



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE FÍSICA

Diagonalização Exata da Hamiltoniana BCS em
sistemas de tamanho finito

Rodrigo Alves Fontenele

Rio de Janeiro

Março de 2020

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE FÍSICA

**Diagonalização Exata da Hamiltoniana BCS em
sistemas de tamanho finito**

Rodrigo Alves Fontenele

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Orientador: Raimundo Rocha dos Santos

Coorientador: Natanael de Carvalho Costa

Rio de Janeiro

Março de 2020

CIP - Catalogação na Publicação

AF683d Alves Fontenele, Rodrigo
Diagonalização Exata da Hamiltoniana BCS em
sistemas de tamanho finito / Rodrigo Alves
Fontenele. -- Rio de Janeiro, 2020.
59 f.

Orientador: Raimundo Rocha dos Santos.
Coorientador: Natanael de Carvalho Costa.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do
Rio de Janeiro, Instituto de Física, Programa de Pós
Graduação em Física, 2020.

1. Supercondutividade. 2. Hamiltoniana BCS. 3.
Método de Lanczos. 4. Sistemas de tamanho finito.
I. Rocha dos Santos, Raimundo, orient. II. Costa,
Natanael de Carvalho, coorient. III. Título.

Diagonalização Exata da Hamiltoniana BCS em sistemas de tamanho
finito

Rodrigo Alves Fontenele

Raimundo Rocha dos Santos
Natanael de Carvalho Costa

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Aprovada por:

Prof. Raimundo Rocha dos Santos
(Presidente e Orientador, IF/UFRJ)

Prof. Natanael de Carvalho Costa
(Coorientador, IF/UFRJ)

Prof. Thereza Cristina de Lacerda Paiva
(IF/UFRJ)

Prof. Wei Chen
(CBPF)

Resumo

Diagonalização Exata da Hamiltoniana BCS em sistemas de tamanho finito

Rodrigo Alves Fontenele

Orientador: Raimundo Rocha dos Santos

Coorientador: Natanael de Carvalho Costa

A teoria BCS da supercondutividade pressupõe uma interação atrativa entre elétrons, efetiva quando a energia destes se encontra numa faixa da ordem de $\hbar\omega_D$ (energia de Debye, característica dos fônons no material) em torno do nível de Fermi. Na abordagem usual usa-se uma Hamiltoniana reduzida, H_{red} , na qual os pares de Cooper passam a ser as entidades fundamentais, ao invés dos elétrons. As propriedades desta Hamiltoniana reduzida são então obtidas dentro de uma aproximação de campo médio, facilmente adaptável ao limite termodinâmico. Apesar do enorme sucesso desta teoria, ela é de difícil extensão para tratar situações físicas como, por exemplo, a coexistência entre ordenamentos supercondutor e magnético, já que a introdução de um acoplamento entre graus de liberdade magnético e de carga inviabiliza o tratamento convencional. Uma estratégia alternativa seria considerar todas estas interações, porém em um sistema de tamanho finito. Assim, o objetivo inicial deste trabalho é efetuar a diagonalização exata da Hamiltoniana BCS original, H_{BCS} , e explorar grandezas que possam caracterizar um estado supercondutor em sistemas finitos. Utilizamos o método de Lanczos para obter o estado fundamental de H_{BCS} em redes uni-dimensionais finitas e calcular funções de correlação de emparelhamento. Com isto pudemos esclarecer questões sutis, específicas do tamanho finito das redes, tais como a mimetização eletrônica da escala de Debye, a finitude do valor crítico da interação efetiva elétron-fônon para que ocorra supercondutividade, e a influência de camadas abertas ou fechadas (no nível de Fermi) no comportamento observado.

Palavras-chave: Supercondutividade, sistemas finitos, método de Lanczos

Abstract

Diagonalização Exata da Hamiltoniana BCS em sistemas de tamanho finito

Rodrigo Alves Fontenele

Orientador: Raimundo Rocha dos Santos

Coorientador: Natanael de Carvalho Costa

Abstract da Tese de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

The BCS theory of superconductivity assumes an attractive interaction between electrons, effective when their energy is in a range of the order of $\hbar\omega_D$ (Debye energy, of the phonons in the material) around the Fermi level. In the usual approach, a reduced Hamiltonian, H_{red} , is used. The properties of H_{red} are obtained within an mean field approximation, adaptable to thermodynamic limit. Despite of the success of this theory, it is hardly adaptable to physical situations such as, for example, the coexistence between superconducting and magnetic ordering, since the introduction of a coupling between degrees of magnetic freedom and charge becomes conventional treatment impracticable. An alternative would be to consider all these interactions, in a finite size system. The objective of this work is to perform the exact diagonalization (via Lanczos method) of the full BCS Hamiltonian, H_{BCS} , and to explore quantities that can characterize a ground state superconductor in finite systems.

Keywords: Superconductivity. Finite size systems. Lnczos method.

Agradecimentos

À minha família: aos meus pais, Florentino Vieira Fontenele e Lucilene Alves Costa, pelo apoio que sempre me deram, nas horas que mais se fez preciso. À minha esposa, Lucinete Maria, que sempre me apoiou e por sempre me manter firme sobre meus objetivos e sobre o que é importante. Ao professor Pimentel, que, mesmo sem ser sua responsabilidade, sempre se disponibilizou a me aconselhar e me ouvir...é uma das pessoas por quem mais tenho respeito e admiração! Ao professor Natanael de Carvalho, que me ajudou diretamente neste trabalho, mas para além disto...foi um grande amigo. Aos professores e toda a equipe da escola pública de Ensino Médio Augustinho Brandão, em especial ao professor Antônio Cardoso do Amaral, pelo esforço em minha formação de base e porque sei que sem eles jamais seria possível nada em minha carreira acadêmica posterior ao ensino médio. Ao Sebastião Jr, Bruno, Nathan Gomes, Juan, Gyell, Felipe e a todos os amigos que ajudaram a descontrair um pouco os longos dias de trabalho...sem vocês todos, seria muito mais difícil a rotina! Ao professor Raimundo Santos, pela sugestão do problema, pela orientação, por contar na minha capacidade de resolvê-lo. Agradeço também por ter sempre se mostrado disponível para conversar e discutir os temas relevantes ao meu trabalho, além da sua paciência comigo. MUITO OBRIGADO! À Capes pelo apoio Financeiro, além da UFRJ pela estrutura física fornecida.

Sumário

Lista de Figuras	x
Introdução	1
1 Problema de Cooper	4
1.1 O par de Cooper: Atração efetiva entre elétrons de condução em metais . . .	4
1.2 Sistemas de tamanho finito	7
1.2.1 Caracterização do problema de Cooper em cadeia 1D	7
1.2.2 Energia do par de elétrons na cadeia	10
2 Métodos de Diagonalização Exata	15
2.1 Diagonalização Direta	15
2.1.1 Base do Número de Ocupação	16
2.1.2 Organização do espaço de Hilbert	18
2.2 Algoritmo de Lanczos	20
2.2.1 Espaço de Krylov e a construção da base de Lanczos	20
3 Teoria BCS: formação de muitos pares de Cooper	23
3.1 Soluções de Campo médio da Hamiltoniana BCS	23
3.2 Soluções exatas da Hamiltoniana BCS via método de Lanczos	28
3.2.1 Soluções para Cadeias 1D: Caracterização e abordagem do Problema	28

3.2.2	Energia de condensação, formação de pares de Cooper e efeitos de paridade para cadeias 1D finitas	30
4	Conclusões	38
A	Simetrias, Leis de Conservação, Média de Observáveis na Base de Lanczos e Lanczos modificado	40
A.0.1	Transformações de Observáveis	40
A.0.2	Simetrias e Leis de Conservação	41
A.0.3	Cálculo do valor esperado de um observável na base de Lanczos	42
A.0.4	O Lanczos Modificado	44
	Referências Bibliográficas	46

Lista de Figuras

- 1.1 Representação esquemática de um único par de Cooper, adicionado no estado fundamental do gás de elétrons livres [1]. 5
- 1.2 Representação de uma banda semipreenchida para Eq. (1.8). Em cor mais escura temos a casca de energia acima do nível de Fermi. 8
- 1.3 E_b como função do potencial atrativo para tamanhos de cadeias distintos com uma casca equivalente a $0.1 k_F$ 11
- 1.4 U_c como função do número de sítios N do sistema para casca equivalente a $0.1 k_F$. A linha em vermelho é uma função de ajuste. 12
- 1.5 No painel à esquerda temos o gráfico da energia de ligação do par para uma casca da ordem de $0.2 k_F$. Já o painel à direita mostra a interação crítica como função do tamanho da cadeia. 13
- 1.6 No painel à esquerda temos o gráfico da energia de ligação do par para uma casca da ordem de $0.05 k_F$. O painel à direita mostra a interação críticas correspondentes, como função do tamanho da cadeia. 13
- 1.7 Valores de E_b para $N = 80$ para as três cascas analisadas. 14
- 2.1 Mostra o uso de simetrias em uma Hamiltoniana [2]. A Hamiltoniana que antes (lado esquerdo) tinha seus elementos mais espaçados, depois da implementação de simetrias, assume uma configuração bloco-diagonal (lado direito). 16

3.1	Representação da banda semipreenchida para dispersão cossenoidal utilizada. A parte destacada em laranja é a região não-interagente, enquanto que a casca em torno do nível de Fermi é a região destacada em tom mais escuro.	29
3.2	Energia de condensação para o caso de camada fechada, para diferentes tamanhos de rede, e casca simétrica, com $x = 0.2$	31
3.3	Valores de interação crítica para diferentes tamanhos de rede, em um sistema camada fechada, para diferentes tamanhos de rede. A curva em vermelho é um ajuste dos pontos que nos fornece uma relação entre U_c e N	32
3.4	Energia de condensação para o de caso camada aberta, para diferentes tamanhos de rede, e casca simétrica, com $x = 0.2$	33
3.5	Número de pares da Eq. (3.24) como função de U_0 para camada aberta e fechada. Os resultados são obtidos para uma casca simétrica, equivalente a $x = 0.2$, acima e abaixo de E_F	34
3.6	As curvas mostram o valor do parâmetro de paridade $\frac{\Delta_P}{N}$ como função da interação atrativa U_0 . É visível o crescimento desse parâmentro com U_0 , indicando um ganho enegético com o aumento da interação atrativa.	36

Introdução

A supercondutividade é um fenômeno conhecido desde 1911, quando Heike Kamerlingh Onnes realizou medidas de resistividade enquanto resfriava amostras de mercúrio até temperaturas da ordem de $T \approx 4K$. Onnes verificou uma queda abrupta na resistividade do mercúrio quando um valor de temperatura crítica era atingido. Passaram-se décadas até que uma teoria para este fenômeno fosse formulada por Bardeen, Cooper e Schrieffer (1957) [3]; a teoria BCS, como ficou conhecida, estabeleceu que uma interação atrativa entre elétrons, neste caso oriunda um acoplamento elétron-fônon, em uma faixa de energia da ordem da energia de Debye, $\hbar\omega_D$, característica dos fônons do material, em torno do nível de Fermi, seria o mecanismo responsável pelo surgimento de supercondutividade. Devido a essa interação atrativa, os elétrons de condução condensam-se em pares ligados (pares de Cooper) [4], levando à geração de um *gap* na banda de energia, e mudando o estado fundamental do sistema.

Uma das formas de tratar o problema de supercondutividade é partir de uma Hamiltoniana BCS completa para uma versão reduzida, H_{red} , onde focamos apenas na dinâmica dos pares de Cooper no sistema, descartando as contribuições de outros termos de interação da Hamiltoniana completa. A teoria BCS é bem sucedida em explicar a fenomenologia dos supercondutores convencionais (SUC), mas sua análise via campo médio não é um procedimento adaptável se quisermos estudar outras situações físicas como a coexistência entre algum ordenamento magnético e supercondutor, por exemplo. Isso ocorre porque a introdução de um acoplamento entre graus de liberdade magnético e de carga inviabiliza o tratamento convencional via campo médio. Uma estratégia possível seria levar em conta

as interações mais relevantes, porém em sistemas de tamanho finito, para os quais soluções podem ser extraídas via métodos de diagonalização exata, por exemplo. No entanto, as propriedades da Hamiltoniana BCS em sistemas de tamanho finito, ainda não são bem conhecidas até hoje, e envolvem aspectos bastante inusitados.

Diante disto, nosso objetivo neste trabalho é caracterizar de forma qualitativa o estado fundamental BCS em sistemas finitos. Inicialmente consideramos cadeias unidimensionais e identificaremos efeitos de escala nas propriedades supercondutoras. Cadeias unidimensionais são um bom laboratório para entender as principais características de efeitos de escala, antes de fazer um estudo em dimensões maiores.

No Capítulo 1 analisaremos um caso mais simples, que é o problema de Cooper para um gás de Fermi, e discutimos a energia de ligação E_b do par. Em seguida realizamos análise semelhante, mas agora em cadeias $1D$ finitas. Nossa metodologia consiste em definir uma faixa de energia acima do nível de Fermi do sistema, como uma fração do mesmo, e diagonalizar diretamente a matriz Hamiltoniana de um par de elétrons adicionados a essa "casca" de energia. Observamos o surgimento de um valor crítico para a interação atrativa, U_c , separando dois regimes distintos, a saber, um onde há um par ligado, e outro onde não há. Notamos ainda que esse valor crítico, U_c , se anula assintoticamente com o inverso de uma potência do tamanho L da cadeia.

Como o problema BCS se baseia na interação de muitos elétrons formando pares de Cooper, precisamos de um conjunto de ferramentas e de técnicas de diagonalização exata. Por isto, no Capítulo 2 apresentamos aspectos técnicos de diagonalização exata e método de Lanczos.

