

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

DIPARTIMENTO DI FISICA E ASTRONOMIA

Tesi di Laurea in Fisica

**UNA TEORIA DI GAUGE DELLA SUSCETTIVITÀ
MAGNETICA DEI CUPRATI AD ALTA T_c**

Laureando

Dario Spolaor

Relatore

Professor Pieralberto Marchetti

Controrelatore

Professor Luca Salasnich

ANNO ACCADEMICO 2015/2016

Indice

Introduzione	2
1 Principi di base dell’NMR	5
1.1 Introduzione	5
1.2 Spin nucleari isolati in campo magnetico	6
1.3 Ensemble canonico di isospin	7
1.4 Interazioni tra spin nucleari	9
1.5 Interazione magnetica iperfina	9
1.6 La suscettività magnetica nel formalismo della seconda quantizzazione	11
1.7 Il Knight shift	18
1.8 K_s da modelli: il caso di Mila-Rice-Shastry per i cuprati	20
1.9 Rilassamento di un sistema nucleare a due livelli	22
1.10 Conclusioni	31
2 Origine ed implementazione del modello $t - J$	33
2.1 Introduzione	33
2.2 Plausibilità fenomenologica del modello $t - J$	33
2.3 Modelli di Hubbard e $t - J$ dalla seconda quantizzazione	35
2.4 L’azione nel path integral: bosonizzazione alla Chern-Simons	40
2.5 Verso un’azione efficace: il gauge fixing	43
2.6 Step 1: costruzione di una configurazione ottimale	44
2.7 Step 2: approssimazioni nel settore spinonico	45
2.8 Step 3: formula per l’azione efficace	48
2.9 Formula di Kubo per la suscettività magnetica	49
2.10 Verso la suscettività magnetica: il propagatore magnonico	51
2.11 La suscettività magnetica nel modello $t - J$	57
2.12 Conclusioni	58
3 Teoria di gauge della suscettività magnetica	63
3.1 Introduzione	63
3.2 Funzione di Green-Matsubara nel caso libero	63
3.3 La funzione di densità spettrale	65
3.4 Sommatorie sulle frequenze di Matsubara	68
3.5 Formula di Kubo per la suscettività paramagnetica di Pauli	70
3.6 Suscettività magnetica e densità degli stati	72
3.7 Espansione in bolle di 4 propagatori	77
3.8 Peso spettrale nei cuprati ad alta temperatura	83
3.9 Ricostruire la buca fisica: densità totale degli stati	87
3.10 Conclusioni	97
A Calcolo della bolla tra due funzioni di Green per la buca fisica	102
Bibliografia	108

Introduzione

E' trascorso più di un secolo da quando Onnes provò che al di sotto di una determinata temperatura, la resistività elettrica del mercurio diventava nulla; da tale misura pionieristica, in seguito raffinata fornendo sostanzialmente un risultato di poco spostato dall'originario, si aprì un campo di studio nuovo, riguardante il fenomeno della superconduttività. Furono compiuti sforzi modellistici veramente notevoli per sondarlo nei dettagli, a partire dal tentativo a due fluidi dei fratelli London (1935), sino a giungere alla celebrata teoria BCS, che valse ai loro scopritori Bardeen, Cooper e Schrieffer il premio Nobel per la fisica nel 1972. Tre lustri più tardi, quando oramai la vena di novità di questo settore sembrava inesorabilmente esaurirsi, balzò alla ribalta della comunità scientifica l'annuncio dell'osservazione di simili proprietà superconduttive fino a temperature critiche anche di due ordini di grandezza maggiori di quelle a cui si era sino ad allora abituati. Come intuibile, questi nuovi materiali, risultavano difficilmente inquadrabili nella cornice concettuale BCS; per essi, denominati in generale HTS (High Temperature Superconductors), fu necessario un cambiamento radicale del paradigma. Parecchie figure furono propugnatrici di tale "rivoluzione", e tra di esse si distingue indubbiamente Anderson per i notevoli apporti teorici forniti alla ricerca. Con il progredire della tecnica, le indagini migliorarono ed oggi il panorama degli HTS è popolato da innumerevoli famiglie di materiali; nel lavoro che si presenta, ci si occupa di una di esse, quella dei cuprati, nella quale gli atomi di rame sono nodi salienti della struttura cristallina. La descrizione delle loro proprietà è difficilmente eseguibile in poche righe; tuttavia volendo riassumere in uno sguardo le loro principali caratteristiche, si arriva a distinguere in essi due fondamentali caratteristiche: i gradi di libertà di carica e di spin. Un'analisi in spazio reciproco delle variabili fisiche che dipendano da essi, mostra come la loro presenza non pesa in egual misura su tutti i punti; in alcune regioni, denominate antiferromagnetiche e centrate intorno al vettore d'onda $\vec{Q}_{AF} = \begin{pmatrix} \pi \\ \pi \end{pmatrix}$, si osserva una relazione competitiva, che porta solo la seconda a dominare, come è possibile osservare attestando le fluttuazioni antiferromagnetiche di spin. In altre zone, dette uniformi poiché collocate in prossimità del momento $\vec{q} = \vec{0}$, la dicotomia tra i settori menzionati si scioglie, mostrando un comportamento collaborativo tra essi, in favore di una descrizione in termini di particelle, le buche (fisiche) utilizzate nel drogaggio del sistema superconduttore. Una siffatta diversità di atteggiamenti, rintracciabile in svariate funzioni di risposta come la suscettività magnetica, lascerebbe a prima vista intendere come sia senza speranza il proposito di trovare una sintesi tra di essi. Tuttavia un'indagine approfondita della teoria di gauge adoperata per trattare i cuprati, rivela come sia possibile, in tale potente formalismo, costruire una visione nella quale le due strade afferenti agli andamenti esaminati siano connettabili tra loro tramite la struttura del campo di gauge che in esso appare non più come mero artificio tecnico, bensì come valido mediatore tra le branche interpretative del modello. Scopo pratico del presente lavoro di tesi è appunto mostrare come le diverse espressioni ottenute dal calcolo della trasformata di Fourier della suscettività magnetica a seconda del punto in spazio reciproco considerato, emergano naturalmente come opportuni limiti della funzione a due punti di spin derivabile nel modello $t - J$. Difatti è noto che nella fase normale del sistema superconduttore, il contributo uniforme (valutato cioè al momento nullo) della funzione di risposta è, trascurando eventuali correzioni in temperatura, dato dalla formula di Pauli; qualora tuttavia si voglia ricercare la medesima quantità intorno al vettore d'onda antiferromagnetico, i lavori citati in bibliografia riportano un risultato ben diverso dal precedente, che a prima vista non sembra ad esso neanche collegabile. Tuttavia tale previsione, grazie ad uno studio più approfondito del paradigma che descrive i materiali in questione, è smentita, in quanto si dimostrerà come entrambi gli andamenti seguano come costituenti diversi della funzione di correlazione tra spin fisici, espressi coerentemente con il formalismo del modello $t - J$ adottato. Per giungere a tale importante conclusione, si è seguita una presentazione schematizzata in figura 1, che mira nel primo capitolo ad introdurre le principali variabili fisiche legate alla suscettività magnetica e misurabili nell'ambito di indagini NMR (Nuclear Magnetic Resonance), offrendo nel secondo una descrizione completa del modello $t - J$ e la sua applicazione al calcolo della funzione di risposta intorno al vettore d'onda antiferromagnetico, lasciando il caso uniforme al terzo capitolo, desumibile tuttavia in un formalismo di tipo Fermi liquid; ivi si riportano altresì il legame annunciato inizialmente, fulcro dell'intero manoscritto, ed ulteriori linee di ricerca rimaste insondate, sorte dopo un confronto con i dati sperimentali. Più in dettaglio, come mostra la mappa concettuale, si è partiti trattando gli spin

nucleari in campo magnetico, sia isolati che in ensemble, catalogando tutte le possibili interazioni che essi possono ammettere. Tra loro, la più importante risulta quella con gli elettroni, il cui effetto si traduce in una modifica del campo risentito dai nuclei e dunque in una variazione della frequenza di risonanza. Tali conseguenze, indagate dall’NMR, vanno sotto il nome di Knight shift, che risulta proporzionale alla suscettività elettronica. Considerando tuttavia solo il potenziale di contatto (o di Fermi), il contributo che ivi rientra è di spin, per cui si preferisce dedicare un paragrafo alla sua derivazione nella teoria della seconda quantizzazione, pervenendo a risultati analitici per la trasformata di Fourier statica della funzione di risposta in due e tre dimensioni. Per completezza, si procede con il desumere un’ulteriore espressione per il Knight shift, qualora l’interazione sia di tipo indiretto, ovvero tra due isospin tramite lo spin elettronico, poiché tale forma fu storicamente adottata come primo tentativo per descrivere l’hamiltoniana di un superconduttore ad alta temperatura, perno del cosiddetto modello di Mila-Rice-Shastry. Quanto ottenuto è noto come MHS (Magnetic Hyperfine Shift) e mostra sempre proporzionalità con la suscettività di spin, pari alla parte reale uniforme e costante della sua trasformata, che sperimentalmente risulta dominata dai siti di rame. Un secondo effetto tangibile sugli spin nucleari riguarda il cambiamento della popolazione dei suoi livelli in seguito alla interazione con un serbatoio che conservi l’energia durante i processi di transizione. Esso, pensato come un connubio tra il reticolo cristallino e gli elettroni in orbitale s , garantisce una variazione in un tempo caratteristico T_1 il cui inverso è detto NSLRR (Nuclear Spin-Lattice Relaxatio Rate). tale variabile è proporzionale, nella formula di Moriya, alla parte immaginaria della trasformata di Fourier statica della suscettività magnetica, ancora una volta dovuta agli atomi di rame, e piccata sul momento filtrato dal modulo quadro del fattore di forma. Volendo misurare il rate di ^{63}Cu , si trova ad esempio un risultato centrato sul vettore d’onda antiferromagnetico, confrontato alla fine del secondo capitolo con la sua previsione teorica. Per arrivare ad essa con criterio, si è scelto dunque di votare la sua prima parte alla descrizione del modello $t - J$ con il quale si imposterà la derivazione, palesando come esso compendi le principali caratteristiche di non doppia occupazione per le lacune di drogaggio a causa della repulsione coulombiana, e di ordine antiferromagnetico a lungo range evidenziato da due sottoreticoli di Neel. Per mostrare inoltre come esse risultino importanti cifre interpretative, si è ricavata la struttura dell’hamiltoniana $t - J$ dal modello di Hubbard, riscontrandone nuovamente la presenza. Essendo sufficientemente solida la base su cui partire, si è proseguito attraverso una serie di passaggi tecnici, fornendo solo i dettagli essenziali, dai quali è stato possibile forgiare la forma utilizzata nel seguito: essa consta di due settori (holonico e spinonico), i quali si riferiscono rispettivamente ai gradi di libertà di carica e di spin, mediati da un campo di gauge non perturbativo $U(1)$. Il suo contributo emerge in prepotenza nel calcolo della funzione di Green tra spin fisici, proporzionale alla suscettività magnetica per la formula di Kubo: espandendo i due operatori con il formalismo insito nel modello, si giunge alla determinazione del propagatore magnonico, un campo che fa le veci dello spinone una volta imposto l’ordinamento antiferromagnetico. Difatti risulta ora possibile calcolare il valore di aspettazione associato alla funzione di Green non più sulla temperatura, bensì sul campo di gauge: esso mostra così il suo ruolo cruciale nel passare da una teoria termodinamica, come quella del path integral, ad una dinamica. Da essa è dunque possibile ottenere la trasformata di Fourier costante della suscettività magnetica, a seconda della fase in cui si trova il sistema superconduttore e del valore di energia del campo esterno rispetto a quella termica. Tali risultati, contenuti nelle referenze citate in bibliografia, rappresentano dunque il primo elemento da inserire per collaudare la teoria di gauge; il secondo, come anticipato, è dato dalla trasformata uniforme e costante della funzione di risposta, frutto di un’analisi a molti corpi nel formalismo del tempo immaginario di Matsubara. Essa riporta come, per un sistema non interagente, la forma richiesta, a meno di costanti, sia pari alla densità degli stati calcolata all’energia di Fermi. Tuttavia, nel caso in esame, è stato necessario dimostrare come tale conclusione potesse essere formalmente estesa anche in presenza di forti correlazioni (tipiche dei cuprati), indirizzando dunque la ricerca verso il peso spettrale. Questo primo importante aspetto permette così di cercare un filo rosso che lo unisca all’espressione desunta nel capitolo 2 intorno al vettore d’onda antiferromagnetico: tale legame si mostrerà palese, derivando la funzione a due punti di spin fisici, spezzandola in diversi costituenti tramite il teorema di Wick, e forzando ciascuno di essi ad ereditare la proprietà della funzione di partenza nell’essere localmente gauge invariante. Si arriva così ad asserire, contraddicendo il senso comune, che è insito nel modello $t - J$ riprodurre un andamento Fermi liquid qualora venga indagato per ricavare la suscettività magnetica intorno all’origine dei momenti, mentre debba comportarsi diversamente al vettore d’onda antiferromagnetico, a causa delle correlazioni tra spin ivi presenti (fornendo difatti un propagatore magnonico). Ciò giustifica in maniera inequivocabile come cambi la tipologia della bolla da calcolare nelle due situazioni; per completarne la disamina si procede dunque a determinare la densità degli stati per la buca fisica. Il suo computo è eseguito in maniera analitica ricorrendo ad alcune assunzioni, dettagliate nel testo; si è prestata inoltre attenzione a sondare diverse regioni energetiche (tutte pertinenti alla fase normale), nelle quali i rapporti tra le variabili fisiche come energy gap Δ e scattering rate Γ mutavano radicalmente. Per tali casistiche si è provveduto ad uno sviluppo in serie, evidenziando le dipendenze sia dalla temperatura che dal doping, in previsione di un confronto con i dati sperimentali. Ciò difatti ha consentito di confermare la previsione asintotica nell’andamento in T della suscettività magnetica, a patto che la costante di rinormalizzazione Z della funzione di Green per la buca fisica ammetta lo stesso comportamento. Verso questa

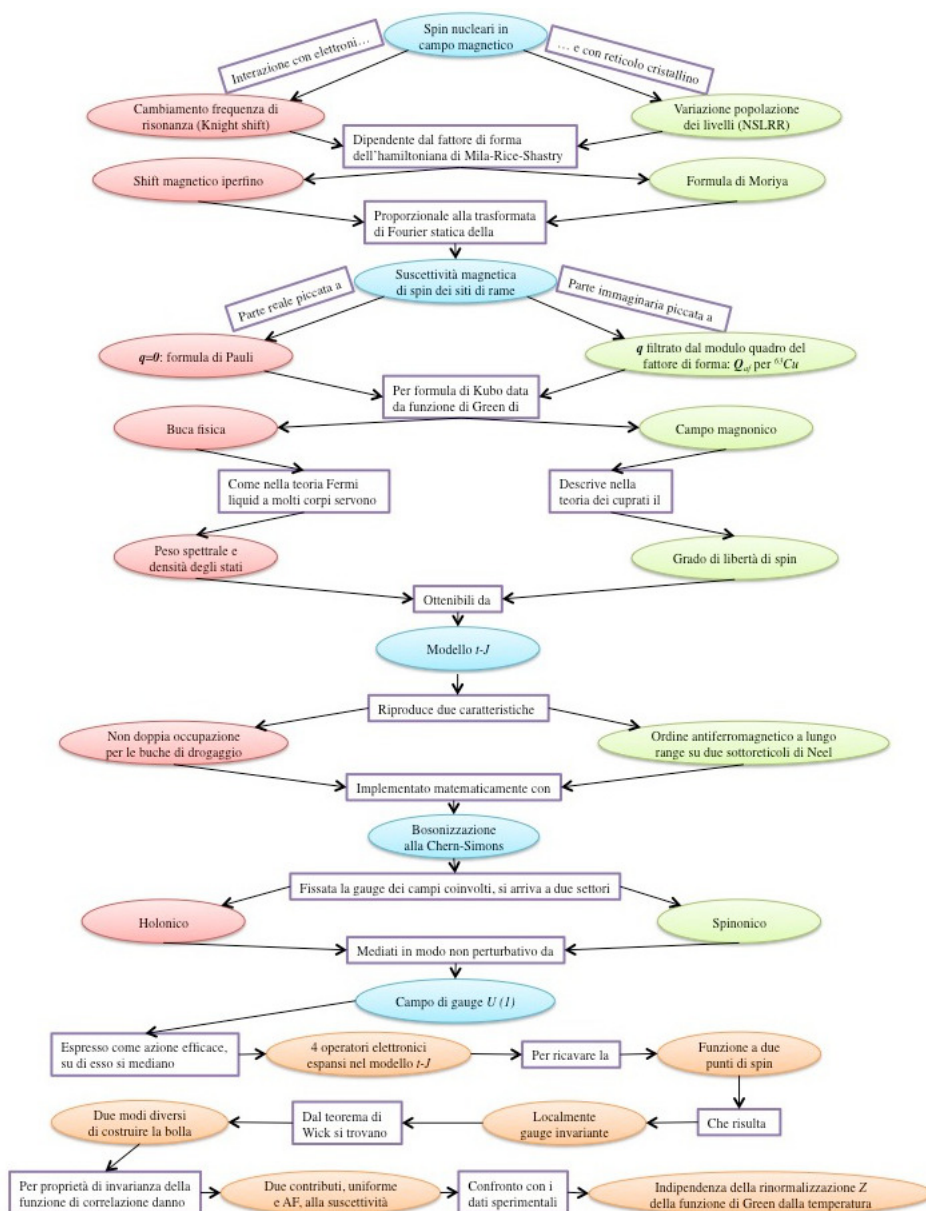


Figura 1: Mappa concettuale per la presentazione della teoria di gauge della suscettività magnetica nei cuprati.

considerazione concordano non solo gli sviluppi mostrati nell'ultima parte del lavoro, ma anche stime preliminari condotte nell'ambito della ricerca. Interessante è senza dubbio approfondire questo filone, e molti altri che da esso possono scaturire, provando senz'altro la vitalità e lo stimolo che riserva lo studio dei superconduttori ad alta temperatura.

Capitolo 1

Principi di base dell’NMR

1.1 Introduzione

In questo primo capitolo si discuterà una delle principali tecniche di indagine nella fisica dello stato solido: la risonanza magnetica nucleare (NMR). La prima applicazione storica risale a metà del secolo scorso ad opera di Bloch, Hansen e Packard, i quali determinarono il rapporto giromagnetico dei protoni in un campione d’acqua, irradiandolo con frequenze radio. Da quel primo successo, l’NMR consentì innumerevoli stime, sino a diventare ai giorni nostri un insostituibile metodo di studio in medicina, biologia e fisica della materia. Proprio in quest’ultimo ambito viene utilizzata nello studio di superconduttori ad alta temperatura, come i cuprati. Da essa si ricavano informazioni importanti (come il Knight shift) che permettono la verifica sperimentale di modelli teorici per alcune famiglie di cuprati (ad esempio il modello di Mila-Rice-Shastry per l’ossido di ittrio, bario e rame, YBCO). Il vantaggio dell’NMR rispetto ad altre tecniche come lo studio della rotazione dello spin muonico (μ SR) risiede nell’informazione locale che esso fornisce, come conseguenza dell’applicazione di un campo magnetico al campione da esaminare.

Si comincerà pertanto studiando il caso di un singolo spin in campo magnetico, estendendo poi i risultati ottenuti ad un campione statistico. In seguito si tratteranno in modo approfondito tutte le interazioni a cui è soggetto uno spin in un cristallo, notando il loro effetto sul campo sperimentato dal nucleo. Ciò ha una conseguenza misurabile, nota come Knight shift, che dipende dalla trasformata di Fourier uniforme e costante della suscettività magnetica di spin. Così si dedica un paragrafo alla sua derivazione con la teoria della seconda quantizzazione, ottenendo un risultato analitico in due e tre dimensioni. Con tale formalismo è possibile proseguire il calcolo delle variabili fisiche misurate con le indagini di NMR, partendo dal Knight shift, ottenuto ipotizzando come unico contributo dell’interazione magnetica iperfina quello di contatto (o di Fermi). Si allarga tale visuale nel paragrafo successivo, in cui modellizzando un potenziale indiretto tra elettroni e nuclei, si presenta la nuova forma del Knight shift: essa ammette la stessa struttura della precedente (proporzionalità alla suscettività magnetica) ma i fattori ivi presenti non sono più le funzioni di Bloch degli elettroni, bensì i tensori di accoppiamento iperfina del modello utilizzato, noto come hamiltoniana di Mila-Rice-Shastry. La seconda parte di tale esposizione sarà invece dedicata ad un altro importante risultato dello studio con la tecnica dell’NMR, il rate di rilassamento nucleare di spin-reticolo $\frac{1}{T_1}$ (NSLRR): si procederà prima con una esposizione generale della teoria del rilassamento dei nuclei e successivamente si deriverà una formula per $\frac{1}{T_1}$ adottando come in precedenza il potenziale di Fermi come termine di interazione. Come risulterà, le componenti complesse della suscettività magnetica saranno in relazione con le due quantità fornite dai dati di NMR: tale ambito è indagato nell’ultimo paragrafo, ove le osservazioni sperimentali introdotte giustificano l’abbandono del modello di Mila-Rice-Shastry, in favore del modello $t - J$ che verrà sondato nei dettagli nel prossimo capitolo.

