4	Extrapolações para todos os casos de desordem considerados aqui.	36
4.5	Gap normalizado supercondutor em função de f . A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.	37
4.6	Gap supercondutor normalizado em função de f para $\langle n \rangle = 1$ e $\langle n \rangle = 0.875$, onde a curva para $\langle n \rangle = 1$ foi extraído da Ref. [8]. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.	38
4.7	Fração crítica como função de U para $\langle n \rangle = 1$ e $\langle n \rangle = 0.875$. A curva vermelha para a banda semi-cheia foi retirada da Ref. [8] e o ponto $U = 4$ para $\langle n \rangle = 0,875$ foi extraído da Ref. [7]. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.	39
4.8	P_s escalonado como função de β para o caso puro.	41
4.9	P_s escalonado como função de β para o caso $f = 2/16$	41
4.10	P_s escalonado como função de β para o caso $f = 3/16$	42
4.11	P_s escalonado como função de β para o caso $f = 7/32$	42
4.12	Temperatura crítica de transição supercondutora como função da desordem. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.	44
4.13	Gráfico comparativo da temperatura crítica de transição supercondutora como função da desordem para $\langle n \rangle = 1$ e $\langle n \rangle = 0.875$, onde a curva para $\langle n \rangle = 1$ foi extraída da Ref. [8]. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.	45

Introdução

A competição entre impurezas e o estado supercondutor tem sido tema de estudo já há algum tempo [1]. Na verdade é conhecido que quanto mais desordem é acrescentada ao sistema, mais o estado supercondutor é inibido, até um ponto em que a supercondutividade é suprimida até no estado fundamental [2]. Experimentalmente foi visto que, à medida em que depositamos Bi e Pb em um substrato de Ge, a resistência da folha R_{\square} , que pode ser entendida como uma medida de desordem do sistema e que depende inversamente da espessura da deposição, vai diminuindo, até o ponto em que ocorre uma transição de fase de um estado normal para um estado supercondutor, sendo que a transição se dá em um ponto crítico quântico, com o valor da resistência da folha perto de $h/4e^2$, que é o quantum de resistência para um par de elétrons [3]. Esta competição fica ainda mais interessante em duas dimensões pois a supercondutividade pertence à classe de universalidade da transição de Kosterlitz-Thouless [4, 5]. Do ponto de vista teórico, o modelo de Hubbard atrativo tem sido muito usado para discutir as propriedades do estado supercondutor [6, 7, 8, 9], já que este aparece naturalmente no modelo e, ainda, por ser formulado no espaço real, e não no recíproco, a incorporação da desordem neste modelo é feita de forma mais simples e direta. É conhecido que, na banda semi-cheia, o modelo de Hubbard atrativo apresenta uma degenerescência entre acoplamento de pares e onda de densidade de carga (CDW) [6], acarretando em um parâmetro de ordem de três componentes, uma correspondendo a CDW e duas ao acoplamento de pares. Logo, o teorema de Mermin-Wagner [10] faz com que $T_c = 0$ na banda semi-cheia para o modelo. Por outro lado, fora da banda semi-cheia, as correlações CDW são suprimidas, quebrando a degenerescência e restando somente o

acoplamento entre pares, que faz com que tenhamos uma temperatura de transição finita de Kosterlitz-Thouless para o estado supercondutor [11]. Há indícios de que T_c apresenta um máximo próximo ao preenchimento de banda $\langle n \rangle = 0.87$ [6, 9].

Alguns resultados de campo médio mostram que, à medida em que aumentamos a interação atrativa U entre os elétrons, decresce a fração crítica de desordem [12], acima da qual o material não é mais supercondutor. Entretanto, cálculos recentes utilizando o método de Monte Carlo Quântico para a banda semi-cheia, vieram a mostrar o contrário, pelo menos para valores de U não muito grandes [8].

Nosso interesse nesta dissertação é analisar o papel da desordem no modelo de Hubbard atrativo, e determinar o quanto de desordem podemos acrescentar sem que tenhamos o estado supercondutor totalmente destruído, bem como estimar a temperatura crítica para cada fração de desordem. Para isso, a dissertação está estruturada como se segue: no capítulo 1 é apresentada a motivação experimental do trabalho, onde comentaremos sobre supercondutores desordenados; no capítulo 2 o modelo de Hubbard atrativo é apresentado e suas principais propriedades e diagramas de fases são discutidos; no capítulo 3 o método de Monte Carlo Quântico, que foi usado neste trabalho, é introduzido e, no capítulo 4, são discutidos os resultados. As conclusões e perspectivas de continuidade deste trabalho são então discutidas ao final.

1

Supercondutividade

1.1 Propriedades básicas dos supercondutores

O fenômeno da supercondutividade foi descoberto em 1911 por Heike Kamerlingh Onnes. A primeira característica incomum observada nos materiais supercondutores foi a queda abrupta da resistividade elétrica abaixo de uma determinada temperatura crítica. A resistividade de um metal normal tem um comportamento do tipo $\rho(T) = \rho_0 + BT^2$, onde ρ_0 é a resistividade residual quando a temperatura do material vai a zero. Já em materiais supercondutores, como observado por Onnes em um composto de mercúrio (Fig. 1.1), a resistividade cai abruptamente a zero abaixo de T_c que, para o Hg, é de 4.2 K.

Mais tarde, por volta de 1933, foi descoberto que um material supercondutor na fase normal, e submetido a um campo magnético não muito intenso, quando resfriado a uma temperatura abaixo de sua temperatura crítica supercondutora, expelia abruptamente as linhas de campo de seu interior, acarretando em um campo magnético nulo dentro do material. Esse comportamento ficou conhecido como efeito Meissner e representa o *diamagnetismo perfeito* que estes materiais apresentam. Na verdade o que ocorre é que, na presença de um campo magnético, de acordo com a Lei da Indução de Faraday, aparecem correntes elétricas induzidas no material supercondutor, de tal forma que o campo magnético produzido por elas é contrário ao campo aplicado, resultando em um campo nulo dentro do supercondutor. A Fig. 1.2 ilustra o fenômeno.

Com relação ao efeito Meissner podemos classificar os supercondutores em dois tipos distintos: tipo 1 e tipo 2. Os supercondutores de tipo 1 expõem todas as linhas

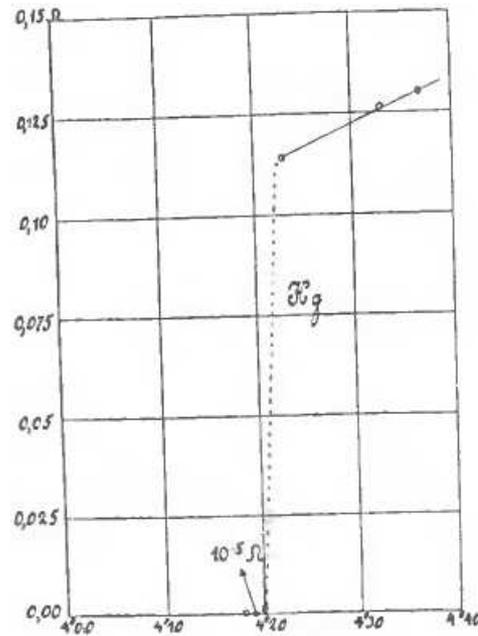


Figura 1.1: Resistividade versus temperatura para o composto de mercúrio [13].

de campo magnético de seu interior, até que a supercondutividade seja destruída e as linhas de campo entrem totalmente dentro do supercondutor. Os do tipo 2 expõem totalmente as linhas de campo até certo valor H_{c1} , acima deste valor o material permite parcialmente a penetração de campo em seu interior. Isto acontece até um certo valor H_{c2} , onde, acima deste, as linhas de campo penetram por completo.

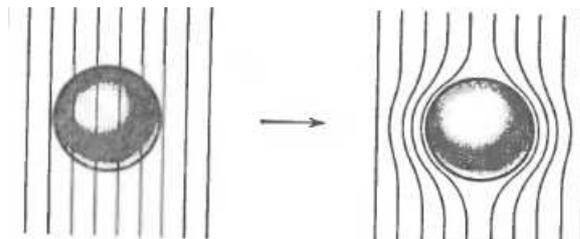
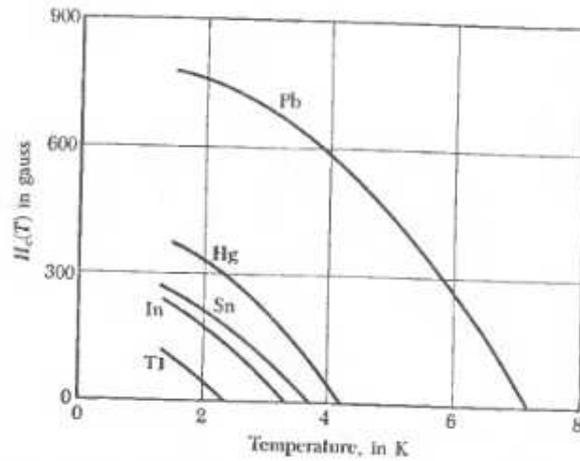


Figura 1.2: Efeito Meissner [13].

Assim, se o campo magnético for suficientemente intenso, o estado supercondutor é destruído. O campo crítico para que isto aconteça é denotado por $H_c(T)$ e é dependente da temperatura, como mostra a Fig. 1.3. Na temperatura crítica o campo crítico assume valor nulo: $H_c(T_c) = 0$.

Figura 1.3: $H_c(T)$ versus temperatura [13].

Uma descrição teórica microscópica satisfatória para estes materiais só foi possível com a teoria formulada por Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS) em 1957 [15]. De acordo com esta teoria, a supercondutividade é resultado da formação de pares de elétrons que se movem através da rede sem dispersão. A interação atrativa entre estes elétrons é causada pela interação de cada um deles com modos vibracionais da rede, conhecidos como fônons, formando um estado ligado entre dois elétrons, chamado de par de Cooper. A teoria BCS conseguiu com sucesso explicar várias propriedades físicas dos supercondutores, tais como a resistência nula e o gap no calor específico, bem como fornecer estimativas para a temperatura crítica dos materiais.

Estas são as características principais, e bastante conhecidas, de materiais supercondutores convencionais. Nesta dissertação estaremos interessados na influência da desordem (impurezas) na transição supercondutora. Para isso são apresentados, na próxima seção, alguns resultados já conhecidos de estudos com supercondutores desordenados.

1.2 Supercondutores Desordenados

Consideremos um substrato (p. ex. de Germânio) inicialmente sem impurezas, em cima do qual átomos de material supercondutor (p. ex. Molibdênio) são depositados, como mostra a Fig. 1.4.

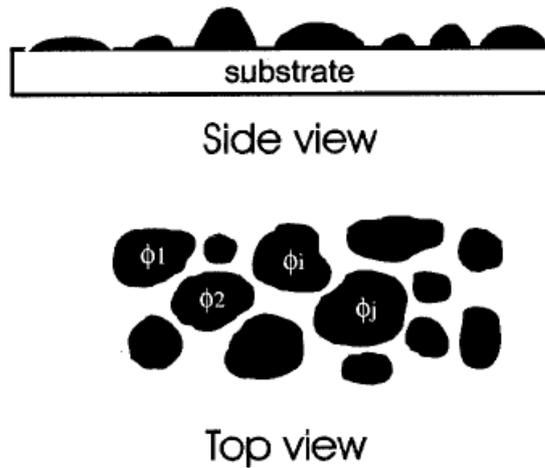


Figura 1.4: Deposição de átomos supercondutores em um substrato [14].

Podemos ver que, para uma pequena deposição de átomos, formam-se pequenas "ilhas" no substrato, as quais são separadamente e independentemente supercondutoras, porém se encontram fracamente acopladas. Quando isto acontece o estado supercondutor não ocorre no material como um todo, pois os pares de elétrons, responsáveis pela ordem supercondutora, perdem coerência em seu movimento pelo material. No entanto, se aumentarmos cada vez mais a espessura da deposição, estas "ilhas" acabam por se conectar, i.e., percolam, o que nos leva a crer que o efeito das impurezas (desordem) no estado supercondutor depende efetivamente da espessura da camada depositada.

Uma maneira de quantificar a desordem é através da resistência da folha, dada por

$$R_{\square} = \rho \frac{l}{A} = \rho \frac{l}{lt} = \frac{\rho}{t} \quad (1.1)$$

onde A é a área da seção reta do filme, l é a dimensão linear, t é a sua espessura e ρ é a resistividade, como mostrado na Fig. 1.5. Podemos ver da equação (1.1) que a

resistência da folha não depende da área do filme, somente de sua espessura, fato que nos leva a considerar esta grandeza como uma medida da desordem do sistema.

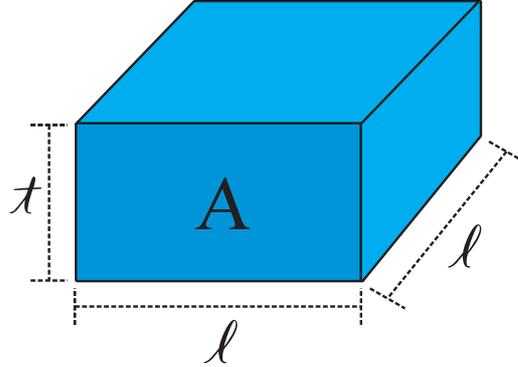


Figura 1.5: Dimensões de um filme fino.

Assim, o processo de deposição afeta a supercondutividade do sistema, levando o material a variar sua temperatura crítica supercondutora. Como dito anteriormente, a desordem tende a suprimir a supercondutividade, à medida que ela desfavorece a formação de pares. Com efeito, a Fig. 1.6 mostra o resultado experimental da temperatura crítica supercondutora como função da resistência da folha de um filme fino de $\text{Mo}_{77}\text{Ge}_{23}$: vê-se claramente que o estado supercondutor é inibido pelo aumento da desordem [2].

Foi possível também acompanhar a transição supercondutor-isolante variando quase continuamente a espessura da deposição em um filme de bismuto, analisando a resistência R_{\square} em função da temperatura. Este cenário é mostrado na Fig. 1.7. Podemos ver que, em uma dada temperatura, à medida em que cresce a espessura do filme, uma fase isolante (de menor espessura) dá lugar a uma fase supercondutora (de maior espessura), sendo que a transição acontece em um ponto crítico quântico, com valor próximo da resistência quântica para pares de elétrons, $h/4e^2$ ou 6450Ω .