No Capítulo 3, estas técnicas são utilizadas num estudo qualitativo da Hamiltoniana BCS em cadeias $1D$ finitas. Começamos o capítulo fazendo uma revisão sobre a análise do modelo BCS, a $T = 0$, dando destaque para a energia de condensação, E_{cond} , uma grandeza que, assim como E_b no caso de um par de Cooper, esperamos que apresente um valor crítico de interação que separe dois regimes distintos. Nossa metodologia é bem

semelhante à do Capítulo 1, mas agora definimos uma faixa de energia em torno do nível de Fermi, como uma fração do mesmo. De início, percebemos que efeitos de camada fechada e camada aberta podem ser relevantes aqui, já que se manifestam no comportamento do número médio de pares como função da interação atrativa. A energia de condensação também indica a presença de uma interação crítica, U_c , como no caso do par de Cooper. Finalizamos o capítulo fazendo uma breve discussão sobre efeitos de paridade, avaliados aqui por meio de um parâmetro Δ_P que dá a diferença de energia entre redes com número par de elétrons, sujeitos a interação atrativa, e redes com número ímpar de elétrons; observa-se que redes com número par de elétrons têm um estado fundamental mais estável com respeito à formação de pares do que redes com número ímpar.

No Capítulo de Conclusões, apresentamos um resumo dos principais resultados deste trabalho, e discutimos perspectivas.

Capítulo 1

Problema de Cooper

1.1 O par de Cooper: Atração efetiva entre elétrons de condução em metais

A ocorrência de um canal de atração efetiva entre elétrons de condução em um metal é a chave para explicação microscópica da supercondutividade. Tal interação atrativa entre elétrons pode originar-se de uma interação retardada, dada pela polarização da rede, gerada quando um elétron interage com ela: os elétrons se acoplam via graus de liberdade de vibrações da rede (fônons), dando origem a pares ligados, os pares de Cooper. Para facilitar as discussões futuras vamos inicialmente descrever o problema de Cooper [4], i.e. investigaremos o estado fundamental de um gás de elétrons livres, no qual adicionamos um par de elétrons acima do nível de Fermi, em estados dentro de uma faixa de energia de espessura proporcional à energia de Debye, $\hbar\omega_D$.

A Figura 1.1 mostra a adição de dois elétrons de momentos e spins opostos, e seu posterior espalhamento em um par ligado, acima do nível de Fermi de um gás de elétrons. Uma visão mais pictórica do processo é apresentada em (a), enquanto que do lado direito, em (b) temos uma representação do processo de espalhamento e formação de um par ligado, pela troca de um fônon de momento \mathbf{q} .

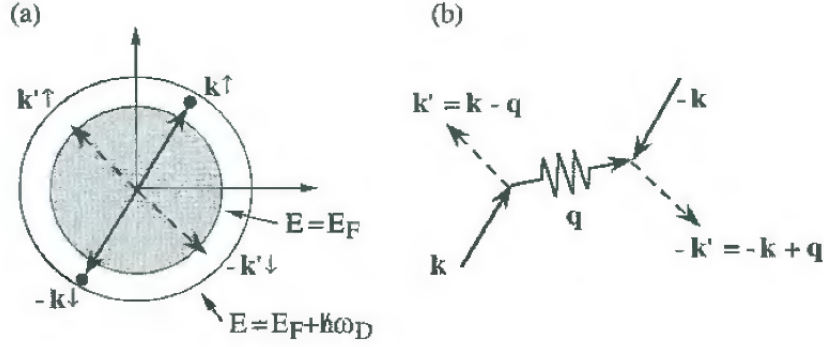


Fig. 1.1: Representação esquemática de um único par de Cooper, adicionado no estado fundamental do gás de elétrons livres [1].

A equação de Schrödinger independente do tempo para estes 2 elétrons é

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}_1}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}_2}^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \Psi(\mathbf{r}_1 \sigma_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2) = E_{pair} \Psi(\mathbf{r}_1 \sigma_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2) \quad , \quad (1.1)$$

onde \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 são as posições dos dois elétrons adicionais e $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ corresponde à interação atrativa entre eles. $\Psi(\mathbf{r}_1 \sigma_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2)$ descreve a função de onda dos dois elétrons e E_{pair} é a autoenergia do sistema.

Para resolver a Eq. (1.1), consideramos um conjunto completo de funções de onda, formadas pelo produto de uma parte espacial, descrita na forma de ondas planas $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ (com a normalização, $V = Nw$, é o volume do cristal, constituído por N células de volume unitário w), e uma parte de funções de onda de spin, α e β . Por simplicidade, vamos descrever o sistema nas coordenadas do centro de massa e supor que seu momento total, \mathbf{K}_{CM} , seja uma constante de movimento; logo, podemos tomar $\mathbf{K}_{CM} = 0$ ou $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$. Levando em conta o determinante de Slater (vide, e.g., Ref. [1]), chegamos a dois resultados possíveis: uma função de onda do tipo singlete e uma do tipo tripleto. Aqui, vamos nos restringir a soluções do tipo singlete ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$), na base de ondas planas, dadas por

$$\Psi^{S=0}(\mathbf{r}_1 \sigma_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \quad , \quad (1.2)$$

onde $g(\mathbf{k}) = g(-\mathbf{k})$ são as amplitudes associadas. Ademais, considera-se que os elétrons situados na região logo abaixo do nível de Fermi se distribuem segundo o princípio de exclusão de Pauli, formando um core estável, insensível à interação atrativa, e que as amplitudes na Eq. (1.2) são não-nulas apenas na região do interior da casca de energia acima de E_F .

Vamos fazer com que a equação de Schrödinger se torne uma equação integral, utilizando a Eq. (1.2) e, por simplicidade, tomamos os elementos de matriz do termo de interação da Hamiltoniana como aproximadamente constantes dentro da casca, i.e.

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -U_0 \quad (1.3)$$

onde U_0 é uma constante positiva com dimensões de energia. Assim, a Eq. (1.1) pode ser reescrita como

$$(2E_k - E_{pair})g(\mathbf{k}) - \frac{U_0}{N} \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') = 0 \quad (1.4)$$

onde os E_k são os níveis de energia dentro da casca. Para o caso singleto e supondo uma banda de condução esférica, $g(\mathbf{k})$ também deve ter simetria esférica; desta forma, o movimento relativo dos elétrons emparelhados é descrito por uma onda-s [1]. É importante frisar aqui que no caso tripleto, descartado de antemão anteriormente, a paridade ímpar das amplitudes $g(\mathbf{k})$ levaria a soma nula no segundo termo da Eq. (1.4), por tomar k' s simétricos dentro da casca. Tendo isso em conta, chegamos à equação

$$1 = \frac{U_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_k - E_{pair}} . \quad (1.5)$$

As soluções da Eq.(1.5) nos levam à noção de *energia de ligação* do par, definida como

$$\epsilon_b = 2E_F - E_{pair} . \quad (1.6)$$

Utilizando as soluções E_{pair} de (1.5) em (1.6), temos

$$\epsilon_b = 2\hbar\omega_D e^{-2/U_0\rho_0(E_F)} , \quad (1.7)$$

onde, $\rho_0(E_F)$, é a densidade de estados no nível de Fermi. Esta densidade de estados, $\rho_0(E_F)$, pode ser considerada constante dentro de uma casca de energia estreita em torno do nível de Fermi ($\hbar\omega_D \ll E_F$). A Eq. (1.6) nos mostra que teremos um estado ligado independente de quão pequena seja a interação atrativa U_0 ; i.e., qualquer $U_0 > 0$ levará à formação de um par de Cooper.

Na próxima seção vamos analisar a formação de pares de Cooper em sistemas de tamanho finito, quando a discretização dos níveis de energia demandará uma análise cuidadosa. Em particular, vamos examinar como a energia de ligação se comporta com o tamanho do sistema e com a interação atrativa.

1.2 Sistemas de tamanho finito

Em sistemas de tamanho finito os níveis de energia são discretizados, de modo que não podemos, em nossa análise, obter a forma integral da equação de Schrödinger. Devido à dificuldade de se obter uma solução analítica, uma alternativa é calcular os elementos da matriz Hamiltoniana, e diagonalizá-la numericamente. A partir daí, discutiremos algumas grandezas que possam identificar a presença de um estado supercondutor.

1.2.1 Caracterização do problema de Cooper em cadeia 1D

Analisaremos o problema de Cooper para uma cadeia contendo um número fixo de sítios, N , que para o caso de uma cadeia 1D homogênea representa o número de células unitárias da cadeia; e espaçamento de rede unitário, $a = 1$, de forma que o comprimento da cadeia é $l = aN$, ou dimensionalmente $L = N$. Investigaremos o sistema no regime de banda semipreenchida com $n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{N}{2}$ e condições de contorno periódicas, tal que a relação de dispersão é dada por

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) , \quad (1.8)$$

onde t é o parâmetro de hopping (com dimensão de energia), \mathbf{a} é o vetor diretor da cadeia e \mathbf{k} o vetor de onda, dado em 1D como

$$ak = \frac{2\pi n}{N}, \quad n = -\frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2}. \quad (1.9)$$

Neste caso, para banda semipreenchida temos $ak_F = \frac{\pi}{2}$, onde $\epsilon(k_F) = 0$, como mostrado na Fig 1.2. Além disso, tomaremos durante todo este trabalho $t = 1$, e iremos suprimir a constante a de agora em diante.

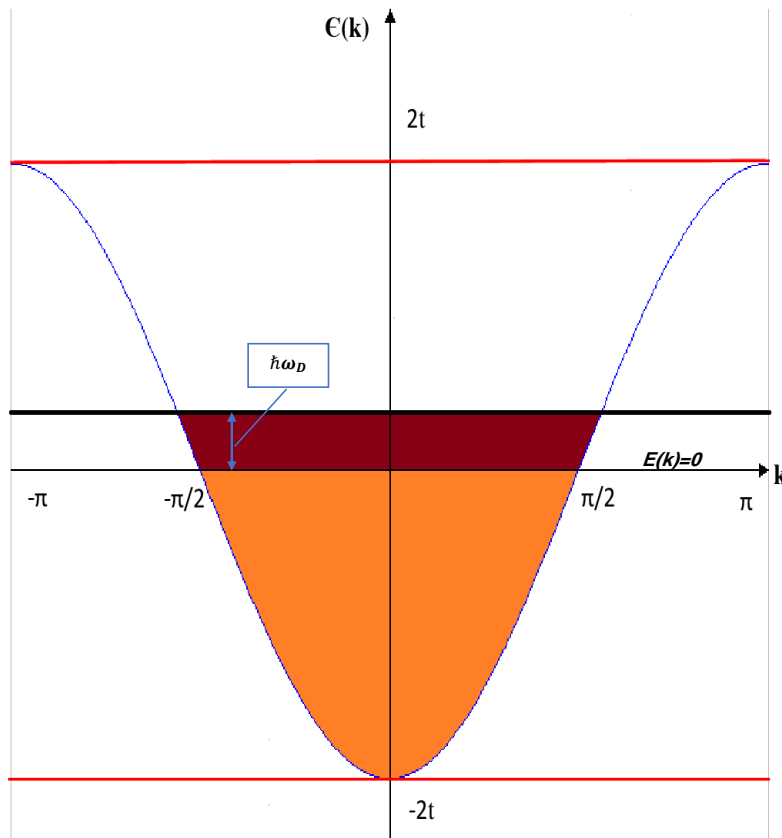


Fig. 1.2: Representação de uma banda semipreenchida para Eq. (1.8). Em cor mais escura temos a casca de energia acima do nível de Fermi.

Para finalizar, precisamos definir uma casca de energia como um parâmetro de controle, que desempenhe o papel característico da energia dos fônons da rede. Uma estratégia para isto é definir um intervalo de energia, Ω , cujos limites inferior e superior são determinados por meio de vetores de onda, k da Eq. (1.9), associados com k_F da

seguinte forma:

$$k_{inf}^{\Omega} = k_F, \quad k_{sup}^{\Omega} = k_F + xk_F, \quad (1.10)$$

onde x é um número real entre 0 e 1. Assim os limites da casca são, $\Omega = E_{sup} - E_{inf}$; onde $E_{sup} = -2t \cos(k_{sup}^{\Omega})$ e $E_{inf} = -2t \cos(k_{inf}^{\Omega})$.

Definindo Ω desta forma temos controle sobre a largura mínima que a casca deve ter para conter pelo menos um nível de energia acima de E_F . Para ilustrar isto, considere uma cadeia com $N = 40$ sítios e banda semipreenchida, $|k_F| = \frac{\pi}{2}$; para que haja pelo menos um estados dentro da casca $(k, -k)$, a diferença entre seus limites deve ser igual a uma unidade de vetor de onda, $\frac{2\pi}{N}$. Assim, tomando a parte positiva dos vetores de onda, temos

$$\begin{aligned} |k_{sup}^{\Omega}| - |k_{inf}^{\Omega}| &= \frac{2\pi}{40} \\ (1+x)\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2} &= \frac{2\pi}{40} \\ (1+x) - 1 &= \frac{4}{40} \\ x &= 0.1, \end{aligned} \quad (1.11)$$

o que torna $\Omega = 0.3t$. É importante notar que mantendo Ω fixo e aumentando o número de sítios da cadeia mais estados $(k, -k)$ aparecem dentro da casca. Logo, podemos tratar o problema de duas formas. Numa, pode-se fixar um valor para N e definir x de modo a acomodar um único estado dentro da casca. Alternativamente, podemos fixar um valor de x a partir do qual o tamanho mínimo da cadeia é aquele para o qual há um estado dentro da casca, que dá o número mínimo de um estado dentro desta.

Podemos resumir (1.11) em uma única relação que nos fornece também como adicionar η pares de estados dentro de uma dada casca. Devemos seguir um procedimento

parecido com o feito em (1.11). Assim, temos então

$$\begin{aligned}
|k_{sup}^{\Omega}| - |k_{inf}^{\Omega}| &= \eta \left(\frac{2\pi}{N} \right) \\
(1+x)\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2} &= \frac{2\eta\pi}{N} \\
Nx &= 4\eta .
\end{aligned} \tag{1.12}$$

A Eq. (1.12) relaciona, portanto, o número de pares de estados, η no interior da casca, com sua espessura (via x) e o número de sítios. Assim, para uma espessura fixa, o tamanho da cadeia cresce linearmente com o número de estado. Equivalentemente, para um tamanho fixo da cadeia, a espessura da casca (no espaço k) também cresce linearmente com o η . No caso do problema de Cooper $\eta = 1$.