Avvertenza: Per tutto il capitolo, in conformità ai testi in bibliografia, si utilizzerà il sistema di Gauss (unità CGS) per l’elettromagnetismo. Esso richiede, rispetto al sistema internazionale, le seguenti sostituzioni per la permittività del vuoto ε_0 , per la permeabilità del vuoto μ_0 , per il campo magnetico \vec{B} , per il potenziale vettore \vec{A} e per il momento magnetico \vec{m} :

$$\varepsilon_0 \leftrightarrow \frac{1}{4\pi}; \mu_0 \leftrightarrow \frac{4\pi}{c^2}; \vec{B} \leftrightarrow \frac{\vec{B}}{c}; \vec{A} \leftrightarrow \frac{\vec{A}}{c}; \vec{m} \leftrightarrow \vec{m}c \quad (1.1)$$

ove c è la velocità della luce nel vuoto. Tali cambiamenti non alterano la forma dell’energia potenziale in campo magnetico di una spira con momento \vec{m} ; introducendo poi la magnetizzazione \vec{M} ed il campo di intensità magnetica

\vec{H} , si riporta la relazione con \vec{B} in unità CGS:

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M} = \vec{H}(1 + 4\pi\chi_m); \vec{M} = \chi_m\vec{H} \quad (1.2)$$

ove χ_m è la suscettività magnetica. Essendo la sua definizione identica a quella del sistema internazionale, si conclude che continuano a valere le formule della meccanica statistica per magnetizzazione e suscettività senza coefficienti aggiuntivi. Inoltre si sfrutteranno queste nuove unità rimpiazzando nella formula per l'energia potenziale magnetica, il campo \vec{B} con \vec{H} , in quanto eventuali contributi dovuti alla magnetizzazione saranno assorbiti nella definizione del Knight shift, come si mostrerà in seguito.

1.2 Spin nucleari isolati in campo magnetico

Come osservato in [10], i nuclei che non hanno un numero pari né di protoni né di neutroni possiedono uno spin nucleare \vec{I} (isospin) che in rappresentazione matriciale obbedisce alle medesime regole dello spin elettronico. Tale grado di libertà \vec{I} genera un momento magnetico $\vec{\mu}$ dato da:

$$\vec{\mu} = g\mu_N\vec{I} = \gamma\hbar\vec{I} \quad (1.3)$$

Nella precedente equazione, costruita sull'analogo elettronico, g indica un fattore di forma, $\mu_N = \frac{e\hbar}{2mc}$ il magnetone nucleare, γ il rapporto giromagnetico (si noti che si è scelto di rendere adimensionali tutti gli operatori del momento angolare, sia orbitale che di spin).

L'applicazione di un campo magnetico \vec{H}_0 fornisce al nucleo l'energia \mathcal{H}_Z (detta interazione di Zeeman):

$$\mathcal{H}_Z = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}_0 \quad (1.4)$$

Promuovendo ambo i membri della precedente equazione ad operatori, si arriva alla visione quantistica: supponendo poi che il campo abbia direzione z , si nota che l'hamiltoniana:

$$\mathcal{H}_Z = -\gamma\hbar H_0 \hat{I}_z \quad (1.5)$$

è direttamente proporzionale alla componente z dell'isospin, e pertanto avrà gli autovettori di tale operatore, e come autovalori:

$$E_m = -\gamma\hbar H_0 \langle I, m | \hat{I}_z | I, m \rangle = -\gamma\hbar m H_0 \quad (1.6)$$

ove m denota i $2I + 1$ valori del numero quantico magnetico:

$$m = -I, -I + 1, \dots, I - 1, I \quad (1.7)$$

Come si può notare dalla figura 1.1, adattata da [8] (nella quale si sono distinti i casi a seconda che il rapporto giromagnetico sia positivo o negativo), essendo i valori di m equispaziati, la differenza in energia tra due livelli adiacenti dopo lo splitting causato dall'interazione di Zeeman nucleare, risulta:

$$\Delta E = |E_m - E_{m-1}| = |\gamma| \hbar H_0 \quad (1.8)$$

Dunque una sorgente esterna può innescare il salto tra i livelli, se la frequenza della sua parte temporale, è pari a $\nu = \frac{\Delta E}{\hbar}$; il passaggio, espresso tramite la rate di probabilità di transizione $W_{mm'}$, è legato alla conservazione dell'energia in questo processo ed al modulo quadro dell'elemento di matrice dell'interazione utilizzata tra gli stati iniziale e finale, in base alla Fermi golden rule:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_Z + \hat{V}(t) \Rightarrow W_{mm'} \propto \left| \langle m | \hat{V}(0) | m' \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_{m'} \pm \hbar\omega) \propto |\langle m | \hat{\mu}_h | m' \rangle|^2 \delta(E_m - E_{m'} \pm \hbar\omega) \quad (1.9)$$

Da questa formula si deduce in primo luogo la necessaria dipendenza dal tempo della perturbazione dell'hamiltoniana di partenza [in questo caso l'interazione $\hat{V}(t) = -\hat{\mu}_h h(t)$], altrimenti essa non fornisce alcun quanto di energia $\hbar\omega$, costringendo il sistema a rimanere nello stato iniziale, per soddisfare l'annullamento dell'argomento della delta di Dirac. In secondo luogo, la scelta di $\hat{V}(t)$ deve garantire l'esistenza non nulla dell'elemento di matrice presente nella formula. Potendo disporre di campi magnetici alternati è dunque sensato usare come perturbazione l'energia potenziale che il nucleo ammette in loro presenza. L'operatore da inserire è quindi la proiezione del momento magnetico nucleare sulla direzione del campo perturbativo inserito:

$$\hat{\mu}_h = \gamma\hbar\hat{I}_h \Rightarrow \langle m | \hat{\mu}_h | m' \rangle \propto \langle m | \hat{I}_h | m' \rangle \quad (1.10)$$

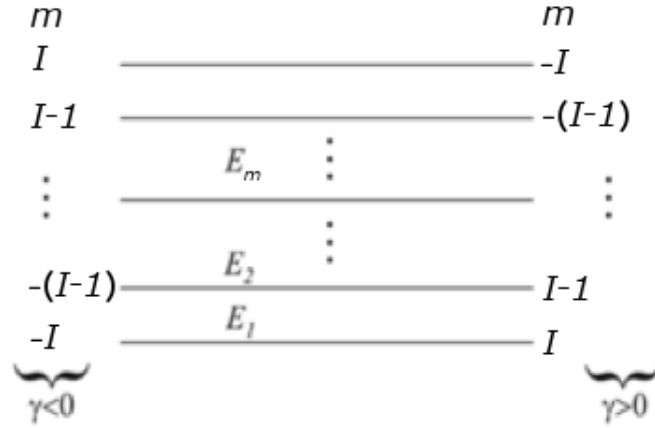


Figura 1.1: Spaziatura dei livelli energetici nucleari in seguito all'interazione di Zeeman (adattata da [8]).

Qualora esso sia lungo l'asse z , come il campo \vec{H}_0 originario, non si osserverà alcuna transizione, poiché la proiezione lungo z dell'isospin è una matrice diagonale. Diverso è il caso scegliendo come direzione di perturbazione l'asse x , poiché la matrice associata all'isospin \hat{I}_x , ha elementi sia sopra che sotto la diagonale. In effetti si ha:

$$\langle m | \hat{I}_x | m' \rangle = c_1 \langle m | m' + 1 \rangle + c_2 \langle m | m' - 1 \rangle \quad (1.11)$$

ove c_1 e c_2 sono costanti non nulle, il cui valore non interessa ai fini del ragionamento. Da ciò si conclude che la transizione in presenza di un piccolo campo magnetico alternato lungo x avviene tra autostati adiacenti di \hat{I}_z . Tale regola di selezione permette la determinazione della frequenza del campo esterno tramite la conservazione dell'energia, cioè l'annullamento dell'argomento della delta nella formula (1.9):

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{|\gamma|}{2\pi} H_0 \Rightarrow \omega = |\gamma| H_0 \quad (1.12)$$

Quanto ottenuto è importante da due punti di vista: la frequenza è indipendente dal numero quantico magnetico m , dunque un campo esterno che vari con essa può favorire transizioni tra due livelli adiacenti qualsiasi. D'altro canto nella formula (1.12) non compare la costante di Planck: ciò suggerisce che il risultato sia ottenibile anche classicamente, come in effetti derivato in [34]. E' noto che il momento torcente subito da una spira con momento magnetico $\vec{\mu}$ in campo \vec{H} è $\vec{\mu} \times \vec{H}$; pertanto l'equazione del moto è ottenuta uguagliando esso alla derivata temporale del momento angolare $\hbar \vec{I}$ (in quanto nel nostro caso il solo grado di libertà è quello spinoriale):

$$\hbar \frac{d\vec{I}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{H} \quad (1.13)$$

Utilizzando per il primo membro l'equazione (1.3) si conclude che:

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \vec{\mu} \times (\gamma \vec{H}) \quad (1.14)$$

Tale espressione descrive un moto di precessione del vettore $\vec{\mu}$ attorno al campo \vec{H} . Come si evince dalla figura 1.2, nel caso in cui \vec{H} non dipenda dal tempo e sia $\gamma > 0$, la punta del vettore $\vec{\mu}$ si muove uscente dal foglio descrivendo un cono. Dalle proprietà del triplo prodotto vettore si conclude poi che sia il modulo che la proiezione lungo \vec{H} del vettore $\vec{\mu}$ restano costanti durante il moto. Utilizzando coordinate cartesiane (con \vec{H} lungo z) si vede che il moto lungo il piano xy è circolare uniforme con frequenza di Larmor equivalente all'espressione (1.12).

1.3 Ensemble canonico di isospin

Dopo aver esaminato nel capitolo precedente il caso di un singolo spin nucleare in campo magnetico, si mostrerà ora seguendo la linea di [10], come cambiano i risultati in presenza di un ensemble di isospin, termostato alla temperatura T , in modo da permettere l'utilizzo del formalismo canonico. Tale situazione è senza dubbio più realistica rispetto alla precedente in ambito sperimentale e permette l'introduzione della suscettività magnetica, vero oggetto della misura. Si comincia associando a ciascuno stato una probabilità data dal peso di Boltzmann:

$$P(m) \propto e^{-\frac{E_m}{k_B T}} \quad (1.15)$$

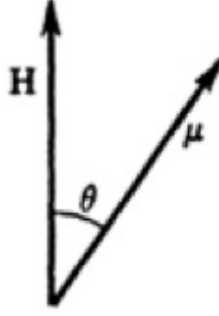


Figura 1.2: Relazione tra $\vec{\mu}$ ed \vec{H} (adattata da [34]).

ove il coefficiente di proporzionalità (dovuto alla normalizzazione) è pari per definizione all'inverso della funzione di partizione Z ed E_m è l'autovalore di energia dato dalla formula (1.6). Ciò permette il calcolo della magnetizzazione lungo l'asse z come densità della proiezione del momento magnetico lungo tale direzione. Denotando con N il numero di spin nucleari per unità di volume ed utilizzando la formula (1.3) si arriva a calcolare il valor medio della componente z dell'isospin, utilizzando come densità di probabilità la precedente formula:

$$M_z = N\gamma\hbar \langle \hat{I}_z \rangle = N\gamma\hbar \frac{\text{Tr} \left(\hat{I}_z e^{\frac{\gamma\hbar H_0 \hat{I}_z}{k_B T}} \right)}{\text{Tr} \left(e^{\frac{\gamma\hbar H_0 \hat{I}_z}{k_B T}} \right)} = N\gamma\hbar \frac{\sum_{m=-I}^I \langle I, m | \hat{I}_z e^{\frac{\gamma\hbar H_0 \hat{I}_z}{k_B T}} | I, m \rangle}{\sum_{m=-I}^I \langle I, m | e^{\frac{\gamma\hbar H_0 \hat{I}_z}{k_B T}} | I, m \rangle} = N\gamma\hbar \frac{\sum_{m=-I}^I m e^{\frac{\gamma\hbar H_0 m}{k_B T}}}{\sum_{m=-I}^I e^{\frac{\gamma\hbar H_0 m}{k_B T}}} \quad (1.16)$$

Le condizioni sperimentali rendono l'argomento dell'esponenziale molto ridotto permettendo uno sviluppo in serie. Poiché l'indice della somma corre su un dominio discreto simmetrico, è possibile eliminare quelle sommatorie con argomenti proporzionali a potenze dispari di tale indice. Completando i calcoli rimanenti si trova:

$$\begin{aligned} M_z &= N\gamma\hbar \frac{\sum_{m=-I}^I \left(m + \frac{\gamma\hbar H_0}{k_B T} m^2 \right)}{\sum_{m=-I}^I \left(1 + \frac{\gamma\hbar H_0}{k_B T} m \right)} = \frac{N(\gamma\hbar)^2 H_0 \sum_{m=-I}^I m^2}{k_B T \cdot 2I + 1} \\ &= \frac{N(\gamma\hbar)^2 H_0}{k_B T} \frac{2}{2I + 1} \frac{I(I + 1)(2I + 1)}{6} = \frac{N(\gamma\hbar)^2 H_0 I(I + 1)}{3k_B T} \end{aligned} \quad (1.17)$$

ove si è utilizzato un risultato notevole sulla somma dei quadrati dei primi I numeri naturali. Esso è dimostrabile partendo dalla seguente somma telescopica, nella quale sopravvivono solo due addendi:

$$\sum_{i=1}^n \left[(i+1)^3 - (i)^3 \right] = (n+1)^3 - 1 \quad (1.18)$$

Sviluppando il lato di sinistra ed utilizzando il risultato noto per la somma dei primi n numeri naturali si conclude che:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (3i^2 + 3i + 1) &= 3 \sum_{i=1}^n i^2 + 3 \frac{n(n+1)}{2} + n \Rightarrow \sum_{i=1}^n i^2 = \frac{1}{3} \left[(n+1)^3 - 1 - \frac{3n(n+1)}{2} - n \right] = \\ &= \frac{(n+1)}{3} \left[(n+1)^2 - \frac{3n}{2} - 1 \right] = \frac{(n+1)}{3} \left(n^2 + \frac{n}{2} \right) = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} \end{aligned} \quad (1.19)$$

Riprendendo il risultato (1.17) si può calcolare la suscettività magnetica nucleare in base alla definizione (1.2). La sua forma risulta:

$$\chi^{spin} = \frac{M_z}{H_0} = \frac{N(\gamma\hbar)^2 I(I + 1)}{3k_B T} \quad (1.20)$$

Affinché tale conclusione sia estesa ad un ensemble di spin elettronici, ove è nota come formula di Curie, vanno operate le seguenti sostituzioni, come suggerisce il risultato (1.3):

$$I \leftrightarrow J; \gamma\hbar \leftrightarrow g_L \mu_B \quad (1.21)$$

ove J denota il momento angolare totale, μ_B il magnetone di Bohr e g_L il fattore di Landè. Entrambe le espressioni mostrano come la suscettività magnetica sia inversamente proporzionale alla temperatura, ma direttamente

proporzionale sia alla densità che al quadrato del magnetone (nucleare o di Bohr a seconda del tipo considerato). Pertanto essendo il rapporto tra le masse a riposo dell'elettrone e del protone circa 1 su 2000 allora il contributo nucleare alla suscettività magnetica è trascurabile rispetto a quello elettronico: tale conclusione sarà molto utile nello studio delle interazioni tra nuclei ed elettroni. Difatti si mostrerà che esse generano una variazione del campo magnetico sentito da una specie proporzionale al contributo dell'altra alla suscettività. Da ciò risulta conveniente studiare solo il cambiamento del campo magnetico a cui è soggetto l'isospin, dovuto alle interazioni con gli elettroni.

1.4 Interazioni tra spin nucleari

A partire dal presente paragrafo, ispirato a [10], considereremo le correzioni al termine di Zeeman \mathcal{H}_Z dovute alle interazioni tra isospin nucleari \mathcal{H}_{n-n} , di isospin con momenti angolari elettronici \mathcal{H}_{n-e} e con la distribuzione di carica nucleare (termine di quadrupolo \mathcal{H}_q). L'hamiltoniana complessiva risulta pertanto:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_Z + \mathcal{H}_{n-n} + \mathcal{H}_{n-e} + \mathcal{H}_q \quad (1.22)$$

Il primo addendo è stato descritto nel paragrafo 1.2, il secondo lo si tratterà di seguito e gli altri nei paragrafi successivi. Si associ a ciascun isospin un indice di riferimento, pensando ad esempio di distribuirli su un reticolo: l'interazione \mathcal{H}_{n-n} tra \vec{I}_i e \vec{I}_j è decomponibile in 2 parti, diretta ed indiretta, a seconda che l'accoppiamento avvenga solo per loro mezzo oppure con la mediazione di un terzo ente (come l'elettrone). Ovvero:

$$\mathcal{H}_{n-n} = \sum_{i,j}^N \vec{I}_i \cdot a(\vec{r}_{ij}) \vec{I}_j = \mathcal{H}_{n-n}^{dir} + \mathcal{H}_{n-n}^{indir} \quad (1.23)$$

ove $a(\vec{r}_{ij})$ è una matrice nello spazio di isospin i cui elementi assumono valori diversi a seconda dei siti a cui appartengono gli isospin che interagiscono ($|\vec{r}_{ij}|$ è la loro distanza). Come anticipato la parte diretta deve essere costruibile in funzione dei 2 soli isospin: lavorando in approssimazione di dipolo essa è scrivibile come l'energia di un nucleo con momento magnetico $\vec{\mu}_j$ nel campo di dipolo generato dall'altro (con momento $\vec{\mu}_i$) a distanza $|\vec{r}_{ij}|$. Tale espressione, ricavata nei testi di elettromagnetismo, deve essere scritta nelle unità CGS adottate, esprimendo il momento magnetico in funzione dell'isospin tramite la (1.3):

$$\mathcal{H}_{n-n}^{dir} = \sum_{i < j}^N \frac{(\gamma\hbar)^2}{|\vec{r}_{ij}|^3} \left[\vec{I}_i \cdot \vec{I}_j - 3 \frac{(\vec{I}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{I}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^2} \right] \quad (1.24)$$

ove N è il numero totale di isospin sul reticolo e la somma corre su indici $i < j$ per contare una sola volta le interazioni. La parte indiretta delle interazioni ha invece la seguente forma:

$$\mathcal{H}_{n-n}^{indir} = \sum_{i < j}^N \vec{I}_i \cdot a_{ij} \vec{I}_j \quad (1.25)$$

ove ora per la matrice a_{ij} non è possibile dare un'espressione esplicita, in quanto dipende dal tipo di interazione. Un discorso analogo sarà ripreso per l'accoppiamento tra isospin e spin elettronico: anche in quella sede si osserverà che la matrice tra i 2 operatori dipende dal modello teorico scelto per la descrizione e dal tipo di atomi che accoppia. Tuttavia la formula (1.25) ha una sua interpretazione fisica: un isospin \vec{I}_i interagisce attraverso l'accoppiamento iperfino (di cui si discuterà in seguito) con un elettrone, il quale è in relazione col medesimo meccanismo con un isospin \vec{I}_j . Dunque modificazioni dell'orientazione di un isospin influiscono sull'altro giustificando in modo qualitativo l'espressione presente in (1.25). Proprio per la presenza di un elemento estraneo ai 2 isospin si parla di accoppiamento indiretto. Per quanto affermato però alla fine del paragrafo precedente, gli effetti di tali accoppiamenti sul termine energetico di Zeeman sono trascurabili. Le prime modificazioni significative del campo magnetico a cui è soggetto un nucleo arriveranno con lo studio del terzo addendo della (1.22) di cui ci si occuperà nel prossimo paragrafo.