Nesta dissertação estamos interessados em saber o quanto de desordem podemos acrescentar a um material sem que ele perca suas características supercondutoras. Sob o ponto de vista microscópico este estudo é melhor efetuado através do modelo de Hubbard atrativo, já que é formulado no espaço real (e não no espaço recíproco, como a hamiltoniana BCS) possibilitando, assim, a incorporação de impurezas de caráter

localizado. Analisaremos o modelo de forma numérica através de simulações de Monte Carlo Quântico.

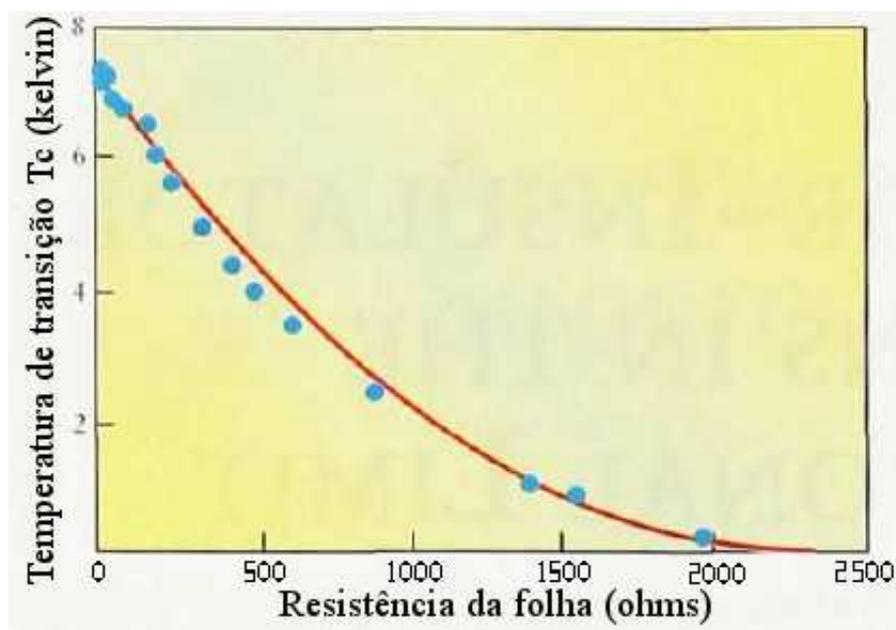


Figura 1.6: Temperatura crítica supercondutora como função da desordem, representada pela resistência da folha R_{\square} , para um filme fino de $\text{Mo}_{77}\text{Ge}_{23}$. Os pontos azuis são os dados experimentais e a curva vermelha representa o tratamento teórico, baseado em modelos perturbativos da interação Coulombiana [2].

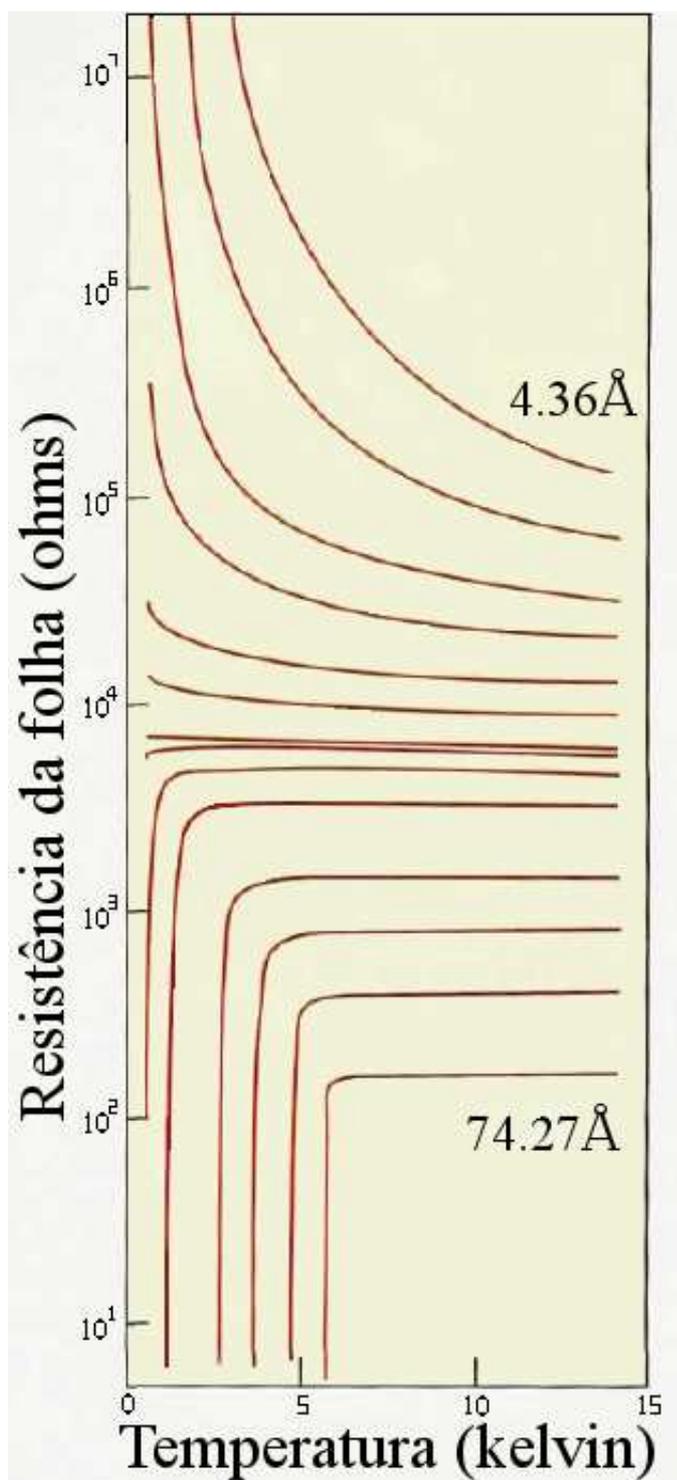


Figura 1.7: R_{\square} versus temperatura para várias espessuras de deposição em um filme de Bi. Há uma transição supercondutor-isolante no ponto crítico $h/4e^2$ [2].

2

O Modelo de Hubbard

O modelo de Hubbard foi proposto na década de 60 [18], e tinha como principal objetivo explicar alguns dos efeitos das fortes correlações que apresentavam os elétrons de bandas estreitas (d e f) em alguns metais de transição (FeO, NiO, CoO). Ao longo dos anos este modelo se tornou o ponto de partida na descrição de elétrons fortemente correlacionados. Isto se deu mais intensamente com a descoberta dos supercondutores de alta temperatura crítica na década de 80 por Bednorz e Müller [19]. Atualmente o modelo também é usado, entre outras, na descrição de sistemas com formação de ondas de densidade de carga CDW em bandas estreitas [20], e em sistemas de férmions pesados [21].

Na próxima seção será apresentado o modelo de Hubbard atrativo, que, como mencionado, é bastante conveniente para discutir os efeitos de impurezas no estado supercondutor [7], foco principal desta dissertação.

2.1 Modelo de Hubbard Atrativo

O modelo de Hubbard atrativo é uma variação do modelo repulsivo originalmente proposto por J. Hubbard [18]. Obtemos o modelo atrativo apenas mudando o sinal da interação U do repulsivo, ou seja, substituímos $U > 0$ (repulsivo) por $U < 0$ (atrativo). Esta mudança dá origem ao comportamento supercondutor do modelo [22], pois a formação de pares em cada sítio passa a ser energeticamente favorável. O Hamiltoniano de Hubbard atrativo é adequado para descrever sistemas onde haja interação atrativa

entre elétrons itinerantes, e é dado por

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) - |U| \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (2.1)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) cria (destrói) um férmion com spin σ no sítio i e $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número. O primeiro termo é o termo de *hopping*, onde a integral de transferência t dá a probabilidade de um elétron saltar de um sítio para outro; este termo é, portanto, relacionado com a energia cinética do sistema. O *hopping* será considerado apenas entre primeiros vizinhos. O segundo termo representa a interação atrativa entre elétrons em um mesmo sítio. A interação efetiva atrativa no modelo favorece a formação de pares eletrônicos, que, por sua vez, podem se mover pela rede sem perda de coerência, acarretando supercondutividade. Esta interação atrativa pode ter origem no acoplamento de elétrons das bandas estreitas com modos de fônons locais [22] ou com graus de liberdade internos como éxcitons, plasmons e outros; mas aqui consideraremos apenas uma descrição fenomenológica onde não nos preocuparemos em justificar a origem desta interação. O terceiro termo controla o preenchimento da banda, onde μ é o potencial químico.

No nosso caso, como estamos interessados em estudar a supercondutividade, calcularemos o fator de estrutura de pares locais,

$$P_s(T, L) \equiv \langle \Delta^\dagger \Delta + \Delta \Delta^\dagger \rangle \quad (2.2)$$

onde L é o tamanho linear da rede e Δ^\dagger é dado por

$$\Delta^\dagger = \frac{1}{L} \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger. \quad (2.3)$$

Outra grandeza ilustrativa é a correlação de densidade de carga, dada por

$$C(\mathbf{q}) = \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle \quad (2.4)$$

onde

$$\rho_{\mathbf{q}}^\dagger = \frac{1}{L} \sum_l e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}} (c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} + c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow}). \quad (2.5)$$

Na banda semi-cheia, ou seja, quando temos um elétron por sítio, $\rho_{\mathbf{q}}$ com $q = (\pi, \pi)$ corresponde ao operador para o parâmetro de ordem CDW.

As propriedades do modelo de Hubbard dependem basicamente de três parâmetros: da competição U/t , do preenchimento da banda dado por $n = N_e/N_s$, onde N_e é o número de elétrons e N_s é o número de sítios, e da temperatura adimensional T/t . Cálculos analíticos são feitos principalmente nos limites de acoplamento fraco ($U \ll t$) e forte ($U \gg t$). Antes de discutirmos o limite de $U \gg t$ veremos como se comporta o modelo através de uma transformação partícula-buraco parcial [24]. Esta transformação, definida como

$$c_{j\uparrow} \rightarrow \bar{c}_{j\uparrow} \quad e \quad c_{j\downarrow} \rightarrow \bar{c}_{j\downarrow}^\dagger = (-1)^j c_{j\downarrow}, \quad (2.6)$$

que leva a

$$n_{j\uparrow} \rightarrow \bar{n}_{j\uparrow} \quad e \quad n_{j\downarrow} \rightarrow \bar{n}_{j\downarrow} = 1 - n_{j\downarrow}, \quad (2.7)$$

preserva os elétrons com spin para cima e transforma os com spin para baixo em buracos. Sob esta transformação, os graus de liberdade de carga são trocados pelos graus de liberdade de spin e vice-versa:

$$n_j \equiv n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} \rightarrow \bar{m}_j \equiv \bar{n}_{j\uparrow} - \bar{n}_{j\downarrow} = n_j - 1, \quad (2.8)$$

$$m_j \rightarrow \bar{n}_j = 1 + m_j. \quad (2.9)$$

Aplicando as transformações (2.6) e (2.7) na hamiltoniana repulsiva:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c. \right) + U \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (2.10)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}} = & - t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(\bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} + H.c. \right) - U \sum_i \left(\bar{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\bar{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu \sum_i (\bar{n}_{i\uparrow} - \bar{n}_{i\downarrow}) \\ & - \mu N_s. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Como podemos ver, a transformação mapeia o modelo repulsivo no atrativo. Na verdade os dois são equivalentes com potencial químico $\bar{\mu} = 0$ e na presença de um campo

magnético $h = 2\mu$. A componente zz da magnetização no modelo repulsivo se transforma em correlações de onda de densidade de carga (CDW) no modelo atrativo, e as componentes transversais xx e yy da magnetização no modelo repulsivo se tornam correlações planares entre pares no modelo atrativo:

$$\rho_\pi \leftrightarrow M_z^\dagger = \frac{1}{L} \sum_i (-1)^i (\bar{n}_{i\uparrow} - \bar{n}_{i\downarrow}) \quad (2.12)$$

$$\Delta^\dagger \leftrightarrow M_{xy}^\dagger = \frac{1}{L} \sum_i (-1)^i \bar{c}_{i\uparrow}^\dagger \bar{c}_{i\downarrow}. \quad (2.13)$$

Esta última é importante pois veremos que, fora da banda semi-cheia, o sistema tem somente correlações planares no parâmetro de ordem, que o faz pertencer à classe de universalidade da transição de Kosterlitz-Thouless [4, 5].

No limite de $U \gg t$ do modelo atrativo, utilizando teoria de perturbação no espaço de estados duplamente ocupados, temos contribuição do termo de hopping somente em segunda ordem, o que nos leva à seguinte hamiltoniana efetiva

$$\mathcal{H}_{eff} = -\frac{t^2}{|U|} \sum_{\langle ij \rangle} \left[c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + (i \leftrightarrow j) \right] - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \quad (2.14)$$

onde $(i \leftrightarrow j)$ substitui os índices da expressão precedente. Podemos mudar esta hamiltoniana para uma representação de spins através das definições

$$S_i^z = \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1), \quad (2.15)$$

$$S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} = S_i^x + iS_i^y, \quad S_i^- \equiv (S_i^+)^\dagger, \quad (2.16)$$

e

$$\sigma_i = \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}). \quad (2.17)$$

Usando estas relações em (2.14), e sabendo que σ é zero em estados de ocupação dupla, obtemos

$$\mathcal{H}_{eff} = J \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_i^z S_j^z - \mathbf{S}_i^\parallel \cdot \mathbf{S}_j^\parallel \right) - h \sum_i S_i^z, \quad (2.18)$$

onde $J = 4t^2/|U|$, $h = 2\mu$ e $\mathbf{S}_i^{\parallel} \equiv (S_i^x, S_i^y)$. Esta última é uma hamiltoniana de Heisenberg com as componentes S^z se acoplando antiferromagneticamente e as componentes planares \mathbf{S}^{\parallel} se acoplando ferromagneticamente.

Utilizando novamente as transformações (2.6) e (2.7), mas agora na hamiltoniana (2.14), obtemos

$$\mathcal{H}_{eff} = J \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_i^z S_j^z + \mathbf{S}_i^{\parallel} \cdot \mathbf{S}_j^{\parallel} \right) - h \sum_i S_i^z, \quad (2.19)$$

ou

$$\mathcal{H}_{eff} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i S_i^z \quad (2.20)$$

que é o modelo de Heisenberg antiferromagnético na presença de um campo externo $h = 2\mu$.