1.2.2 Energia do par de elétrons na cadeia

Definimos na seção anterior uma faixa de vetores de onda k , dentro da qual os elétrons sentem a interação atrativa. Os demais elétrons se concentram na região não-interagente chamada de *core*, destacada na cor mais clara na Fig 1.2, de modo que resolve-se a equação de Schrödinger apenas no subespaço definido pelos limites da casca, onde a dinâmica dos elétrons é descrita pela Hamiltoniana:

$$H = \sum_k \epsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - U_0 \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}, \quad k' \neq k. \tag{1.13}$$

Os operadores $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) são os operadores de criação (aniquilação) fermiônicos já adaptados ao caso unidimensional, e os momentos, k , rotulam os estados dentro da casca; além disso, já tomamos, $U_{kk'} = -U_0$, constante dentro da casca. Podemos escrever a Eq. (1.13) em uma forma matricial usando, por conveniência, a base

$$|k\rangle = \prod_k (c_{k\uparrow}^\dagger)^{n_{k\uparrow}} (c_{-k\downarrow}^\dagger)^{n_{-k\downarrow}} |0\rangle, \tag{1.14}$$

onde $n_{k\uparrow}(n_{-k\downarrow}) = 1, 0$ são as ocupações eletrônicas dos estados $k \uparrow(-k \downarrow)$. Esta base permite escrever os termos fora da diagonal (i.e., os termos de interação) sempre com

o mesmo sinal de fase das permutas de férmions; discutiremos isso detalhadamente no próximo Capítulo.

Os elementos de matriz são dados por

$$\langle k' | H | k \rangle = 2\epsilon(k)\delta_{k'k} - U_0(1 - \delta_{k'k}) . \quad (1.15)$$

Por exemplo, para uma casca contendo dois níveis de energia e dois pares $(-k_2, -k_1, k_1, k_2)$, temos

$$H = \begin{bmatrix} 2\epsilon(k_1) & -U_0 & -U_0 & -U_0 \\ -U_0 & 2\epsilon(-k_1) & -U_0 & -U_0 \\ -U_0 & -U_0 & 2\epsilon(k_2) & -U_0 \\ -U_0 & -U_0 & -U_0 & 2\epsilon(-k_2) \end{bmatrix} , \quad (1.16)$$

Assim, ao diagonalizar a matriz (1.16) obtemos a energia de ligação, E_b . É importante destacar que dada a Eq. (1.8) e o regime de banda semipreenchida, a energia de Fermi torna-se $E_F = 0$. Assim, levando em conta a definição da Eq. (1.6), apresentamos nossos resultados como a tendência dos elétrons em se agruparem em um par ligado.

Na Fig 1.3 traçamos E_b como função da interação, U_0 , para $x = 0.1$, $k_{inf} = k_F$, $k_{sup} = k_F + x k_F$ e $\Omega \approx 0.3t$ para diferentes tamanhos de cadeia. Assim, de acordo com a Eq. (1.12) o número de estados dentro da casca também cresce.

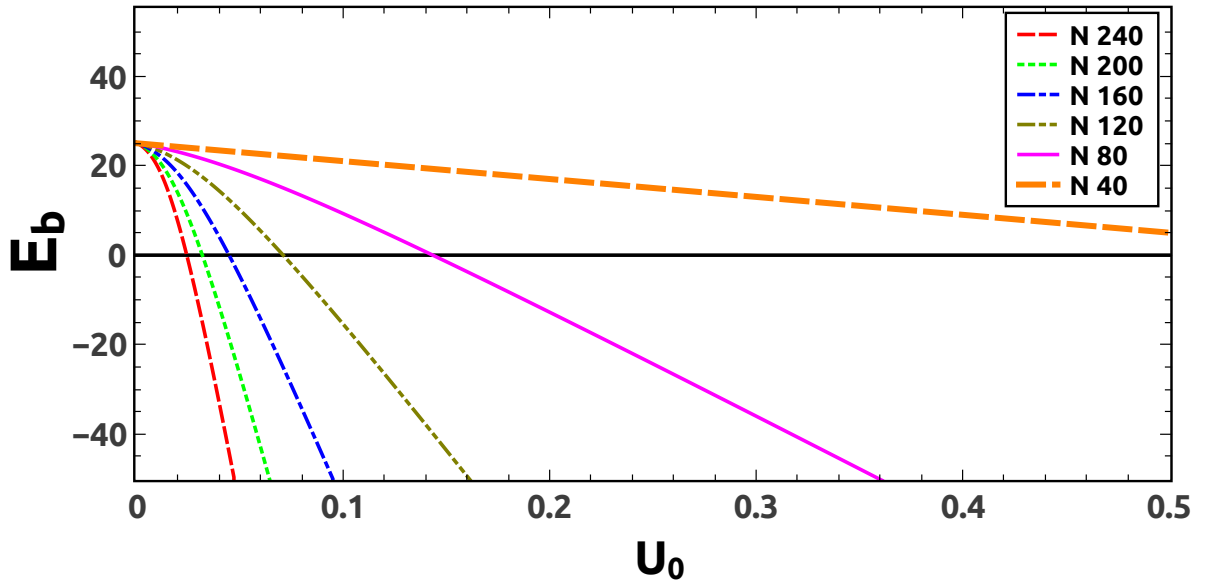


Fig. 1.3: E_b como função do potencial atrativo para tamanhos de cadeias distintos com uma casca equivalente a $0.1 k_F$.

Observa-se que a discretização de níveis faz com que haja agora um potencial de corte, ou crítico, U_c , que separa um regime onde não existe um estado ligado ($E_b > 0$, para $U < U_c$) de um regime onde há um estado ligado ($E_b < 0$, para $U > U_c$). Isto é diferente do que tínhamos anteriormente, quando qualquer interação atrativa levava à formação de um par de Cooper.

A partir destes resultados, podemos analisar sistematicamente como U_c se comporta como função de N . A Fig. 1.4 mostra U_c para diferentes tamanhos de sistemas.

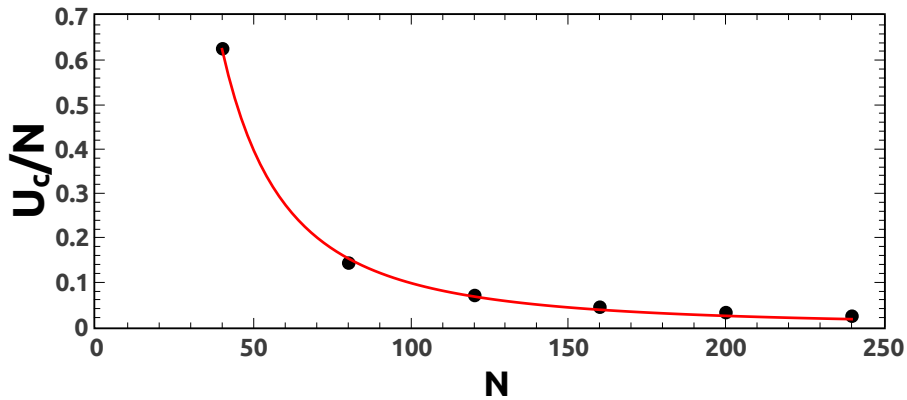


Fig. 1.4: U_c como função do número de sítios N do sistema para casca equivalente a $0.1 k_F$. A linha em vermelho é uma função de ajuste.

O ajuste dos pontos (curva sólida vermelha) leva a

$$U_c(N) = \frac{A}{NB}, \quad (1.17)$$

onde $A \approx 10^3$ (em unidades de t), e $B \approx 1$. Vemos que este valor crítico depende do tamanho do sistema, mas tende a zero no limite de $N \rightarrow \infty$; isto é, recuperamos o caso onde qualquer valor de interação atrativa, por menor que seja, leva a um par ligado.

Repetindo o procedimento descrito acima para $x = 0.2$ e $x = 0.05$ ($\Omega = 0.6t$ e $\Omega = 0.15t$, respectivamente), obtemos as Figuras 1.5 e 1.6, respectivamente. Em ambos os casos, o comportamento de U_c é dado por Eq. (1.17), com os valores de A e B sendo aproximadamente os mesmos.

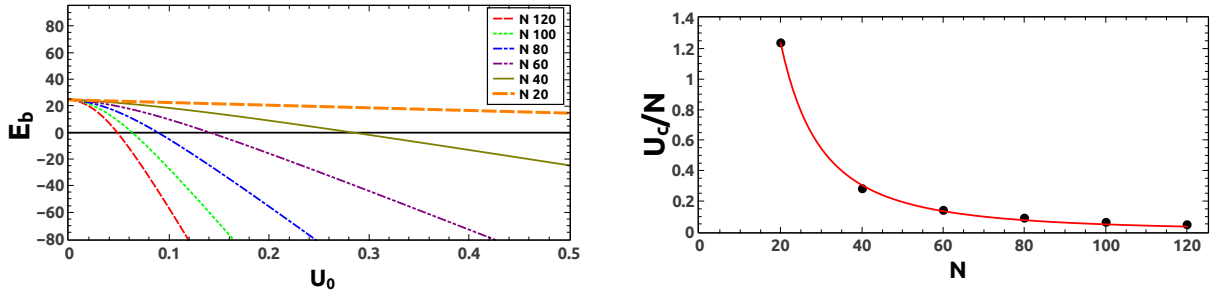


Fig. 1.5: No painel à esquerda temos o gráfico da energia de ligação do par para uma casca da ordem de $0.2 k_F$. Já o painel à direita mostra a interação crítica como função do tamanho da cadeia.

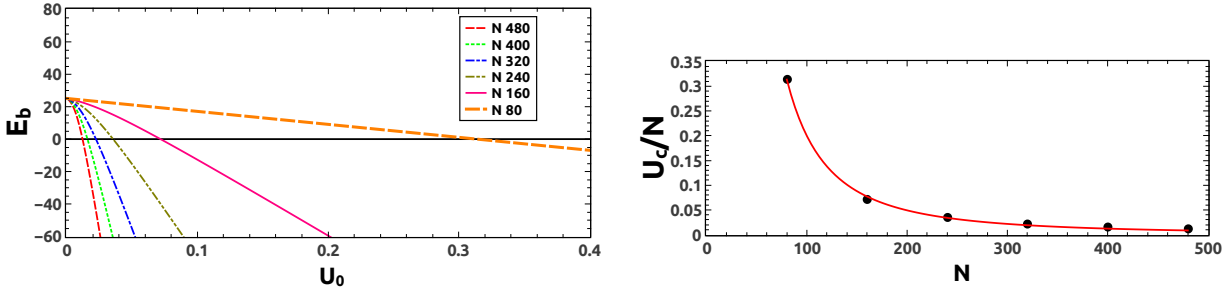


Fig. 1.6: No painel à esquerda temos o gráfico da energia de ligação do par para uma casca da ordem de $0.05 k_F$. O painel à direita mostra a interação críticas correspondentes, como função do tamanho da cadeia.

Apesar das curvas de energia de ligação, E_b , e interação crítica, U_c , não terem seu comportamento alterado, pode-se notar que o aumento na largura da casca produz dois efeitos. O primeiro é uma redução no tamanho mínimo da cadeia, o que já era previsto na Eq. (1.12). O segundo efeito pode ser visto através da Fig 1.7, que mostra o E_b vs U_0 , para $N = 80$ e diferentes cascas. Vemos que U_c diminui a medida que aumentamos a casca; isto ocorre porque para uma cadeia com N sítios, ao aumentarmos a casca, aumentamos o número de estados acessíveis dentro dela, como pode ser visto também da Eq. (1.12). Este aumento no número de estados da casca favorece a formação do par ligado e reduz U_c .

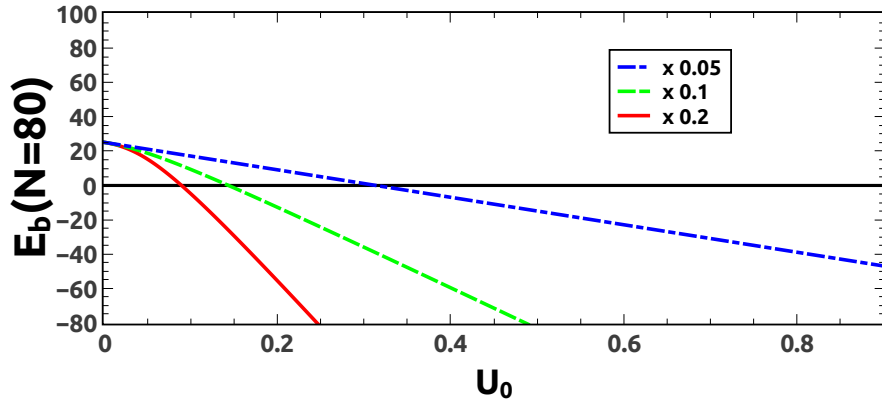


Fig. 1.7: Valores de E_b para $N = 80$ para as três cascas analisadas.

A análise do Problema de Cooper em cadeias 1D finitas, nos permite tirar algumas conclusões. Em primeiro lugar, observa-se que há um valor mínimo para a largura da casca, que permite alocar um par de estados dentro dela. Além disso, pode-se acrescentar estados dentro da casca crescendo o número de sítios N . Ambos os casos são resumidos por uma lei direta que relaciona a largura da casca, número de sítios e a quantidade de estados dentro da casca, dada pela Eq (1.12).

A análise da energia de ligação indica que não há formação de um par ligado até um valor crítico U_c , cuja dependência com o tamanho do sistema, N , é $U_c(N) = A/N^B$, independente da espessura da casca de energia. Por outro lado, para um mesmo valor de N e cascas de largura diferentes vemos que U_c é menor quanto maior for a casca, reflexo do aumento no número de estados dentro de Ω (uma casca mais larga, tem mais estados e portanto um U_c menor). No entanto, quando $N \rightarrow \infty$, recuperamos o resultado conhecido de que qualquer valor não-nulo de interação atrativa leva a um estado ligado. Nos próximos capítulos examinaremos o caso de muitos elétrons, descrito pela Hamiltoniana BCS. Porém, devemos usar um método numérico mais eficiente, como o método de Lanczos. Dedicaremos o próximo capítulo à descrição dos detalhes técnicos desta metodologia, apresentando no Capítulo 3, os resultados para o modelo BCS em cadeias 1D.