1.5 Interazione magnetica iperfina

Seguendo quanto esposto in [1], per descrivere il cambiamento nel campo magnetico nucleare per effetto dell'interazione con gli elettroni, si cerca una forma simile all'hamiltoniana di Zeeman. Per trattare il comportamento in

campo magnetico, viene operata nell'hamiltoniana elettronica la sostituzione dettata dall'accoppiamento minimale (in unità CGS):

$$\vec{p} \leftrightarrow \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0, \quad \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{H} \quad (1.26)$$

ove il potenziale vettore \vec{A} è considerato in gauge di Coulomb. Una sua espressione che generi il campo nucleare di dipolo è:

$$\vec{A} = \frac{\vec{\mu} \times \vec{r}}{r^3} = \vec{\nabla} \times \left(\frac{\vec{\mu}}{r} \right) = \frac{\mu \sin \theta}{r^2} \hat{\phi} \quad (1.27)$$

ove $\vec{\mu}$ è il momento magnetico ed \vec{r} la distanza a cui viene valutato il campo. L'hamiltoniana dell'elettrone nel campo magnetico nucleare deve però anche descrivere il grado di libertà spinoriale: si utilizzerà a questo scopo una forma simile a quella ricavata nell'equazione (1.3), poiché è possibile dimostrare come tale addendo si ottenga naturalmente quando si lavora con l'hamiltoniana di Dirac per l'elettrone in campo elettromagnetico. Ricordando che ora il momento angolare è descritto dallo spin \vec{s} , sostituendo nella (1.3) il corretto fattore di forma g ed il valore del magnetone di Bohr, si trova:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - g(-\mu_B) \vec{s} \cdot \vec{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (1.28)$$

L'interazione \mathcal{H}_1 cercata si trova sottraendo allo sviluppo al primo ordine della precedente equazione la parte libera (contributo cinetico elettronico):

$$\mathcal{H}_1 = \frac{e}{2mc} \left(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} \right) + 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{e}{2mc} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + 2\vec{A} \cdot \vec{p} \right) + 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (1.29)$$

ove si è sfruttata la gauge di Coulomb per eliminare un addendo nello sviluppo del quadrato. Utilizzando la (1.27) per l'espressione di \vec{A} e la definizione di magnetone di Bohr, la precedente formula diviene:

$$\mathcal{H}_1 = \frac{2\mu_B}{\hbar} \left(\frac{\vec{\mu} \times \vec{r}}{r^3} \right) \cdot \vec{p} + 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A} = 2\mu_B \frac{\vec{l} \cdot \vec{\mu}}{r^3} + 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{\nabla} \times \left[\vec{\nabla} \times \left(\frac{\vec{\mu}}{r} \right) \right] \quad (1.30)$$

ove si sono sfruttate le proprietà del triplo prodotto vettore per isolare nel primo addendo l'espressione del momento angolare orbitale $\hbar \vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$. Per ottenere l'espressione del contributo alla variazione del campo magnetico a cui è soggetto il nucleo, bisogna sviluppare il secondo addendo \mathcal{H}_1^s della precedente equazione, dipendente dallo spin, utilizzando le identità vettoriali e la costanza di $\vec{\mu}$:

$$\begin{aligned} \left[\vec{\nabla} \times \left(\vec{\nabla} \times \frac{\vec{\mu}}{r} \right) \right]_i &= \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\varepsilon_{klm} \frac{\partial A_m}{\partial x_l} \right) = (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \frac{\partial^2 A_m}{\partial x_j \partial x_l} = \left[\vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{\mu}}{r} \right) - \nabla^2 \frac{\vec{\mu}}{r} \right]_i \\ \Rightarrow \mathcal{H}_1^s &= 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{\nabla} \times \left[\vec{\nabla} \times \left(\frac{\vec{\mu}}{r} \right) \right] = 2\mu_B \left[(\vec{s} \cdot \vec{\nabla}) \left(\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} \right) - (\vec{s} \cdot \vec{\mu}) \nabla^2 \right] \frac{1}{r} \\ &= 2\mu_B \left[(\vec{s} \cdot \vec{\nabla}) \left(\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} \right) - \frac{1}{3} (\vec{s} \cdot \vec{\mu}) \nabla^2 \right] \left(\frac{1}{r} \right) - \frac{4\mu_B}{3} (\vec{s} \cdot \vec{\mu}) \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) \end{aligned} \quad (1.31)$$

ove nell'ultimo membro si è scelto di rendere convergente il primo termine. Con l'espressione (1.31) è dunque possibile valutare \mathcal{H}_1^s : per $\vec{r} \neq \vec{0}$ essa è data sviluppando il primo addendo, poiché come noto il secondo è nullo in quanto per l'equazione di Laplace, il laplaciano del potenziale elettrostatico generato da una singola carica elettrica svanisce per $\vec{r} \neq \vec{0}$. Sempre per questo motivo, nel primo addendo solo il primo termine sopravvive per $\vec{r} \neq \vec{0}$; poiché esso contiene solo scalari, si è optato per esprimerli in un sistema cartesiano, ivi convertendo anche la norma r del vettore. Sviluppando i calcoli, si ottiene:

$$\begin{aligned} s_i \frac{\partial}{\partial x_i} \mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) &= s_i \mu_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left[-\frac{x_j}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \right] = s_i \mu_j \left\{ \frac{3x_i x_j}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{5}{2}}} \quad i \neq j, \right. \\ &\quad \left. -\frac{(x^2 + y^2 + z^2) - 3x_i^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{5}{2}}} = -\frac{r^2 - 3x_i^2}{r^5} \quad i = j \right\} \Rightarrow s_i \frac{\partial}{\partial x_i} \mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{r} \right) = \sum_i s_i \mu_i \left(-\frac{r^2 - 3x_i^2}{r^5} \right) \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{3s_i x_i \mu_j x_j}{r^5} = -\frac{r^2 \vec{s} \cdot \vec{\mu}}{r^5} + 3 \sum_{ij} \frac{s_i x_i \mu_j x_j}{r^5} = 3 \frac{(\vec{s} \cdot \vec{r})(\vec{\mu} \cdot \vec{r})}{r^5} - \frac{\vec{s} \cdot \vec{\mu}}{r^3} \end{aligned} \quad (1.32)$$

Invece nel caso in cui $\vec{r}' = \vec{0}$, a causa della convergenza del primo addendo, è necessario riesprimere solo il secondo con il teorema di Gauss. Esso contiene il potenziale elettrostatico in unità CGS di una carica $q = 1$; scrivendone la densità in funzione della delta di Dirac si ottiene:

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi\delta(\vec{r}') \Rightarrow -\frac{4\mu_B}{3} (\vec{s}' \cdot \vec{\mu}) \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{16\pi\mu_B}{3} (\vec{s}' \cdot \vec{\mu}) \delta(\vec{r}') \quad (1.33)$$

Unendo i due risultati precedenti si ottiene la definizione della funzione (1.31); aggiungendo ad essa la parte orbitale si perviene alla riscrittura voluta della (1.30):

$$\mathcal{H}_1 = 2\mu_B \gamma_n \hbar \vec{I} \cdot \left[\frac{\vec{l}}{r^3} - \frac{\vec{s}}{r^3} + \frac{3\vec{r}'(\vec{s}' \cdot \vec{r}')}{r^5} + \frac{8\pi}{3} \vec{s}' \delta(\vec{r}') \right] \quad (1.34)$$

ove il momento magnetico $\vec{\mu}$ è riscritto in funzione dell'isospin \vec{I} . Questo è il risultato voluto per l'interazione magnetica iperfina: esso può essere riscritto come energia potenziale magnetica isolando dunque il campo \vec{H}_e a cui è soggetto il nucleo per l'interazione con gli elettroni:

$$\mathcal{H}_1 = -\gamma_n \hbar \vec{H}_e \cdot \vec{I} \Rightarrow \vec{H}_e = -2\mu_B \left[\frac{\vec{l}}{r^3} - \frac{\vec{s}}{r^3} + \frac{3\vec{r}'(\vec{s}' \cdot \vec{r}')}{r^5} + \frac{8\pi}{3} \vec{s}' \delta(\vec{r}') \right] \quad (1.35)$$

Riprendendo il risultato (1.34), si nota che esso contiene tre contributi: il primo rappresenta l'energia potenziale del nucleo con momento $\vec{\mu}$ nel campo di dipolo generato dall'elettrone con momento $-2\mu_B \vec{s}'$. Il secondo descrive la medesima energia nel campo generato dal momento angolare orbitale: esso ha segno opposto rispetto alla pura parte spinoriale del precedente e tale fatto sarà confermato nei prossimi paragrafi quando si mostreranno le varie componenti diamagnetiche e paramagnetiche della suscettività elettronica, legata al campo \vec{H}_e e dunque alla (1.34). Infine il terzo contributo essendo proporzionale alla delta di Dirac spaziale, genererà autovalori non nulli di energia solo se è non nulla la probabilità di trovare un elettrone ad $\vec{r}' = \vec{0}$, ovvero per orbitali s . Questo completa la giustificazione della forma presentata per l'interazione magnetica iperfina, in quanto rende nel dettaglio il terzo addendo della (1.22); i primi due termini ivi presenti sono già stati esposti nel paragrafo precedente, mentre il quarto non viene discusso in questo lavoro, in quanto descrivendo gli effetti della distribuzione di carica elettronica sull'energia nucleare, è di più stretta competenza della NQR (Nuclear Quadrupole Resonance). Ora dunque si possono cercare le conseguenze del cambiamento del campo magnetico sperimentato dai nuclei, tramite quantità misurabili, come il Knight shift. Dipendendo esso, come si mostrerà, dalla suscettività magnetica, si preferisce introdurre nel paragrafo successivo una sua presentazione con la teoria della seconda quantizzazione, rimandando al paragrafo 1.7 la derivazione del Knight shift.

1.6 La suscettività magnetica nel formalismo della seconda quantizzazione

Obiettivo di questo paragrafo, ispirato a [45], è presentare una cornice generale per il calcolo della suscettività magnetica. Conviene pertanto cominciare illustrando il formalismo della seconda quantizzazione che permette di scrivere in modo efficace gli operatori di interesse fisico. Si definisce $C_{\vec{k}\sigma}^\dagger$ l'operatore di creazione che aggiunge allo stato su cui opera un elettrone di vettore d'onda \vec{k} e proiezione z di spin σ ; in modo analogo $C_{\vec{k}\sigma}$ risulta un operatore di distruzione il quale operando su uno stato toglie una particella con caratteristiche \vec{k} , σ . Applicando ripetutamente il primo operatore allo stato di vuoto, si può ottenere la funzione d'onda che descrive il numero voluto di elettroni negli stati desiderati. Da notare sono le regole di anticommutazione dei precedenti operatori, che garantiscono le proprietà fermioniche di un sistema a molte particelle:

$$C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}'\sigma'} + C_{\vec{k}'\sigma'} C_{\vec{k}\sigma}^\dagger = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma}^\dagger + C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger = 0, \quad C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} + C_{\vec{k}'\sigma'} C_{\vec{k}'\sigma'} = 0 \quad (1.36)$$

Come anticipato, la loro utilità risiede nella riscrittura di un operatore $a(\vec{r}'s)$ a molti corpi (di seguito si presenterà solo il caso ad un corpo); come noto difatti esso assume la forma (detta di seconda quantizzazione):

$$A = \sum_{\vec{k}\sigma, \vec{k}'\sigma'} a(\vec{k}\sigma; \vec{k}'\sigma') C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}'\sigma'} \quad (1.37)$$

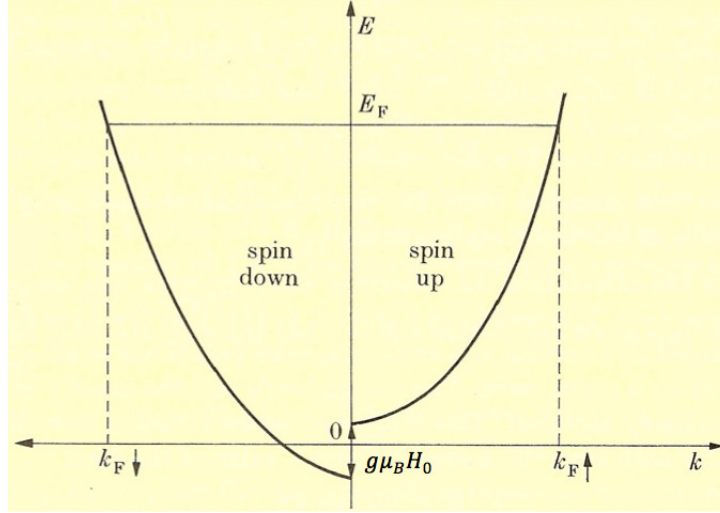


Figura 1.3: Relazioni di dispersione per un gas di elettroni liberi in un campo magnetico esterno (adattata da [45]).

ove la quantità che moltiplica la coppia di creazione e distruzione risulta l'elemento della matrice iniziale tra gli stati elettronici descritti dai pedici degli operatori precedenti:

$$a(\vec{k}\sigma; \vec{k}'\sigma') = \langle \phi_{\vec{k}\sigma} | a(\vec{r}s) | \phi_{\vec{k}'\sigma'} \rangle \quad (1.38)$$

Per estendere le precedenti equazioni al caso di due o più corpi, bisogna ammettere la presenza di quattro o più operatori C , C^\dagger inseriti in modo tale da garantire l'autoaggiuntezza del risultato. Tuttavia ciò che conta è in realtà il valor medio termico del prodotto di due operatori C , C^\dagger :

$$\langle C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}'\sigma'} \rangle = n(E_{\vec{k}\sigma}) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \langle C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}'\sigma'} \rangle = 0, \quad \langle C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger \rangle = 0 \quad (1.39)$$

Nella precedente equazione si vede che l'unico risultato non nullo è il valor medio del prodotto tra gli operatori di creazione e distruzione di uno stesso stato, che risulta pari alla funzione di Fermi n valutata nell'energia di questo stato. Nei calcoli successivi tale conclusione sarà ripetutamente sfruttata, unitamente al teorema di Bloch (ripreso anche nel prossimo paragrafo) per la forma della funzione d'onda elettronica in un potenziale efficace con la periodicità del reticolo:

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = U_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (1.40)$$

ove $U_{\vec{k}}(\vec{r})$, detta funzione di Bloch, ha la periodicità del reticolo. Essa, e dunque l'espressione precedente, è normalizzata nel volume V del campione; tuttavia è conveniente passare alla normalizzazione sul volume atomico Ω tramite la seguente definizione:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{V}{\Omega}} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.41)$$

Uno di tali risultati riguarda la suscettività magnetica, di cui si tratterà inizialmente il caso statico, per generalizzare poi le conclusioni ad un campo magnetico non locale. Si consideri pertanto un sistema di elettroni non interagenti soggetti ad un campo esterno uniforme H_0 ; per calcolare la suscettività, è necessario determinare la magnetizzazione elettronica di spin M_S , ad essa legata da:

$$M_S = \chi_S H_0 \quad (1.42)$$

Rispetto al caso in assenza di campo, si osserva per il sistema una variazione di energia, dovuta all'interazione Zeeman, data da:

$$\Delta E = \hbar\omega_0 = g\mu_B H_0 \quad (1.43)$$

I due segni negativi della carica elettronica e dell'energia potenziale magnetica, si compensano, dando un cambiamento di energia direttamente proporzionale alla componente z dello spin che dunque provoca uno shift della densità degli stati, favorendo gli spin down come mostrato in figura 1.3. Per ottenere il risultato voluto, si comincia utilizzando la definizione di magnetizzazione di spin:

$$M_S = \frac{g\mu_B}{2} \sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}\downarrow} - n_{\vec{k}\uparrow}) \quad (1.44)$$

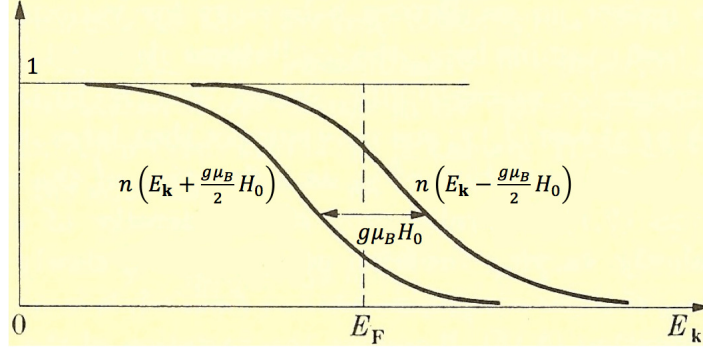


Figura 1.4: Funzioni di distribuzione per un gas di elettroni liberi in un campo magnetico esterno (adattata da [45]).

Il valore n presente nella precedente formula denota il numero di occupazione dello stato a cui esso si riferisce, mediato su tutte le possibili distribuzioni elettroniche, ovvero risulta pari alla funzione di Fermi. La precedente somma discreta può essere valutata passando al continuo, esprimendo però l'integrale ottenuto nella variabile energia; l'integrando, argomento della sommatoria precedente, deve essere così moltiplicato per i fattori $\frac{V}{(2\pi)^3}$ e lo Jacobiano del cambio di variabile. Ma il loro prodotto risulta per definizione pari alla densità $\frac{Vg(E_{\vec{k}})}{2}$ degli stati, ove il fattore $\frac{1}{2}$ è dovuto al fatto che l'integrando dipende dalla direzione dello spin e dunque bisogna esprimere il numero degli stati accessibili per ogni suo valore:

$$M_S = \frac{g\mu_B V}{2} \int_0^\infty dE_{\vec{k}} \frac{g(E_{\vec{k}})}{2} \left[n\left(E_{\vec{k}} - \frac{g\mu_B H_0}{2}\right) - n\left(E_{\vec{k}} + \frac{g\mu_B H_0}{2}\right) \right] \quad (1.45)$$

Le funzioni nella parentesi quadra della precedente formula sono rappresentate nella figura 1.4, avendone esagerato la pendenza per motivi grafici; essendo l'energia di Zeeman una correzione a quella traslazionale $E_{\vec{k}}$, risulta possibile un'espansione in serie che fornisce:

$$n\left(E_{\vec{k}} - \frac{g\mu_B H_0}{2}\right) - n\left(E_{\vec{k}} + \frac{g\mu_B H_0}{2}\right) = -g\mu_B H_0 \frac{dn(E_{\vec{k}})}{dE_{\vec{k}}} \quad (1.46)$$

Inserendo tale risultato nella precedente equazione, si ottiene una formula di validità generale per la magnetizzazione di spin e dunque per la suscettività tramite la (1.42):

$$M_S = -\frac{(g\mu_B)^2 V H_0}{4} \int_0^\infty dE_{\vec{k}} g(E_{\vec{k}}) \frac{dn(E_{\vec{k}})}{dE_{\vec{k}}} \Rightarrow \chi_S = \frac{V(g\mu_B)^2}{4} \int_0^\infty dE_{\vec{k}} g(E_{\vec{k}}) \left[-\frac{dn(E_{\vec{k}})}{dE_{\vec{k}}} \right] \quad (1.47)$$

Da essa è possibile ottenere la formula di Pauli specificando il calcolo per una temperatura nulla, nel qual caso la funzione di Fermi risulta una funzione gradino e la sua derivata è l'opposto della delta di Dirac centrata in E_F :

$$\frac{dn(E_{\vec{k}})}{dE_{\vec{k}}} = -\delta(E_{\vec{k}} - E_F) \Rightarrow \chi_S = \frac{V(g\mu_B)^2}{4} g(E_F) \quad (1.48)$$

Tale conclusione va tuttavia modificata quando si considera un campo magnetico non omogeneo; si consideri difatti un sistema soggetto a $\vec{H}(\vec{R})$ che varia nello spazio. Per definire la magnetizzazione di spin $\vec{M}(\vec{R})$, bisogna considerare la somma tra la funzione di risposta non locale $\chi_S(\vec{R}, \vec{R}')$ (suscettività) ed il campo $\vec{H}(\vec{R}')$ in quel punto. Passando al limite continuo, e normalizzando le unità di misura rispetto al volume del campione, si ha:

$$\vec{M}(\vec{R}) = \frac{1}{V} \int \chi_S(\vec{R}, \vec{R}') \vec{H}(\vec{R}') d^3 R' \quad (1.49)$$

Al solito, la magnetizzazione sarà proporzionale al valor medio termico dello spin in quel punto:

$$\vec{M}(\vec{R}) = -g\mu_B \langle \vec{S}(\vec{R}) \rangle \quad (1.50)$$

Qualora si consideri un campo magnetico centrato in un sol punto \vec{R}_i , utilizzando le proprietà della delta nell'integrazione, si ottiene una formula analoga alla (1.42):

$$\vec{H}(\vec{R}') = V \vec{h} \delta(\vec{R}' - \vec{R}_i) \Rightarrow \vec{M}(\vec{R}) = \vec{h} \chi_S(\vec{R}, \vec{R}_i) \quad (1.51)$$

Volendo trattare tale argomento in generale, conviene però ipotizzare una omogeneità del reticolo, cosicchè la suscettività risulti invariante per traslazione e dipenda dalla differenza dei suoi argomenti. Con tale ipotesi è possibile introdurre la sua trasformata di Fourier $\chi_S(\vec{q})$, la cui relazione con la funzione diretta è definita in serie tramite le formule:

$$\begin{aligned} \chi_S(\vec{q}) &= \frac{1}{V} \int d^3(R - R') \chi_S(\vec{R} - \vec{R}') e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')}, \\ \chi_S(\vec{R} - \vec{R}') &= \sum_{\vec{q}} \chi_S(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q \chi_S(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \end{aligned} \quad (1.52)$$

ove nell'ultima uguaglianza si è sfruttato il passaggio al continuo. Inserendo tale espressione in ambo i membri della (1.49), utilizzando definizione e proprietà della delta, è possibile ottenere la seguente relazione nello spazio reciproco, valida per la trasformata di Fourier di una convoluzione:

$$\vec{M}(\vec{R}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q M(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \Rightarrow M(\vec{q}) = \chi_S(\vec{q}) \vec{H}(\vec{q}) \quad (1.53)$$

L'energia magnetica di tale sistema può essere ottenuta con una somma continua, come fatto nella (1.49), dei singoli addendi di Zeeman, trovando:

$$\mathcal{H}_{\vec{q}} = \frac{1}{V} \int g\mu_B \vec{H}(\vec{R}) \cdot \vec{S}(\vec{R}) d^3R \quad (1.54)$$

Per semplicità di trattazione si consideri una forma oscillante del campo esterno; tale scrittura ad onda piana, è utile in quanto lo esprime come serie di Fourier ad un solo addendo. Inserendola nella precedente formula si ha dunque:

$$\vec{H}(\vec{R}) = \vec{h}_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \Rightarrow \mathcal{H}_{\vec{q}} = g\mu_B \vec{h}_{\vec{q}} \cdot \frac{1}{V} \int \vec{S}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} d^3R = g\mu_B \vec{h}_{\vec{q}} \cdot \vec{S}_{-\vec{q}} \quad (1.55)$$