Quando $h = 0$, estaremos na banda semi cheia ($\mu = 0$), e o parâmetro de ordem de nosso modelo terá três componentes. Como o modelo de Heisenberg tem simetria contínua, ele está sujeito ao teorema de Mermin-Wagner [10], que proíbe ordem de longo alcance a $T \neq 0$ para sistemas de simetria contínua em $d \leq 2$. Neste regime o modelo de Hubbard atrativo também apresenta três componentes no parâmetro de ordem, uma correspondente à CDW e duas ao acoplamento de pares, que faz com que $T_c = 0$ em $d = 2$, pelo teorema de Mermin-Wagner. Fora da banda semi-cheia temos $h \neq 0$, o que tende a destruir o acoplamento antiferromagnético nas componentes zz , acarretando em uma transição de fase de Kosterlitz-Thouless a temperatura finita. Neste regime, para o modelo de Hubbard atrativo, a CDW é suprimida restando apenas o parâmetro de ordem de duas componentes associado ao acoplamento de pares. Este fato foi confirmado por simulações de Monte Carlo Quântico [6, 23]. O gráfico da Fig. 2.1 deixa evidente a degenerescência das correlações entre pares (P_s) e das CDW, dadas pelo fator de estrutura $C(\pi, \pi)$ em (2.4), na banda semi-cheia $\langle n \rangle = 1$ [6]. Vemos pelo gráfico que $P_s = C(\pi, \pi)$ na banda semi-cheia, acarretando em um parâmetro de ordem de três componentes. No entanto, à medida em que nos afastamos de $\langle n \rangle = 1$, $C(\pi, \pi)$ vai sendo suprimido ao passo em que P_s tem um valor finito a temperaturas suficientemente baixas. É interessante notar que P_s tem um pico em $\langle n \rangle = 0.875$.

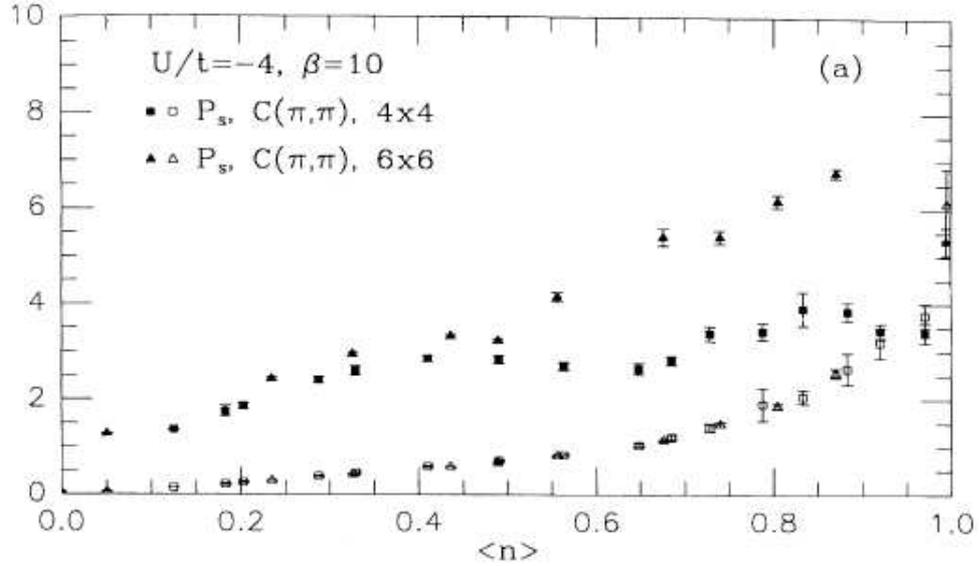


Figura 2.1: P_s e $C(\pi, \pi)$ versus $\langle n \rangle$ para redes 4×4 e 6×6 , $U = -4$, $t=1$ e $\beta = 10$ [6].

O fato de as CDW serem suprimidas significa que elas não apresentarão ordem de longo alcance. O gráfico da Fig. 2.2 mostra a dependência de P_s e $C(\pi, \pi)$ com o inverso da temperatura $\beta = 1/k_B T$, com $\langle n \rangle = 0.87$ para redes 4×4 , 6×6 e 8×8 com $|U|/t = 4$ [6]. Vemos que P_s cresce a baixas temperaturas, saturando em um valor que cresce com o tamanho da rede. Por outro lado, $C(\pi, \pi)$ não apresenta dependência com o tamanho da rede; conseqüentemente, não apresenta ordem de longo alcance.

Podemos então associar o modelo de Hubbard atrativo fora da banda semi-cheia ao modelo XY, que pertence à classe de universalidade da transição de Kosterlitz-Thouless (KT) [5]. A transição KT prevê que correlações entre os spins, no regime $0 < T \leq T_c$, decaem algebricamente, i.e.,

$$\langle \sigma(\mathbf{r}) \cdot \sigma(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle \sim R^{-\eta(T)} \quad (2.21)$$

onde $\sigma(\mathbf{r})$ tem duas componentes. As correlações entre pares no modelo de Hubbard caem com a mesma lei de potência,

$$\Gamma(\mathbf{r}) \equiv \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + H.c. \rangle \sim r^{-\eta(T)} \quad (2.22)$$

onde $r \equiv |i - j|$ e o expoente $\eta(T)$ varia monotonicamente entre $\eta(0) = 0$ e $\eta(T_c) = 1/4$ [4].

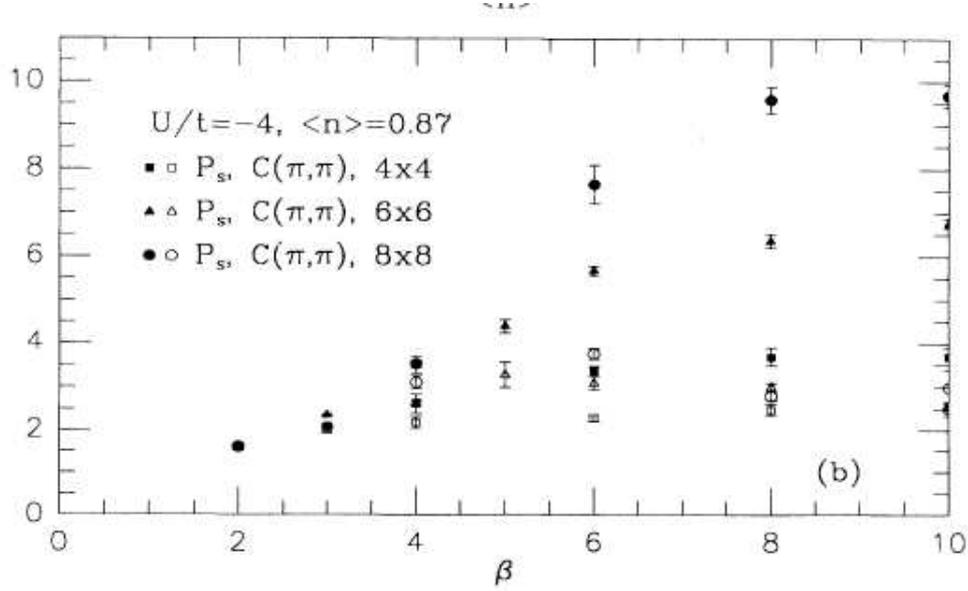


Figura 2.2: P_s e $C(\pi, \pi)$ versus β para redes 4×4 , 6×6 e 8×8 , $U = -4$, $t=1$ e $\langle n \rangle = 0.87$ [6].

Acima da transição, i.e., para temperaturas próximas a T_c , por valores maiores, a função de correlação decai exponencialmente,

$$\Gamma(\mathbf{r}) \sim e^{-r/\xi(T)}, \quad (2.23)$$

onde $\xi(T)$ é o comprimento de correlação, o qual possui uma dependência exponencial com o inverso da distância ao ponto crítico

$$\xi(T) \sim \exp \left[\frac{A}{(T - T_c)^{1/2}} \right] \quad (2.24)$$

onde A é uma constante.

Estes argumentos de universalidade da transição KT nos permitem prever aspectos gerais do comportamento de grandezas de interesse no ponto crítico. Fazendo uma análise de *finite-size scaling* obtemos a dependência escalonada de P_s com o tamanho linear da rede.

Para o estado fundamental ($T = 0$), Huse [25], analisando a magnetização do modelo de Heisenberg antiferromagnético, mostrou que as correlações entre spins decaem

com a seguinte relação:

$$|\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle| - (m^\dagger)^2 \sim \frac{1}{r}, \quad (2.25)$$

onde m^\dagger é a magnetização por spin e r é a separação entre eles, que deve ser grande no limite termodinâmico. Integrando esta última no espaço bidimensional, obtemos

$$S(\pi, \pi) - N_s (m^\dagger)^2 \sim \sqrt{N_s} \quad (2.26)$$

onde N_s é o número total de sítios com $N_s = L^2$ para uma rede bidimensional. Dividindo ambos os lados por L^2 obtemos

$$\frac{S(\pi, \pi)}{L^2} \sim (m^\dagger)^2 + \frac{1}{L}. \quad (2.27)$$

Utilizando a identificação (2.13), obtemos a dependência de P_s com o tamanho linear de rede como sendo

$$\frac{P_s}{L^2} = |\Delta_0|^2 + \frac{a}{L} \quad (2.28)$$

onde Δ_0 é o gap supercondutor à temperatura zero e $a = a(U, f)$ é uma constante que não depende de L . Com esta expressão é possível fazer extrapolações para o limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$, ou seja, $a/L \rightarrow 0$, depois de calculado o valor de P_s para vários tamanhos de rede, obtendo uma estimativa de $|\Delta_0|^2$ no estado fundamental. Podemos ver este processo de extrapolação na prática na Fig. 2.3, onde os dados foram obtidos através de simulações de Monte Carlo Quântico [23]. No gráfico é exibido P_s/N e $C(\pi, \pi)/N$ versus $N^{-1/2}$, onde $N = L^2$ é o número total de sítios, para $\langle n \rangle = 1$ e $\langle n \rangle = 0.5$. Vemos que a extrapolação é feita para $N^{-1/2} \rightarrow 0$. É importante notar a confirmação da degenerescência, $P_s = C(\pi, \pi)$, na banda semi-cheia. Já para $\langle n \rangle = 0.5$, $C(\pi, \pi)$ extrapola para um valor nulo neste preenchimento de banda.

Podemos também estudar o comportamento do sistema a temperaturas finitas. Para isso integramos $r^{-\eta}$ em um sistema bidimensional de tamanho linear L ,

$$P_s \sim \int_0^L r^{-\eta} d^2 r \sim L^{2-\eta}. \quad (2.29)$$

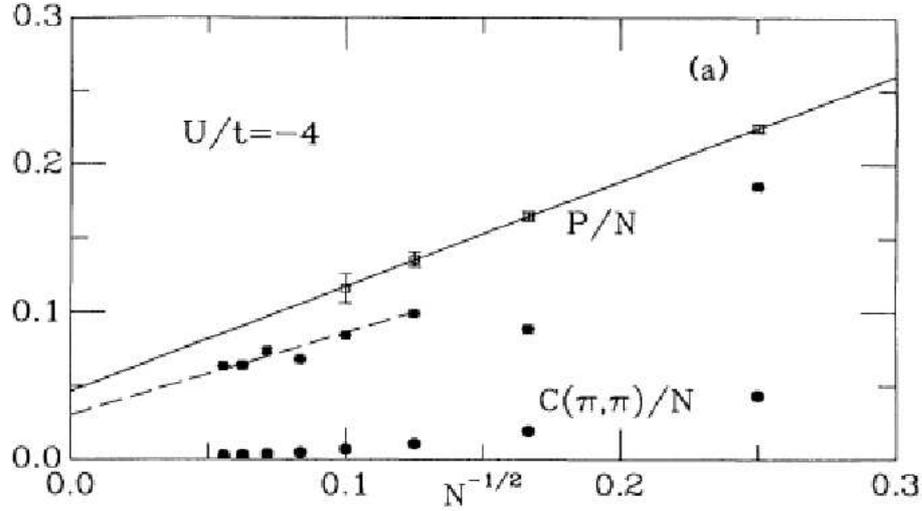


Figura 2.3: Extrapolações para P_s e $C(\pi, \pi)$ na banda semi-cheia (\square) e em $\langle n \rangle = 0.5$ (P_s (\blacksquare) e $C(\pi, \pi)$ (\bullet)) [23].

Aqui a variável de interesse é a razão entre o comprimento linear L e o comprimento de correlação ξ ; portanto, devemos esperar que

$$P_s(T, L) = L^{2-\eta} f(L/\xi). \quad (2.30)$$

Ao exibirmos L/ξ em termos de T^{-1} para uma transição KT, esperamos que as curvas se superponham no ponto crítico e acima dele, diferentemente do que acontece em uma transição normal, onde as curvas apenas se cruzam em T_c . A comparação entre estes dois casos é facilmente vista na Fig. 2.4.

Da mesma forma, se exibirmos $L^{\eta-2} P_s(T_c, L)$ versus $\beta = (k_B T)^{-1}$ esperamos que as curvas se superponham a partir do ponto crítico, fornecendo uma estimativa de β_c e conseqüentemente de T_c , com $\eta = 1/4$ para $T \rightarrow T_c^+$. Na prática temos então que analisar $L^{-7/4} P_s(T_c, L)$ versus β para determinar T_c , e é isso que será usado nesta dissertação para este fim.