Capítulo 2

Métodos de Diagonalização Exata

2.1 Diagonalização Direta

Quando se busca analisar propriedades físicas de um sistema de partículas interagentes, um ponto de partida é buscar soluções exatas para a Hamiltoniana que o descreve. No entanto, mesmo lançando mão de aproximações a tarefa de encontrar soluções exatas de forma analítica ainda é algo desafiador; em uma dimensão existem soluções conhecidas para algumas Hamiltonianas obtidas a partir do *Bethe ansatz* [5], [6]. Assim, uma das alternativas é recorrer a métodos numéricos sem viés, para extrair o máximo possível de informações. Dentro deste contexto, podemos usar o método de diagonalização direta da matriz Hamiltoniana, porém pagando-se o preço de estar longe do limite termodinâmico.

A diagonalização exata pode ser utilizada para obter todo o espectro de uma Hamiltoniana. Porém, aqui o interesse principal é determinar apenas o estado fundamental de um sistema de muitos corpos interagentes, e com ele analisar valores esperados de alguns observáveis e funções de correlação. No entanto, existem algumas limitações ligadas diretamente à capacidade de armazenamento na memória dos computadores, já que em geral a dimensão do espaço de Hilbert leva a matrizes muito grandes. Para exemplificar, considere um sistema de férmions numa rede com N sítios no espaço real [6]: a dimensão do espaço de Hilbert desse sistema é $D = 4^N$. Este crescimento exponencial do espaço de Hilbert com N , em geral, limita a análise numérica a redes pequenas, uma vez que se

torna impraticável, mesmo para o melhor computador, lidar com operações em um espaço composto por uma quantidade muito grande de vetores de estado.

Devido às dificuldades técnicas de memória e tempo computacional, buscamos por implementações que viabilizem a diagonalização para sistemas maiores, como recorrer a propriedades de simetrias do problema, que nos permite encontrar uma base onde a Hamiltoniana assume uma forma bloco-diagonal. Como exemplo, podemos caracterizar os blocos em setores com número de elétrons, $N_e = N_\uparrow + N_\downarrow$, fixos, cujas dimensões são $D = \binom{N}{N_\uparrow} \binom{N}{N_\downarrow}$, onde N_\uparrow (N_\downarrow) é o número de elétrons com spin up (down) e as expressões do lado direito da igualdade de D são combinatórias. A Fig. 2.1 ilustra a forma que uma matriz Hamiltoniana assume devido ao uso de simetrias.

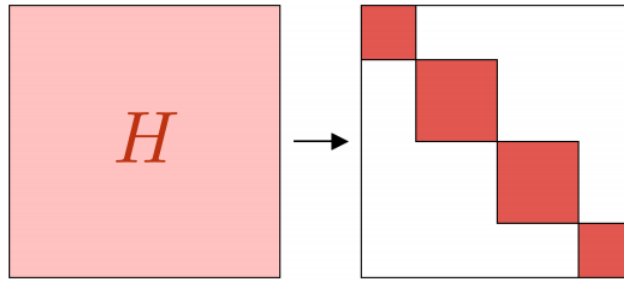


Fig. 2.1: Mostra o uso de simetrias em uma Hamiltoniana [2]. A Hamiltoniana que antes (lado esquerdo) tinha seus elementos mais espaçados, depois da implementação de simetrias, assume uma configuração bloco-diagonal (lado direito).

Para apresentar detalhes técnicos do método, é instrutivo discutir inicialmente a construção dos vetores de base. Assim, na próxima seção abordaremos o formalismo adequado para representar uma base completa para um sistema de elétrons interagentes, em um ensemble canônico.

2.1.1 Base do Número de Ocupação

Para trabalhar com sistemas de muitos corpos utilizamos a base do número de ocupação, devido às inúmeras simplificações que ela nos proporciona [7]. Nesta base, definimos

um vetor de estado como

$$|\Psi\rangle \equiv |n_{m_1} \dots n_{m_i} \dots\rangle = (c_{m_1}^\dagger)^{n_{m_1}} \dots (c_{m_i}^\dagger)^{n_{m_i}} \dots |0\rangle, \quad (2.1)$$

onde $c_{m_i}^\dagger$ é o operador de criação de partículas num dado estado m_i , enquanto n_{m_i} é o número de partículas ocupando esse estado. As propriedades do estado $|\Psi\rangle$ dependem das relações de comutação ou anti-comutação relacionadas aos operadores de criação, e destruição, de partículas [8]. No caso fermiônico, esses operadores seguirão regras de anti-comutação.

Para exemplificar a importância da base do número de ocupação, vamos analisar um sistema com 2 férmions e 4 estados, como mostrado abaixo [9],

$$|001_{m_3} 1_{m_4}\rangle = (c_{m_1}^\dagger)^0 (c_{m_2}^\dagger)^0 (c_{m_3}^\dagger)^1 (c_{m_4}^\dagger)^1 |0_{m_1} 0_{m_2} 0_{m_3} 0_{m_4}\rangle. \quad (2.2)$$

Os índices m 's dos operadores de criação podem representar níveis de energia ou posições dos sítios em uma rede cristalina, no espaço real, ou ainda momentos, no espaço recíproco. A forma como os sobrescritos da Eq. (2.2) são dispostos já estabelece uma analogia direta com uma representação binária. Observe que esse estado pode ser descrito como sendo o número binário 0011, lembrando que as posições dos bits correspondem aos respectivos operadores de criação. Desta maneira, podemos associar um estado de base a um número inteiro que, neste caso particular, seria

$$|001_{m_3} 1_{m_4}\rangle_{bin} \equiv 0011 \equiv 3, \quad (2.3)$$

o subscrito "bin" significa que estamos escrevendo o vetor de estado na base binária.

Estabelecido o protocolo para representar estados por uma sequência binária, podemos construir todo um conjunto de vetores de base representados por números inteiros, já incluindo informações sobre os tipos de simetrias [2] associadas ao sistema físico em análise.

2.1.2 Organização do espaço de Hilbert

Devido às relações de anti-comutação de férmions, a organização do espaço de Hilbert [i.e., como dispomos os operadores de criação na Eq. (2.1)] é de fundamental importância no nosso trabalho, para a eficiência do código. Dada a Hamiltoniana BCS

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad \mathbf{k}' \neq \mathbf{k}, \quad (2.4)$$

cujos detalhes discutiremos no próximo capítulo, note que o termo de dispersão $\epsilon(\mathbf{k})$ é proporcional ao operador número (i.e., é um termo diagonal), logo sua atuação não altera um estado da base do sistema. Porém, o termo de interação é não-diagonal, levando a transições entre estados e a permutações de férmions. Tais permutações adicionam fases ± 1 , aumentando o grau de complexidade da análise numérica do sistema. No entanto, enfatizamos que isto depende diretamente de como organizamos o espaço de Hilbert, uma vez que uma escolha mais adequada pode facilitar a análise.

Para ilustrar isso, vamos considerar um estado com 4 elétrons (2 elétrons up e 2 down), em um espaço recíproco que contém 4 momentos disponíveis,

$$|\Psi_{\mathbf{k}\sigma}\rangle = |\downarrow_{-\mathbf{k}_2} \uparrow_{\downarrow_{-\mathbf{k}_1}} \uparrow_{\mathbf{k}_1} 0_{\mathbf{k}_2}\rangle. \quad (2.5)$$

Levando em conta que a Hamiltoniana conserva a componente total de spin na direção z , S_{total}^z , podemos organizar o espaço de Hilbert em blocos rotulados pelos autovalores de S_{total}^z , e assim reescrever a Eq. (2.5) como

$$|\Psi_{\mathbf{k}\sigma}\rangle = |\downarrow_{-k_2} \uparrow_{\downarrow_{-k_1}} \uparrow_{k_1} 0_{k_2}\rangle \equiv \underbrace{|0_{-k_2} \ 1_{-k_1} \ 1_{k_1} \ 0_{k_2} \ 1_{-k_2} \ 1_{-k_1} \ 0_{k_1} \ 0_{k_2}\rangle}_{\uparrow \qquad \qquad \qquad \downarrow}. \quad (2.6)$$

De acordo com a representação dos operadores de criação, o espaço de Hilbert está disposto na forma

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{k}\sigma}\rangle &= (c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger)^0 (c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger)^1 (c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger)^1 (c_{\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger)^0 (c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger)^1 (c_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger)^1 (c_{\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger)^0 (c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger)^0 |0\rangle \\ &= c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Vamos realizar uma operação com o segundo termo da Hamiltoniana BCS, para um caso específico onde destruimos os elétrons no estado $(\mathbf{k}_1 \uparrow, -\mathbf{k}_1 \downarrow)$ e criamos um par ligado no estado $(-\mathbf{k}_2 \uparrow, \mathbf{k}_2 \downarrow)$, obtendo assim um novo vetor de estado $|\Psi'_{\mathbf{k}\sigma}\rangle$

$$|\Psi'_{\mathbf{k}\sigma}\rangle = c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow} c_{\mathbf{k}_1\uparrow} |\Psi_{\mathbf{k}\sigma}\rangle = c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow} c_{\mathbf{k}_1\uparrow} \left\{ c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger \right\} |0\rangle. \quad (2.8)$$

Seguindo as regras de anticomutação destes operadores fermiônicos, temos então

$$\begin{aligned} |\Psi'_{\mathbf{k}\sigma}\rangle &= (-1) c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger |0\rangle \\ &= (-1) c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger |0\rangle, \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde podemos ver o surgimento de uma fase (-1) no novo estado resultante; esta fase é fruto das permutações entre operadores fermiônicos e das suas relações de anti-comutação. Por isso é crucial a forma como organizamos nosso espaço, ou, em outras palavras, como dispomos nossos operadores fermiônicos na representação dos vetores de estado.

Vamos tomar agora o mesmo estado da Eq. (2.7), mas organizando o espaço em pares na forma

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{k}\sigma}\rangle &= (c_{\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger)^0 (c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger)^1 (c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger)^1 (c_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger)^1 (c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger)^0 (c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger)^0 (c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger)^1 (c_{\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger)^0 |0\rangle \\ &= c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Os estados (2.10) e (2.7) são essencialmente os mesmos, mas o fato de organizarmos os operadores em pares $(\mathbf{k}\sigma, -\mathbf{k} - \sigma)$ faz com que a operação do termo de interação sobre o vetor de estado em questão, gere um $|\Psi'_{\mathbf{k}\sigma}\rangle$ sem uma fase (-1) . Para ilustrar isso vamos, novamente, atuar com o termo de interação sobre o vetor de estado (2.10)

$$\begin{aligned} |\Psi'_{\mathbf{k}\sigma}\rangle &= c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow} c_{\mathbf{k}_1\uparrow} |\Psi_{\mathbf{k}\sigma}\rangle \\ &= c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow} c_{\mathbf{k}_1\uparrow} \left\{ c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger \right\} |0\rangle \\ &= c_{-\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

O desaparecimento da fase é reflexo, como já mencionado, de o espaço de Hilbert estar agora organizado em pares. Os operadores sempre permutam uns sobre os outros, dois a

dois, o que no final nos dá um número par de permutas e elimina a fase. Ou seja a forma como organizamos os rótulos dos momentos do espaço de Hilbert nos leva ao surgimento, ou não, de uma fase resultante da atuação do termo de interação.

2.2 Algoritmo de Lanczos

Nessa seção finalizaremos os detalhes técnicos discutindo o método de Lanczos, que é muito utilizado sendo associado a diagonalização exata de Hamiltonianas diversas. Como iremos recorrer a ele em nosso trabalho, por motivos que ficarão claros a seguir, vamos resumí-lo nas próximas linhas.

A ideia central do método de Lanczos é diagonalizar uma Hamiltoniana- H em um subespaço no qual a forma matricial de H é tridiagonal. Se esse subespaço for invariante, então os autoestados da Hamiltoniana nesse subespaço produzem um subconjunto de autoestados da Hamiltoniana no espaço completo de Hilbert. Escolhemos o subespaço de Krylov, que garante a convergência para autoestados extremos, com o intuito de obter o estado fundamental da Hamiltoniana.

2.2.1 Espaço de Krylov e a construção da base de Lanczos

O espaço de Krylov é um subespaço invariante do espaço de Hilbert. Ele é construído de tal forma que contenha com boa precisão o estado de mais baixa energia dentro de um dado setor de simetria da Hamiltoniana, H . Tomando um estado arbitrário, $|\Psi\rangle$, com seus elementos vetoriais gerados aleatoriamente dentro do espaço de Hilbert M -dimensional, iremos expandir esse estado arbitrário em termos dos autovetores da Hamiltoniana H (representados aqui por $|a_i\rangle$), agindo com potências de H sobre o estado de referência $|\Psi\rangle$, tem-se

$$H^n|\Psi\rangle = \sum_{i=0}^{M-1} c_i E_i^n |a_i\rangle = c_{max} E_{max}^n \left[|a_{max}\rangle + \sum_{i \neq max} \frac{c_i}{c_{max}} \left(\frac{E_i}{E_{max}} \right)^n |a_i\rangle \right]. \quad (2.12)$$

Se a potência n for grande, o estado correspondente ao autovalor com maior módulo $|E_{max}|$ (dependendo do nível de referência, podemos ter $max = 0$ ou $max = M - 1$) dominará a soma, contanto que o coeficiente $c_{max} \neq 0$. Conseqüentemente, agindo muitas vezes sobre o estado de referência, ele será projetado sobre os autoestados com autovalores E_{max} . Para garantirmos que o estado fundamental $|a_0\rangle$ seja obtido, devemos fazer em vez de H^n , $(H-c)^n$, onde c é um número positivo suficientemente grande, tal que, $|E_0-c| > |E_{M-1}-c|$.

A forma mais eficiente de construir um estado que se aproxime do estado fundamental de H , para n grande, é considerar não somente $H^n|\Psi\rangle$, mas sim todo o subespaço de Hilbert expandido por um conjunto de estados $H^m|\Psi\rangle$, $m = 0, \dots, n$. Estes estados podem ser gerados um por um, agindo sucessivas vezes com a Hamiltoniana sobre o vetor de referência [2]. Nesse subespaço (Espaço de Krylov) existe uma combinação linear que aproxima muito bem o estado fundamental.