Per poter procedere è necessario tuttavia che l'hamiltoniana precedente sia reale; ipotizzando che $\vec{h}_{\vec{q}}$ lo sia, la (1.55) va così completata:

$$\mathcal{H}_{\vec{q}} = g\mu_B \vec{h}_{\vec{q}} \cdot (\vec{S}_{-\vec{q}} + \vec{S}_{\vec{q}}) \quad (1.56)$$

Essa mostra che dunque anche nel calcolo del coefficiente di Fourier della magnetizzazione, si dovranno mediare sia $\vec{S}_{\vec{q}}$ che $\vec{S}_{-\vec{q}}$; per procedere è dunque necessario determinare tali quantità utilizzando il formalismo della seconda quantizzazione. Poiché esse moltiplicano il parametro perturbativo $\vec{h}_{\vec{q}}$, si utilizzeranno le (1.37) e (1.38) con gli stati di elettrone libero; ricordando la forma diagonale dell'operatore S_z per l'elettrone di spin $\frac{1}{2}$, si trova:

$$S_z(\vec{R}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} (C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}'\uparrow} - C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow}) \quad (1.57)$$

Sempre in tale formalismo risulta utile esprimere l'operatore di innalzamento di spin che nel caso $\frac{1}{2}$ vale:

$$S_+(\vec{R}) = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow} \quad (1.58)$$

Utilizzando la (1.52) per il calcolo della trasformata di Fourier, passando al continuo in \vec{k}' e sfruttando le proprietà della delta, si ha:

$$\begin{aligned} S_z(\vec{q}) &= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}'\uparrow} - C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow}) \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{R}} d^3R = \frac{(2\pi)^3}{2V} \frac{V}{(2\pi)^3}, \\ \sum_{\vec{k}} \int d^3k' (C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}'\uparrow} - C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow}) \delta(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} - C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow}) \end{aligned} \quad (1.59)$$

Di tale quantità verrà fatta una media termica per il calcolo della magnetizzazione di spin; è necessario calcolare ora gli stati G' su cui operare tale media, utilizzando la teoria perturbativa al primo ordine. Detti ϕ_n gli autostati dell'hamiltoniana imperturbata con autovalori $E_n^{(0)}$, nel caso non degenerare risulta:

$$|G'\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk} |\phi_k\rangle, \quad c_{nk}^{(1)} = \frac{\langle \phi_k | \mathcal{H}_{\vec{q}} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (1.60)$$

Se n denota lo stato fondamentale G , allora la sommatoria si estende sui possibili stati eccitati che non annullano l'elemento di matrice della perturbazione. Dalle formule (1.56) e (1.59) ciò avviene scegliendo, per entrambe le direzioni di spin, stati che hanno un elettrone in meno con momento $\vec{k} - \vec{q}$ ed uno in più con vettore d'onda \vec{k} , ripetendo tale ragionamento nel caso in cui \vec{q} sia sostituito con $-\vec{q}$, vista la condizione di realtà a cui deve soddisfare l'hamiltoniana della perturbazione; utilizzando il formalismo della seconda quantizzazione per scrivere gli stati descritti, si dovranno calcolare dei coefficienti pari a:

$$c_{nk}^{(1)} = \frac{\frac{g\mu_B}{2} \sum_{\vec{k}} h_z \vec{q} \langle \phi_k | C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow} - C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}-\vec{q}\downarrow} + C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} - C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow} | G \rangle}{E_{GS} - E_k^{(0)}}, \quad (1.61)$$

$$|\phi_\uparrow\rangle = C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow} | G \rangle, \quad |\phi_\downarrow\rangle = C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}-\vec{q}\downarrow} | G \rangle, \quad |\phi'_\uparrow\rangle = C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} | G \rangle, \quad |\phi'_\downarrow\rangle = C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow} | G \rangle$$

Come si vede, la quantità da calcolare, con le variazioni dovute al segno di \vec{q} ed alla direzione dello spin, è un valor medio termico, per il quale si utilizzano le regole di anticommutazione (1.36) nonché la (1.39). Di seguito si presenta il procedimento esteso valido per $+\vec{q}$ e spin \uparrow , apportando poi i necessari cambiamenti per desumere gli altri casi:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{n\uparrow}^{(1)} &= \langle G | C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow} | G \rangle = \langle G | C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger | G \rangle - \langle G | C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow} | G \rangle = \\ &n_\uparrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) - n_\uparrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) n_\uparrow(E_{\vec{k}}), \quad \tilde{c}_{n\downarrow}^{(1)} = n_\downarrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) - n_\downarrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) n_\downarrow(E_{\vec{k}}), \quad \tilde{c}'_{n\uparrow} = \\ &n_\uparrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) - n_\uparrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) n_\uparrow(E_{\vec{k}}), \quad \tilde{c}'_{n\downarrow} = n_\downarrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) - n_\downarrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) n_\downarrow(E_{\vec{k}}) \end{aligned} \quad (1.62)$$

Inserendo tale risultato nella precedente equazione, dopo aver valutato caso per caso l'energia dello stato k (che nel caso esaminato in modo esteso precedentemente differisce dallo stato fondamentale per la distruzione di un elettrone con vettore d'onda $\vec{k} - \vec{q}$ e spin \uparrow e la creazione di una particella in stato \vec{k} , \uparrow e così via) si può ottenere tramite la (1.60) la modificazione di G per effetto dell'interazione Zeeman:

$$\begin{aligned} |G'\rangle &= |G\rangle + \frac{g\mu_B h_z \vec{q}}{2} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{n_\uparrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) [1 - n_\uparrow(E_{\vec{k}})]}{-E_{\vec{k}\uparrow} + E_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow}} |\phi_\uparrow\rangle - \frac{n_\downarrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) [1 - n_\downarrow(E_{\vec{k}})]}{-E_{\vec{k}\downarrow} + E_{\vec{k}-\vec{q}\downarrow}} |\phi_\downarrow\rangle + \right. \\ &\left. \frac{n_\uparrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) [1 - n_\uparrow(E_{\vec{k}})]}{-E_{\vec{k}\uparrow} + E_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow}} |\phi'_\uparrow\rangle - \frac{n_\downarrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) [1 - n_\downarrow(E_{\vec{k}})]}{-E_{\vec{k}\downarrow} + E_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow}} |\phi'_\downarrow\rangle \right\} = |G\rangle + \sum_{\vec{k}} (\delta n_{-\vec{q}\uparrow} C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow} | G \rangle \\ &+ \delta n_{-\vec{q}\downarrow} C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}-\vec{q}\downarrow} | G \rangle + \delta n_{\vec{q}\uparrow} C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} | G \rangle + \delta n_{\vec{q}\downarrow} C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow} | G \rangle) \end{aligned} \quad (1.63)$$

ove nell'ultima uguaglianza si è definita una variazione del numero di occupazione, a seconda dei valori di \vec{k} , \vec{q} e della direzione di spin, che è il tratto marcato dell'accoppiamento con il campo esterno e può essere utilizzato similmente a quanto fatto nella (1.44) per il calcolo della magnetizzazione di spin. In questo caso si trova:

$$\begin{aligned} M_{z\vec{q}} &= \frac{g\mu_B}{2} \sum_{\vec{k}} (\delta n_{-\vec{q}\downarrow} - \delta n_{-\vec{q}\uparrow} + \delta n_{\vec{q}\downarrow} - \delta n_{\vec{q}\uparrow}) = \frac{(g\mu_B)^2 h_z \vec{q}}{4} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{n_\downarrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) [1 - n_\downarrow(E_{\vec{k}})]}{E_{\vec{k}\downarrow} - E_{\vec{k}-\vec{q}\downarrow}} \right. \\ &+ \frac{n_\uparrow(E_{\vec{k}-\vec{q}}) [1 - n_\uparrow(E_{\vec{k}})]}{E_{\vec{k}\uparrow} - E_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow}} + \frac{n_\downarrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) [1 - n_\downarrow(E_{\vec{k}})]}{E_{\vec{k}\downarrow} - E_{\vec{k}+\vec{q}\downarrow}} + \frac{n_\uparrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) [1 - n_\uparrow(E_{\vec{k}})]}{E_{\vec{k}\uparrow} - E_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow}} \left. \right\} \\ &= \frac{(g\mu_B)^2 h_z \vec{q}}{4} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{n_\uparrow(E_{\vec{k}}) + n_\downarrow(E_{\vec{k}}) - [n_\uparrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) + n_\downarrow(E_{\vec{k}+\vec{q}})]}{E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}}} \right\} \end{aligned} \quad (1.64)$$

$$\begin{aligned}
\chi_S(\vec{q}) &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{(g\mu_B)^2}{2} \int d^3k \frac{\theta\left(\mu - \frac{\hbar^2|\vec{k}+\vec{q}|^2}{2m}\right) - \theta\left(\mu - \frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m}\right)}{\frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m} - \frac{\hbar^2|\vec{k}+\vec{q}|^2}{2m}}, \\
\int d^3k \frac{\theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - |\vec{k}|^2\right)}{|\vec{k}+\vec{q}|^2 - |\vec{k}|^2} &= I(\vec{q}) \Rightarrow \chi_S(\vec{q}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{(g\mu_B)^2}{2} \frac{2m}{\hbar^2} [I(-\vec{q}) + I(\vec{q})] \\
I(\pm\vec{q}) &= \int d^3k \frac{\theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - |\vec{k}|^2\right)}{|\vec{q}|^2 \pm 2|\vec{k}||\vec{q}|\cos\theta} = 2\pi \int_0^\infty dk k^2 \theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - k^2\right) \int_0^\pi d\theta \frac{\sin\theta}{q^2 \pm 2kq \cos\theta} = \\
&= 2\pi \int_0^{\sqrt{\frac{2m\mu}{\hbar^2}}} dk k^2 \left(-\frac{1}{\pm 2kq} \ln|q^2 \pm 2kq \cos\theta| \right)_{\theta=0}^{\theta=\pi} = 2\pi \int_0^{\sqrt{\frac{2m\mu}{\hbar^2}}} dk \frac{\pm k}{2q} \ln \left| \frac{q \pm 2k}{q \mp 2k} \right| \\
\int x \ln|a + cx| dx, \quad a + cx = t \rightarrow dx = \frac{dt}{c} &\Rightarrow \int \left(\frac{t-a}{c}\right) \ln|t| \frac{dt}{c} = \frac{1}{c^2} \left[-a(t \ln|t| - t) + \frac{t^2}{2} \ln|t| - \frac{t^2}{4} \right] \\
+K = \frac{1}{c^2} \left\{ \ln|a + cx| \left[-a(a + cx) + \frac{1}{2}(a + cx)^2 \right] + a(a + cx) - \frac{1}{4}(a + cx)^2 \right\} &+ K = \frac{1}{c^2} \left[\ln|a + cx| \cdot \left(\frac{c^2 x^2}{2} - \frac{a^2}{2} \right) + \frac{acx}{2} - \frac{c^2 x^2}{4} \right] + K' \Rightarrow \int x \ln|a + cx| dx = \ln|a + cx| \left(\frac{x^2}{2} - \frac{a^2}{2c^2} \right) + \frac{ax}{2c} - \frac{x^2}{4} + K' \\
I(-\vec{q}) + I(\vec{q}) &= 2\pi \int_0^{k_F} dk \left(\frac{k}{2q} \ln|q + 2k| - \frac{k}{2q} \ln|q - 2k| + \frac{k}{2q} \ln|q + 2k| - \frac{k}{2q} \ln|q - 2k| \right) = \\
&= 4\pi \int_0^{k_F} dk \frac{k}{2q} \ln|q + 2k| + 4\pi \int_{-k_F}^0 dk \frac{k}{2q} \ln|q + 2k| = \frac{4\pi}{2q} \int_{-k_F}^{k_F} x \ln|q + 2x| dx = \frac{4\pi}{2q} \left[\ln|q + 2x| \cdot \left(\frac{x^2}{2} - \frac{q^2}{8} \right) + \frac{qx}{4} - \frac{x^2}{4} \right]_{x=-k_F}^{x=k_F} = \frac{2\pi}{q} \left[\left(\frac{k_F^2}{2} - \frac{q^2}{8} \right) \ln \left| \frac{q+2k_F}{q-2k_F} \right| + \frac{qk_F}{2} \right] = \pi k_F \left[\frac{(2k_F)^2 - q^2}{4qk_F} \ln \left| \frac{q+2k_F}{q-2k_F} \right| + 1 \right] \\
\chi_S(\vec{q}) &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{(g\mu_B)^2}{2} \frac{2m}{\hbar^2} \pi k_F \left[\frac{1 - \left(\frac{q}{2k_F}\right)^2}{\frac{2}{2k_F} \frac{q}{2k_F}} \ln \left| \frac{1 + \frac{q}{2k_F}}{1 - \frac{q}{2k_F}} \right| + 1 \right] = \frac{1}{2} \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_F} \frac{(g\mu_B)^2}{4} F\left(\frac{q}{2k_F}\right), \\
F(x) = 1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|, \quad g(E_F) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_F} &\Rightarrow \chi_S(\vec{q}) = \frac{1}{2} \frac{V(g\mu_B)^2}{4} g(E_F) F\left(\frac{q}{2k_F}\right) = \frac{\chi_S^{auti}}{2} F\left(\frac{|\vec{q}|}{2k_F}\right)
\end{aligned}$$

Tabella 1.1: Derivazione della trasformata di Fourier della suscettività nel caso 3d.

ove si è usato il fatto che nello stato stazionario di elettroni liberi, l'energia non dipende dalla componente di spin. Per la (1.53) proiettata in direzione z , si può calcolare la suscettività magnetica come:

$$\begin{aligned}
\chi_S(\vec{q}) &= \frac{M_z \vec{q}}{h_z \vec{q}} = \frac{(g\mu_B)^2}{4} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{n_\uparrow(E_{\vec{k}}) + n_\downarrow(E_{\vec{k}}) - [n_\uparrow(E_{\vec{k}+\vec{q}}) + n_\downarrow(E_{\vec{k}+\vec{q}})]}{E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}}} \right\} \\
&= \frac{(g\mu_B)^2}{2} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{n(E_{\vec{k}+\vec{q}}) - n(E_{\vec{k}})}{E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}}} \right] \tag{1.65}
\end{aligned}$$

ove nell'ultimo passaggio si è utilizzato il fatto che all'ordine 0 la somma delle funzioni di Fermi valutate nell'energia perturbata a seconda della direzione \uparrow o \downarrow è pari al doppio della distribuzione n avente per argomento il solo termine cinetico libero (energia traslazionale). Il calcolo della precedente sommatoria è proseguibile analiticamente nel caso di temperatura nulla, dopo un passaggio al continuo; i risultati sono mostrati in tabella 1.1. In essa si è operata l'integrazione in coordinate sferiche, prima nell'angolo θ , poi nel raggio; utilizzando un'integrale notevole che lì si trova giustificato, attraverso trasformazioni di simmetria, si è espressa la suscettività nei termini di una funzione F (lì definita) e del valore di Pauli calcolato in precedenza.

In figura 1.5 è graficato l'andamento della suscettività magnetica; sono da notare due aspetti: in primo luogo per $|\vec{q}| = 0$, essa assume il valore uniforme di Pauli, come esplicitamente derivato ad inizio paragrafo; in secondo luogo per $|\vec{q}| = 2k_F$, essa si dimezza e la sua derivata diverge. Nella figura citata si trova anche la rappresentazione del caso bidimensionale, che può essere utile all'argomento della tesi, in quanto il fenomeno superconduttivo si origina sui piani CuO_2 .

Il calcolo per la suscettività magnetica, riprodotto in tabella 1.2, solo per certi versi è analogo al precedente: difatti dopo il consueto passaggio al continuo, lavorando in coordinate polari, si integra prima nell'angolo φ con il teorema dei residui e poi nel raggio. Il primo risultato è non nullo solo se il raggio soddisfa ad una determinata relazione con $|\vec{q}|$, dunque per il prosieguo del calcolo, si otterrà una funzione definita per tratti, che risulta costante per $|\vec{q}| < 2k_F$ e decrescente per $|\vec{q}| > 2k_F$. Gli ultimi passaggi riportati legano quanto trovato al valore uniforme di Pauli (1.48), a patto di sostituire per il caso 2d l'opportuna densità degli stati (costante).

Da notare risultano dunque le seguenti differenze: dal punto di vista formale, nel caso 2d l'integrazione con il teorema dei residui costringe a procedere per tratti, mentre ciò non accadeva in precedenza; da quello numerico, la suscettività mostra per $|\vec{q}| = 2k_F$ una pendenza infinita in entrambe le situazioni, solo che il valore assunto

$$\chi_S(\vec{q}) = \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{(g\mu_B)^2}{2} \int d^2k \left[\frac{\theta\left(\mu - \frac{\hbar^2|\vec{k}+\vec{q}|^2}{2m}\right) - \theta\left(\mu - \frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m}\right)}{\frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m} - \frac{\hbar^2|\vec{k}+\vec{q}|^2}{2m}} \right] =$$

$$\frac{A}{(2\pi)^2} \frac{(g\mu_B)^2}{2} \frac{2m}{\hbar^2} [I(-\vec{q}) + I(\vec{q})], \quad I(\vec{q}) = \int d^2k \left[\frac{\theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - |\vec{k}|^2\right)}{|\vec{k}+\vec{q}|^2 - |\vec{k}|^2} \right]$$

$$I(\pm\vec{q}) = \int d^2k \left[\frac{\theta\left(k_F^2 - |\vec{k}|^2\right)}{|\vec{q}|^2 \pm 2|\vec{k}||\vec{q}|\cos\varphi} \right] = \int_0^{k_F} dk \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{k}{q^2 \pm 2kq\cos\varphi} = \int_0^{k_F} kJ(q^2, 2kq) dk,$$

$$J(A, B) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{A \pm B \cos\varphi} = \int_0^{2\pi} \frac{2d\varphi}{2A \pm B(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})}, \quad e^{i\varphi} = z \rightarrow e^{i\varphi} i d\varphi = dz \rightarrow d\varphi = -i \frac{dz}{z} \Rightarrow$$

$$J(A, B) = \oint_C -i \frac{dz}{z} \frac{2}{2A \pm B(z+z^{-1})} = \mp 2i \oint_C \frac{dz}{Bz^2 \pm 2Az + B}$$

$$Bz^2 \pm 2Az + B = 0 \Rightarrow z_{1,2}^\pm = \frac{1}{B} (\mp A \pm \sqrt{A^2 - B^2}), \quad A^2 > B^2 \Rightarrow q^2 > 2kq \rightarrow q > 2k. \quad |z_{1,2}^\pm| < 1$$

$$\Rightarrow \frac{1}{B} (A \pm \sqrt{A^2 - B^2}) < 1 \rightarrow \sqrt{A^2 - B^2} < B - A \vee \sqrt{A^2 - B^2} > A - B \rightarrow \emptyset \vee AB - B^2 > 0 \rightarrow \emptyset$$

$$\vee \forall (A > B) \Rightarrow z_1^+ = \frac{1}{B} (-A + \sqrt{A^2 - B^2}) \wedge z_2^- = \frac{1}{B} (A - \sqrt{A^2 - B^2}) \rightarrow |z_1^+| < 1 \wedge |z_2^-| < 1$$

$$J(A, B) = \mp 2i \oint_C \frac{dz}{B(z-z_1^\pm)(z-z_2^\pm)} = \frac{\mp 2i}{B} 2\pi i \text{Res} \left[\frac{1}{(z-z_1^\pm)(z-z_2^\pm)} \right] \left(\begin{matrix} z_1^+ \\ z_2^- \end{matrix} \right) =$$

$$\pm \frac{4\pi}{B} \lim_{z \rightarrow \begin{pmatrix} z_1^+ \\ z_2^- \end{pmatrix}} \left[\frac{z - \begin{pmatrix} z_1^+ \\ z_2^- \end{pmatrix}}{(z-z_1^\pm)(z-z_2^\pm)} \right] = \left\{ +\frac{4\pi}{B} \frac{1}{z_1^+ - z_2^+}, -\frac{4\pi}{B} \frac{1}{z_2^- - z_1^-} \right\} =$$

$$\left\{ 4\pi \left[\frac{1}{-A + \sqrt{A^2 - B^2} - (-A - \sqrt{A^2 - B^2})} \right], -4\pi \left[\frac{1}{A - \sqrt{A^2 - B^2} - (A + \sqrt{A^2 - B^2})} \right] \right\} = \left\{ \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - B^2}}, \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - B^2}} \right\}$$

$$Bz^2 \pm 2Az + B = 0 \Rightarrow z_{1,2}^\pm = \frac{1}{B} (\mp A \pm i\sqrt{B^2 - A^2}), \quad A^2 < B^2 \Rightarrow q^2 < 2kq \rightarrow q < 2k.$$

$$|z_{1,2}^\pm| = 1 \Rightarrow J(A, B) = 0 \rightarrow I(\vec{q}) = I(-\vec{q}) = \int_0^\infty \theta(k_F - k) kJ(q^2, 2kq) dk =$$

$$\int_0^\infty \theta(k_F - k) \theta(q - 2k) \frac{2\pi k}{\sqrt{(q^2)^2 - (2kq)^2}} dk$$

$$\theta(k_F - k) \theta(q - 2k) = \left\{ \theta(k_F - k) \quad q > 2k_F, \theta\left(\frac{q}{2} - k\right) \quad q < 2k_F \right\} \Rightarrow I(\vec{q}) = I(-\vec{q}) =$$

$$\left\{ \int_0^{k_F} \frac{2\pi k}{q\sqrt{q^2 - 4k^2}} dk \quad q > 2k_F, \int_0^{\frac{q}{2}} \frac{2\pi k}{q\sqrt{q^2 - 4k^2}} dk \quad q < 2k_F \right\} = \left\{ -\frac{\pi}{2q} \sqrt{q^2 - 4k^2} \Big|_{k=0}^{k=k_F} \quad q > 2k_F, \right.$$

$$\left. -\frac{\pi}{2q} \sqrt{q^2 - 4k^2} \Big|_{k=0}^{k=\frac{q}{2}} \quad q < 2k_F \right\} = \left\{ \frac{\pi}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{2k_F}{q}\right)^2} \right] \quad q > 2k_F, \frac{\pi}{2} \quad q < 2k_F \right\}$$

$$\chi_S(\vec{q}) = \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{(g\mu_B)^2}{2} \frac{2m}{\hbar^2} \pi \left\{ \theta(2k_F - q) + \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{2k_F}{q}\right)^2} \right] \theta(q - 2k_F) \right\} =$$

$$\frac{m}{\pi\hbar^2} \frac{A(g\mu_B)^2}{4} F\left(\frac{q}{2k_F}\right), \quad F(x) = \theta(1-x) + \left[1 - \sqrt{1 - \frac{1}{x^2}} \right] \theta(x-1),$$

$$\frac{m}{\pi\hbar^2} = g(E) = g(E_F) \Rightarrow \chi_S(\vec{q}) = \frac{A(g\mu_B)^2}{4} g(E_F) F\left(\frac{|\vec{q}|}{2k_F}\right) = \chi_S^{\text{Pauli}} F\left(\frac{|\vec{q}|}{2k_F}\right)$$

 Tabella 1.2: Derivazione della trasformata di Fourier della suscettività nel caso $2d$.