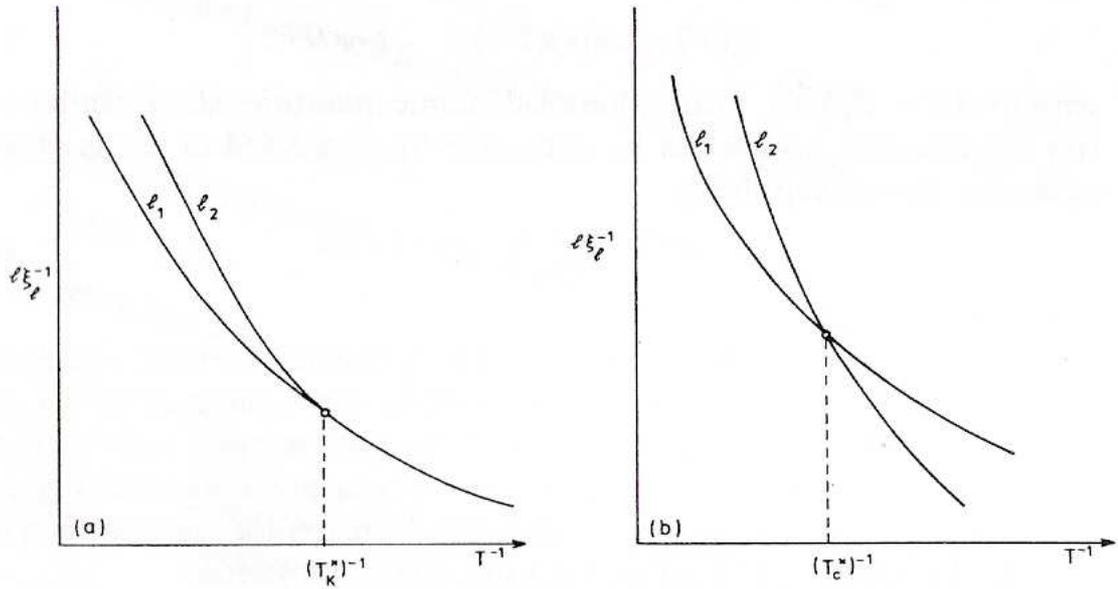


Figura 2.4: Comparativo entre uma Transição de Kosterlitz-Thouless representada pelo gráfico (a) e uma transição normal representada pelo gráfico (b) [32].

Todos os resultados até aqui mostrados relacionados a T_c , U e $\langle n \rangle$ para o modelo de Hubbard homogêneo, i.e., sem desordem, em duas dimensões, podem ser resumidos no diagrama de fases da Fig. 2.5. Na banda semi-cheia temos $T_c = 0$ e a transição supercondutora se dá a uma temperatura finita fora da banda semi-cheia; vê-se também que T_c apresenta um máximo perto de $\langle n \rangle = 0.87$ [6, 9]. A transição KT para o parâmetro supercondutor de duas componentes é representada pelas fatias no gráfico. A curva pontilhada representa T_c indo com $\sim \exp(-8t/|U|)$ para acoplamentos fracos e a curva tracejada, decaindo com $t^2/|U|$ dividido por $4t$, descreve o regime de acoplamento forte; ambas são para a banda semi-cheia ($\langle n \rangle = 1$).

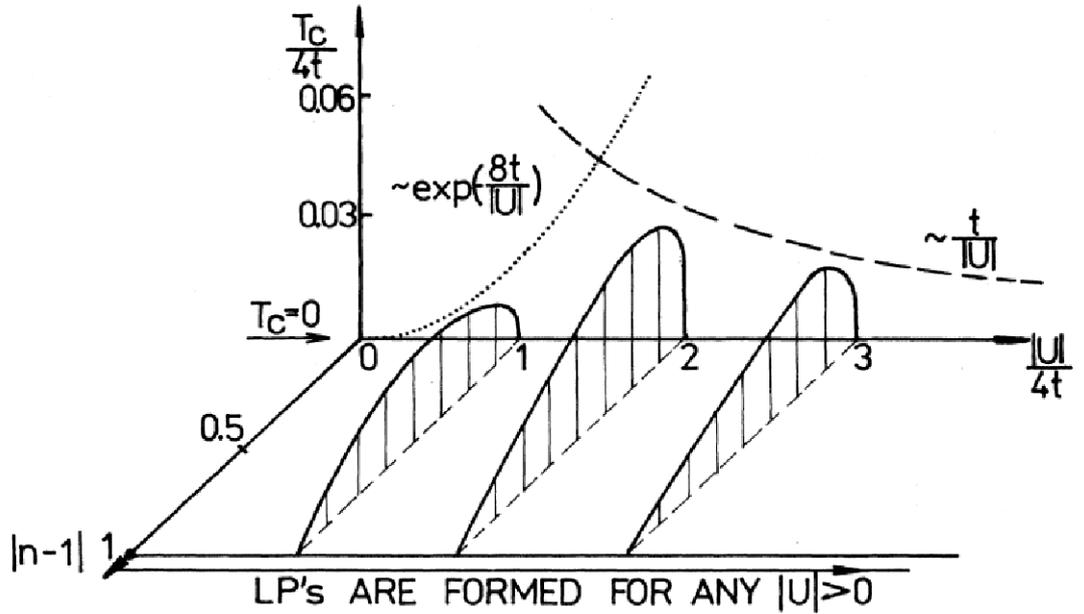


Figura 2.5: Diagrama de fases do modelo de Hubbard atrativo em $d = 2$ [22].

2.2 Modelo de Hubbard Atrativo Desordenado

As propriedades do modelo de Hubbard atrativo discutidas na última seção correspondem ao caso puro, ou seja, sem desordem. Podemos, no entanto, usar este modelo para simular o efeito de impurezas no estado supercondutor. Como comentado no capítulo 1, ao depositarmos Molibdênio em um substrato de Germânio, acabamos por formar pequenas ilhas que estão fracamente acopladas para uma pequena deposição, não favorecendo o surgimento de um estado supercondutor. Um modelo teórico adequado neste contexto pode ser obtido através de uma rede bidimensional onde os sítios estão dispostos de uma forma regular e a interação atrativa pode assumir dois valores, ou seja, o modelo de Hubbard é implementado atribuindo-se a cada sítio os valores $U(\mathbf{r}) = 0$ ou $U(\mathbf{r}) = -|U|$, com probabilidades de ocorrência f e $1 - f$, respectiva-

mente. Portanto, a Hamiltoniana para o modelo toma a seguinte forma:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) - \sum_i |U_i| n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (2.31)$$

com

$$U_i = \begin{cases} 0 & \text{com probabilidade } f \\ U & \text{com probabilidade } 1-f. \end{cases}$$

A implementação da desordem $U(\mathbf{r}) = 0$ é feita de forma aleatória em fL^2 sítios de uma rede bidimensional, onde f é a fração de desordem do sistema e L é o tamanho linear da rede. Uma representação esquemática desta implementação pode ser vista na figura abaixo.

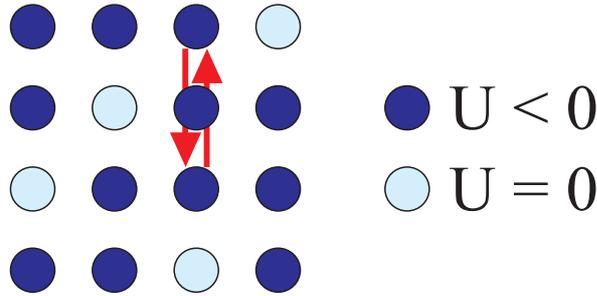


Figura 2.6: Representação esquemática da implementação da desordem em uma rede bidimensional.

Este modelo desordenado na banda semi-cheia foi estudado através de técnicas de campo médio [12], onde, no mesmo trabalho, foram também apresentados argumentos heurísticos para a determinação da fração crítica f_c , acima da qual o sistema perde suas características supercondutoras. Considerando que a distância entre dois sítios de U negativo seja $(1-f)^{-1/d}$, podemos estimar o número l de saltos individuais de um sítio com U negativo para outro em um passeio aleatório como $(1-f)^{-1/d} = l^{1/(d-1)}$. Se cada salto leva \hbar/W segundos onde W é a largura da banda para os pares, o tempo para os pares irem de um sítio com U negativo para outro é $\tau = (\hbar/W)(1-f)$. Os pares só irão se propagar para intervalos de energia δt obedecendo a relação de incerteza $\delta E = \hbar/\delta t > U$. Pegando $\delta t = \tau$ concluímos que para $\delta E = W(1-f)^{(d-1)/d} > U$ os pares se propagarão e para $\delta E = W(1-f)^{(d-1)/d} < U$ os pares não se propagarão. Isto

determina a fração crítica como

$$f_c = 1 - \left(\frac{U}{W} \right)^{d/(d-1)}, \quad (2.32)$$

que fica, para o caso bidimensional

$$f_c = 1 - \left(\frac{U}{W} \right)^2. \quad (2.33)$$

Logo, de acordo com esta última, à medida que o valor de U aumenta, f_c diminui. Os cálculos de campo médio confirmaram esta tendência [12], como pode ser visto no gráfico da Fig. 2.7, onde podemos analisar a dependência de $c_c = 1 - f_c$, a qual representa a fração crítica dos sítios de U negativo, com vários valores de U . No entanto,

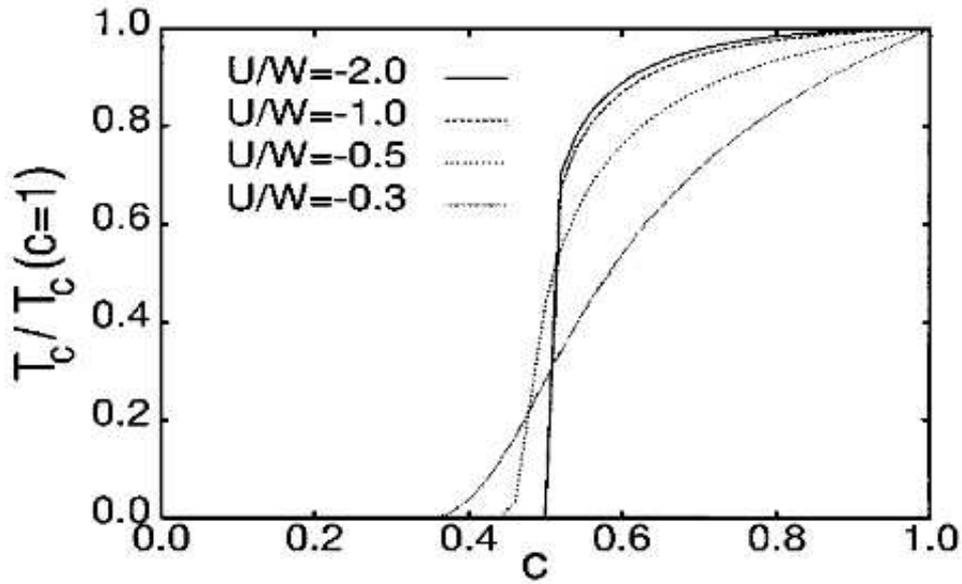


Figura 2.7: Temperatura crítica como função da fração crítica c para vários valores de U em cálculos de campo médio [12].

simulações de Monte Carlo Quântico na banda semi-cheia mostraram um aumento de f_c à medida que o valor de U aumenta [8], pelo menos para valores até $U < 6$, como mostrado na Fig. 2.8.

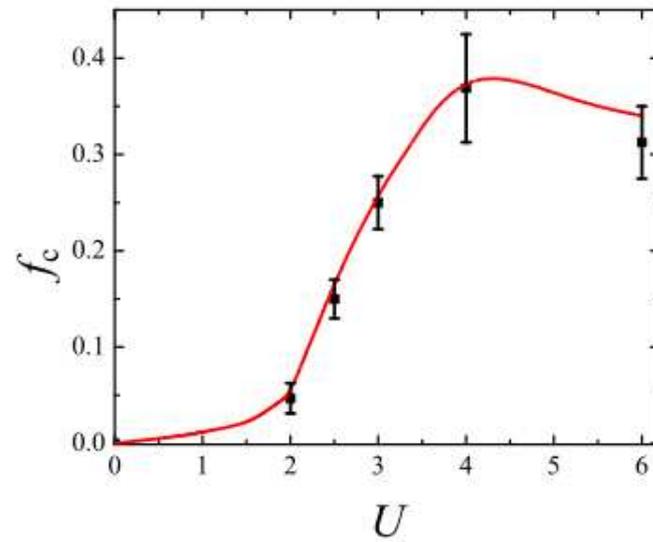


Figura 2.8: f_c como função de U , obtido através de Monte Carlo Quântico [8].

Esta discordância entre estes dois resultados é causada pelo fato de que, em teorias de campo médio, as flutuações em torno da média das grandezas termodinâmicas são negligenciadas, o que nos leva a considerar uma teoria de campo médio apenas como uma primeira aproximação, especialmente em duas dimensões, onde devemos ser extremamente cautelosos com relação aos resultados obtidos.

3

Método de Monte Carlo Quântico

Apesar de sua aparência simples, o modelo de Hubbard só tem solução exata em uma dimensão [26]. Muitas técnicas são utilizadas para a elucidação das propriedades termodinâmicas do modelo em duas e três dimensões, tais como aproximações de campo médio [27], método de funções de Green [18] e soluções numéricas via Monte Carlo Quântico (MCQ) [28, 29], com este último sendo o método empregado nesta dissertação.

O MCQ, assim como o método de Monte Carlo Clássico baseado no algoritmo de Metropolis [30], se firma na idéia de *amostragem por importância* de configurações através do cálculo de pesos de Boltzmann correspondentes, usados para a aceitação, ou não, de certa configuração do sistema. A diferença é que no MCQ trabalhamos com partículas quânticas indistinguíveis, ao passo que em sua outra versão os spins são tratados como entes clássicos. Para levar em conta os aspectos quânticos adequadamente, veremos que a simulação fica bem mais elaborada e custosa numericamente.

Apresentaremos o método nas próximas seções, baseando-nos na Ref [31].