Essa discussão sobre o espaço de Krylov nos permite compreender melhor o método de Lanczos, que depende da construção de uma base de vetores (*base de Lanczos*), que são combinações lineares dos vetores do espaço de Krylov [2]. A importância desse método está no fato de que nesta base de vetores a Hamiltoniana tem uma forma tridiagonal, o que facilita muito o processo de diagonalização, já que temos que armazenar um número bem menor de elementos que na representação original da Hamiltoniana.

A construção da base de Lanczos inicia-se com um vetor normalizado e arbitrário do espaço de Krylov $|\phi_0\rangle$ ($\{|\phi_m\rangle\}$; $m = 0, \dots, n$), para o qual é necessário apenas que ele não seja ortogonal ao estado fundamental de H . O próximo estado normalizado é construído iterativamente por meio da aplicação da Hamiltoniana H , da seguinte forma:

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1}} (H|\phi_0\rangle - a_0|\phi_0\rangle) . \quad (2.13)$$

Onde N_1 é uma constante de normalização, que pode ser determinada por cálculo direto do produto escalar do estado com ele próprio ($N_1 = \langle\phi_1|\phi_1\rangle$) e, para garantir a ortogonalidade

de $|\phi_1\rangle$ com $|\phi_0\rangle$, determinamos a_0 como:

$$a_0 = \langle \phi_1 | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | H | \phi_0 \rangle = H_{00} . \quad (2.14)$$

Podemos gerar todos os estados seguintes de forma análoga. Temos então que os $m + 1$ estados são dados da seguinte forma,

$$|\phi_{m+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{m+1}} (H|\phi_m\rangle - a_m|\phi_m\rangle - N_m|\phi_{m-1}\rangle) = \frac{|\gamma_{m+1}\rangle}{\sqrt{N_{m+1}}} , \quad (2.15)$$

onde $a_m = \langle \phi_m | H | \phi_m \rangle$ e $N_m = \langle \gamma_m | \gamma_m \rangle$. Como podemos perceber, geramos uma base que contém $n + 1$ vetores. Nesta base podemos construir os elementos da matriz Hamiltoniana da seguinte forma:

$$\langle \phi_{m-1} | H | \phi_m \rangle = \sqrt{N_m} \quad (2.16)$$

$$\langle \phi_m | H | \phi_m \rangle = a_m \quad (2.17)$$

$$\langle \phi_{m+1} | H | \phi_m \rangle = \sqrt{N_{m+1}} \quad (2.18)$$

As formas descritas nas Eq. (2.16)-(2.18) são os elementos de uma matriz tridiagonal, como dito anteriormente. Assim, a matriz resultante é:

$$H = \begin{bmatrix} a_0 & \sqrt{N_1} & \cdots & 0 \\ \sqrt{N_0} & a_1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \sqrt{N_{m+1}} \\ 0 & \cdots & \sqrt{N_m} & a_m \end{bmatrix} . \quad (2.19)$$

Observe que os elementos $\sqrt{N_{m+1}}$ e $\sqrt{N_m}$, das diagonais posterior e anterior à diagonal principal, respectivamente, são complexos conjugados uns dos outros. Além do mais, o esforço computacional para diagonalizar uma matriz do tipo (2.19) é bem menor já que temos que armazenar e gerar bem menos elementos do que em uma matriz completa, fazendo com que em geral o custo computacional para gerar o determinante de uma matriz tridiagonal seja linear m , enquanto é da ordem de m^3 em uma matriz completa.

Capítulo 3

Teoria BCS: formação de muitos pares de Cooper

3.1 Soluções de Campo médio da Hamiltoniana BCS

A teoria BCS se baseia na formação cooperativa de muitos pares de Cooper [1]. Vamos, nesta seção, fazer uma breve discussão sobre a Hamiltoniana BCS que descreve a dinâmica de formação desses pares, como é feito em geral na literatura, para que possamos em seguida comparar com nossos resultados exatos obtidos em sistemas de tamanho finito.

A forma mais geral da Hamiltoniana BCS é [10]

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}, \quad \mathbf{k}' \neq \mathbf{k} \quad (3.1)$$

O termo de emparelhamento em H_{BCS} é derivado de uma interação efetiva elétron-elétron mediada por fônons da rede cristalina do material, e sua forma é

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}} = \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}',-\mathbf{q}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}})^2 - \hbar^2\omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad (3.2)$$

onde \mathbf{k} e \mathbf{k}' são os momentos lineares eletrônicos, \mathbf{q} é o vetor associado ao fônon da rede, e $\omega_{\mathbf{q}}$ é frequência associada a esse fônon. A Eq. (3.2) é uma interação efetiva devida ao espalhamento de dois elétrons em estados com momentos \mathbf{k} e \mathbf{k}' em novos, com momentos $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ e $\mathbf{k}' - \mathbf{q}$, por meio da troca de um fônon de momento \mathbf{q} . Além disso, os termos $\alpha_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$ e $\alpha_{\mathbf{k}',-\mathbf{q}}$ representam constantes complexas de acoplamento elétron-fonon,

e são associadas ao produto interno do vetor de polarização dos fonons com a diferença, $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$, dos momentos dos elétrons envolvidos no processo de espalhamento [11], [1].

No contexto de pares de Cooper em supercondutores convencionais, a interação efetiva entre elétrons de momentos \mathbf{k} e $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ é de especial importância. Neste caso, podemos escrever $\alpha_{-\mathbf{k}, -\mathbf{q}} = \alpha_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^*$, e então

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}} = |\alpha_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - \hbar^2\omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (3.3)$$

De (3.3) notamos que há dois regimes distintos para a interação efetiva, ambos relacionados à energia dos fonons, $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$. Se $0 < |\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}| < \hbar\omega_{\mathbf{q}}$, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}}$ é uma interação atrativa entre elétrons; por outro lado, se $|\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}| > \hbar\omega_{\mathbf{q}}$, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}}$ é uma interação repulsiva entre elétrons.

A interação efetiva elétron-elétron, mediada por fonons, é limitada a priori apenas por uma faixa de energia característica dos fonons como fica evidente em (3.3), mas não há, em princípio, para $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}}$, algo como uma simetria privilegiada que defina sua forma. Mais que isso, a parte interagente da Hamiltoniana (3.1) pode ser expandida em termos que permitem, por exemplo, a existência de canais do tipo tripleto [10]. No entanto, considerar todas as interações possíveis de H_{BCS} é algo desafiador, de forma que inicialmente aproximações são feitas em benefício da simplicidade.

Um ponto de partida para analisar H_{BCS} é considerar a interação $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}}$ como favorecendo um estado singlete do tipo onda-s, onde tomamos $|\mathbf{q}| = 0$ e $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0 = -V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}^0$, e tratando inicialmente o estado fundamental, $T = 0$. Além disso, definimos a faixa de energia de corte como sendo da ordem da energia de Debye (tal como no problema de Cooper) em torno do nível de Fermi; em geral, esta escala é escolhida como a dos fonons acústicos da rede, que dão as contribuições na maioria dos casos para os processos de espalhamento. Além disto, $\hbar\omega_D$ é muito menor que a energia de Fermi, de modo que a casca de energia se concentra apenas na região onde os elétrons podem sofrer excitações, no gás de elétrons, provenientes de espalhamentos por fonons e assim podem levar

à interação atrativa descrita. Logo, a aproximação BCS, considera a interação atrativa pequena e aproximadamente constante, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0 = -V_0$ [1], de modo que podemos reescrever a Hamiltoniana BCS como

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0 c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} . \quad (3.4)$$

Para analisar H_{BCS} podemos tratar diretamente o termo de interação da Hamiltoniana desacoplando os operadores por meio de uma aproximação de Hartree-Fock [11],

$$\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \approx \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle . \quad (3.5)$$

Definindo então a *função gap* como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle, \quad (3.6)$$

podemos reescrever a Hamiltoniana como,

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle . \quad (3.7)$$

Efetuada uma transformação canônica nos operadores $c_{\mathbf{k}\sigma}$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$, para novos operadores fermiônicos $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}$ e $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$, com o auxílio de coeficientes $v_{\mathbf{k}}$ e $u_{\mathbf{k}}$, a determinar,

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, & \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} &= u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}, & \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Esta transformação é conhecida como transformação de Bogoliubov-Valatin [1]. As constantes são normalizadas seguindo as regras de anticomutação dos operadores fermiônicos, da seguinte forma,

$$\{c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{\mathbf{k}\sigma'}^\dagger\} = [|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2] \{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}\sigma'}^\dagger \} . \quad (3.9)$$

Para que os novos operadores fermiônicos anticomutem seguindo as mesmas regras de $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}$, tomamos

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 . \quad (3.10)$$

Os novos operadores são denominados Bogoliubons e são ditos de quasi-partículas, por representarem combinações de elétrons e buracos. Podemos reescrever os operadores $c_{\mathbf{k}\sigma}$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ em termos dos Bogoliubons e das novas variáveis, e então a Eq. (3.7) torna-se

$$H_{BCS}^{Bogo} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\epsilon_{\mathbf{k}}(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) + \Delta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^*u_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}] \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} [2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}^2] \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + h.c. \quad (3.11)$$

A estratégia é encontrar os parâmetros $v_{\mathbf{k}}$ e $u_{\mathbf{k}}$ que diagonalizem H_{BCS}^{Bogo} , fazendo com que o termo que mistura as quasipartículas (termos dentro do somatório vinculado a $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$) desapareça. Desta forma, teremos no final,

$$H_{BCS}^{Bogo} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma} + E_0 \quad (3.12)$$

com $v_{\mathbf{k}}$ e $u_{\mathbf{k}}$ sendo dados em módulo por

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right) \quad (3.13)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right) \quad (3.14)$$

Além disso, E_0 é a energia do estado fundamental BCS, dada por

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right) \quad (3.15)$$

onde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ é a energia de excitação do espectro das quasipartículas.

Podemos ver das Equações (3.13), (3.14) e (3.8) que criar, no estado normal, um Bogoliubon corresponde a criar um elétron com energia acima do nível de Fermi, e um buraco de momento e spins opostos em um nível inferior ao nível de Fermi. Assim, no estado supercondutor, Bogoliubons podem ser entendidos como uma superposição de um elétron e um buraco. Neste caso, a função de onda do estado fundamental BCS, corresponde ao vácuo dos Bogoliubons. Portanto, podemos escrever

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma} |\Psi_{BCS}^0\rangle = 0. \quad (3.16)$$

Para fazer uma análise na representação eletrônica original dos operadores $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$) reescrevemos a Eq. (3.16) como,

$$u_{\mathbf{k}\uparrow}c_{\mathbf{k}\uparrow}|\Psi_{BCS}^0\rangle = v_{\mathbf{k}\uparrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|\Psi_{BCS}^0\rangle, \quad (3.17)$$

de modo que podemos ainda escrever $|\Psi_{BCS}^0\rangle$ como uma combinação arbitrária de pares de Cooper na forma,

$$|\Psi_{BCS}^0\rangle = \mathcal{N} \prod_{\mathbf{k}} e^{\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle, \quad (3.18)$$

onde \mathcal{N} é um fator de normalização, definido a partir de $\langle\Psi_{BCS}^0|\Psi_{BCS}^0\rangle$. Para finalizar, podemos reescrever ainda o estado fundamental BCS como,

$$\begin{aligned} |\Psi_{BCS}^0\rangle &= \mathcal{N} \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle \\ &= \mathcal{N} \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \end{aligned} \quad (3.19)$$

com a normalização $\mathcal{N} = \langle\Psi_{BCS}^0|\Psi_{BCS}^0\rangle = \langle 0| |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 |0\rangle = 1$, onde usamos a Eq. (3.10) dos coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$. Por fim, temos

$$|\Psi_{BCS}^0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (3.20)$$

A Eq. (3.20) deixa claro que $|\Psi_{BCS}^0\rangle$ está descrito em um formalismo onde o número de partículas não é definido a priori, característico do ensemble Grande Canônico.

Para finalizar, definimos a energia de condensação como [1]

$$E_{cond} = E_0 - 2 \sum_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_F} \epsilon_{\mathbf{k}}. \quad (3.21)$$

O segundo termo da Eq. (3.21) representa a energia do sistema no caso não-interagente e E_0 é a energia do estado fundamental para o caso interagente. Esta energia de condensação será bastante útil em nossa análise, pois no limite termodinâmico e na descrição de campo médio, E_b é sempre negativo [1]. Isto reflete o fato que o emparelhamento leva à condensação de elétrons em pares ligados (pares de Cooper) por menor que seja a interação efetiva, diminuindo a energia do sistema na fase supercondutora.

Nas próximas seções veremos como esta análise pode ser modificada quando tratamos de sistemas de tamanho finito, nos quais os níveis de energias são discretos. Nossa análise se restringirá a cadeias unidimensionais, resumidamente.

3.2 Soluções exatas da Hamiltoniana BCS via método de Lanczos

Tendo feito uma discussão genérica sobre o método de Lanczos no capítulo anterior, aplicaremos aqui uma versão modificada do método de Lanczos (descrito no Apêndice A) para diagonalizar matrizes com dimensões bem maiores do que as que aparecem no problema de Cooper, uma vez que temos mais corpos interagindo. A princípio, como estamos em sistemas de tamanho finito e em banda semipreenchida, nosso sistema pode apresentar efeitos de camada aberta ou fechada. Em outras palavras, as cadeias podem ter um nível de Fermi completo, sendo portanto camada fechada ($N = 14, 18, \dots, 4n + 2$; onde n é um número inteiro) ou um nível de Fermi incompleto, sendo camada aberta ($N = 12, 16, \dots, 4n$; onde n é um número inteiro). Assim, nesta seção apresentaremos resultados para as duas classes de camadas, com o objetivo de averiguar até que ponto a análise difere de camada aberta para camada fechada.