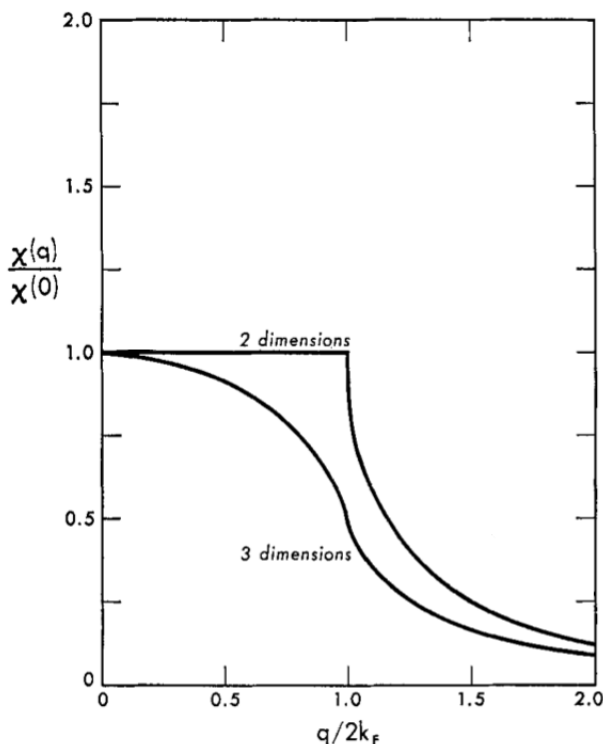


Figura 1.5: Trasformata di Fourier normalizzata della suscettività in funzione del vettore d'onda nei casi 2d e 3d (adattata da [32]).

risulta diverso (pari a quello uniforme in 2d, la sua metà in 3d). Ciò conclude la discussione sulla suscettività magnetica, calcolata in questo paragrafo con il formalismo della seconda quantizzazione ed utile nel prosieguo poiché, se pensata come funzione di risposta complessa, la sua parte reale statica ed uniforme sarà proporzionale al Knight shift, mentre la sua parte immaginaria rientra nel computo del NSLRR.

1.7 Il Knight shift

Come mostrato in [10], riprendendo il primo ed il terzo addendo dell'hamiltoniana (1.22), è possibile dar loro un'espressione simile, pari a:

$$\mathcal{H}_Z + \mathcal{H}_{n-e} = -\gamma_n \hbar \vec{I} \cdot (1 + \hat{K}) \vec{H}_0 \quad (1.66)$$

ove \hat{K} è una matrice nota come tensore di Knight shift. Tale scrittura è utile in quanto lega il Knight shift come matrice di proporzionalità tra la variazione del campo magnetico a cui è soggetto l'isospin per interazioni iperfine ed il campo esterno \vec{H}_0 . Scegliendo pertanto un'opportuna forma per gli accoppiamenti, è possibile derivare un'espressione per il Knight shift come si farà nel prosieguo del paragrafo. Prima però conviene analizzare i vari contributi a questa quantità: storicamente fu descritta per la prima volta nel 1949 da Walter D. Knight, il quale osservò che la frequenza di risonanza nel rame metallico ^{63}Cu è più alta di quella nel sale diamagnetico CuCl , a patto che le misure vengano effettuate con il medesimo campo statico \vec{H}_0 . Attribuendo tale discrepanza all'accoppiamento magnetico iperfine, è dunque possibile spezzare ciascuna componente \hat{K} della matrice precedente nel seguente modo:

$$K = K_{dia} + K_{orb} + K_s \quad (1.67)$$

ove K_{orb} rappresenta il contributo della parte orbitale (primo addendo) della (1.34), K_s denota la correzione quando agisce il contributo spinoriale alla (1.34) sia in forma di dipolo (secondo e terzo addendo) che come potenziale di contatto di Fermi (quarto addendo) e K_{dia} è il risultato tra l'accoppiamento del nucleo con gli elettroni di core. Esso non è presente nella (1.34), la quale vale per l'interazione tra il nucleo ed un elettrone libero (ovvero di conduzione); tuttavia K_{dia} è il meno importante tra i tre termini presenti nella precedente formula, e spesso volte viene omissso. Infine il suo carattere diamagnetico sarà giustificato in seguito, quando si leggerà il Knight shift alla suscettività magnetica elettronica, che offre un contributo diamagnetico per gli elettroni non coinvolti nella conduzione, detto di Larmor-Langevin. Dei rimanenti due addendi nella (1.67), il più immediato da legare alla

suscettività magnetica è K_s ; anche per K_{orb} si dimostra valere tale proporzionalità, a patto di considerare come suscettività il contributo di Van Vleck, legato all'energia di transizione tra orbitali elettronici (situazione nella quale si può avere ancora un momento angolare orbitale definito). Occupandosi pertanto di K_s si svilupperà il calcolo con l'hamiltoniana iperfine descritta dal solo contributo di contatto di Fermi (non nullo solo per gli elettroni in orbitale s). Esso deve riprodurre le 4 caratteristiche sperimentalmente riscontrate da Knight. Definendo:

$$\omega_m = \omega_0 + \Delta\omega \quad (1.68)$$

per la variazione $\Delta\omega$ della frequenza di risonanza ω_m rispetto al suo valore di riferimento ω_0 egli notò che: $\Delta\omega > 0$; il rapporto $\frac{\Delta\omega}{\omega_0}$ (noto come shift frazionario) è indipendente dai valori del campo esterno \vec{H}_0 ; lo shift frazionario non varia sensibilmente con la temperatura, infine esso risulta proporzionale alla carica nucleare Z . Tali caratteristiche sono spiegabili utilizzando un potenziale di contatto alla Fermi: in un reticolo con un nucleo ad ogni sito, gli elettroni di conduzione del metallo non restano localizzati, bensì saltano da un nucleo all'altro generando un accoppiamento indiretto come visto nel paragrafo 4 (tale forma sarà utilizzata nel seguito per calcolare il Knight shift nella famiglia di cuprati YBCO). Concentrandosi su uno di questi nuclei, poiché esso interagisce con molti elettroni, conviene mediare l'interazione tra il campo presente in quel punto e le varie orientazioni degli spin elettronici. In assenza di campo esterno essendo lo spazio isotropo, non vi è alcuna direzione di polarizzazione e pertanto si annulla la media sugli spin, non producendo alcuna energia potenziale magnetica nel campo nucleare. Se però si applica un campo esterno \vec{H}_0 , come si è dimostrato nello scorso paragrafo gli elettroni di conduzione manifestano un comportamento paramagnetico, ovvero polarizzano il loro spin preferibilmente nella direzione di \vec{H}_0 . Tale contributo, per l'equazione (1.2), va ad aggiungersi ad \vec{H}_0 , aumentando il valore del campo a cui è soggetto il nucleo, giustificando la prima proprietà $\Delta\omega > 0$. Poiché però essendo $\Delta\omega$ proporzionale a tale magnetizzazione netta, è legata in base alla (1.2) ad \vec{H}_0 ; ricordando la proporzionalità tra frequenza di Larmor ω_0 e campo statico \vec{H}_0 , si può concludere che lo shift frazionario è indipendente dal valore di \vec{H}_0 . Inoltre l'unica dipendenza dalla temperatura riscontrabile nello shift frazionario dovrebbe risiedere nel termine di magnetizzazione; tuttavia come si è dimostrato in precedenza essa (e dunque la suscettività per gli elettroni di conduzione) è in buona approssimazione indipendente dalla temperatura, in quanto l'unica scala di energia che compare è quella di Fermi. Pertanto si conclude la validità della terza proprietà; infine la dipendenza da Z è ricavabile nella media delle orientazioni degli spin, ove appaiono le funzioni d'onda per gli elettroni in orbitale s . Poiché queste, calcolate a $\vec{r} = \vec{0}$ sono crescenti in Z (basta confrontare una tabella per le autofunzioni elettroniche degli atomi idrogenoidi), si conclude che la magnetizzazione e dunque lo shift frazionario ammettono il medesimo comportamento, come era affermato nella quarta proprietà. Avendo dimostrato le corrette conseguenze decidendo di usare l'interazione di contatto di Fermi, si opta ora per un calcolo esplicito del Knight shift, condotto sulla base di [45]; il potenziale adottato descrive come gli elettroni in orbitale s producano un campo \vec{H}_{ec} cui è soggetto il nucleo pari a:

$$\vec{H}_{ec} = -\frac{8\pi}{3}g\mu_B\vec{S}(\vec{R}_i) \quad (1.69)$$

ove \vec{R}_i è la coordinata nucleare. Essendo il Knight shift dato da $\frac{\Delta H}{H_0}$, è necessario per ottenere il numeratore fare una media termica della precedente formula, e dunque, ipotizzando che il campo agisca solo in direzione z , conviene utilizzare il formalismo della seconda quantizzazione ottenendo:

$$S_z(\vec{R}_i) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}_i} U_{\vec{k}}^*(\vec{R}_i) U_{\vec{k}'}(\vec{R}_i) (C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}'\uparrow} - C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow}) \quad (1.70)$$

ove gli stati elettronici su cui si è calcolato l'elemento di matrice non sono più le onde piane, ma hanno la forma prevista dal teorema di Bloch, supponendo gli elettroni in un potenziale efficace. Applicando dunque il valor medio ad ambo i membri della precedente equazione, per la (1.39) si ha:

$$\langle S_z(\vec{R}_i) \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} |U_{\vec{k}}(\vec{R}_i)|^2 [n(E_{\vec{k}\uparrow}) - n(E_{\vec{k}\downarrow})] \quad (1.71)$$

La precedente formula può essere semplificata notando che la variazione del numero di occupazione degli elettroni è sensibile solo in vicinanza della superficie di Fermi, in quanto è in quella regione che si trovano stati liberi per la transizione. Dunque si può porre $\vec{k} = \vec{k}_F$ nella funzione di Bloch; in realtà, potendo il suo valore variare sulla superficie di energia costante E_F , conviene rimpiazzare tale quantità con il suo valor medio calcolato su tale superficie, ottenendo in definitiva che:

$$\langle S_z(\vec{R}_i) \rangle = \frac{1}{2} \left\langle |U_{\vec{k}}(\vec{R}_i)|^2 \right\rangle_{E_F} \sum_{\vec{k}} [n(E_{\vec{k}\uparrow}) - n(E_{\vec{k}\downarrow})] \quad (1.72)$$

La sommatoria a fattore della (1.72) può essere espressa tramite la suscettività di spin con la (1.42) e la (1.44), trovando:

$$\langle H_{ez} \rangle = \frac{8\pi}{3} \left\langle \left| U_{\vec{k}}(\vec{R}_i) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \frac{g\mu_B}{2} \sum_{\vec{k}} \left[n(E_{\vec{k}\downarrow}) - n(E_{\vec{k}\uparrow}) \right] = \frac{8\pi}{3} \chi_S H_0 \left\langle \left| U_{\vec{k}}(\vec{R}_i) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \quad (1.73)$$

Da essa si può ottenere la formula per il Knight shift come:

$$K = \frac{\langle H_{ez} \rangle}{H_0} = \frac{8\pi}{3} \chi'_S V \left\langle \left| U_{\vec{k}}(\vec{R}_i) \right|^2 \right\rangle_{E_F} = \frac{8\pi}{3} \chi'_S \Omega \left\langle \left| \psi_{\vec{k}}(\vec{R}_i) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \quad (1.74)$$

ove nel secondo passaggio si è definita una suscettività χ'_S per unità di volume, mentre nel terzo si è usata la (1.41) per passare dalla funzione di Bloch normalizzata nel campione a quella $\psi_{\vec{k}}$ nel volume atomico. Nel seguito si porrà il nucleo all'origine del sistema di riferimento, avendo così $\vec{R}_i = \vec{0}$, e assegnerà alla suscettività il valore previsto dalla formula di Pauli, ricordando che esso coincide con il limite statico ($\omega = 0$) ed uniforme della sua trasformata di Fourier, per cui la precedente equazione diviene:

$$K = \frac{\Delta H}{H_0} = \frac{8\pi}{3} \left\langle \left| \psi_{\vec{k}}(\vec{0}) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \Omega \chi'_S(\vec{0}, 0) \quad (1.75)$$

ove l'apice indica la parte reale della suscettività (l'unica presente, come calcolato nel paragrafo precedente). Tale conclusione verifica le 4 proprietà osservate da Walter D. Knight enunciate ad inizio del presente paragrafo: esse seguono ricordando che la variazione misurata in frequenza $\Delta\omega$ è direttamente proporzionale a ΔH espresso dalla (1.75). In primo luogo $\Delta\omega > 0$ poiché la (1.75) contiene solo termini positivi (la media del modulo quadro lo è per monotonia, la suscettività elettronica di spin per il suo carattere paramagnetico come ha dimostrato la formula di Pauli nello scorso paragrafo); in secondo luogo lo shift frazionario è indipendente da H_0 poiché sia $\Delta\omega$ che ω_0 sono lineari in H_0 ; in terzo luogo esso è indipendente dalla temperatura poiché lo sono i termini che compaiono nella (1.75) (la quantità mediata è valutata nella costante E_F , mentre per la suscettività di spin si rimanda nuovamente alla formula di Pauli del paragrafo precedente); in ultimo luogo lo shift frazionario è crescente nella carica nucleare Z poiché lo è $\Delta\omega$. Per questa ultima caratteristica basta osservare che nella (1.75) la funzione di cui viene calcolato il valor medio è crescente in Z : per il teorema di Bloch, essa rappresenta la probabilità che un elettrone di momento \vec{k} soggetto ad un potenziale efficace si trovi ad $\vec{r} = \vec{0}$, ovvero sul nucleo nel nostro sistema di coordinate. Ma la forma dell'interazione coulombiana suggerisce che tale probabilità cresce con l'aumentare di Z . La verifica delle 4 proprietà assicura dunque la correttezza nelle ipotesi fatte per ottenere la (1.75); essa descrive il cambiamento del campo magnetico a cui è soggetto il nucleo a causa del solo termine di contatto (ultimo addendo) della (1.34). Gli effetti degli altri contributi saranno esaminati nel paragrafo successivo.

1.8 K_s da modelli: il caso di Mila-Rice-Shastry per i cuprati

Nel paragrafo 7 si è derivata una formula esplicita per la parte di spin del Knight shift K_s ipotizzando come accoppiamento tra isospin nucleare e spin elettronico l'interazione di contatto di Fermi. Il risultato trovato (che in seguito si denoterà con $K_{contact}$) dipende però da parametri che non sono facilmente accessibili in un esperimento; pertanto nel presente paragrafo si cercherà un modello meno dettagliato per l'interazione magnetica iperfina (che coinvolge lo spin elettronico), ottenendo formule meno complicate per materiali superconduttori come YBCO. Seguendo [10], si comincia osservando che $K_{contact}$ non è l'unico contributo a K_s ; difatti vi è un termine di polarizzazione di core K_{core} , che descrive la polarizzazione degli elettroni in orbitali s interni da parte di altri in orbitali più esterni e semipieni. L'effetto al solito è una magnetizzazione netta che cambia grazie alla (1.2) il valore del campo a cui è soggetto l'isospin \vec{I} . Un terzo termine è dato dalla parte dipolare della (1.34) (secondo e terzo addendo): scegliendo questa come interazione, ripercorrendo una strada simile a quella del paragrafo 7, si troverà il contributo K_{dip} . La parte spinoriale del Knight shift risulta dunque:

$$K_s = K_{dip} + K_{contact} + K_{core} \quad (1.76)$$

Estendere questo risultato a tutte le coppie nucleo-elettrone diventa improbo; si preferisce pertanto descrivere l'interazione iperfina della (1.34) tramite una matrice \hat{A}^{ij} a valori nello spazio spinoriale, dipendenti dai siti reticolari in cui sono localizzati l'isospin \vec{I}_i e lo spin \vec{S}_j :

$$\mathcal{H}_{spin} = \sum_{i,j} \vec{I}_i \cdot \hat{A}^{ij} \vec{S}_j \quad (1.77)$$

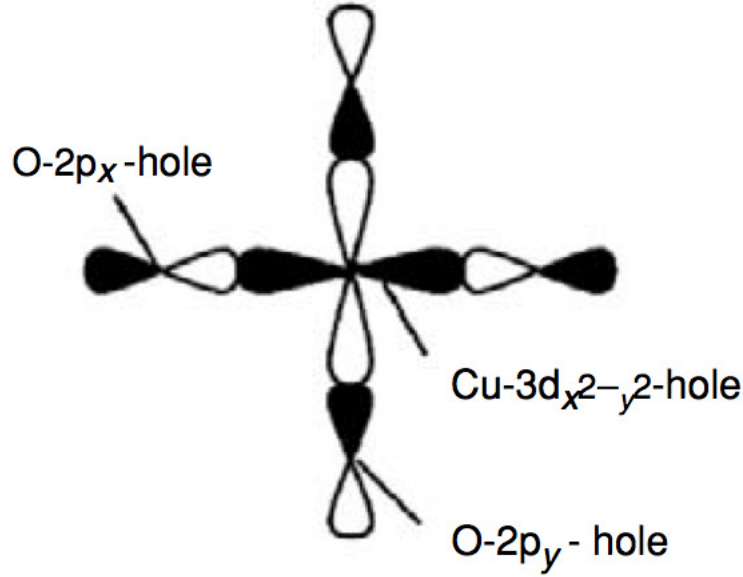


Figura 1.6: Rappresentazione schematica dello stato di singoletto di Zhang-Rice (adattata da [31]).

ove la somma in principio si estende a tutte le possibili coppie, anche se nella pratica è solitamente limitata ai primi vicini. Come discusso in [31], tale forma è comune all'accoppiamento iperfino utilizzato nel modello di molti cuprati; la loro caratteristica comune è il piano CuO_2 , che dal punto di vista cristallografico è costituito da 2 tipi di siti: gli ioni Cu^{2+} , che sono atomi di rame con configurazione $3d^9$, ovvero con una buca negli orbitali $x^2 - y^2$ (avendo identificato le direzioni x e y con gli assi a e b rispettivamente); gli ioni O^- nei quali la buca è contenuta negli orbitali $2p_x$ o $2p_y$, i quali interagendo con i precedenti danno vita ad uno stato ibrido, noto come singoletto di Zhang-Rice e rappresentato dalla sovrapposizione schematica in figura 1.6.

I piani CuO_2 sono ritenuti la sede del fenomeno superconduttivo e costituiscono una caratteristica essenziale nelle celle unitarie dei cuprati; di seguito si rappresenta in figura 1.7 quella della famiglia YBCO $123O_{6+y}$, una scrittura nella quale ogni numero è il coefficiente stechiometrico dell'opportuno elemento ($Y_1Ba_2Cu_3O_{6+y}$). A destra è riportato il caso $y = 0$ mentre a sinistra quello $y = 1$; si noti che negli schemi, i numeri dopo i simboli chimici servono solo per distinguere la stessa tipologia di atomo a seconda dell'asse cristallografico su cui si trova, e dunque in base al numero ed al tipo di primi vicini da cui è attorniato.