3.1 Monte Carlo Quântico: Preliminares

Em linhas gerais, o método aqui apresentado é válido para os casos repulsivo e atrativo da Hamiltoniana de Hubbard. A função de partição gran-canônica é definida como

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (3.1)$$

onde o $\mathcal{T}r$ é tomado sobre todos os números de partículas e sobre os graus de liberdade fermiônicos, e \mathcal{H} é a Hamiltoniana. Efeitos quânticos já se manifestam aqui pelo fato de não podermos escrever a exponencial de uma soma em um produto de exponenciais, ou seja,

$$e^{K+V} \neq e^K e^V \quad (3.2)$$

onde K e V são operadores, definidos como

$$K \equiv -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c. \right) - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (3.3)$$

e

$$V \equiv -U \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (3.4)$$

Isto se deve ao fato de que os termos de *hopping* e de interação não comutam entre si, ou seja, $[K, V] \neq 0$, fazendo com que as partículas percam suas individualidades, estando correlacionadas de uma forma fundamental. Para contornar este problema utilizaremos a fórmula de Suzuki-Trotter,

$$\begin{aligned} e^{K+V} &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} (e^{\Delta\tau K} e^{\Delta\tau V})^{1/\Delta\tau} \\ &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} (e^{\Delta\tau K} e^{\Delta\tau V}) (e^{\Delta\tau K} e^{\Delta\tau V}) \dots (e^{\Delta\tau K} e^{\Delta\tau V}) \end{aligned} \quad (3.5)$$

o que leva à seguinte decomposição

$$e^{\Delta\tau(K+V)} = e^{\Delta\tau K} e^{\Delta\tau V} + O[(\Delta\tau)^2] [K, V] \quad (3.6)$$

onde foi introduzido o parâmetro $\Delta\tau$ para ser possível a decomposição. Podemos definir o parâmetro $\Delta\tau$ através da relação $\beta = M\Delta\tau$, onde M representa o número de fatias ao longo da "direção temporal", com intervalos discretos $\Delta\tau$. Além disso, $\Delta\tau$ nos fornece uma fonte de *erros sistemáticos*, que são minimizados à medida em que aumentamos M . Com isso a exponencial da função de partição pode ser escrita como

$$\begin{aligned} e^{-\beta\mathcal{H}} &= e^{-\beta(K+V)} = e^{-M\Delta\tau(K+V)} = e^{-(\Delta\tau K + \Delta\tau V)^M} \\ &= (e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V})^M + O[(\Delta\tau)^2 U]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Feita esta aproximação deparamo-nos com outro problema: existem termos quárticos na hamiltoniana, que aparecem no termo de interação, $U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$, os quais não são integráveis. Isto se soluciona com o auxílio da transformada de Hubbard-Stratonovich, que transforma a exponencial do quadrado de um operador em uma exponencial do próprio operador,

$$e^{\frac{1}{2}A^2} \equiv \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 - xA} dx. \quad (3.8)$$

ao preço de introduzir um campo auxiliar x que se acopla com o operador A . Queremos transformar o termo $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ com (3.8), mas para isso temos que escrevê-lo em termos de uma forma quadrática. Conseguimos isso através de três formas distintas:

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = -\frac{1}{2}m^2 + \frac{1}{2}n \quad (3.9)$$

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n \quad (3.10)$$

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = -\frac{1}{4}n^2 - \frac{1}{4}m^2 \quad (3.11)$$

onde $m \equiv (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$ é a magnetização local e $n \equiv (n_{\uparrow} + n_{\downarrow})$ é a carga local. Para o caso atrativo usa-se a eq. (3.10), onde o campo auxiliar se acoplará com a carga local. Usando então (3.8) e (3.10), o termo $e^{|U|\Delta\tau n_{\uparrow} n_{\downarrow}}$ fica, para $U < 0$

$$e^{|U|\Delta\tau n_{\uparrow} n_{\downarrow}} = e^{-\frac{1}{2}|U|\Delta\tau n} \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 - xn} \sqrt{|U|\Delta\tau} dx \quad (3.12)$$

onde $A = n\sqrt{|U|\Delta\tau}$. Para simulações é mais conveniente usarmos variáveis discretas para o campo escalar, ao invés de contínuas. Desta forma, usaremos variáveis discretas de Ising, $s = \pm 1$, no lugar do campo x . Com isso a última equação fica, depois de alguns arranjos,

$$e^{|U|\Delta\tau n_{\uparrow} n_{\downarrow}} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} e^{(s\lambda + \frac{|U|\Delta\tau}{2})(n_{\sigma} - \frac{1}{2})} \quad (3.13)$$

onde λ é dado por

$$\cosh \lambda = e^{|U|\Delta\tau/2} \quad (3.14)$$

Para o caso repulsivo usamos (3.9), onde a magnetização se acoplará ao campo de Ising, resultando em

$$e^{-U\Delta\tau n_{\uparrow}n_{\downarrow}} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-(\sigma s\lambda + \frac{|U|\Delta\tau}{2})n_{\sigma}} \quad (3.15)$$

As equações (3.13) e (3.15) apresentam agora uma forma adequada para ser inserida na função de partição, pois aparecerão somente termos bilineares. Depois de alguns cálculos a função de partição toma a forma, para o caso atrativo,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} \cosh(N\lambda/2) [\cosh(\lambda)]^{-N/2} \times \\ &\times \text{Tr}_{\{s\}} \text{Tr} \prod_{l=M}^1 \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-\Delta\tau \sum_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} K_{ij} c_{j\sigma}} e^{-\Delta\tau \sum_i c_{i\sigma}^{\dagger} V_i^{\sigma}(l) c_{i\sigma}} \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde as matrizes do termo de interação e de *hopping* são dadas por

$$V_i^{\sigma}(l) = -\frac{1}{\Delta\tau} \lambda s_i(l) - \left(\mu + \frac{|U|}{2}\right) \quad (3.17)$$

e

$$K_{ij} = \begin{cases} -t & \text{se } i \text{ e } j \text{ forem primeiros vizinhos,} \\ 0 & \text{outros} \end{cases}$$

Com as exponenciais da função de partição sendo expressas agora somente com termos bilineares, podemos efetuar o traço nas variáveis fermiônicas. Através da identidade

$$e^{-\sum_{ij} c_i^{\dagger} A_{ij} c_j} e^{-\sum_{ij} c_i^{\dagger} B_{ij} c_j} = e^{-\sum_{\nu} c_{\nu}^{\dagger} l_{\nu} c_{\nu}} \quad (3.18)$$

o traço nas variáveis fermiônicas vira um determinante

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{-\sum_{\nu} c_{\nu}^{\dagger} l_{\nu} c_{\nu}} &= \text{Tr} \prod_{\nu} e^{-n_{\nu} l_{\nu}} \\ &= \det(1 + e^{-A} e^{-B}) \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde A e B são operadores genéricos. Com isso a função de partição pode ser escrita como

$$\mathcal{Z} = \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} \text{Tr}_{\{s\}} \prod_{\sigma} \det[1 + B_M^{\sigma} B_{M-1}^{\sigma} \dots B_1^{\sigma}] \quad (3.20)$$

onde

$$B_l^\sigma \equiv e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(l)}. \quad (3.21)$$

Introduzindo a notação

$$O^\sigma(\{s\}) \equiv 1 + B_M^\sigma B_{M-1}^\sigma \dots B_1^\sigma \quad (3.22)$$

obtemos, finalmente

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} \text{Tr}_{\{s\}} \det O^\uparrow(\{s\}) \cdot \det O^\downarrow(\{s\}) = \\ &= \text{Tr}_{\{s\}} \rho(\{s\}). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Se a quantidade $\rho(\{s\})$ sob o traço for positiva, ela deve ser usada como o "peso de Boltzmann" para fazer as amostragens por importância nas configurações de Ising. Entretanto, para o modelo de Hubbard repulsivo, fora da banda semi-cheia, esta grandeza pode ser negativa em algumas configurações, levando ao "problema do sinal negativo" [31], o que não ocorre para o nosso caso do modelo de Hubbard atrativo.

Estamos interessados em funções de correlação entre operadores que, levando em conta (3.15) e (3.23), toma a forma

$$\langle AB \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}_{\{s\}} \text{Tr} \left[AB \prod_{l\sigma} e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(l)} \right]. \quad (3.24)$$

Definindo agora uma média fermiônica, ou mais precisamente as *funções de Green*, como

$$\langle AB \rangle_{\{s\}} \equiv \frac{1}{\rho(\{s\})} \text{Tr} \left[AB \prod_{l\sigma} e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(l)} \right] \quad (3.25)$$

a função de correlação (3.24) se torna

$$\langle AB \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}_{\{s\}} \langle AB \rangle_{\{s\}} \rho(\{s\}). \quad (3.26)$$

Portanto a característica principal deste método é que o cálculo de qualquer média pode ser efetuado em termos de funções de Green sob uma certa configuração de spins,

com probabilidade $\rho(\{s\})$ de ocorrência. Em especial, precisaremos da seguinte função de Green instantânea para uma partícula, calculada na fatia l ,

$$\left\langle c_{i\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \right\rangle_{\{s\}} = (1 + B_{l-1}^\sigma B_{l-2}^\sigma \dots B_1^\sigma B_M^\sigma \dots B_l^\sigma)^{-1} = g_l^\sigma; \quad (3.27)$$

seu papel será discutido na próxima seção. Cabe aqui salientar que as grandezas de interesse podem ser calculadas em termos desta função de Green de uma partícula. Isto pode ser feito para P_s com o auxílio do Teorema de Wick,

$$\left\langle c_{i_1}^\dagger c_{i_2} c_{i_3}^\dagger c_{i_4} \right\rangle_{\{s\}} = \left\langle c_{i_1}^\dagger c_{i_2} \right\rangle_{\{s\}} \left\langle c_{i_3}^\dagger c_{i_4} \right\rangle_{\{s\}} + \left\langle c_{i_1}^\dagger c_{i_4} \right\rangle_{\{s\}} \left\langle c_{i_2} c_{i_3}^\dagger \right\rangle_{\{s\}}, \quad (3.28)$$

o que nos permite escrever funções de Green de duas partículas em termos das de uma partícula.

3.2 A Simulação

A simulação se inicia fixando-se uma configuração aleatória de spins $\{s\}$. O "andarilho" começa a varrer a primeira fatia temporal l e tenta inverter cada um dos spins em cada sítio da rede. A equação (3.27) é usada para calcular a função de Green na primeira fatia ($l = 1$). Se um spin é invertido no sítio i de uma fatia genérica l ($s_i(l) \rightarrow -s_i(l)$), as matrizes B_l^\uparrow e B_l^\downarrow mudam devido aos elementos de matriz $V^\uparrow(l)$ e $V^\downarrow(l)$ mudarem. Definindo

$$A^\sigma(l) \equiv (B_{l-1}^\sigma B_{l-2}^\sigma \dots B_1^\sigma B_M^\sigma \dots B_l^\sigma) \quad (3.29)$$

então a mudança acarretará em

$$A^\sigma(l) \rightarrow (A^\sigma(l))' = [1 + \Delta^\sigma(\mathbf{i}, l)] \cdot A^\sigma(l) \quad (3.30)$$

com

$$[\Delta^\pm(\mathbf{i}, l)]_{jk} = \delta_{ij} \delta_{ki} (e^{\pm 2\Delta\tau\lambda s_i(l)} - 1). \quad (3.31)$$

Isso também mudará a matriz $O^\sigma(\{s\})$, já que ela depende de $A^\sigma(l)$. Este procedimento consiste em um passo de Monte Carlo, que é aceito com uma probabilidade dada por

$$W \equiv \frac{R_\uparrow R_\downarrow}{1 + R_\uparrow R_\downarrow} \quad (3.32)$$

com

$$R_{\uparrow} = \frac{(\det O^{\uparrow})'}{\det O^{\uparrow}} \quad \text{e} \quad R_{\downarrow} = \frac{(\det O^{\downarrow})'}{\det O^{\downarrow}} \quad (3.33)$$

onde usamos a função de Green calculada na fatia l (eq. 3.27) para escrever R_{σ} em termos dela:

$$R_{\sigma} = 1 + [1 - [g_l^{\sigma}]_{ii}] [\Delta^{\sigma}(\mathbf{i}, l)]_{ii}. \quad (3.34)$$

Se o passo for aceito é necessário atualizar a função de Green da fatia l através da relação

$$g_l^{\sigma} \rightarrow \bar{g}_l^{\sigma} = [1 + (1 - g_l^{\sigma}) (\Delta_l^{\sigma}(\mathbf{i}) - 1)]^{-1} g_l^{\sigma} \quad (3.35)$$

onde percebemos o caráter não-local da simulação, já que, a partir de agora, a função de Green que será usada para os próximos sítios será a (3.35). Este procedimento é feito para todos os N_s sítios da rede até que passamos para a próxima fatia $l + 1$, onde a função de Green passa a ser dada por

$$g_{l+1}^{\sigma} = B_l^{\sigma} g_l^{\sigma} (B_l^{\sigma})^{-1} \quad (3.36)$$

onde os processos de virada dos spins e de atualização das funções de Green seguem a mesma lógica discutida anteriormente.

4

Resultados

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos através de simulações de Monte Carlo Quântico para a análise do estado supercondutor no modelo de Hubbard atrativo desordenado, tanto no estado fundamental quanto a temperaturas finitas.

Como foi discutido no capítulo 2, a desordem no modelo é implementada de forma aleatória em fL^2 sítios da rede, onde f é a fração de desordem em um sistema bidimensional $L \times L$, a qual é definida como

$$f = \frac{N_{U_0}}{N_s} \quad (4.1)$$

onde N_{U_0} é o número de sítios com $U = 0$ e $N_s = L^2$ é o número total de sítios. Os cálculos foram feitos para tamanhos de rede 8×8 , 10×10 , 12×12 e, para alguns casos, 14×14 .

Conforme apresentado no capítulo 3, o inverso da temperatura β é discretizado em M fatias de tempo imaginário $\Delta\tau$. No caso do modelo de Hubbard atrativo podemos fazer simulações a temperaturas muito baixas (β grande) pois não há problema do sinal negativo [31]. No entanto, à medida que se aumenta β , o número de fatias aumenta e o tempo computacional para as simulações também aumenta.

A fim de obter informações quantitativas relacionadas ao estado supercondutor no modelo, calcularemos o fator de estrutura de pares locais P_s discutido no capítulo 2, em função de β , mas agora efetuamos uma média sobre as configurações de desordem,

$$P_s = \left[\sum_r \Gamma(r) \right], \quad (4.2)$$

onde $\Gamma(r) \equiv \langle \Delta(i)\Delta^\dagger(i+r) + H.c. \rangle$ com $\Delta(r) = c_{r\downarrow}c_{r\uparrow}$, e [...] denota a média configu-

racional. A fim de obter uma boa estimativa para esta grandeza, foram feitas em média 20 realizações de desordem para cada valor de β em um tamanho de rede fixo, cada realização com 4000 passos de Monte Carlo Quântico. Existem duas fontes de erro no cálculo desta grandeza: uma de erros sistemáticos da ordem de $\Delta\tau^2$, que advêm do método de MCQ, e a outra provem do desvio padrão de cada espaço amostral, que aparece como consequência de flutuações entre as várias realizações, e é esta última que será usada como a medida das incertezas em nossos cálculos de P_s , uma vez que ela é maior do que o erro sistemático vindo de $\Delta\tau^2$.

Vale ressaltar também que, para alguns casos, N_{U_0} não é um inteiro; nestes casos, as realizações de desordem são feitas para os dois números inteiros mais próximos de N_{U_0} , onde as médias são efetuadas com seus respectivos pesos. Por exemplo, para a fração de desordem $f = 1/16$ em uma rede $L = 10$, temos que $N_{U_0} = 6.25$; consideramos então os dois valores adjacentes mais próximos, no caso $N_{U_0} = 6$ e $N_{U_0} = 7$, e mantemos a proporção de três realizações para $N_{U_0} = 6$ para cada realização de $N_{U_0} = 7$, e esta proporção deverá sempre ser mantida ao aumentarmos o número de realizações.