3.2.1 Soluções para Cadeias 1D: Caracterização e abordagem do Problema

A caracterização do problema é muito semelhante à feita no caso do par de Cooper para redes finitas. Trabalharemos em regime de banda semipreenchida $N = L = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$, com a Hamiltoniana

$$H_{BCS}^{1D} = \sum_{k\sigma} (-2t \cos k) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} - U_0 \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{-k'\downarrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}, \quad k' \neq k, \quad (3.22)$$

já admitindo a priori um caso de simetria-s para o potencial $V_{kk'} = -U_0$, e uma constante de rede a unitária. A principal diferença está na presença de mais partículas interagindo dentro de uma casca definida a priori. Quanto à definição da casca, esta segue o que foi

discutido anteriormente, com a diferença de que a faixa de energia que antes estava acima do nível de Fermi, agora está em torno deste nível. Ou seja, seus limites são tomados como uma fração de k_F acima e abaixo do mesmo, levando a uma casca aproximadamente simétrica em torno do nível de Fermi, como na Fig. 3.1. Tomar uma casca de energia acima e abaixo do nível de Fermi é feito de modo a considerar a região onde os elétrons podem sofrer excitações, proveniente de uma interação atrativa efetiva, e assim interagirem indiretamente com outros elétrons de momentos e spins opostos, formando pares de Cooper.

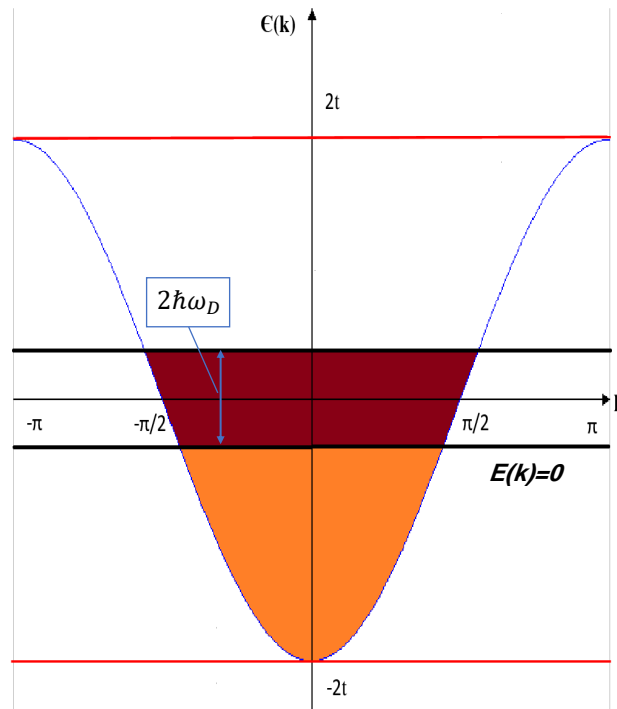


Fig. 3.1: Representação da banda semipreenchida para dispersão cossenoidal utilizada. A parte destacada em laranja é a região não-interagente, enquanto que a casca em torno do nível de Fermi é a região destacada em tom mais escuro.

É importante destacar uma diferença técnica fundamental entre este caso e o problema de Cooper. A largura da casca, Ω , e o tamanho da cadeia definem o número total de elétrons que participam do processo de formação de pares. A casca seleciona os estados próximos do nível de Fermi onde a interação atrativa é efetiva, mas como os níveis de energia se distribuem na banda conforme a Eq. (1.8), ao aumentarmos o número

de sítios da cadeia podemos acrescentar mais níveis $\epsilon(k)$ dentro da metade inferior da casca, situada abaixo de E_F e portanto composta por estados, k , duplamente ocupados por elétrons de spins opostos, no caso não-interagente.

Assim como no caso do problema de Cooper, faremos a diagonalização apenas no subespaço da casca, já que H_{BCS}^{1D} não mistura elementos da casca com os da região não-interagente, logo abaixo do seu limite inferior (core). Devemos então gerar os elementos de matriz como nas Equações (2.16)-(2.18), onde os vetores de estado em representação binária são do tipo da Eq. (2.3). A base para o espaço de Hilbert é formado por estados organizados como na Eq. (2.10) ou, de forma compacta, $|\Psi_k\rangle = \prod_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |0\rangle$, onde $|0\rangle$ é o vácuo de partículas que, no nosso caso, é o nível inferior da casca em torno do nível de Fermi. Ao diagonalizar a Hamiltoniana, obtemos seu estado fundamental e a energia associada, a partir dos quais nas próximas seções analisaremos diferentes grandezas como funções do tamanho da cadeia e da intensidade da interação atrativa .

3.2.2 Energia de condensação, formação de pares de Cooper e efeitos de paridade para cadeias 1D finitas

É importante salientar que apresentaremos nosso resultado para apenas um tamanho de casca, uma vez que o problema de Cooper nos mostrou que aumentar ou reduzir o tamanho da casca, não muda de forma essencial o problema, interferindo apenas na amplitude da lei de formação da interação crítica. Como é de se esperar que ocorra algo semelhante no caso BCS, inicialmente tomaremos uma casca de tamanho fixo.

Uma vez obtida a energia do estado fundamental BCS, podemos agora analisar e contrastar com resultados já conhecidos de campo médio, a energia de condensação E_{cond} . A Fig. 3.2 mostra os resultados obtidos para três tamanhos de rede distintos, com $N = 14$, $N = 34$, $N = 54$ sítios, correspondendo respectivamente a 4, 8 e 12 estados dentro da casca; para o caso de camada fechada.

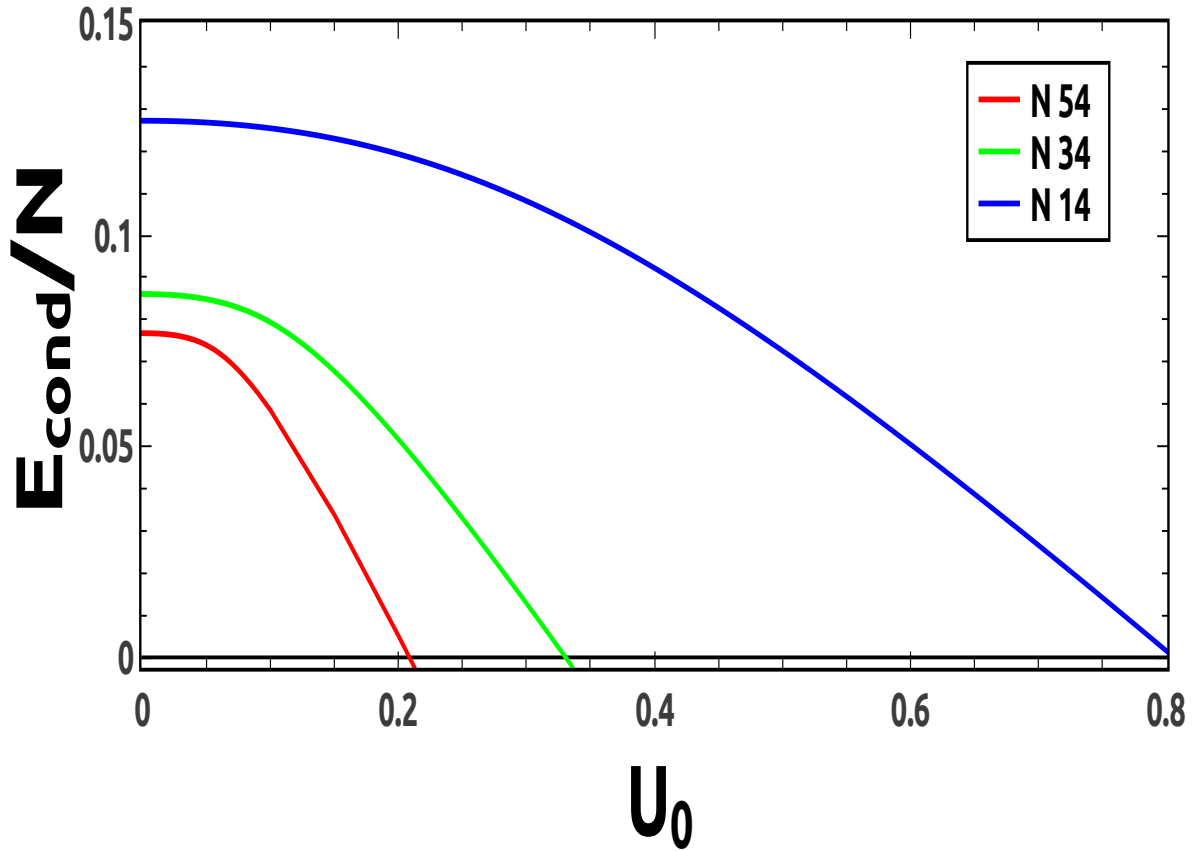


Fig. 3.2: Energia de condensação para o caso de camada fechada, para diferentes tamanhos de rede, e casca simétrica, com $x = 0.2$.

A primeira coisa a salientar é que as curvas da Fig. 3.2 têm um comportamento muito similar ao encontrado para a energia de ligação E_b no problema de Cooper. Isto é reflexo, mais uma vez, da competição entre um termo de energia cinética dos elétrons e um termo de interação, que favorece o emparelhamento de elétrons formando pares de Cooper, contribuindo para baixar a energia do sistema fermiônico.

O principal efeito desta competição é o surgimento de uma interação atrativa crítica, ou de corte, U_c , finita e que apresenta uma dependência funcional com o tamanho N da cadeia, semelhantemente ao que acontece no problema de Cooper, como podemos ver a seguir na Fig. 3.3.

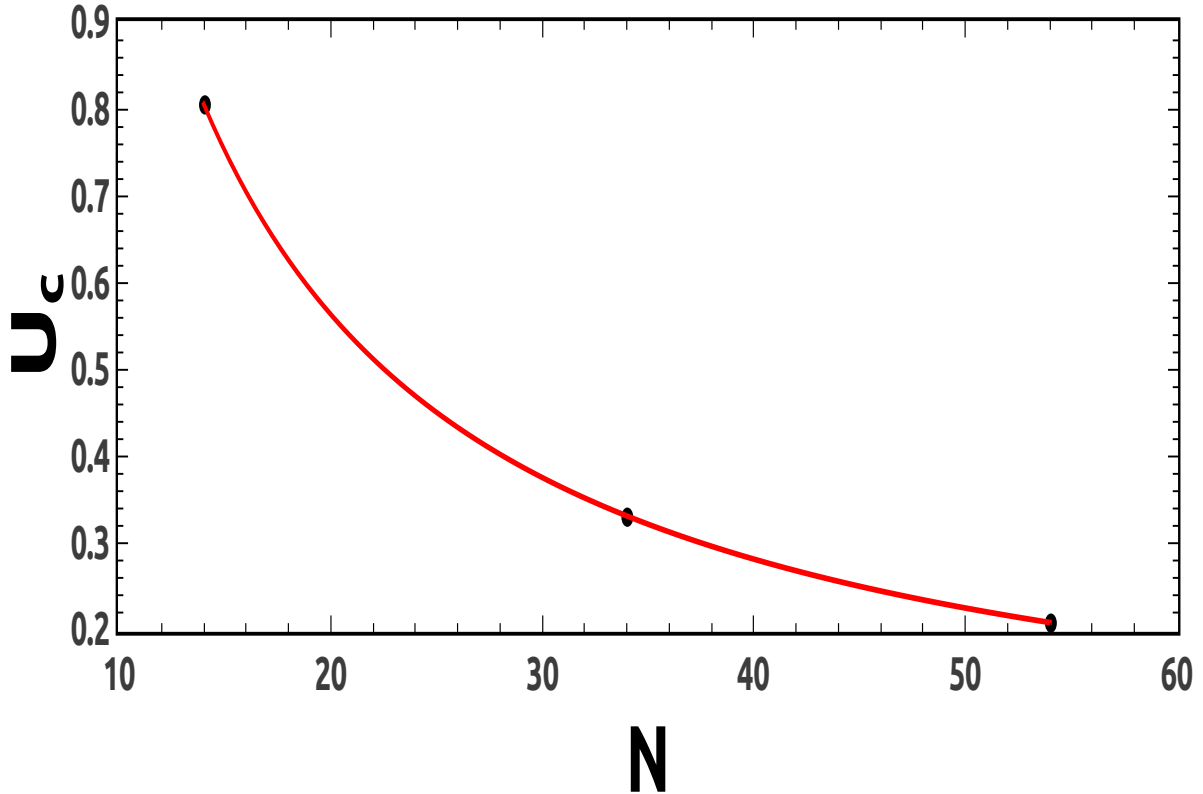


Fig. 3.3: Valores de interação crítica para diferentes tamanhos de rede, em um sistema camada fechada, para diferentes tamanhos de rede. A curva em vermelho é um ajuste dos pontos que nos fornece uma relação entre U_c e N .

O ajuste dos pontos, dado pela curva em vermelho no gráfico na Figura (3.3), fornece

$$U_c = \frac{A}{N^B}, \quad (3.23)$$

onde encontramos $B \approx 1$ e uma amplitude A (em unidades de t) da ordem de 10. Ou seja, o decaimento de U_c com N , no caso BCS é mais lento que para o caso do problema de Cooper. Uma razão para isto pode ser o fato de que o número maior de partículas interagindo no caso BCS, contribui com o aumento na energia cinética do sistema, tornando o decaimento de U_c mais suave, como resultado do efeito de competição com o termo de interação atrativa.

Os dados correspondentes à energia de condensação para o caso de camada aberta, e cadeias $N = 24$, $N = 44$, $N = 64$, correspondentes a 3, 5 e 7 pares de estados dentro da casca; são mostrados na Fig. 3.4.