Come si evince dalla figura 1.7, risulta impossibile scrivere una hamiltoniana completa per un fissato nucleo a causa degli innumerevoli tipi di interazioni, anche limitandosi ai legami tra primi vicini. Una prima soluzione (che si rivelò tuttavia una modellizzazione troppo drastica), consiste nel riscrivere l'hamiltoniana (1.22) con i 2 addendi centrali sostituiti dalla forma (1.77), che vale per i nuclei di rame ed ossigeno, considerando solo i contributi on-site per i quali $i = j$. Essi descrivono come gli spin degli elettroni negli orbitali d per il rame e p per l'ossigeno interagiscono con i rispettivi nuclei. Tale modello grezzo fu migliorato con contributi differenti da Mila, Rice e Shastry, i quali riconobbero il forte carattere del rame nel creare interazioni con isospin anche diversi dal nucleo di Cu , che generano effetti apprezzabili non solo on-site, ma anche negli atomi di ossigeno primi vicini; ciò tuttavia elimina l'accoppiamento on-site tra isospin di O ed i suoi elettroni p , in quanto trascurabile rispetto a quello testé menzionato. Tale risultato non è ancora definitivo: come mostrato in [42] difatti, il modello di Mila-Rice-Shastry, implementa l'accoppiamento iperfino, considerando i 2 stati di ossidazione del rame presenti nella cella unitaria di YBCO ($Cu1$ e $Cu2$) nonché l'interazione tra l'isospin dell'ittrio e gli spin degli elettroni d nei siti di rame primi vicini. Da ciò si evince come la (1.77) fornisca un punto di partenza coerente per ricavare il Knight shift \hat{K}_S ricordando che, moltiplicato per il campo esterno \vec{H}_0 , fornisce la correzione all'energia potenziale magnetica; il suo contributo su tutti i siti reticolari fornisce una media della precedente formula ovvero:

$$-\gamma_n \hbar \sum_i \vec{I}^i \cdot \hat{K}_S^i \vec{H}_0 = \langle \mathcal{H}_{HF} \rangle = \sum_i \vec{I}^i \cdot \left(\sum_j \hat{A}^{ij} \langle \vec{S}^j \rangle \right) \quad (1.78)$$

Per ottenere la forma \hat{K}_S è dunque necessario legare la media termica degli spin (indicata tra parentesi angolari)

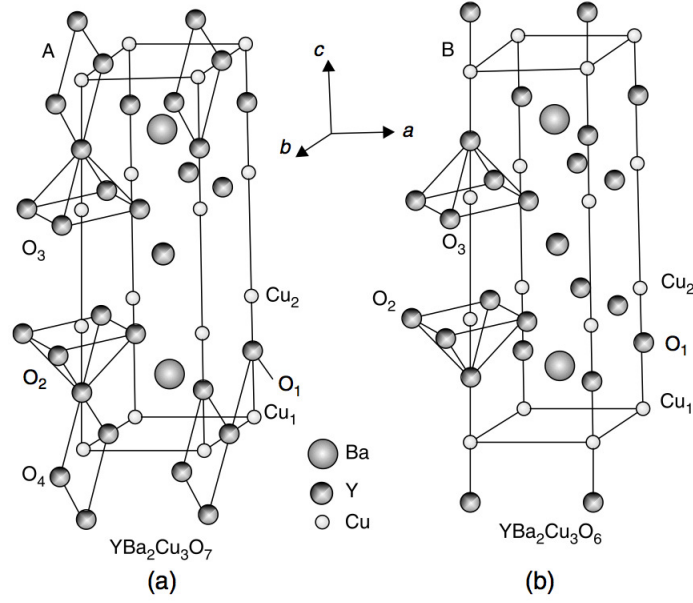


Figura 1.7: La struttura di YBCO: (a) ortorombica; (b) tetragonale (adattata da [30]).

alla magnetizzazione ed infine al campo esterno tramite la suscettività molare $\hat{\chi}_S$. Si ottiene:

$$\vec{M}^i = N_{AV} (-g_L \mu_B) \langle \vec{S}^i \rangle = -N_{AV} \gamma_e \hbar \langle \vec{S}^i \rangle, \vec{M}^i = \hat{\chi}_S^i \vec{H}_0 \Rightarrow \langle \vec{S}^i \rangle = -\frac{\vec{M}^i}{N_{AV} \gamma_e \hbar} = -\frac{\hat{\chi}_S^i \vec{H}_0}{N_{AV} \gamma_e \hbar} \quad (1.79)$$

ove si sono ricordate le formule per la magnetizzazione \vec{M} per mole (si sta lavorando in un volume unitario) ed N_{AV} denota il numero di Avogadro. Inserendo quest'ultima nel secondo membro della (1.78) otteniamo:

$$\langle \mathcal{H}_{HF} \rangle = -\frac{1}{N_{AV} \gamma_e \hbar} \sum_i \vec{I}^i \cdot \left(\sum_j \hat{A}^{ij} \hat{\chi}_S^j \vec{H}_0 \right) \quad (1.80)$$

In realtà quanto scritto è troppo specifico: parecchi modelli non fanno dipendere il tensore di accoppiamento magnetico dai siti reticolari, ed inoltre ne limitano l'interazione a contributi on-site e tra primi vicini. Supponendo che interessi un reticolo con coordinazione z (numero di primi vicini) sui quali è uguale la media termica degli spin, la precedente equazione diviene:

$$-\gamma_n \hbar \sum_i \vec{I}^i \cdot \hat{K}_S^i \vec{H}_0 = -\frac{1}{N_{AV} \gamma_e \hbar} \sum_i \vec{I}^i \cdot \left[(\hat{A}^{ii} + z \hat{B}^i) \hat{\chi}_S \vec{H}_0 \right] \quad (1.81)$$

Confrontando i 2 membri si deduce che l'espressione richiesta per \hat{K}_S risulta:

$$\hat{K}_S^i = \frac{(\hat{A}^{ii} + z \hat{B}^i) \hat{\chi}_S}{N_{AV} \gamma_n \gamma_e \hbar^2}, \hat{\alpha}^i = \frac{\hat{A}^{ii} + z \hat{B}^i}{N_{AV} g_L \mu_B \gamma_n \hbar} \Rightarrow \hat{K}_S^i = \hat{\alpha}^i \hat{\chi}_S \quad (1.82)$$

nel quale ad ultimo passaggio si è mostrata la dipendenza lineare tra Knight shift e suscettività magnetica di spin. Tale conclusione è importante poiché suggerisce un metodo di stima dei tensori di accoppiamento iperfine presenti nel modello scelto: il loro valore è noto dalla (1.82) una volta inseriti i valori appropriati delle costanti e della suscettività molare. Tale determinazione conclude il discorso iniziato nel capitolo 4 per le interazioni del nucleo con se stesso e con gli elettroni; tali modificazioni alla sua energia comportano però anche una variazione del numero di isospin che popolano i suoi livelli, il cui tempo di rilassamento (noto come Nuclear Spin-Lattice Relaxation Rate) verrà discusso nel prossimo paragrafo.

1.9 Rilassamento di un sistema nucleare a due livelli

In questo paragrafo, ispirato a [34], si discuterà il meccanismo di rilassamento spin-reticolo, il cui rate viene fornito da misurazioni condotte con la tecnica dell'NMR. Per illustrarlo si consideri lo splitting dei livelli energetici nucleari a seguito dell'interazione di Zeeman, rappresentato in figura 1.8 nel caso in cui il nucleo abbia isospin $I = \frac{1}{2}$.

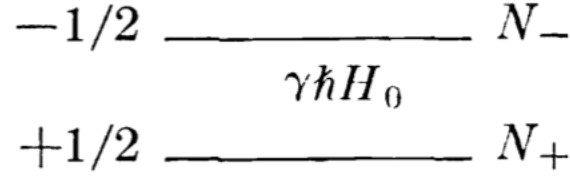


Figura 1.8: Livelli energetici per un nucleo con isospin $I = \frac{1}{2}$ (adattata da [34]).

In essa si sono individuati i 2 livelli di energia crescente, popolati rispettivamente da N_+ ed N_- nuclei, i quali distano per la formula (1.6) $\gamma\hbar H_0$. Come si è discusso nel paragrafo 2, qualora si applichi un campo magnetico alternato in direzione x , si può osservare la transizione tra i 2 livelli energetici: quella tra $m = +\frac{1}{2}$ ed $m = -\frac{1}{2}$, sarà descritta da una rate di probabilità $W_{+\rightarrow-}$; per il processo inverso la medesima quantità sarà invece $W_{-\rightarrow+}$. Con esse è dunque possibile scrivere la variazione di popolazione di un livello contando i termini di guadagno e di perdita relativi ad esso:

$$\frac{dN_+}{dt} = N_- W_{-\rightarrow+} - N_+ W_{+\rightarrow-}, \quad \frac{dN_-}{dt} = N_+ W_{+\rightarrow-} - N_- W_{-\rightarrow+} \quad (1.83)$$

Per determinare W si ricorre alla Fermi Golden Rule già discussa nel paragrafo 2: la rate della probabilità di transizione tra uno stato iniziale a ed uno finale b è proporzionale al modulo quadro dell'elemento di matrice del potenziale di interazione $V(t)$ calcolato a $t = 0$, con la condizione di conservazione dell'energia rappresentata dalla delta di Dirac. Specificando tale calcolo alla situazione in esame, detta ω la pulsazione del campo alternato, si ha:

$$W_{a\rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b|V(0)|a\rangle|^2 \delta(E_{in} + E_{int} - E_{fin}) \Rightarrow W_{+\rightarrow-} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | V(0) | \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \delta\left(E_{+\frac{1}{2}} + \hbar\omega - E_{-\frac{1}{2}}\right),$$

$$W_{-\rightarrow+} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} | V(0) | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \delta\left(E_{-\frac{1}{2}} - \hbar\omega - E_{+\frac{1}{2}}\right) \quad (1.84)$$

Le 2 rate calcolate, per hermiticità del potenziale e simmetria della delta, sono uguali, garantendo una legge di bilancia dettagliata; definendole entrambe W , la (1.83) diviene:

$$\frac{dN_+}{dt} = W(N_- - N_+), \quad \frac{dN_-}{dt} = W(N_+ - N_-) \quad (1.85)$$

Per comodità si definiscono ora il numero totale di nuclei N e lo sbilanciamento tra le popolazioni n come:

$$N = N_+ + N_-, \quad n = N_+ - N_- \Rightarrow N_+ = \frac{1}{2}(N + n), \quad N_- = \frac{1}{2}(N - n) \quad (1.86)$$

Con essa la precedente espressione diviene:

$$\frac{dN}{dt} = 0, \quad \frac{dn}{dt} = -2Wn \Rightarrow N(t) = const = N(0), \quad n(t) = n(0) e^{-2Wt} \quad (1.87)$$

ove si sono espresse entrambe le soluzioni in funzione dei dati iniziali a $t = 0$. Utilizzando la (1.86) per ritornare alle variabili iniziali, si trova che:

$$N_+(t) = \frac{1}{2} [N(0) + n(0) e^{-2Wt}], \quad N_-(t) = \frac{1}{2} [N(0) - n(0) e^{-2Wt}] \quad (1.88)$$

Da essa si vede come l'effetto del potenziale di interazione (espresso dal W) tenda a smussare lo sbilanciamento tra le popolazioni dei 2 livelli energetici, portandole per tempi infiniti al valore asintotico pari a metà dei nuclei totali a disposizione. Per calcolare poi l'energia assorbita dal sistema, bisogna considerare il contributo $\hbar\omega$ per tutti gli spin che nell'unità di tempo passano da $m = +\frac{1}{2}$ a $m = -\frac{1}{2}$, e $-\hbar\omega$ per il processo inverso. Nelle notazioni precedenti pertanto si trova:

$$\frac{dE}{dt} = N_+ W \hbar\omega - N_- W \hbar\omega = \hbar\omega W n = \hbar\omega W n(0) e^{-2Wt} \Rightarrow$$

$$E(t) = -\frac{1}{2} \hbar\omega n(0) e^{-2Wt} + const \Rightarrow E(t) = E(0) + \frac{\hbar\omega n(0)}{2} (1 - e^{-2Wt}) \quad (1.89)$$

ove $E(0)$ rappresenta la condizione iniziale. Dunque il cambiamento netto di energia, per tempi sufficientemente lunghi, è proporzionale allo sbilanciamento iniziale $n(0)$: dunque se il sistema è più popolato nel livello $m = +\frac{1}{2}$, è

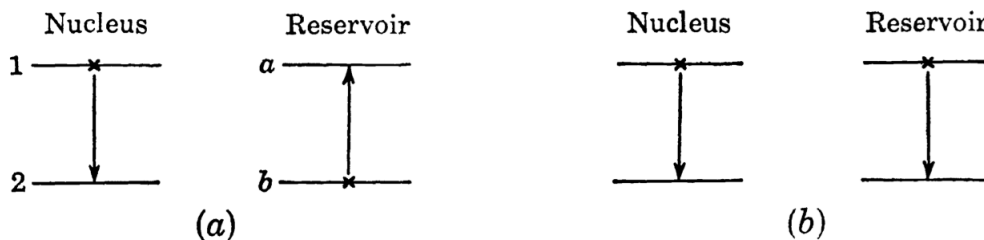


Figura 1.9: Transizione nel sistema nucleo-serbatoio: (a) caso permesso; (b) caso vietato (adattata da [34]).

necessario che l'energia fornita al sistema sia maggiore di quella da esso ceduta, affinché si pervenga ad una uguale popolazione nei livelli, in regime asintotico; caso opposto qualora vi sia più popolazione ad energia maggiore in $m = -\frac{1}{2}$, nel qual caso il sistema dovrà cedere una quantità netta di energia per pervenire alla situazione descritta. Tali considerazioni però falliscono nel caso in cui $W = 0$, ovvero in assenza di campo esterno alternato: come si nota dalla (1.85), entrambe le popolazioni restano congelate ai valori iniziali e pertanto è impossibile descrivere un processo come la magnetizzazione netta, in cui dei nuclei con componente z di isospin $m = -\frac{1}{2}$, si trasferiscono al livello inferiore di energia $m = +\frac{1}{2}$, segnando una variazione netta del momento magnetico totale. Affinchè tale processo sia osservabile in assenza di interazioni esterne, è dunque necessario ammettere la presenza di un serbatoio di energia che compensi le variazioni ad opera dei nuclei nei processi di transizione. Tale serbatoio a temperatura T giustifica l'utilizzo dell'ensemble canonico, nel quale in una situazione di equilibrio ai due livelli energetici di figura 1.8 è associata una probabilità proporzionale al peso di Boltzmann, minore per quello ad energia più elevata. Dunque i valori asintotici N_+^0 ed N_-^0 delle due popolazioni sono legati tramite:

$$\frac{N_-^0}{N_+^0} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} = e^{-\frac{\gamma_m \hbar H_0}{k_B T}} \quad (1.90)$$

Studiando la variazione delle popolazioni come in precedenza [equazione (1.83)], si definiscono ora la rate di probabilità W_\uparrow per il passaggio dal livello $m = +\frac{1}{2}$ ad $m = -\frac{1}{2}$, e W_\downarrow per il processo inverso. Utilizzando la medesima forma della (1.83) per descrivere i termini di guadagno e di perdita nelle popolazioni, si ha:

$$\frac{dN_+}{dt} = N_- W_\downarrow - N_+ W_\uparrow, \quad \frac{dN_-}{dt} = N_+ W_\uparrow - N_- W_\downarrow \quad (1.91)$$

Per risolverle si possono introdurre le medesime variabili della (1.86); tuttavia ora la situazione è più complicata in quanto non vi è una legge di bilancia dettagliata che garantisca l'uguaglianza delle 2 rate, e ciò è vitale se si vuole descrivere una preferenza nella transizione e dunque il processo di magnetizzazione. Pertanto si può cominciare studiando il caso stazionario, nel quale le precedenti equazioni danno il risultato:

$$\frac{N_-^0}{N_+^0} = \frac{W_\uparrow}{W_\downarrow} \Rightarrow \frac{W_\downarrow}{W_\uparrow} = e^{\frac{\gamma_m \hbar H_0}{k_B T}} \quad (1.92)$$

Come atteso dunque vi è una preferenza per W_\downarrow e ciò è in linea con quanto discusso prima sulla tendenza a raggiungere la minima energia originando una magnetizzazione netta. Ora la situazione è ben diversa dalla (1.84), in quanto oltre al sistema costituito dai nuclei vi è anche il serbatoio a compiere transizioni in modo tale da garantire la conservazione dell'energia come mostrato in figura 1.9.

In essa si è rappresentata una sola transizione (da 1 a 2) per il sistema nucleare, il cui salto in energia è pari a quello tra i livelli a e b del serbatoio: dunque il processo è ammissibile solo nel caso in cui il serbatoio transisca da b ad a (figura di sinistra) garantendo la conservazione dell'energia, mentre nel caso opposto non si osserva alcun passaggio, essendo violato tale principio (figura di destra). Pertanto le rate W_\uparrow e W_\downarrow devono tener conto della probabilità che il serbatoio si trovi in uno stato tale da permettere la transizione; nel modello rappresentato in figura esse sono calcolabili dal seguente ragionamento. Associando ad N un pedice per ogni livello di cui si vuol determinare la popolazione, la figura 1.9.a descrive un numero di transizioni per unità di tempo pari a:

$$N_1 N_b W_{1b \rightarrow 2a} \quad (1.93)$$

ove $W_{1b \rightarrow 2a}$ è la rate di probabilità che il sistema complessivo passi dallo stato $1b$ a quello $2a$. Considerando unitamente i nuclei ed il serbatoio in equilibrio termodinamico, si può applicare la legge della bilancia dettagliata che eguaglia il numero di transizioni per unità di tempo in una direzione e nell'altra, ovvero:

$$N_1 N_b W_{1b \rightarrow 2a} = N_2 N_a W_{2a \rightarrow 1b} \quad (1.94)$$

Tuttavia per i 2 rate W ivi contenuti valgono espressioni simili alla (1.84), segno che per una transizione fisica descritta da una matrice di interazione hermitiana essi sono uguali; inserendolo nella precedente formula si trova:

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{N_a}{N_b} \quad (1.95)$$

Ciò giustifica anche la conclusione (1.90), in quanto si associa alle popolazioni degli stati del reservoir una quantità proporzionale al peso canonico, ricordando che la differenza in energia tra essi è uguale a quella tra i livelli nucleari. Un'altra conclusione che si può trarre dalla precedente equazione è la forma di W_\uparrow e W_\downarrow , pari al numero di transizioni per unità di tempo rapportate alla popolazione dello stato nucleare iniziale:

$$W_\uparrow = N_a W_{2a \rightarrow 1b}, \quad W_\downarrow = N_b W_{1b \rightarrow 2a} = N_b W_{2a \rightarrow 1b} \quad (1.96)$$

Da ciò si vede che il loro rapporto, esprimibile con le considerazioni precedenti su N_a e N_b , uguaglia la seconda parte della (1.92). Queste conclusioni, anche se ricavate per un modello semplificato, mostrano la necessità di tenere distinti i rate a seconda del tipo di transizione; pertanto riprendendo la (1.91) si ottengono le seguenti equazioni nelle variabili definite in (1.86):

$$\frac{dn}{dt} = 2N_- W_\downarrow - 2N_+ W_\uparrow = N(W_\downarrow - W_\uparrow) - n(W_\downarrow + W_\uparrow), \quad \frac{dN}{dt} = 0 \Rightarrow N(t) = \text{const} = N(0) \quad (1.97)$$