Todos os cálculos foram feitos para o preenchimento de banda $\langle n \rangle = 0.875$ e para $U = 6$. O preenchimento de banda é fixado ajustando-se o valor do potencial químico μ , até se conseguir, em média, o valor 0.875, pois a densidade também sofre flutuações nas diferentes realizações de desordem. Este valor do preenchimento de banda foi escolhido por haver indícios de que este apresenta um máximo no valor da temperatura crítica supercondutora [6, 9].

Nas próximas seções serão analisados resultados para o estado fundamental ($T = 0$) e para temperaturas finitas, onde nesta última usamos o comportamento escalonado de P_s para a transição de Kosterlitz-Thouless como discutido no cap. 2.

4.1 Propriedades do estado fundamental ($T = 0$)

A fim de entender o efeito das impurezas no modelo de Hubbard atrativo, calculamos o fator de estrutura P_s como função do inverso da temperatura β para vários tamanhos de rede e diferentes frações de desordem, como mostra a Fig. 4.1, lembrando que os

cálculos foram efetuados para um preenchimento de banda $\langle n \rangle = 0.875$ e que as barras de erro provêm do desvio padrão sobre as realizações de desordem. Notamos que P_s

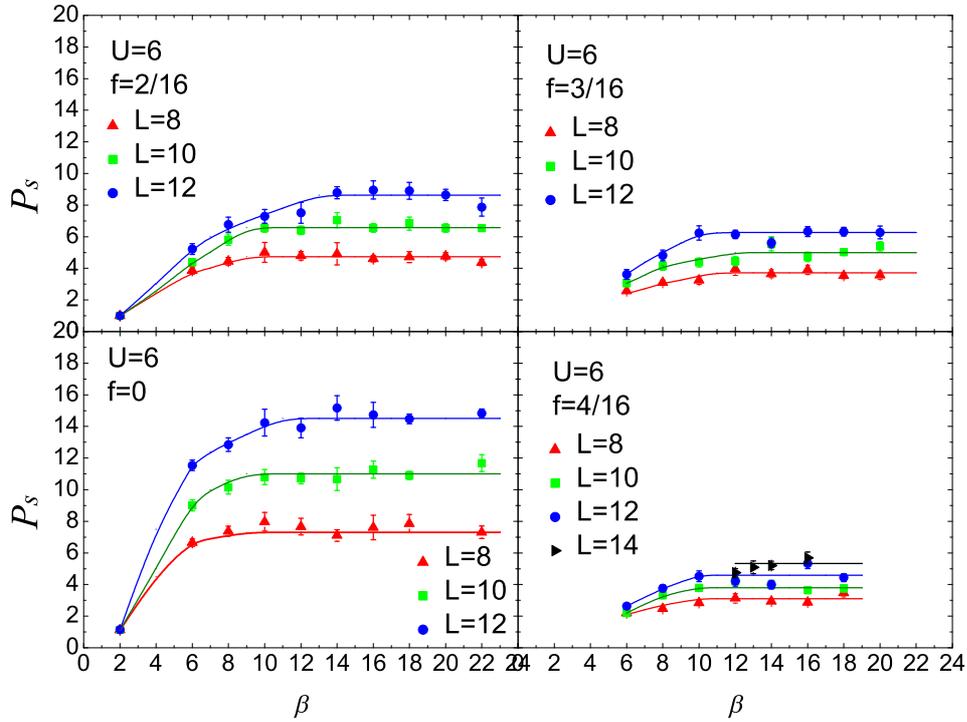


Figura 4.1: P_s em função de β .

tende a se estabilizar para valores altos de β (baixas temperaturas) pois, neste regime, o alcance das correlações é limitado pelo tamanho finito da rede, e P_s tende a um valor de saturação que não mais depende da temperatura, nos permitindo fazer uma média desta grandeza no regime assintótico onde ela se estabiliza.

O primeiro gráfico representa o caso puro (sem desordem) onde $N_{U_0} = 0$; já no segundo temos um oitavo dos sítios da rede com $U = 0$. É visto no gráfico que, à medida em que vamos aumentando a desordem, o valor de P_s se estabiliza em valores cada vez menores, confirmando a tendência geral de supressão do estado supercondutor pela desordem como discutido no capítulo 1.

De posse do valor médio de P_s , podemos usar a correção de onda de spin para o

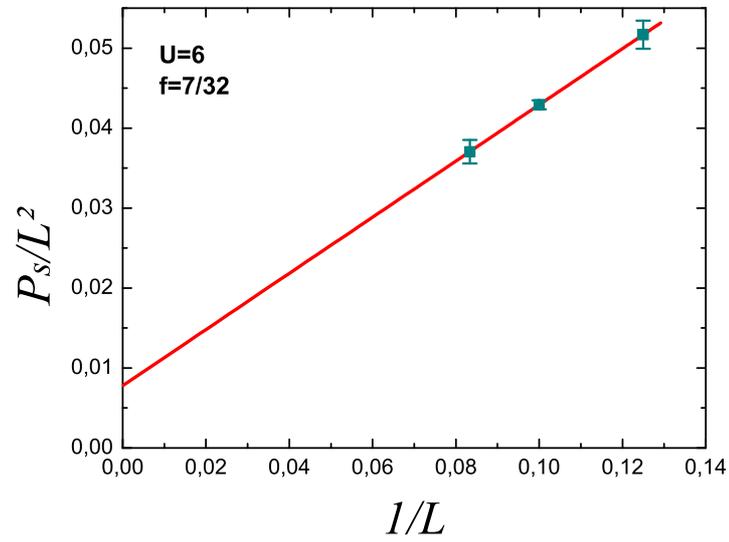
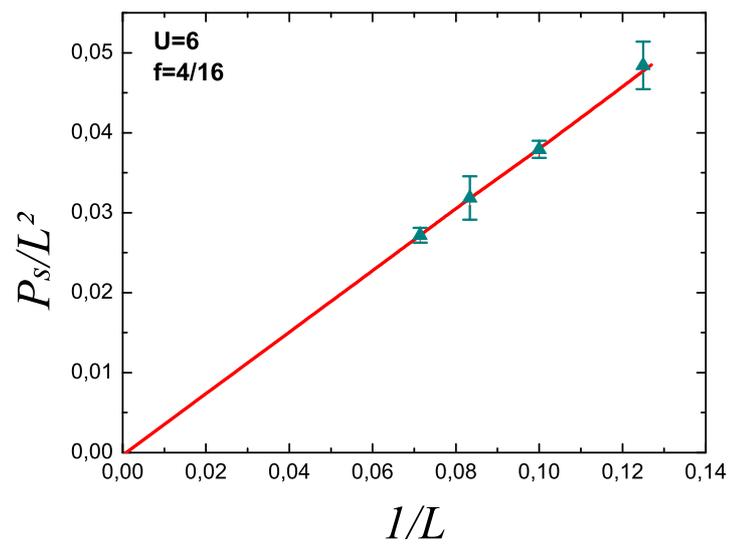
fator de estrutura de pares dada pela relação de Huse [25],

$$\frac{P_s}{L^2} = |\Delta|^2 + \frac{a}{L} \quad (4.3)$$

onde L é o tamanho linear da rede, $|\Delta|$ é o gap supercondutor a temperatura zero e a uma constante, para tirar informações sobre a transição supercondutora. No nosso caso temos dois gaps a temperatura zero diferentes: o gap do caso puro, que denotaremos por Δ_0 , e o gap para os casos desordenados, que denotaremos por Δ . Fazendo um gráfico de P_s/L^2 versus $1/L$, e extrapolando nossos resultados para redes infinitas, ou seja, fazendo $L \rightarrow \infty$ (limite termodinâmico), obtemos uma estimativa para o valor de $|\Delta_0|^2$ (gap supercondutor ao quadrado) para o caso puro, ou $|\Delta|^2$, para os casos desordenados, na interseção da extrapolação com o eixo das ordenadas. As Figs. 4.2 e 4.3 mostram as extrapolações para algumas frações de desordem utilizando redes de tamanho 8×8 , 10×10 , 12×12 e, para alguns casos, 14×14 . Na Fig. 4.2 podemos ver, pela reta do ajuste, que $|\Delta|^2 \neq 0$ para a fração $f = 7/32$. Já na Fig. 4.3, para a fração $f = 4/16$, vemos que $|\Delta|^2 \simeq 0$. A Fig. 4.4 nos dá uma visão geral das extrapolações para todos os casos de desordem, onde podemos ver que o valor de $|\Delta|^2$ se tornará cada vez menor, à medida que f aumenta.

De posse do valor do gap Δ para cada valor de desordem podemos analisar a tendência do gap normalizado pelo caso puro, Δ/Δ_0 , com a desordem, como mostra a Fig. 4.5. O valor em que a curva intercepta o eixo horizontal, nos fornece uma estimativa para a fração crítica de desordem, acima da qual o estado supercondutor é totalmente inibido. No nosso caso estimamos a fração crítica como $f_c \approx 0.24 \pm 0.01$. Este valor é obtido passando-se uma curva suave pelo limite superior da curva no gráfico, que acaba no ponto $f = 0.25$, e outra pelo limite inferior das barras de erro. O valor 0.24 é o valor médio da distância entre os dois pontos onde morrem as duas curvas no eixo x.

Ao contrário do que acontece na banda semi-cheia [8], inicialmente uma pequena fração de desordem não favorece o estado supercondutor. Isto se deve ao fato de que, na banda semi-cheia, a degenerescência da supercondutividade com a onda de densidade de carga é quebrada na presença de desordem, favorecendo o estado supercondutor

Figura 4.2: Extrapolação de P_s com $1/L$ para a fração de desordem $f = 7/32$.Figura 4.3: Extrapolação de P_s com $1/L$ para a fração de desordem $f = 4/16$.

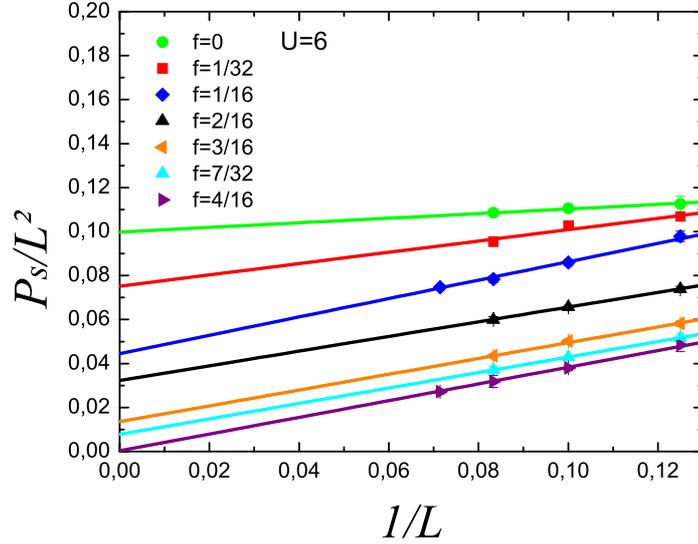


Figura 4.4: Extrapolações para todos os casos de desordem considerados aqui.

para pequenos f . Como fora da banda semi-cheia a CDW é naturalmente suprimida, qualquer fração inicial de desordem já é suficiente para começar a destruir o estado supercondutor, não ocorrendo, assim, nenhum máximo em Δ/Δ_0 . Um gráfico comparativo entre estes dois casos pode ser visto na Fig. 4.6.

Podemos analisar o comportamento de f_c com relação a U (Fig. 4.7) utilizando o resultado obtido na Ref. [7] para a fração crítica no caso $\langle n \rangle = 0.875$ e $U = 4$. É razoável supor, já que só temos informações para dois pontos, que o gráfico seguirá uma tendência semelhante a que acontece para o caso da banda semi-cheia [8], onde, para pequenos valores de U ($U \lesssim 2$), f_c cresce de forma mais lenta devido ao fato de os pares não estarem muito fortemente ligados e uma pequena desordem já destrói a coerência. De $U \approx 2$ até $U \approx 4$, f_c cresce mais rapidamente, sofrendo um decréscimo para $U \gtrsim 4$. Portanto, os cálculos de campo médio para o modelo de Hubbard atrativo desordenado [12], onde é previsto um decréscimo de f_c com o aumento de U , só estão corretos neste limite de U grande. É importante perceber também que, ao menos para $U = 4$ e $U = 6$, à medida que se diminui o preenchimento da banda, o valor da

desordem crítica também diminui.

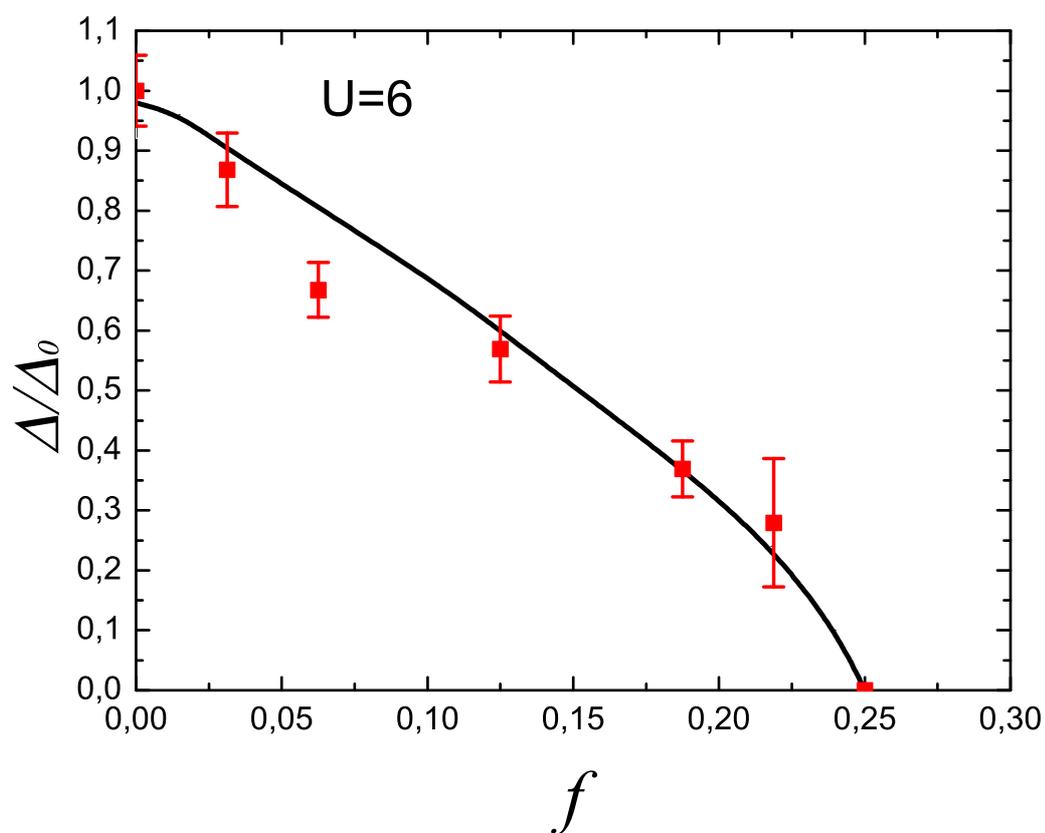


Figura 4.5: Gap normalizado supercondutor em função de f . A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.