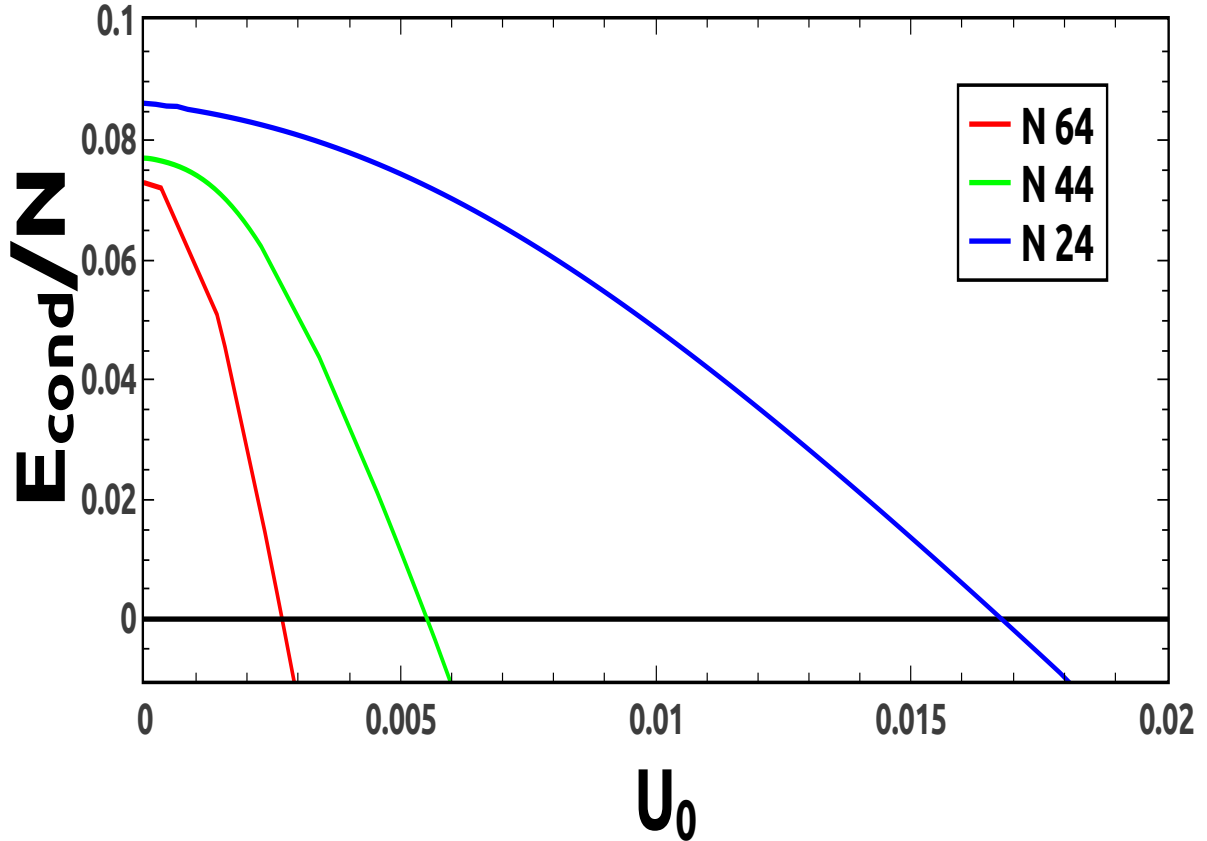


Fig. 3.4: Energia de condensação para o de caso camada aberta, para diferentes tamanhos de rede, e casca simétrica, com $x = 0.2$.

Vemos que o comportamento é análogo ao de E_{cond}/N para o caso de camada fechada, Fig. 3.2, dando origem a $U_c(N)$ dado por Eq. (3.23), inclusive com as constantes A e B praticamente iguais ao caso de camada fechada.

A energia de condensação nos dá uma ideia do comportamento do sistema quando aumentamos o valor da interação e favorecemos a formação de pares. Esta grandeza nos sugere o surgimento de um estado supercondutor no sistema, a partir de um valor crítico da interação atrativa.

Uma outra forma de caracterizar o estado supercondutor é através do número médio

de pares [12]

$$\langle \Psi_{BCS}^0 | N_{pair} | \Psi_{BCS}^0 \rangle = \frac{1}{L^d} \langle \Psi_{BCS}^0 | \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} | \Psi_{BCS}^0 \rangle \quad (3.24)$$

onde $b_{\vec{k}} = c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow}$ destrói um par no estado fundamental BCS, Ψ_{BCS}^0 , e $b_{\vec{k}}^\dagger = c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$ cria um par neste mesmo estado fundamental.

A Fig. 3.5 mostra os resultados para os casos de camada aberta e fechada. Vemos que há uma diferença entre o comportamento da camada aberta e fechada. Para a camada fechada o número de pares não depende de U_0 , ao passo que no caso de camada aberta há uma certa dependência com U_0 , no regime de interação fraca.

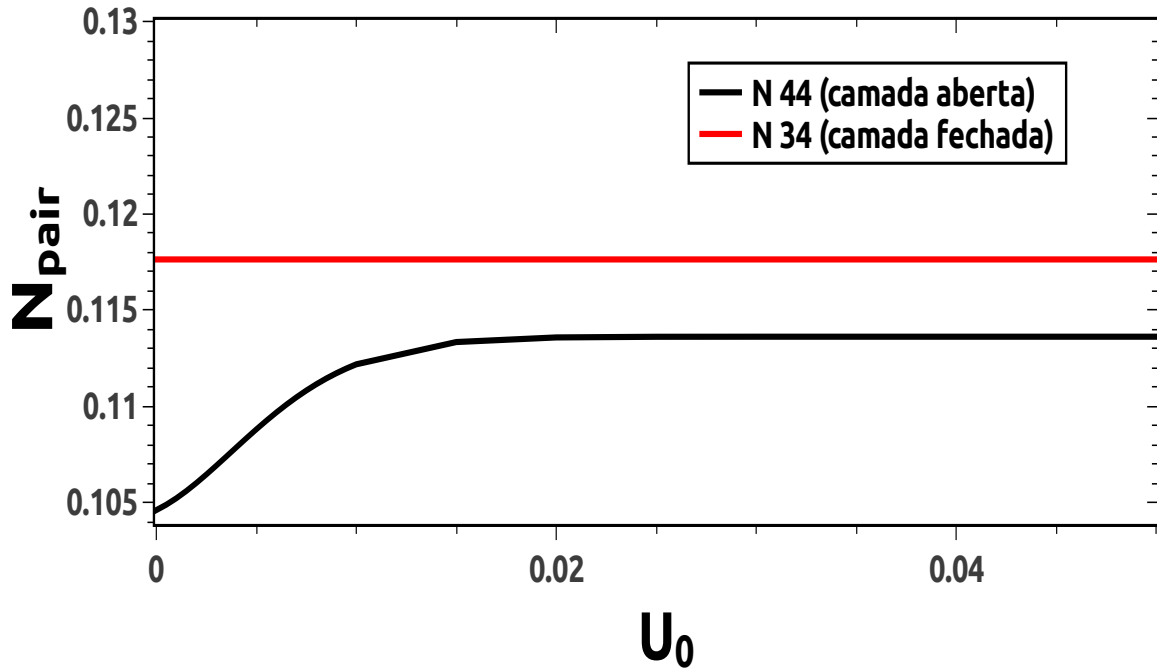


Fig. 3.5: Número de pares da Eq. (3.24) como função de U_0 para camada aberta e fechada. Os resultados são obtidos para uma casca simétrica, equivalente a $x = 0.2$, acima e abaixo de E_F

Uma explicação possível para o que ocorre nos dois casos é que no regime de camada aberta o estado fundamental do sistema não interagente é degenerado devido aos elétrons sobre o nível de Fermi incompleto, diferentemente do regime de camada fechada, onde isso não ocorre. Assim, os elétrons da camada incompleta podem estar

em uma configuração em que não podem ser espalhados em pares de Cooper pelo termo de interação da Hamiltoniana, mas contribuem com o crescimento da energia cinética do sistema. Isto faz surgir um valor limite de interação a partir do qual a formação de pares começa a estabilizar, até atingir a amplitude máxima. Neste ponto é importante lembrar que o estado fundamental BCS é obtido no ensemble gran-canônico. Em sistemas finitos, o número de partículas é fixo, logo o número de pares também deveria ser fixo a priori, não apenas em média. O que ocorre com este parâmetro no caso de camada aberta é fruto de correlações entre elétrons desemparelhados em um nível de Fermi incompleto.

Para finalizar, discutiremos efeitos de paridade em cadeias 1D, entendido aqui como distinguindo sistemas com números par ou ímpar de elétrons. Uma grandeza que pode caracterizar esta diferença é

$$\Delta_P = E_0^{2N_e+1} - \frac{1}{2}(E_0^{N_e+2} - E_0^{N_e}) , \quad (3.25)$$

onde $E_0^{N_e}$ é o estado fundamental de um sistema com N_e elétrons. Δ_P reflete essencialmente, o ganho energético que deve haver para acrescentar um elétron desemparelhado em um sistema de elétrons correlacionados, de modo que sistemas com um número total de elétrons ímpar, em geral são mais instáveis [13], [14] que aqueles com um número par. No presente caso, vamos, avaliar esta grandeza como função da intensidade da interação atrativa da Hamiltoniana BCS.

A Fig.3.6 mostra Δ_P para dois tamanhos de cadeias distintos, $N = 26$, e $N = 38$, para uma casca fixa, $0.2 k_F$.

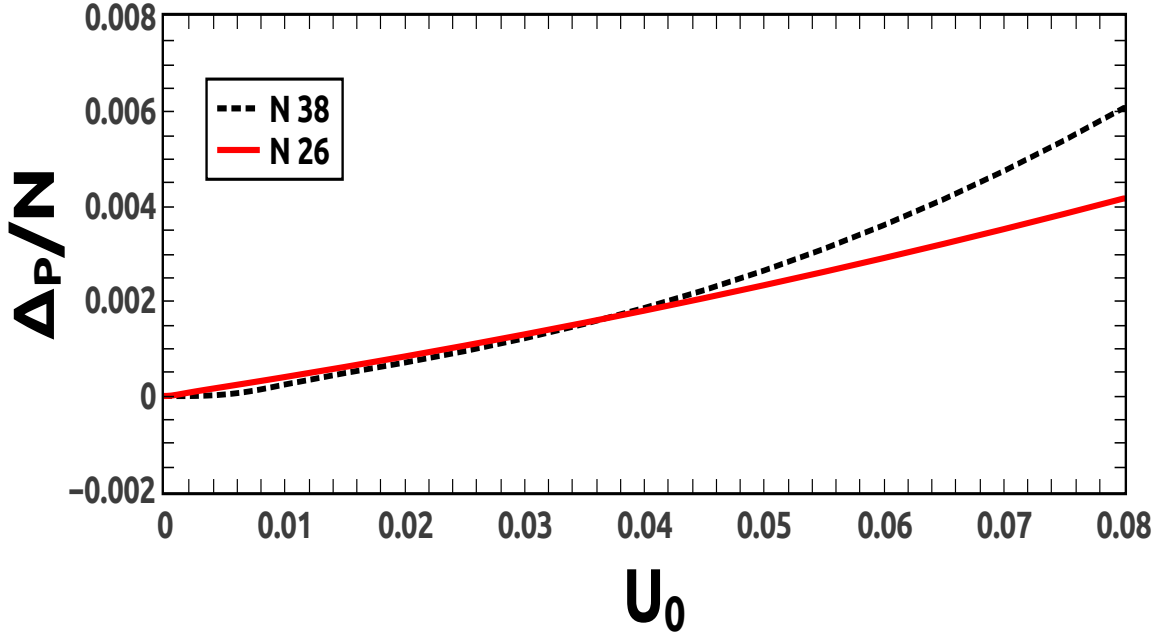


Fig. 3.6: As curvas mostram o valor do parâmetro de paridade $\frac{\Delta P}{N}$ como função da interação atrativa U_0 . É visível o crescimento desse parâmetro com U_0 , indicando um ganho energético com o aumento da interação atrativa.

Da Fig. 3.6 vemos que à medida em que aumenta a interação atrativa entre os elétrons, adicionar um elétron desemparelhado ao sistema torna-se cada vez mais custoso do ponto de vista energético. Ou seja, o sistema desenvolve uma espécie de blindagem contra a adição de partículas desemparelhadas.

Em resumo, pudemos identificar dois regimes distintos no estado fundamental BCS em redes unidimensionais finitas. Como no problema de Cooper (Cap. 1) estes regimes são separados por um valor de interação crítica, U_c acima do qual, notamos a existência de um estado com características supercondutoras, onde os elétrons dentro da casca se condensam em pares de Cooper; abaixo de U_c , temos um metal comum. Observa-se um comportamento distinto em camada fechada e aberta apenas para o número médio de pares como função da interação atrativa: no primeiro caso esta grandeza é uma função constante de U_0 , enquanto que no segundo caso ela cresce com U_0 , para pequenos valores de

interação atrativa, estabilizando em um valor constante para um valor limite de interação atrativa.

Por fim, conseguimos também identificar efeitos de paridade, observando que um sistema que contenha um número ímpar de partículas será instável com relação à formação de pares, devido aos elétrons desemparelhados. Logo sistemas finitos com um número par de partículas apresentam um estado fundamental mais estável e que tende a blindar a adição de partículas desemparelhadas.

Capítulo 4

Conclusões

A partir do nosso estudo em cadeias unidimensionais finitas, pudemos identificar algumas características relacionadas a escalas de energia e à discretização do sistema. Uma destas características está relacionada a definição de um parâmetro de controle, fixo, que desempenhe o papel da casca de energia da ordem da energia de Debye (característica dos fônons da rede). Definimos a largura da casca por meio de uma fração do vetor de onda de Fermi, k_F , e obtivemos uma relação entre x , o número de pares de estados dentro da casca, η , e o número de sítios, N , a saber, $Nx = 4\eta$.

Consideramos inicialmente o problema de Cooper, que consiste de um par de elétrons interagindo atrativamente na presença mar de Fermi. Através da energia de ligação, E_b , mostramos que para sistemas de tamanho finito há um valor crítico de interação atrativa, U_c , a partir do qual há a formação de um estado ligado. Observamos que $U_c \sim \frac{1}{N}$. Ao avaliar como E_b e U_c se comportam com a largura da casca, vemos que a forma assintótica de E_b e U_c não muda. Porém, para um mesmo N , há uma redução no valor de U_c à medida que aumentamos a largura da casca; ou seja, a inclusão de mais estados dentro da casca, favorecendo assim a formação do par ligado. Concluimos, então, que a largura da casca não altera qualitativamente os resultados, mas fornece uma escala que controla a quantidade mínima de sítios N , através de $Nx = 4$.