Grazie alla costanza di N la prima equazione in (1.97) può essere riscritta come:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{n_0 - n}{T_1}, \quad n_0 = N \left(\frac{W_\downarrow - W_\uparrow}{W_\downarrow + W_\uparrow} \right), \quad \frac{1}{T_1} = W_\downarrow + W_\uparrow \quad (1.98)$$

ove i nuovi parametri hanno un chiaro significato fisico: n_0 è una quantità che rappresenta il numero di passaggi netti affinché il sistema raggiunga la minima energia, mentre T_1 è un tempo caratteristico di questo processo il cui inverso è determinato dalla regola di somma delle probabilità. Risolvendo la precedente equazione con il metodo della variazione delle costanti di Eulero, si ottiene:

$$n(t) = n_0 + A e^{-\frac{t}{T_1}} \quad (1.99)$$

ove A è una costante di integrazione. Lavorando in un metallo, è sensato che sia la struttura reticolare di bulk a rappresentare il serbatoio a temperatura costante; in questo caso T_1 prende il nome di tempo di rilassamento di spin-reticolo ed il suo inverso di NSLRR (Nuclear Spin-Lattice Relaxation Rate). Come anticipato, lo sbilanciamento n delle popolazioni dei livelli nucleari è direttamente proporzionale alla magnetizzazione netta; dunque la precedente equazione descrive l'evolversi di tale processo come:

$$n(t) = n_0 \left(1 - e^{-\frac{t}{T_1}} \right) \quad (1.100)$$

se si assume che a $t = 0$ il campione non sia magnetizzato. E' dunque il meccanismo di rilassamento spin-reticolo che garantisce la comparsa di una magnetizzazione non nulla e permette di risolvere il caso presentato all'inizio con campo esterno alternato, sommando i secondi membri delle (1.87) e (1.98) per dare l'effetto comune:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} = -2Wn + \frac{n_0 - n}{T_1} \Rightarrow n(t) = A(t) e^{-(2W + \frac{1}{T_1})t}, \quad A(t) = \int \frac{n_0}{T_1} e^{(2W + \frac{1}{T_1})t} dt = \\ \frac{n_0}{2WT_1 + 1} e^{(2W + \frac{1}{T_1})t} + C \Rightarrow n(t) = \frac{n_0}{2WT_1 + 1} + C e^{-(2W + \frac{1}{T_1})t} = \frac{n_0}{2WT_1 + 1} \left[1 - e^{-(2W + \frac{1}{T_1})t} \right] \end{aligned} \quad (1.101)$$

ove nell'ultimo passaggio si è sfruttata l'assunzione di non sbilanciamento a $t = 0$. Per tempi sufficientemente lunghi, la precedente formula assume il valore asintotico:

$$n_\infty = \frac{n_0}{2WT_1 + 1} \quad (1.102)$$

che si vede essere pari a quello del caso (1.100) qualora $T_1 \ll \frac{1}{2W}$, ovvero nel caso in cui il rilassamento avviene molto prima che il sistema possa accorgersi del campo alternato. Qualora ciò non fosse soddisfatto, la precedente formula darebbe uno sbilanciamento asintotico nullo, come accade in presenza di solo campo magnetico esterno, in quanto i tempi scala in questo secondo caso sono sistemati in modo tale da rendere ininfluenza il rilassamento spin-reticolo ($T_1 \rightarrow \infty$, $2WT_1 \gg 1$). Essendo l'energia conservata nel processo di rilassamento, per determinare

quella assorbita dal sistema nucleare si considera la sola interazione con il campo esterno, descritta dalla (1.89), nella quale si inserisce il risultato (1.101) ottenendo:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} = \hbar\omega W n = \frac{\hbar\omega W n_0}{2WT_1 + 1} \left[1 - e^{-(2W + \frac{1}{T_1})t} \right] \Rightarrow E(t) = \frac{\hbar\omega W n_0}{2WT_1 + 1} \left[t + \frac{T_1}{2WT_1 + 1} e^{-(2W + \frac{1}{T_1})t} \right] + C, \\ E(0) = E_0 \Rightarrow E(t) = E_0 + \frac{\hbar\omega W n_0}{2WT_1 + 1} \left\{ t + \frac{T_1}{2WT_1 + 1} \left[e^{-(2W + \frac{1}{T_1})t} - 1 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.103)$$

con E_0 la condizione iniziale. Lavorando nella condizione più fisica in cui a regime asintotico si possa mantenere uno sbilanciamento di popolazione, si trova:

$$E_\infty = E_0 + \frac{\hbar\omega W n_0}{2WT_1 + 1} \left(t - \frac{T_1}{2WT_1 + 1} \right) \approx \frac{\hbar\omega W n_0}{2WT_1 + 1} t, \quad E_\infty \xrightarrow{2WT_1 \ll 1} \hbar\omega W n_0 t \quad (1.104)$$

Esso mostra come l'assorbimento di energia cresca linearmente col tempo, secondo la scala dell'inverso di W , in quanto esso è legato all'elemento di matrice dell'interazione esterna. Tale comportamento è sensato in quanto il campo esterno guarda allo sbilanciamento asintotico della popolazione n_0 , fornendo per ciascun nucleo sbilanciato un quanto di energia $\hbar\omega$ per la transizione. Si noti tuttavia che l'obiettivo finale non è riequilibrare i 2 livelli energetici, altrimenti l'espressione corretta della variazione di energia sarebbe stato il limite asintotico della (1.89), il quale mostra come il campo fornisca o assorba un quanto di energia per metà dello sbilanciamento iniziale cosicché promuovendo o deprimendo in energia tale quantità di nuclei, si arriva all'equilibrio descritto nella prima parte. Di seguito si mostrerà il calcolo del tempo di rilassamento, condotto sulla base di [45]: come noto esso è dato dalla seconda parte della (1.98), perciò è necessario calcolare i rate di transizione W_\uparrow e W_\downarrow (si ricorda che i pedici si riferiscono al nucleo). Utilizzando la forma di Fermi del potenziale di contatto V_C , espandendo sia gli isospin che gli spin elettronici in funzione dei rispettivi operatori di innalzamento ed abbassamento, si ottiene:

$$\begin{aligned} V_C = \frac{8\pi}{3} g\mu_B \gamma_n \hbar \left[I_x S_x(\vec{R}_i) + I_y S_y(\vec{R}_i) + I_z S_z(\vec{R}_i) \right] = \frac{8\pi}{3} g\mu_B \gamma_n \hbar \left\{ \frac{(I^+ + I^-) \left[S^+(\vec{R}_i) + S^-(\vec{R}_i) \right]}{4} - \right. \\ \left. \frac{(I^+ - I^-) \left[S^+(\vec{R}_i) - S^-(\vec{R}_i) \right]}{4} + I_z S_z(\vec{R}_i) \right\} = \frac{8\pi}{3} g\mu_B \gamma_n \hbar \left[\frac{I^+ S^-(\vec{R}_i)}{2} + \frac{I^- S^+(\vec{R}_i)}{2} + I_z S_z(\vec{R}_i) \right] \end{aligned} \quad (1.105)$$

Per avere transizione, è necessario che sia il nucleo che l'elettrone cambino direzione di spin; dunque il termine $I_z S_z(\vec{R}_i)$ della precedente equazione non contribuisce essendo entrambe le matrici diagonali. Poiché l'espressione per T_1 prescrive di calcolare separatamente e poi sommare le W , si vede che per ciascuna contribuirà un solo addendo della precedente formula, a seconda del verso della transizione. Denotando gli stati iniziali con a e finali con b , la regola d'oro di Fermi prescrive che:

$$W_\uparrow = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{8\pi}{3} g\mu_B \gamma_n \hbar \right)^2 \left| \left\langle b \left| \frac{I^+ S^-(\vec{R}_i)}{2} \right| a \right\rangle \right|^2 \delta(E_{nuc}^{tr} - E_{el}^{tr}) \quad (1.106)$$

ove l'argomento della delta, dovendo rappresentare la conservazione dell'energia, è la differenza tra l'energia di transizione nucleare E_{nuc}^{tr} e quella elettronica E_{el}^{tr} . Ma il calcolo di W_\downarrow , rappresentando il processo con la freccia del tempo invertita è analogo: scambiando gli stati a e b nella precedente formula, ricordando la commutazione tra gli operatori nucleari ed elettronici e la presenza del modulo quadro, per la parità della delta nei suoi argomenti, si trova proprio tale quantità. Dunque, lavorando in presenza di un nucleo con isospin $I = \frac{1}{2}$, definendo a' e b' gli stati elettronici iniziali e finali, utilizzando le considerazioni precedenti si trova che:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi}{\hbar} \left(\frac{8\pi}{3} g\mu_B \gamma_n \hbar \right)^2 \frac{1}{4} \left| \left\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \left| I^+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \left| \left\langle b' \left| S^-(\vec{R}_i) \right| a' \right\rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega_n + E_{a'} - E_{b'}) \quad (1.107)$$

ove $\hbar\omega_n$ è l'energia acquisita dal nucleo dopo la transizione. Il calcolo dell'elemento di matrice può essere fatto esprimendo l'operatore in seconda quantizzazione tramite:

$$S^-(\vec{R}_i) = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_i} U_{\vec{k}}(\vec{R}_i) U_{\vec{k}'}^*(\vec{R}_i) C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} \quad (1.108)$$

Lavorando al primo ordine si può pensare che avvenga una sola transizione elettronica per compensare quella nucleare; ovvero si considera di volta in volta solamente la distruzione di un elettrone con vettore d'onda \vec{k} e spin \uparrow e la creazione di un altro nello stato \vec{k}' , \downarrow , riservandosi per l'espressione finale della rate di probabilità la somma sui vari \vec{k} , \vec{k}' . Così facendo è immediato risolvere l'elemento di matrice della formula precedente, ricordando le regole di anticommutazione ed il valor medio termico (1.39):

$$\begin{aligned} |a'\rangle &= |G\rangle, |b'\rangle = C_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} |G\rangle \Rightarrow \langle b'|S^-(\vec{R}_i)|a'\rangle_{\vec{k},\vec{k}'} = e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_i} U_{\vec{k}}(\vec{R}_i) U_{\vec{k}'}^*(\vec{R}_i) \cdot \\ \langle G|C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow} C_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} |G\rangle &= e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_i} U_{\vec{k}}(\vec{R}_i) U_{\vec{k}'}^*(\vec{R}_i) (\langle G|C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} |G\rangle - \\ \langle G|C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}'\downarrow} C_{\vec{k}\uparrow} |G\rangle) &= e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_i} U_{\vec{k}}(\vec{R}_i) U_{\vec{k}'}^*(\vec{R}_i) n_\uparrow(E_{\vec{k}}) [1 - n_\downarrow(E_{\vec{k}'})] \end{aligned} \quad (1.109)$$

Dalle considerazioni precedenti si può ottenere T_1 , scrivendo l'opportuna energia di transizione elettronica e trascurando nell'argomento della delta quella nucleare, rappresentando l'accoppiamento di Zeeman:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{\pi}{\hbar} \left(\frac{8\pi}{3} g\mu_B \gamma_n \hbar \right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left\{ |U_{\vec{k}}(\vec{R}_i)|^2 |U_{\vec{k}'}(\vec{R}_i)|^2 n_\uparrow^2(E_{\vec{k}'}) [1 - n_\downarrow(E_{\vec{k}'})]^2 \delta(E_{\vec{k}'\downarrow} - E_{\vec{k}\uparrow}) \right\} \quad (1.110)$$

Dalle proprietà dei numeri di occupazione fermionici, si ha che $n^2 = n$; accontentandosi di lavorare all'ordine più basso, si trascura inoltre nell'argomento della funzione di Fermi e della delta di Dirac, la correzione all'energia dovuta allo spin. Inserendo tali osservazioni nella formula precedente, si ottiene:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{64\pi^3}{9} (g\mu_B \gamma_n)^2 \hbar \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left\{ n(E_{\vec{k}}) [1 - n(E_{\vec{k}'})] \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}) |U_{\vec{k}}(\vec{R}_i)|^2 |U_{\vec{k}'}(\vec{R}_i)|^2 \right\} \quad (1.111)$$

Per procedere si notano i seguenti fatti: in primo luogo, come ragionato nel paragrafo 1.7, avvenendo le transizioni in prossimità della superficie di Fermi, è possibile sostituire ciascun modulo quadro della funzione di Bloch con il valor medio su tale superficie ad energia costante. In secondo luogo si può sostituire la sommatoria con un integrale in energia, moltiplicando il suo argomento per la densità degli stati $\frac{Vg}{2}$, ove il fattore $\frac{1}{2}$ ricorda che tale argomento è stato calcolato per una fissata direzione di spin. Da ciò si deduce:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{64\pi^3}{9} (g\mu_B \gamma_n)^2 \hbar \left\langle |U_{\vec{k}}(\vec{R}_i)|^2 \right\rangle_{E_F}^2 \int_0^\infty \int_0^\infty n(E) [1 - n(E')] \delta(E - E') \frac{V^2}{4} g(E) g(E') dE dE' \quad (1.112)$$

Sfruttando la delta per l'integrazione, dalle proprietà della distribuzione di Fermi si trova:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{16\pi^3}{9} (g\mu_B \gamma_n)^2 \hbar k_B T V^2 \left\langle |U_{\vec{k}}(\vec{R}_i)|^2 \right\rangle_{E_F}^2 \int_0^\infty \left[-\frac{dn(E)}{dE} \right] g^2(E) dE \quad (1.113)$$

Al solito, tale calcolo ammette una soluzione analitica nel caso di temperatura nulla, in quanto la derivata è l'opposto della delta calcolata in E_F . Ovvero:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{16\pi^3}{9} (g\mu_B \gamma_n)^2 \hbar \left\langle |U_{\vec{k}}(\vec{R}_i)|^2 \right\rangle_{E_F}^2 k_B T V^2 g^2(E_F) \quad (1.114)$$

Tale risultato può essere riscritto con le convenzioni di esprimere il prefattore in funzione del rapporto giromagnetico elettronico e di scrivere la densità degli stati $\rho(E)$ per una fissata direzione di spin, lavorando altresì nell'ipotesi di porre il nucleo al centro del sistema di riferimento:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{64}{9} \pi^3 \hbar^3 \gamma_n^2 \gamma_e^2 \left\langle |\psi_{\vec{k}}(\vec{0})|^2 \right\rangle_{E_F}^2 \Omega^2 k_B T \rho^2(E_F) \quad (1.115)$$

ove si è usata la (1.41) per passare alla normalizzazione sul volume atomico della funzione di Bloch. Come mostrato infine in [34], è possibile estendere tale derivazione anche al caso di nuclei con isospin diverso da $\frac{1}{2}$, ottenendo le medesime conclusioni. Conviene tuttavia generalizzare la (1.107), al caso in cui si considerino diversi livelli energetici per la transizione, non solo quello ottenuto dallo stato fondamentale distruggendo un elettrone di

vettore d'onda \vec{k} e spin \uparrow e creando una particella nello stato \vec{k}', \downarrow per ogni valore di \vec{k}, \vec{k}' . In questa nuova visuale si usa una somma delle probabilità a seconda dei diversi valori di energia degli stati iniziali E_i e finali E_f , sempre legati alla conservazione di energia nel processo dalla delta, ciascuna pesata da un fattore statistico P_i , ottenendo:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi}{\hbar} \left(\frac{8\pi}{3} g\mu_B\gamma_n\hbar \right)^2 \sum_{E_i, E_f} P_i \left| \left\langle E_i \left| \frac{S^+ \left(\vec{R}_i \right)}{2} \right| E_f \right\rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_n) \quad (1.116)$$

ove si è mantenuto l'ipotesi di isospin $I = \frac{1}{2}$. La precedente formula può essere riscritta manipolando il prefattore, il modulo quadro ed utilizzando la rappresentazione integrale della funzione delta come:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{32\pi^2}{9} g^2 \mu_B^2 \gamma_n^2 \sum_{E_i, E_f} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i\hbar}{\hbar}(E_i - E_f - \hbar\omega_n)t} P_i \left\langle E_i \left| S^+ \left(\vec{R}_i \right) \right| E_f \right\rangle \left\langle E_f \left| S^- \left(\vec{R}_i \right) \right| E_i \right\rangle \quad (1.117)$$

La precedente sommatoria, utilizzando la partizione dell'identità, assume la forma proporzionale ad una traccia di operatori dipendenti dal tempo, ovvero espressi in visuale di Heisenberg:

$$\sum_{E_i, E_f} e^{-i\omega_n t} P_i \left\langle E_i \left| e^{\frac{iE_i t}{\hbar}} S^+ \left(\vec{R}_i \right) e^{-\frac{iE_f t}{\hbar}} \right| E_f \right\rangle \left\langle E_f \left| S^- \left(\vec{R}_i \right) \right| E_i \right\rangle = \quad (1.118)$$

$$e^{-i\omega_n t} Tr \left[\hat{P} S^+ \left(\vec{R}_i, t \right) S^- \left(\vec{R}_i, 0 \right) \right], \quad S^+ \left(\vec{R}_i, t \right) = e^{\frac{i\mathcal{H}_e t}{\hbar}} S^+ \left(\vec{R}_i \right) e^{-\frac{i\mathcal{H}_e t}{\hbar}}$$

ove si sono posti \mathcal{H}_e come hamiltoniana elettronica e \hat{P} come matrice densità, i cui autovalori forniscono i pesi statistici P_i nominati in precedenza in interpretazione canonica. Dalle due precedenti si conclude che:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{32\pi^2}{9} g^2 \mu_B^2 \gamma_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n t} \left\langle S^+ \left(\vec{R}_i, t \right) S^- \left(\vec{R}_i, 0 \right) \right\rangle dt \quad (1.119)$$

ove si è ricordata la definizione di media di un operatore, data la matrice densità del sistema. Partendo da tale espressione è possibile dimostrare che il tempo di rilassamento dipende dalla parte immaginaria della suscettività, utilizzando come sua definizione quella che emerge dalla teoria di Kubo della risposta lineare. Dato un operatore A di perturbazione dell'hamiltoniana, la variazione nella risposta di un operatore B è descritta dalla suscettività χ_{BA} , la cui trasformata di Fourier temporale risulta:

$$\chi_{BA}(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \langle [B(\tau), A] \rangle e^{-i\omega\tau - \varepsilon\tau} d\tau \quad (1.120)$$

L'obiettivo è mettere in relazione essa con la trasformata di Fourier temporale della funzione di correlazione tra B ed A . Per ottenerlo conviene anzitutto calcolare:

$$\chi_{AB}(-\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \langle [A(\tau), B] \rangle e^{i\omega\tau - \varepsilon\tau} d\tau = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \langle [B, A(-\tau)] \rangle e^{-i\omega\tau + \varepsilon\tau} d\tau \quad (1.121)$$

ove nel secondo passaggio si è cambiato segno alla variabile di integrazione e sfruttata l'antisimmetria del commutatore. La forma risulta simile alla precedente solo lavorando in condizioni stazionarie, in cui il valor medio del prodotto di due operatori è invariante traslando di una uguale quantità l'argomento temporale di entrambi. Sotto tale ipotesi, le precedenti equazioni forniscono:

$$\langle A(-\tau) B \rangle = \langle AB(\tau) \rangle \Rightarrow \chi_{BA}(\omega) - \chi_{AB}(-\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle [B(\tau), A] \rangle e^{-i\omega\tau - \varepsilon|\tau|} d\tau \quad (1.122)$$

La precedente equazione risulta molto simile in forma alla trasformata $J_{BA}(\omega)$ della funzione di correlazione, tuttavia nella prima compare il commutatore che è assente nella seconda:

$$J_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle B(\tau) A \rangle e^{-i\omega\tau - \varepsilon|\tau|} d\tau \quad (1.123)$$

Per dimostrarne la relazione è dunque necessario calcolare esplicitamente i valori medi tramite le tracce: supponendo che gli autovalori dell'hamiltoniana del sistema siano E_i , trascurando il termine di convergenza nell'integrale,

si trova che:

$$\begin{aligned}
J_{BA}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{e^{-i\omega\tau}}{Z} \langle n | e^{-\frac{\mathcal{H}_e\tau}{\hbar}} e^{\frac{i\mathcal{H}_e\tau}{\hbar}} B e^{-\frac{i\mathcal{H}_e\tau}{\hbar}} A | n \rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{m,n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ \frac{e^{-i\omega\tau}}{Z} \right. \\
&\left. \langle n | e^{-\mathcal{H}_e\left(\frac{1}{k_B T} - \frac{i\tau}{\hbar}\right)} B | m \rangle \langle m | e^{-\frac{i\mathcal{H}_e\tau}{\hbar}} A | n \rangle \right\} = \frac{1}{2\pi} \sum_{m,n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ \frac{e^{-i\omega\tau}}{Z} e^{-\frac{E_n}{k_B T}} e^{\frac{i(E_n - E_m)\tau}{\hbar}} \right. \\
&\left. \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle \right\} = \frac{1}{2\pi} \sum_{m,n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{e^{-i\omega\tau}}{Z} e^{\frac{i(E_n - E_m)\tau}{\hbar}} e^{-\frac{E_n}{k_B T}} A_{mn} B_{nm}
\end{aligned} \tag{1.124}$$

ove nell'ultimo passaggio si sono definiti gli elementi di matrice A_{mn} e B_{nm} . Operando i medesimi calcoli per la seconda parte della (1.122), si trova che:

$$\begin{aligned}
\chi_{BA}(\omega) - \chi_{AB}(-\omega) &= \frac{2\pi i}{\hbar} J_{BA}(\omega) - \frac{i}{\hbar} \sum_{m,n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ \frac{e^{-i\omega\tau}}{Z} \langle m | e^{-\frac{\mathcal{H}_e\tau}{\hbar}} A | n \rangle \right. \\
&\left. \langle n | e^{\frac{i\mathcal{H}_e\tau}{\hbar}} B e^{-\frac{i\mathcal{H}_e\tau}{\hbar}} | m \rangle \right\} = \frac{2\pi i}{\hbar} J_{BA}(\omega) - \frac{i}{\hbar} \sum_{m,n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{e^{-i\omega\tau}}{Z} e^{-\frac{E_m}{k_B T}} A_{mn} e^{\frac{i(E_n - E_m)\tau}{\hbar}} B_{nm} \\
\Rightarrow \chi_{BA}(\omega) - \chi_{AB}(-\omega) &= \frac{2\pi i}{\hbar} J_{BA}(\omega) - \frac{2\pi i}{\hbar} J_{BA}(\omega) e^{-\frac{E_m - E_n}{k_B T}}
\end{aligned} \tag{1.125}$$

Tuttavia l'esponentiale a fattore della precedente equazione può essere riscritto notando che l'espressione (1.124) contiene il suo esponente come parte dell'argomento della funzione delta. Per le proprietà di essa pertanto, la precedente equazione fornisce:

$$e^{-\frac{E_n - E_m}{k_B T}} = e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \Rightarrow J_{BA}(\omega) = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\chi_{BA}(\omega) - \chi_{AB}(-\omega)}{1 - e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} \tag{1.126}$$