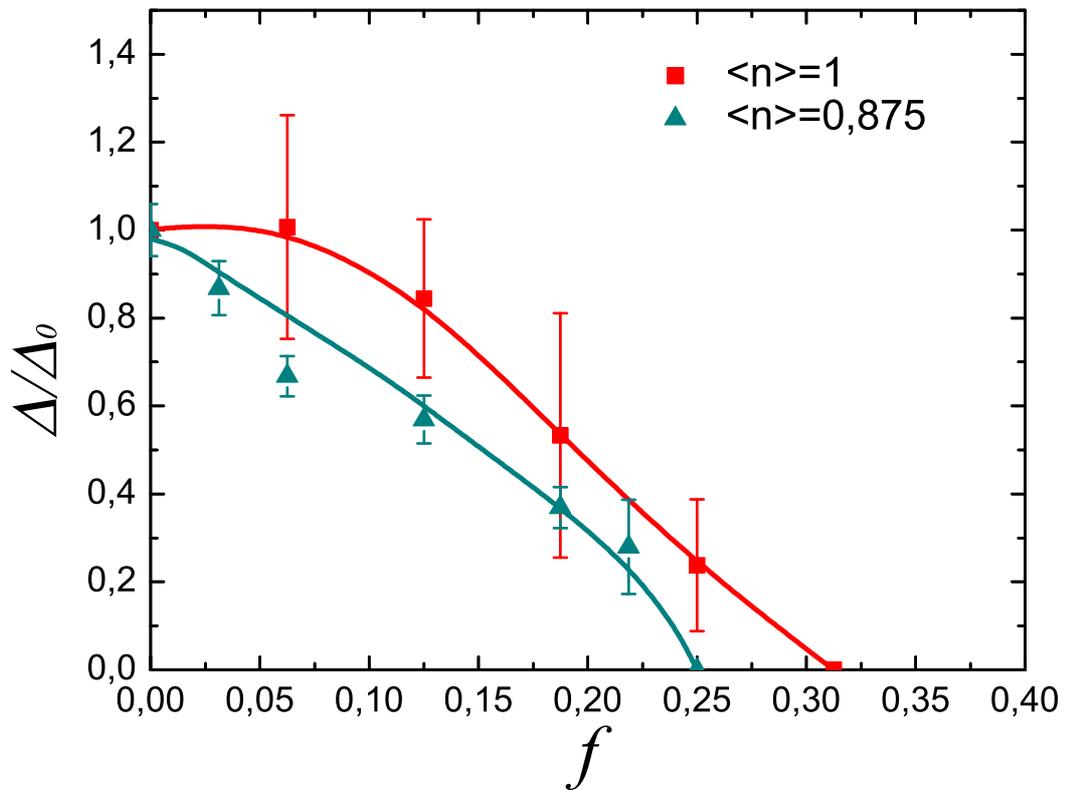


Figura 4.6: Gap supercondutor normalizado em função de f para $\langle n \rangle = 1$ e $\langle n \rangle = 0.875$, onde a curva para $\langle n \rangle = 1$ foi extraído da Ref. [8]. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.

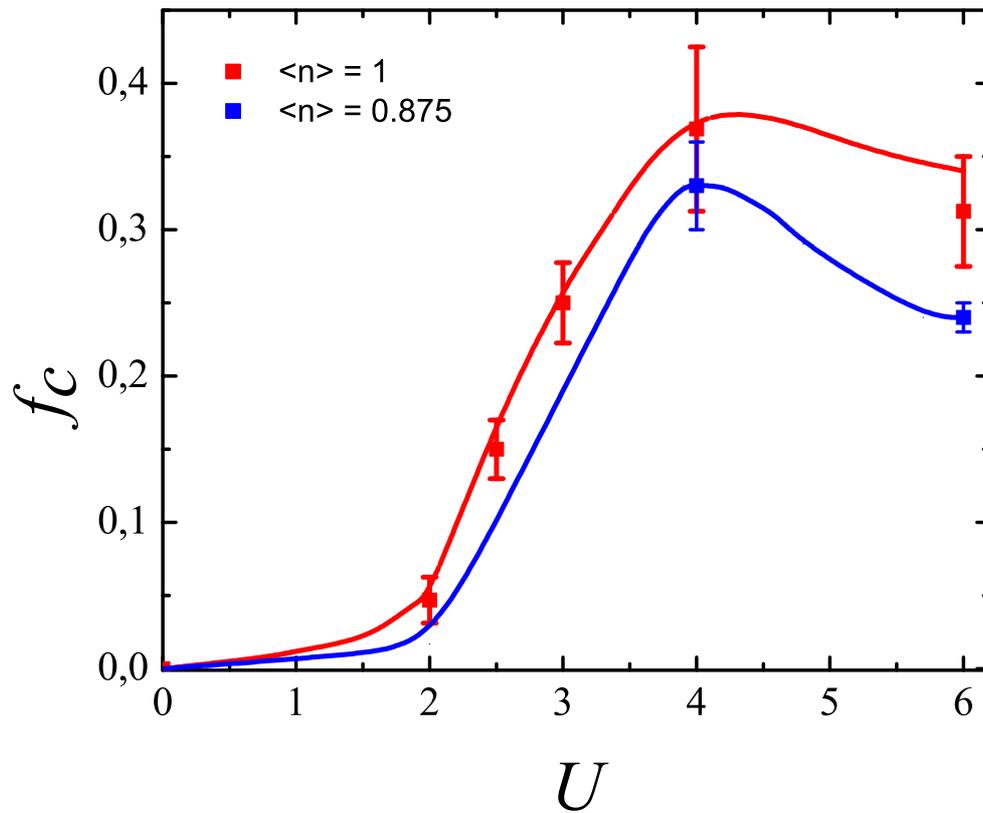


Figura 4.7: Fração crítica como função de U para $\langle n \rangle = 1$ e $\langle n \rangle = 0.875$. A curva vermelha para a banda semi-cheia foi retirada da Ref. [8] e o ponto $U = 4$ para $\langle n \rangle = 0,875$ foi extraído da Ref. [7]. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.

4.2 Propriedades a temperatura finita

Tendo discutido as propriedades do sistema a temperatura zero, podemos analisar as propriedades a temperatura finita. Como discutido no capítulo 2, a natureza de duas componentes do parâmetro de ordem supercondutor leva à uma transição de fase supercondutora que pertence à classe de universalidade de Kosterlitz-Thouless [4, 5]. Esta transição prevê um decaimento algébrico da função de correlação de pares, i.e.,

$$\Gamma(r) \equiv \langle \Delta(i)\Delta^\dagger(i+r) + H.c. \rangle \sim r^{-\eta(T)}. \quad (4.4)$$

no regime de $0 < T \leq T_c$, onde $\eta(T)$ cresce monotonicamente entre $\eta(0) = 0$ e $\eta(T_c) = 1/4$ [4, 5, 33]. O comportamento escalonado de P_s acima da criticalidade é dado por [6]

$$P_s = L^{2-\eta(T_c)} F(L/\xi), \quad T \rightarrow T_c^+, \quad (4.5)$$

onde $F(L/\xi)$ é uma função do tamanho linear da rede L e do comprimento de correlação $\xi \sim \exp(A/(T-T_c)^{1/2})$. É importante salientar que estes argumentos de universalidade ainda devem ser válidos mesmo na presença de desordem, pois ainda estamos lidando com um parâmetro de ordem de duas componentes; simulações no modelo xy desordenado confirmaram que não há mudança de classe de universalidade em presença de desordem [33].

Como comentado no capítulo 2, afim de extrair T_c , construímos um gráfico de $P_s L^{-7/4}$ versus β . No menor ponto onde as curvas se interceptarem, dentro das barras de erro, obteremos uma estimativa para o ponto crítico $\beta_c = 1/T_c$, como foi ilustrado na Fig. 2.4 [32]. Cabe aqui dizer que, devido às grandes flutuações a que os dados estão sujeitos, nossa análise deve ser muito cuidadosa. Os gráficos 4.8 ao 4.11 mostram o comportamento de P_s escalonado em função de β para várias frações de desordem. As setas apontam a estimativa para T_c em cada fração de desordem. É importante discutir primeiramente dois casos limites: o caso puro e o caso $f = f_c$. Para o caso puro, fica bem claro que as barras de erro estão se sobrepondo entre $\beta = 8$ e $\beta = 9$. Isto nos fornece uma temperatura crítica de $T_c = 0.12 \pm 0.01$. Para $f = f_c$, por outro lado, a supercondutividade é suprimida, de modo que $T_c = 0$.

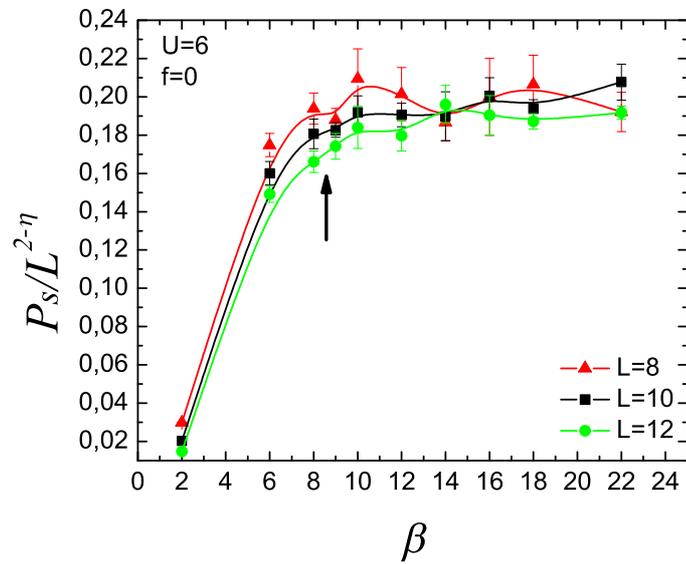


Figura 4.8: P_s escalonado como função de β para o caso puro.

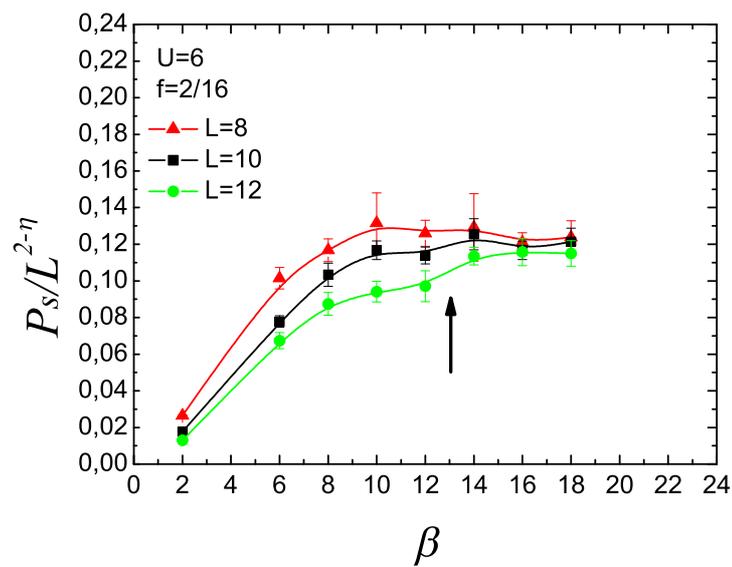


Figura 4.9: P_s escalonado como função de β para o caso $f = 2/16$.

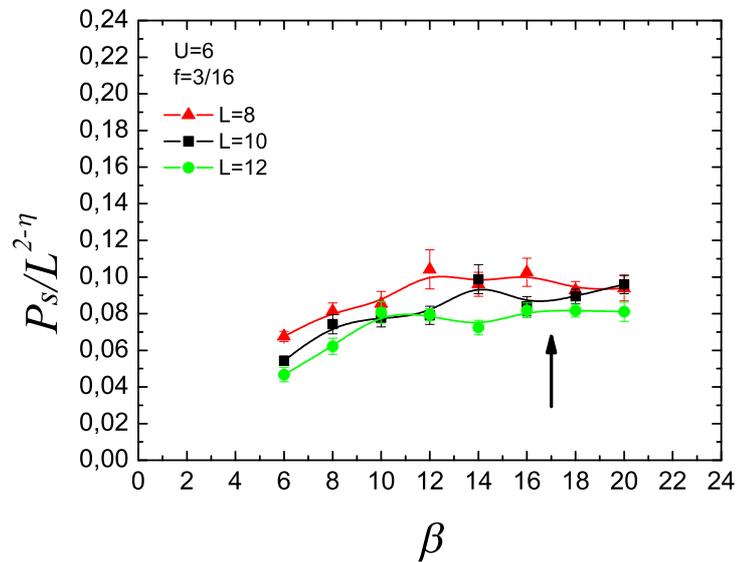


Figura 4.10: P_s escalonado como função de β para o caso $f = 3/16$.

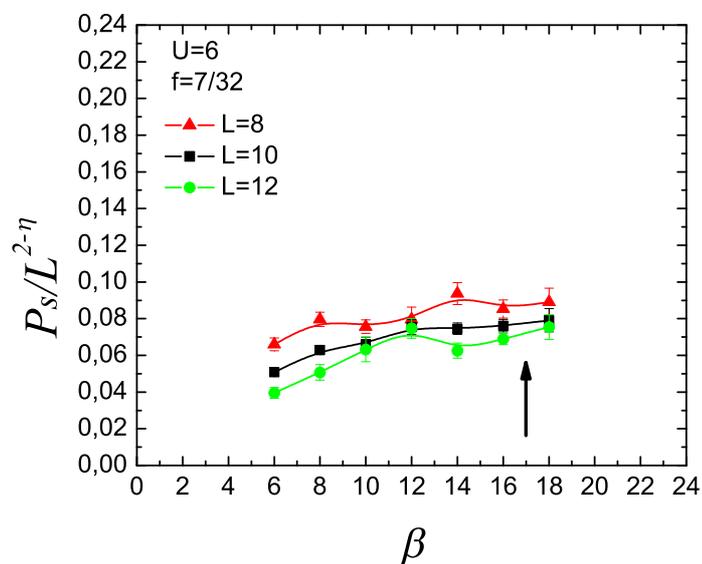


Figura 4.11: P_s escalonado como função de β para o caso $f = 7/32$.