Finalmente, analisamos a Hamiltoniana BCS em sistemas 1D finitos, onde já consideramos uma casca de espessura fixa. Avaliamos a energia de condensação, E_{cond} , do

sistema como função da interação atrativa, e percebemos que há um valor crítico de interação, $U_c \sim \frac{1}{N}$, a partir do qual temos um estado supercondutor, semelhante ao que ocorria no problema de Cooper. Identificamos também efeitos de camada aberta e fechada, por meio da média do número de pares, N_{pair} : para camada fechada N_{pair} é constante com relação a U_0 , mas em camada aberta ele é uma função crescente da interação atrativa, para valores pequenos de U_0 . O comportamento para o caso de camada aberta pode ser explicado levando em conta o comportamento dos elétrons desemparelhados sobre o nível de Fermi, do caso não interagente.

Encerramos a análise da Hamiltoniana BCS neste trabalho discutindo efeitos de paridade em cadeias 1D finitas. Analisamos estes efeitos comparando a energia de sistemas com número par e ímpar de elétrons. Observamos que ter um elétron desemparelhado na casca (paridade ímpar) é mais custoso do ponto de vista energético, se uma interação atrativa é estabelecida entre os elétrons no interior da casca.

Concluimos, portanto, que a finitude da cadeia leva a existência de dois regimes, acima e abaixo de U_c . Isto deve ser levado em conta nas extrapolações dos dados para limite termodinâmico. Por exemplo, o estudo de funções de correlação de emparelhamento deve refletir estes dois regimes; este tema será adentrado na continuidade deste trabalho.

Apêndice A

Simetrias, Leis de Conservação, Média de Observáveis na Base de Lanczos e Lanczos modificado

A.0.1 Transformações de Observáveis

O conceito de simetrias de uma Hamiltoniana fica mais claro quando tratamos inicialmente de transformações no dispositivo de medida (referente aos operadores observáveis) e transformações de um sistema físico (descrito por uma dada função de onda em um instante t) [15]. Seja um observável Q e Γ , uma transformação no dispositivo de medida, essa transformação se reflete sobre o ato de medir, como, $Q' = \Gamma[Q]$, que é a transformação do observável $Q \rightarrow Q'$. Além disso, quando o sistema sofre a mesma transformação, sendo levado do estado $|\psi\rangle$ para o estado $|\psi'\rangle = \Gamma[|\psi\rangle]$, dessa forma, então, temos garantida a relação entre o dispositivo e o sistema, de modo que preservamos os valores esperados,

$$\langle\psi|Q|\psi\rangle = \langle\psi'|Q'|\psi'\rangle \quad (\text{A.1})$$

ou,

$$\langle\psi|Q|\psi\rangle = \langle\psi|\Gamma^\dagger Q' \Gamma|\psi\rangle \quad (\text{A.2})$$

por fim,

$$Q' = \Gamma Q \Gamma^\dagger. \quad (\text{A.3})$$

Onde usamos o fato de que $\Gamma\Gamma^\dagger = \Gamma^\dagger\Gamma = 1$, que reflete o motivo pelo qual chamamos

essas transformações de *Transformações Unitárias*. Então, para finalizar essa seção, vale ressaltar o teorema que: *Observáveis, unitariamente equivalentes tem o mesmo espectro*. Esse teorema é facilmente demonstrável, mas resumimos seu enunciado nas expressões abaixo,

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (\text{A.4})$$

e,

$$A'|a'\rangle = a|a'\rangle. \quad (\text{A.5})$$

Onde, na Eq. (A.5), $|a'\rangle = \Gamma|a\rangle$.

Na próxima seção iremos analisar o caso onde o observável é invariante sobre uma dada transformação. Isso nos levará ao conceito de simetria de uma Hamiltoniana de forma mais simplificada.

A.0.2 Simetrias e Leis de Conservação

Um Observável Q é invariante sobre uma dada transformação Γ se,

$$Q = \Gamma Q \Gamma^\dagger, \quad (\text{A.6})$$

ou, sendo Q um observável,

$$Q^\dagger = \Gamma^\dagger Q \Gamma = Q \quad (\text{A.7})$$

$$\Gamma Q = Q \Gamma \Rightarrow [Q, \Gamma] = 0 \quad (\text{A.8})$$

Podemos ver da equação A.8 que caso o Observável comute com o Operador que representa a transformação unitária, então dizemos que ele é invariante sobre a mesma. Dessa mesma relação emerge o conceito de simetria.

Podemos escrever de forma mais geral possível que, se, uma Hamiltoniana, H , de um sistema físico, é invariante sobre um dada transformação unitária U , tal que U tenha um gerador S (um observável físico), então, sendo U dado infinitesimalmente por,

$$U(\epsilon) = \mathbb{1} - i\frac{\epsilon}{\hbar}S \quad (\text{A.9})$$

onde ϵ é o parâmetro infinitesimal, que depende da natureza da transformação, bem como do seu gerador. Para definimos de modo mais apropriado a Eq. (A.9), podemos dizer que ele obedece as propriedades gerais de grupo, as quais não entraremos em detalhes por não ser nosso foco principal aqui (detalhes no cap.2 de [15]). Temos, então, as relações,

$$[H, U] = 0; \quad (\text{A.10})$$

$$[H, S] = 0; \quad (\text{A.11})$$

Dizemos que H é *invariante sobre a transformação U* e que S é *uma simetria de H* . Ainda sobre S , podemos dizer que ele se trata de uma constante de movimento,

$$\frac{dS_H}{dt} = 0. \quad (\text{A.12})$$

Onde o subscrito H indica que S está na interpretação de Heisenberg. Assim, podemos dizer de forma mais geral que: *H conserva S* .

A maior vantagem do uso de simetrias é que, como já foi dito, a Hamiltoniana assumi uma estrutura blocada. Temos que,

$$H[U|n\rangle] = U[H|n\rangle] = E_n[U|n\rangle] \quad (\text{A.13})$$

ou,

$$H[U|n\rangle] = E_n[U|n\rangle]. \quad (\text{A.14})$$

Assim, uma vez que $|n\rangle$ e $U|n\rangle$ não são iguais, temos que esses dois autovetores são degenerados, tendo a mesma energia E_n . Isso associado a regras de seleção, nos permite escrever a Hamiltoniana em sua forma blocada.

A.0.3 Cálculo do valor esperado de um observável na base de Lanczos

Quando queremos analisar uma grandeza física na Mecânica Quântica, o que fazemos é calcular a média do operador que representa essa grandeza. Seja, por exemplo, um

operador \mathbf{A} qualquer, descrito em um espaço N -dimensional de base $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |N\rangle$, a média de \mathbf{A} é dada como,

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle j | \mathbf{A} | i \rangle \quad (\text{A.15})$$

Quando diagonalizamos a matriz tridiagonal, o que obtemos é um conjunto de autovalores c_y e autovetores associados \mathbf{V}_y com $y = 0, \dots, n-1$. Por outro lado, precisamos desses vetores na base binária, onde podemos realizar a operação da Eq. (A.15), assim, escrevemos os vetores de Lanczos na forma:

$$|\phi_m\rangle = \sum_{i=1}^N \phi_m(i) |i\rangle, \quad m = 0, \dots, n-1. \quad (\text{A.16})$$

De maneira semelhante, os autovetores da Hamiltoniana na base binária, são da forma,

$$|\psi_y\rangle = \sum_{i=1}^N \psi_y(i) |i\rangle, \quad y = 0, \dots, n-1. \quad (\text{A.17})$$

Por outro lado, para um número n de interações suficientemente grande, os primeiros autovetores V_y da matriz tridiagonal representam com precisão os autoestados da Hamiltoniana nessa base [2]. Assim, podemos escrever

$$|\psi_y\rangle = \sum_{m=0}^{n-1} V_y(m) |\phi_m\rangle = \sum_{m=0}^{n-1} \sum_{i=1}^N V_y(m) \phi_m(i) |i\rangle. \quad (\text{A.18})$$

Agora, para não carregar demais a notação, agrupamos os termos em um coeficiente da forma

$$\psi_y(i) = \sum_{m=0}^{n-1} V_y(m) \phi_m(i) |i\rangle, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{A.19})$$

Uma vez estabelecida a relação entre as bases, vamos analisar a atuação do operador \mathbf{A} sobre $|\psi_y\rangle$,

$$\mathbf{A} |\psi_y\rangle = \sum_{i=1}^N \psi_y(i) \mathbf{A} |i\rangle \quad (\text{A.20})$$

Dessa forma, inserindo uma identidade $(\sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j|)$ na Eq. (A.20), temos,

$$\mathbf{A} |\psi_y\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \psi_y(i) |j\rangle \langle j | \mathbf{A} | i \rangle. \quad (\text{A.21})$$

Por fim,

$$\begin{aligned}
\langle \psi_y | \mathbf{A} | \psi_y \rangle &= \sum_{i'=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \psi_y(i) \psi_y^*(i') \langle i' | j \rangle \langle j | \mathbf{A} | i \rangle = \\
&= \sum_{i'=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \psi_y(i) \psi_y^*(i') \delta_{i'j} \langle j | \mathbf{A} | i \rangle = \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \psi_y(i) \psi_y^*(j) \langle j | \mathbf{A} | i \rangle .
\end{aligned} \tag{A.22}$$

A Eq. (A.22) nos fornece a forma de calcular a média de qualquer operador \mathbf{A} genérico, a partir das componentes dos vetores de Lanczos. Isto é algo muito útil para calcular, por exemplo, funções de correlação em sistemas de tamanho finito [2].

A.0.4 O Lanczos Modificado

O algoritmo de Lanczos tem como principal efeito armazenar as entradas não nulas de uma matriz Hamiltoniana na forma de um conjunto de vetores [2]. No entanto, dependendo da forma da matriz e do número de passos do procedimento iterativo, pode haver um custo computacional muito grande, o que torna o procedimento limitado. Uma forma de contornar esse problema é uma pequena alteração na lógica do procedimento, que se trata do Lanczos Modificado [16].

No lugar de gerarmos todo o espaço de Lanczos, armazenando a matriz nos vetores, o que fazemos é construir uma matriz menor (2×2), diagonalizar e tomar seu estado fundamental como estado de entrada no processo iterativo novamente [16]. Nesse caso não precisamos armazenar toda a base de Lanczos, mas apenas 3 vetores da base, por outro lado devemos aumentar o número de interações para garantir a convergência, em geral tomamos em torno de 400 à 500 interações.

Implementar o Lanczos Modificado é muito simples. Vamos tomar o estado aleatório $|\phi_0\rangle$, o próximo estado é gerado como na Eq. (2.13),

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1}} (H|\phi_0\rangle - a_0|\phi_0\rangle) . \tag{A.23}$$

Além de $|\phi_1\rangle$, precisamos gerar mais um vetor de Lanczos $|\phi_2\rangle$, que contém um elemento do tipo, $H|\phi_1\rangle$. Temos então,

$$|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_2}} (H|\phi_1\rangle - a_1|\phi_1\rangle - N_1|\phi_0\rangle) \quad (\text{A.24})$$

$$H|\phi_1\rangle = \sqrt{N_2}|\phi_2\rangle + a_1|\phi_1\rangle + N_1|\phi_0\rangle . \quad (\text{A.25})$$

Os elementos da matriz 2×2 , para a primeira interação, são:

$$H_{00} = \langle\phi_0|H|\phi_0\rangle = a_0 \quad (\text{A.26})$$

$$H_{01} = \langle\phi_0|H|\phi_1\rangle = N_1 = H_{10} \quad (\text{A.27})$$

$$H_{11} = \langle\phi_1|H|\phi_1\rangle = a_1 . \quad (\text{A.28})$$

Na forma matricial temos,

$$H = \begin{bmatrix} a_0 & N_1 \\ N_1 & a_1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.29})$$

O próximo passo é diagonalizar a matriz A.29 e usar seu estado fundamental como um novo vetor de entrada $|\phi_0\rangle$. Ao repetir esse processo de interação por um número adequado de vezes, obtemos o estado fundamental exato da Hamiltoniana H . A forma para obter o valor médio de operadores é generica e portanto igual para o Lanczos Modificado.

Referências Bibliográficas

- [1] GIUSEPPE GROSSO and GIUSEPPE PASTORI PARRAVICINI. Xviii - superconductivity. In GIUSEPPE GROSSO and GIUSEPPE PASTORI PARRAVICINI, editors, *Solid State Physics*, pages 663 – 721. Academic Press, London, 2000.
- [2] A. W. Sandvik. Computational Studies of Quantum Spin Systems. In A. Avella and F. Mancini, editors, *American Institute of Physics Conference Series*, volume 1297 of *American Institute of Physics Conference Series*, pages 135–338, November 2010.
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, Dec 1957.
- [4] Leon N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.*, 104:1189–1190, Nov 1956.
- [5] P B Ramos and M J Martins. Algebraic bethe ansatz approach for the one-dimensional hubbard model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 30(7):L195–L202, Apr 1997.
- [6] Shao shiung Lin and Shi shyr Roan. Bethe ansatz for heisenberg xxx model, 1995.
- [7] R.D. Mattuck. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-body Problem*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 1992.
- [8] R. T. Scalletar. An introduction to the hubbard hamiltonian. 6:121–150, 2016.

- [9] H. Fehske, R. Schneider, and A. Weiße. *Computational Many-Particle Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [10] Christopher L. Henley. States in solids. In *Solid State Physics*, pages 755 – 772. No prelo.
- [11] Karsten Flensberg Henrik Bruus. *Many-body quantum theory in condensed matter physics*. Oxford Graduate Texts. Oxford University Press, USA, illustrated edition edition, 2004.
- [12] Jan von Delft. *Annalen der Physik*, 10(3):219–276, Mar 2001.
- [13] Jan von Delft and D.C. Ralph. Spectroscopy of discrete energy levels in ultrasmall metallic grains. *Physics Reports*, 345(2):61 – 173, 2001.
- [14] Johannes Hofmann. Mesoscopic pairing without superconductivity. *Physical Review B*, 96(22), Dec 2017.
- [15] Kurt Gottfried and Tung-Mow Yan. *Quantum Mechanics : Fundamentals / K. Gottfried, T.M. Yan*. 01 2003.
- [16] Eduardo R Gagliano, Elbio Dagotto, Adriana Moreo, and Francisco C Alcaraz. Erratum: Correlation functions of the antiferromagnetic heisenberg model using a modified lanczos method. *Physical Review B*, 35(10):5297, 1987.