Estes dois pontos fixam vínculos para a curva de $T_c(f)$, i.e., a temperatura crítica deve descrever uma curva suave que passe por estes dois pontos. Assim, nossa estima-

tiva de T_c analisando somente a sobreposição das barras de erro pode se tornar mais confiável, não nos deixando trair por flutuações que possam nos fornecer uma análise errada.

Para $f = 2/16$ estimamos β_c entre $\beta_c = 12$ e $\beta_c = 14$, o que fornece $T_c = 0.077 \pm 0.007$. Para $f = 3/16$ temos β_c entre 16 e 18, que fornece $T_c = 0.059 \pm 0.004$. Da mesma forma, para $f = 1/16$, temos β_c entre 8 e 12, que fornece $T_c = 0.1 \pm 0.02$. Para $f = 1/32$ a estimativa de β_c ficou entre 6 e 10, o que fornece $T_c = 0.14 \pm 0.04$. Para a fração $f = 7/32$ obtemos a mesma estimativa que para $f = 3/16$, ou seja, $T_c = 0.059 \pm 0.004$. Todos estes dados estão organizados na tabela abaixo.

Tabela de $T_c(f)$		
f	β_c	T_c
0	8 – 9	0.12 ± 0.01
1/32	6 – 10	0.14 ± 0.04
1/16	8 – 12	0.1 ± 0.02
2/16	12 – 14	0.077 ± 0.007
3/16	16 – 18	0.059 ± 0.004
7/32	16 – 18	0.059 ± 0.004
4/16		0

Estes dados fornecem o diagrama de fases da Fig. 4.12. Aqui é interessante fazer outra comparação com os resultados obtidos para a banda semi-cheia (Fig. 4.13) [8], onde $T_c = 0$ para o caso puro pelo teorema de Mermin-Wagner [10]; para o caso $\langle n \rangle = 0.875$, a simetria entre supercondutividade e CDW já está quebrada, e teremos uma temperatura crítica finita de Kosterlitz-Thouless para o caso puro. Pelo gráfico vemos claramente que T_c é suprimida pela desordem, o que já era esperado, no entanto, aparentemente, a concavidade é diferente da que foi obtida experimentalmente [2] (Fig. 1.6). Portanto, o que temos aqui, deve ser encarado apenas como uma primeira aproximação qualitativa, que está sujeita a refinamentos no futuro, como, por exemplo, calculando-se a densidade superfluida para uma melhor estimativa de T_c ou aumentando-se o número de realizações de desordem. As grandes barras de erro

refletem a incerteza que temos com relação à determinação da temperatura crítica para alguns casos de desordem. Outra possível fonte de discrepância da concavidade da curva T_c versus f é a relação entre R_{\square} e f , que não é necessariamente linear.

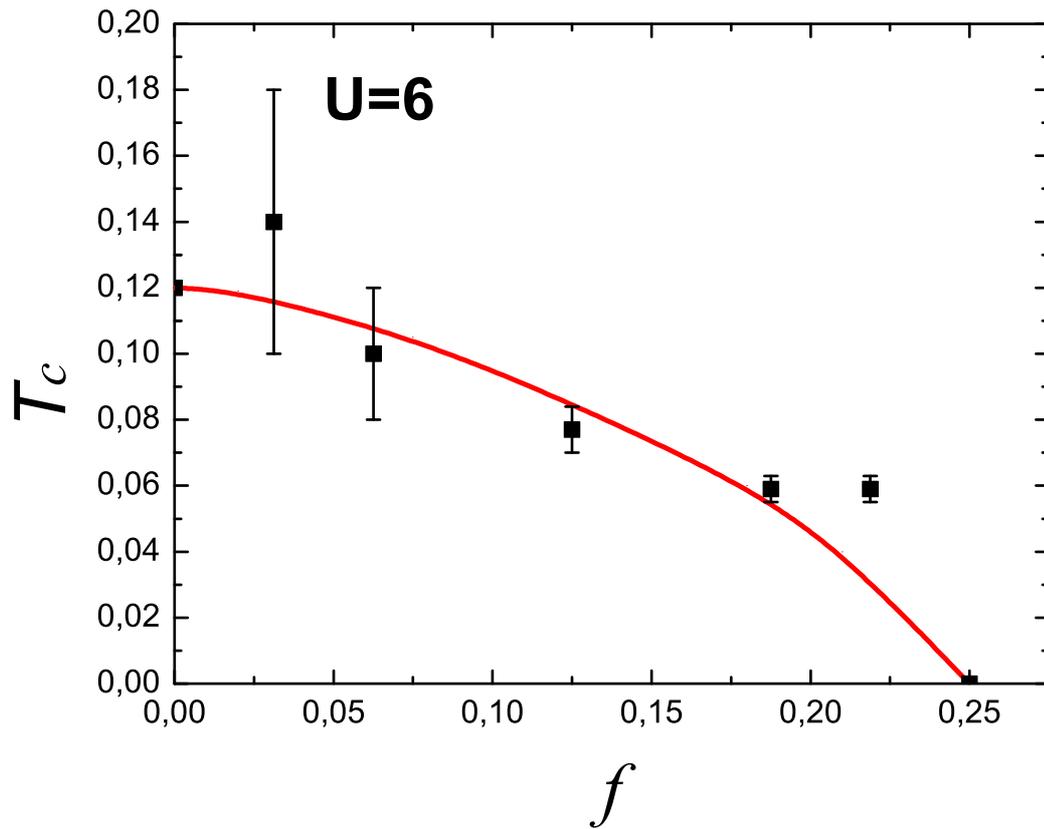


Figura 4.12: Temperatura crítica de transição supercondutora como função da desordem. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.

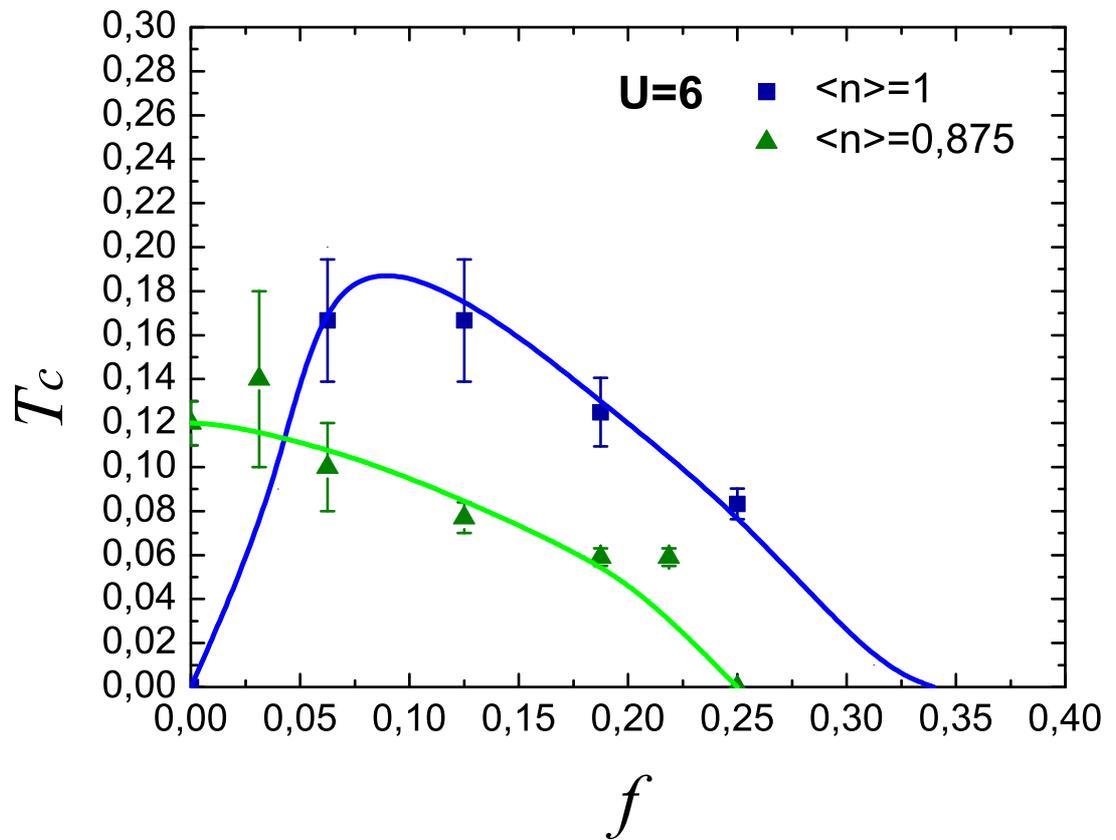


Figura 4.13: Gráfico comparativo da temperatura crítica de transição supercondutora como função da desordem para $\langle n \rangle = 1$ e $\langle n \rangle = 0,875$, onde a curva para $\langle n \rangle = 1$ foi extraída da Ref. [8]. A linha cheia é apenas uma guia para os olhos.

Conclusões

Neste trabalho foram estudados os efeitos de desordem no modelo de Hubbard atrativo, para o preenchimento de banda $\langle n \rangle = 0.875$, e com valor de atração $U = 6$. Utilizando o método de Monte Carlo Quântico para redes bidimensionais de tamanhos 8×8 , 10×10 , 12×12 e 14×14 , foi mostrado que a supercondutividade no estado fundamental, inicialmente presente no sistema, é inibida conforme vamos aumentando a quantidade de impurezas, até que, em uma certa fração crítica de desordem, denotada por f_c , a supercondutividade é totalmente destruída. O valor da fração crítica para que isso ocorra foi estimado como $f_c = 0.24 \pm 0.01$. Como f_c depende de parâmetros não geométricos, tais como o preenchimento da banda e a intensidade de U , esta transição é não percolativa. Vimos que para $\langle n \rangle = 0.875$ qualquer fração de desordem inicial já começa a suprimir o estado supercondutor, ao invés de favorecê-lo, como na banda semi-cheia. Conjecturamos que f_c em função de U deve seguir uma tendência semelhante à da banda semi-cheia, onde f_c cresce com U para valores pequenos de U e, acima de $U = 4$, deve diminuir com U , mostrando que os cálculos de campo médio só são qualitativamente corretos neste último regime. O fato da supercondutividade pertencer à classe de universalidade da transição de Kosterlitz-Thouless também nos permitiu obter estimativas qualitativas para o diagrama de fases de $T_c(f)$.

Finalmente podemos concluir que o modelo de Hubbard atrativo parece ser um bom modelo na investigação de supercondutores desordenados. Também seria interessante que estes mesmos cálculos fossem feitos para outros valores da atração U , neste mesmo preenchimento de banda, utilizando grandezas adicionais como a densidade superfluida para cálculos da temperatura crítica.

Referências

- [1] P. W. Anderson, *J. Phys. Chem. Sol.* **11**, 26 (1959);
- [2] A. M. Goldman and N. Marković, *Phys. Today*, p. 39, November (1998);
- [3] D. B. Haviland, Y. Liu, and A. M. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2180 (1989);
- [4] J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **7**, p. 1046 (1974);
- [5] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **6**, p. 1181 (1973);
- [6] A. Moreo and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **66**, n. 7, p. 946 (1991);
- [7] Raimundo R. dos Santos, Thereza Paiva, et al., *Phys. Rev. B* **72**, p. 144513 (2005);
- [8] Felipe Mondaini, Thereza Paiva, Raimundo R. dos Santos, and R. T. Scalettar, *Phys. Rev. B* **78**, 174519 (2008);
- [9] Thereza Paiva, Raimundo R. dos Santos, R. T. Scalettar, and P. J. H. Denteneer, *Phys. Rev. B* **69**, 184501 (2004);
- [10] N. D. Mermin, and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, p. 1133 (1966);
- [11] F. F. Assaad, W. Hanke, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **49**, 4327 (1994);
- [12] G. Litak and B. L. Györfy, *Phys. Rev. B* **62**, N. 10, p. 6629 (2000);

-
- [13] C. Kittel, in *Introduction to Solid State Physics*, seventh edition, John Wiley and Sons Inc.;
- [14] L. Merchant, J. Ostrick, R. P. Barder, Jr., and R. C. Dynes, *Phys. Rev. B* **63**, 134508 (2001);
- [15] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, n. 5, 1175-1204 (1957);
- [16] D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 261 (1994);
- [17] M. Ma, *Phys. Rev. B* **26**, 5097 1981;
- [18] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London*, Ser. A 238, 257 (1963);
- [19] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B*, n.2, p.189-193 (1986);
- [20] R. Micnas, S. Robaszkiewicz, and K. A. Chao, *Phys. Rev. B* **29**, p.2784 (1984);
- [21] A. Reich and L. M. Falicov, *Phys. Rev. B* **37**, p.5560 (1988);
- [22] R. Micnas, J. Ranninger, and S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.* **62**, p. 113 (1990);
- [23] R. T. Scalettar, E. Dagotto, D. J. Scalapino et al., *Phys. Rev. Lett.* **62**, n. 12, p. 1407 (1989);
- [24] Raimundo R. dos Santos, *Phys. Rev. B* **48**, p. 3976 (1993);
- [25] D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **37**, n. 37, p. 2380 (1988);
- [26] E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, p. 1445 (1968);
- [27] D. Penn, *Phys. Rev.* **142**, p. 350 (1966);
- [28] J. E. Hirsh, *Phys. Rev. B* **31**, p. 4403;
- [29] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino et al., *Phys. Rev. B* **39**, p. 4711;

-
- [30] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. W. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, p. 1087 (1953);
- [31] Raimundo R. dos Santos, *Brazilian J. Phys.* **33**, n. 1, p. 36 (2003);
- [32] M. N. Barber, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, New York, 1983), Vol. 8;
- [33] B. Berche, A. I. Farinas-Sanchez, and R. Paredes, *Europhys. Lett.* **60**, 539 (2002);
- [34] B. Berche, A. I. Farinas-Sanchez, Y. Holovatch, and R. Paredes, *Eur. Phys. J. B* **36**, 91 (2003);

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)