Tale risultato permetterà di dimostrare quanto voluto; si cominci notando anzitutto che gli autovettori degli stati in energia della (1.116) devono essere moltiplicati per la funzione di Bloch, la quale ne modula l'ampiezza descrivendo correttamente il sistema soggetto ad un potenziale efficace. Al solito la si valuterà in $\vec{k} = \vec{k}_F$ e per ottenere una buona approssimazione si inserirà in sua vece il valor medio calcolato sulla superficie di energia costante E_F . Tale correzione non modifica i calcoli precedenti che pertanto forniscono:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{32\pi^2}{9} g^2 \mu_B^2 \gamma_n^2 \left\langle \left| U_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F}^2 2\pi J_{S^+(t)S^-(0)}(\omega_n) \tag{1.127}$$

ove per l'ultimo termine si è utilizzata la definizione (1.123). Utilizzando la conclusione precedente, con l'esponentiale a denominatore espanso in serie al primo ordine come permesso dai valori delle grandezze lì presenti, si trova:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{32\pi^2}{9} g^2 \mu_B^2 \gamma_n^2 \left\langle \left| U_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F}^2 \frac{\hbar k_B T}{i \hbar \omega_n} [\chi_{S^-(0)S^+(t)}(-\omega_n) - \chi_{S^+(t)S^-(0)}(\omega_n)] \tag{1.128}$$

Le suscettività che appaiono in parentesi quadra sono legate a quella di spin solo tramite un riscaldamento, come è possibile osservare partendo dalle formule di Kubo (si veda ad esempio [16]):

$$\begin{aligned}
\chi_{\alpha\beta}^S(\omega) &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i\omega(t-t')} \langle [m_\alpha(t), m_\beta(t')] \rangle dt' = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \left\{ e^{i\omega(t-t')} \right. \\
&\left. \langle [m_\alpha(t-t'), m_\beta] \rangle \right\} dt' = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty e^{i\omega\tau} \langle [m_\alpha(\tau), m_\beta] \rangle d\tau = \chi_{\alpha\beta}(-\omega)
\end{aligned} \tag{1.129}$$

ove oltre alla condizione di stazionarietà ed al cambio di variabile, si è utilizzata la definizione (1.120). Esprimendo la magnetizzazione nella precedente equazione in funzione dello spin, si può sostituire la sua conclusione alla (1.128) che assume la forma:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{32\pi^2}{9} g^2 \mu_B^2 \gamma_n^2 \left\langle \left| U_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F}^2 \frac{k_B T}{i \omega_n} \left[\frac{\chi_{\mp}^S(\omega_n) - \chi_{\pm}^S(-\omega_n)}{(g\mu_B)^2} \right] = \frac{32\pi^2}{9} \gamma_n^2 \left\langle \left| U_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F}^2 \frac{k_B T}{\omega_n} [2\chi_{S^\pm}''(\omega_n)] \tag{1.130}$$

ove nell'ultimo passaggio i due apici indicano la parte immaginaria della suscettività. Per ricavarla si è in primo luogo trascurata la differenza tra gli operatori S^+ ed S^- (connessa con l'interazione di Zeeman) cosicchè i pedici

delle suscettività nella precedente equazione sono uguali ed in secondo luogo dalla definizione (1.120) emerge come per calcolare il complesso coniugato di $\chi_{BA}(\omega)$ basti cambiare segno alla frequenza nel caso i due operatori siano hermitiani. Espandendo nella precedente formula la dipendenza spaziale della suscettività in serie di Fourier si trova:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_1} &= \frac{32\pi^2}{9} \gamma_n^2 \left\langle \left| U_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \frac{2k_B T}{\omega_n} \left[\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \chi_{S\pm}''(\vec{q}, \omega_n) \right] = \\ & \frac{64\pi^2}{9} \gamma_n^2 \left\langle \left| U_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \frac{k_B T}{\omega_n} \frac{V}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \chi_{S\pm}''(\vec{q}, \omega_n) d^3 q \end{aligned} \quad (1.131)$$

ove si è usato il passaggio al continuo. Inserendo nella precedente equazione la suscettività per unità di volume, è possibile tramite la (1.41) cambiare normalizzazione passando dal campione al volume atomico, cosicché si ha:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_1} &= \frac{8}{9\pi} \gamma_n^2 V^2 \left\langle \left| U_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \frac{k_B T}{\omega_n} \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \chi_{\pm}''(\vec{q}, \omega_n) d^3 q = \\ & \frac{8}{9\pi} \left\langle \left| \psi_{\vec{k}} \left(\vec{R}_i \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \gamma_n^2 k_B T \Omega^2 \omega_n^{-1} \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \chi_{\pm}''(\vec{q}, \omega_n) d^3 q \end{aligned} \quad (1.132)$$

La precedente formula coincide con il risultato usato per l'analisi dei dati NMR tabulato in [43], a patto di porre il nucleo all'origine del sistema di riferimento, per cui inserendo $\vec{R}_i = \vec{0}$ ed ipotizzando per isotropia che la trasformata di Fourier dipenda solo dal modulo del vettore d'onda, si trova:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{32}{9} \left\langle \left| \psi_{\vec{k}} \left(\vec{0} \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \gamma_n^2 k_B T \Omega^2 \omega_n^{-1} \int q^2 \chi_{\pm}''(q, \omega_n) dq \quad (1.133)$$

Il risultato precedente, assieme alla (1.75), costituisce il punto di partenza per il confronto dei risultati sulla suscettività previsti dai modelli teorici con i dati sperimentali; essi però come noto sono legati dalla relazione di Korringa e dunque conviene vedere le sue implicazioni sulle parti reale ed immaginaria della suscettività. Partendo dalla (1.48) (per unità di volume, entrando tale quantità nel computo del Knight shift), esprimendo il prefattore in funzione del rapporto giromagnetico elettronico ed utilizzando $\rho(E)$ come densità degli stati per una assegnata direzione di spin, si trova:

$$\frac{g(E_F)}{2} = \rho_0(E_F) \Rightarrow \chi_0'(\vec{0}, 0) = \frac{(\gamma_e \hbar)^2}{2} \rho_0(E_F) \quad (1.134)$$

ove il pedice 0 ad ambo i membri ricorda che la formula di Pauli (coincidente come visto con il valore statico ed uniforme della trasformata di Fourier della suscettività di spin) tratta un sistema elettronico non interagente. Sostituendo la precedente equazione nella (1.75) si può ottenere la relazione descritta tra Knight shift e tempo di rilassamento; essa si basa sul calcolo del prodotto di Korringa, funzione delle due quantità menzionate, ed è di seguito presentata nella forma valida per il caso libero:

$$T_1 \left(\frac{\Delta H}{H_0} \right)^2 = \frac{\hbar}{4\pi k_B T} \frac{\gamma_e^2}{\gamma_n^2} \quad (1.135)$$

Quanto ottenuto può essere utilizzato per dimostrare, come anticipato, il legame tra la parte reale uniforme e costante della suscettività e l'integrale spaziale della sua parte immaginaria. Sostituendo nella precedente formula la (1.133) per il rate di rilassamento, si trova:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_1} &= \frac{4\pi k_B}{\hbar} \left(\frac{\gamma_n}{\gamma_e} \right)^2 K^2 T \Rightarrow \frac{32}{9} \left\langle \left| \psi_{\vec{k}} \left(\vec{0} \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \gamma_n^2 k_B T \Omega^2 \omega_n^{-1} \int q^2 \chi_{0\pm}''(q, \omega_n) dq = \frac{4\pi k_B T}{\hbar} \left(\frac{\gamma_n}{\gamma_e} \right)^2. \\ & \frac{64\pi^2}{9} \left\langle \left| \psi_{\vec{k}} \left(\vec{0} \right) \right|^2 \right\rangle_{E_F} \Omega^2 \left[\chi_0'(\vec{0}, 0) \right]^2 \Rightarrow \omega_n^{-1} \int q^2 \chi_{0\pm}''(q, \omega_n) dq = \frac{8\pi^3}{\gamma_e^2 \hbar} \left[\chi_0'(\vec{0}, 0) \right]^2 \end{aligned} \quad (1.136)$$

La (1.136) fornisce così una formula utile per l'integrale spaziale considerato nel caso di sistema non interagente in 3d, esprimendo il valore di Pauli della suscettività magnetica in funzione della densità degli stati tramite la (1.134):

$$\omega_n^{-1} \int q^2 \chi_{0\pm}''(q, \omega_n) dq = 2\pi^3 \hbar^3 \gamma_e^2 \rho_0^2(E_F) \quad (1.137)$$

Nel caso generale, l'integrale spaziale della parte immaginaria della suscettività magnetica, fornisce un valore finito qualora il suo argomento sia piccato in una stretta regione dello spazio reciproco. Interessante è dunque capire quali vettori d'onda vengono filtrati dalla formula del tempo di rilassamento; tale risposta dipende dal tipo di atomo sul quale viene compiuta la misura e verrà presentata in dettaglio nel paragrafo successivo.

1.10 Conclusioni

Come noto, il Knight shift risulta proporzionale alla parte reale della suscettività, mentre il rate di rilassamento coinvolge l'integrale della sua parte immaginaria. Nel presente paragrafo, condotto sulla linea di [5], si studieranno in dettaglio tali dipendenze mostrando le peculiarità che sorgono a seconda dell'atomo su cui si conducono le misure e del vettore d'onda su cui si valuta la trasformata di Fourier. Un primo fatto sperimentale riguarda lo shift magnetico iperfino (MHS), pari alla parte di spin del Knight shift a cui viene sottratto il valore a temperatura nulla. Come intuibile esso è proporzionale alla suscettività elettronica di spin tramite il tensore di accoppiamento iperfino A (come si era dimostrato analizzando il modello di Mila-Rice-Shastry); tuttavia le misurazioni mostrano che la χ^{spin} che rientra nella proporzionalità è quella del rame cosicché vale:

$${}^{\alpha}K_{spin} = \chi_{Cu}^{spin} \sum_{\delta=NN, (0)} \frac{{}^{\alpha}A_{\delta}}{2\mu_B} \quad (1.138)$$

ove gli apici α denotano il tipo di nucleo cui si riferisce la misura ed il pedice δ corre tra i primi vicini (NN) dell'atomo, aggiungendo il valore on site [(0)] solo nel caso del rame. Tale predizione sperimentale trova concretezza in campo modellistico nella scelta di abbandonare l'hamiltoniana di Mila-Rice-Shastry in favore di quella del modello $t - J$ che dei concetti presentati descrivendo il primo formalismo tiene solamente i siti del rame ed i singoletti di Zhang-Rice. Tale scelta è giustificata in quanto come mostrato prima per l'MHS, ad assumere un ruolo dominante è la suscettività di spin del rame, mentre si possono trascurare i gradi di libertà (e le relative funzioni di risposta) dei restanti siti, anche se importanti per innescare il fenomeno superconduttivo come l'ossigeno. Altre importanti verifiche sperimentali riguardano il NSLRR; nel modello di Mila-Rice-Shastry esso assume una forma molto simile (a meno di costanti e della presenza del tensore iperfine) a quella ricavata nel paragrafo precedente. Il risultato corretto dovuto a Moriya, presentato per la prima volta nel suo articolo [26], è mostrato di seguito:

$$({}^{\alpha}T_1T)^{-1} = \frac{k_B\gamma_{\alpha}^2}{2\mu_B^2} \sum_{\vec{q}} |{}^{\alpha}A(\vec{q})|^2 \frac{\chi''(\vec{q}, \omega_n)}{\omega_n} \quad (1.139)$$

ove all'interno del modulo quadro vi è la trasformata di Fourier del tensore di accoppiamento, mentre la parte immaginaria riguarda la suscettività di spin del rame, come accadeva anche in precedenza. A seconda del nucleo su cui viene effettuata la misura si avranno comportamenti diversi in quanto varia il tensore di accoppiamento, di cui per ciascuno interessa il valore quando ha come primi vicini i siti di rame (essendo di tale elemento la suscettività che il fattore di forma modula nella sommatoria). Calcoli dettagliati mostrano che per $Cu(2)$ la trasformata di Fourier dell'accoppiamento è piccata sia per $\vec{q} = \vec{0}$ che per $\vec{q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, detto vettore d'onda antiferromagnetico \vec{Q}_{AF} (per le notazioni sugli assi reticolari si vedano i paragrafi precedenti); tale andamento non vale però né per $O(2, 3)$ né per Y , poiché per entrambi la funzione è massima in $\vec{q} = \vec{0}$, mentre si annulla in $\vec{q} = \vec{Q}_{AF}$. Pertanto anche se l'NSLRR riflette le fluttuazioni di spin dei siti del rame, a seconda del nucleo di cui si adotta il punto di vista per compiere la misura, si ottengono risultati diversi: solo nel caso di $Cu(2)$ sono osservabili le cosiddette fluttuazioni antiferromagnetiche, mentre per i siti di $O(2, 3)$ e di Y esse scompaiono per azione del filtro operato dal fattore di forma ad essi relativo. Volendo viceversa determinare la parte immaginaria della trasformata di Fourier della suscettività, è possibile sfruttare i ragionamenti precedenti per scegliere da quali dati del tempo di rilassamento partire: se si sta studiando il suo incremento per le fluttuazioni antiferromagnetiche, conviene partire dal $(T_1T)^{-1}$ del rame, che lo localizza intorno a $\vec{q} = \vec{Q}_{AF}$; qualora si sia invece interessati al suo valore uniforme, bisogna scegliere $(T_1T)^{-1}$ dell'ossigeno o dell'ittrio, poiché il tensore iperfine di tali elementi filtra solo gli andamenti che corrispondono a $\vec{q} = \vec{0}$. Tuttavia la deduzione dalla formula di Moriya sul NSLRR non è l'unica tecnica utilizzata per la determinazione della parte immaginaria della suscettività magnetica in trasformata di Fourier: esiste anche la possibilità di dedurla dallo scattering inelastico di neutroni (INS) che però fornisce una visione diversa rispetto alla precedente. Mentre la (1.139) dà in principio una misura integrata su tutte le \vec{q} (anche se in pratica l'accoppiamento iperfine ne filtra determinati valori), dall'INS si può dedurre solo la variazione rispetto ad un valore di riferimento quando \vec{q} è in una regione intorno al vettore d'onda antiferromagnetico. Dunque, supponendo come in precedenza che siano le fluttuazioni antiferromagnetiche ad aumentare la parte immaginaria della suscettività, la misura ottenuta con la tecnica dell'INS per $\vec{q} = \vec{Q}_{AF}$, è senz'altro compatibile con quella dedotta dal rate di rilassamento del rame, discussa in precedenza. La presentazione di queste due tecniche di indagine mostra chiaramente come poter ricavare la dipendenza dai \vec{q} di interesse fisico della parte immaginaria della suscettività; a gettare luce su quella reale è invece quanto presentato ad inizio paragrafo unitamente ad un risultato di teoria della risposta. Difatti essendo la parte reale della suscettività di spin nel caso $\vec{q} = \vec{0}$ pari alla formula di Pauli, essa risulta proporzionale all'MHS tramite la (1.138), dunque è deducibile dai dati

sperimentali. Quando $\vec{q} = \vec{Q}_{AF}$ invece, è necessario introdurre il teorema di Kramers-Kronig che lega parte reale ed immaginaria della trasformata di Fourier della suscettività come:

$$\chi'(\vec{Q}_{AF}, \omega = 0) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi''(\vec{Q}_{AF}, \omega')}{\omega'} d\omega' \quad (1.140)$$

ove si è ipotizzata una parità in frequenza della funzione integranda, e si è deciso di valutare ambo i membri nel vettore d'onda antiferromagnetico. Si noti che la precedente equazione dà il valore statico della parte reale (in analogia col caso uniforme $\vec{q} = \vec{0}$), altrimenti la frequenza a cui la si valuta andrebbe sottratta al denominatore della funzione integranda, risultandone un polo. Quanto ottenuto, valido in realtà per ogni funzione di risposta, mostra che la parte reale è una somma continua in frequenza della parte immaginaria: pertanto, qualora si vogliono evitare problemi di convergenza, è sensato attendersi contributo solo dalla regione centrale di integrazione, con poche correzioni agli estremi. Se dunque capitasse una redistribuzione di energia (ovvero di frequenza) dai suoi valori bassi in favore di quelli alti, per il ragionamento precedente non si dovrebbe osservare un sensibile cambiamento nel risultato d'integrazione, che è la parte reale della suscettività. Quanto descritto, in realtà si osserva dalle dipendenze in temperatura della trasformata di Fourier della suscettività: mentre la sua parte immaginaria viene largamente soppressa intorno alla temperatura critica, quella reale mantiene il suo valore quasi costante, dimostrando a volte una crescita per $T < T_c$. Tale fenomeno imputabile al meccanismo presentato sopra, si materializza fisicamente nell'apertura di un intervallo di energia (noto come pseudogap) a causa del minor peso delle regioni a bassa energia, conseguente allo spopolamento in favore di quelle ad alta energia. Tale previsione, puntualmente riscontrata nei dati a disposizione, conclude la relazione discussa in questo paragrafo tra quantità da misurare e componenti complesse della trasformata di Fourier della suscettività magnetica, sia a $\vec{q} = \vec{0}$ che a $\vec{q} = \vec{Q}_{AF}$. Tale sguardo alle misurazioni di laboratorio compendia la presentazione teorica dello studio delle principali tecniche di indagine dei superconduttori ad alta temperatura critica, come i cuprati. Nel prossimo capitolo si passerà all'introduzione ed alla descrizione del modello $t - J$, già citato in precedenza, che fornirà l'impalcatura concettuale per lo sviluppo dei calcoli sulla suscettività magnetica con la teoria di gauge, che è l'obiettivo finale del presente lavoro.

Capitolo 2

Origine ed implementazione del modello $t - J$

2.1 Introduzione

Obiettivo del presente capitolo è una descrizione del modello $t - J$, che in un'opportuna presentazione riesce a catturare gli aspetti salienti dei cuprati superconduttori ad alta temperatura. Nel seguito sarà privilegiato un approccio qualitativo, che non si sofferma dettagliatamente sugli aspetti tecnici della trattazione, bensì fornisce un'idea di base ed il filo conduttore di tutto il ragionamento. Tale scelta tuttavia non si applica agli argomenti più rilevanti per il prosieguo del lavoro, dei quali verranno forniti anche i dettagli tecnici. Si comincerà dunque con una introduzione al modello, il cui scopo principale è mostrare la sua plausibilità nella descrizione dei cuprati; più a fondo andrà invece il terzo paragrafo, che oltre a rintracciare l'origine del modello $t - J$ nel formalismo della seconda quantizzazione per la teoria dei sistemi a molti corpi, giustifica alcune sue peculiarità, come la condizione di non doppia occupazione ed il termine di Heisenberg per l'ordinamento antiferromagnetico. Dal quarto all'ottavo paragrafo ci si occuperà invece di costruire un'azione partendo dal modello $t - J$, con la quale ricavare quantità di interesse utilizzando le regole del path integral: si presenterà dunque la bosonizzazione alla Chern-Simons, che permette di sostituire opportunamente le variabili di Grassmann, il gauge fixing per i due gruppi $U(1)$ ed $SU(2)$ introdotti con il precedente metodo, l'equivalente dell'espansione dell'azione attorno al suo punto di sella applicato al caso in esame, ed infine un'espansione su reticolo che permette di ottenere l'azione efficace richiesta. Da questa è possibile calcolare i propagatori per le nuove variabili introdotte, in quanto rientrano nel calcolo della suscettività magnetica, una volta espresso lo spin coerentemente con il formalismo adottato. Dunque nel paragrafo nove si presenterà la relazione tra la suscettività e tali propagatori, nota come formula di Kubo. Al calcolo del propagatore magnonico sarà invece dedicato il decimo paragrafo, nel quale si evidenzierà il contributo del campo di gauge per l'espressione di tale quantità. Combinando i due risultati precedenti sul propagatore e la formula di Kubo, si perverrà nel paragrafo undici ad un'espressione per la suscettività di spin, che viene differenziata a seconda delle caratteristiche del campo magnetico esterno (sua energia rispetto a quella termica) e della fase del superconduttore (dipendente dai valori di temperatura e di drogaggio). Per testare tali conclusioni si presenta nell'ultimo paragrafo, uno sguardo ai dati sperimentali che permette di ottenere una legge per il tempo di rilassamento misurato sui siti di rame sfruttando quanto desunto in precedenza.

Avvertenza: Nel presente capitolo si adotterà la convenzione delle unità naturali $\hbar = 1$ in tutti i calcoli presentati, riguardanti sia la semplificazione e l'utilizzo del modello $t - J$, che la derivazione dei risultati ausiliari sulla suscettività magnetica, come la formula di Kubo.

2.2 Plausibilità fenomenologica del modello $t - J$

In questo paragrafo, ispirato a [25], si presenteranno le caratteristiche fisiche dei cuprati superconduttori ad alta temperatura e si assoceranno ad esse le varie parti costituenti il modello $t - J$. Per descrivere tali sistemi è necessario partire da cristalli noti come parent compound, che costituiscono la struttura di base per i cuprati, alla quale può essere applicato un processo di doping tramite la sostituzione di opportuni atomi nell'edificio cristallino.

Si analizzi il caso concreto di LSCO: esso è originato a partire da un cristallo di La_2CuO_4 , del quale è mostrata la struttura in figura 2.1.a. In essa si può notare la presenza dei piani CuO_2 la cui dinamica è catturata dal modello $t - J$; la regione che li separa funge da serbatoio di cariche, in favore dei piani, i cui effetti possono essere amplificati sostituendo gli atomi in tale regione con dei loro equivalenti a valenza maggiore, attuando il

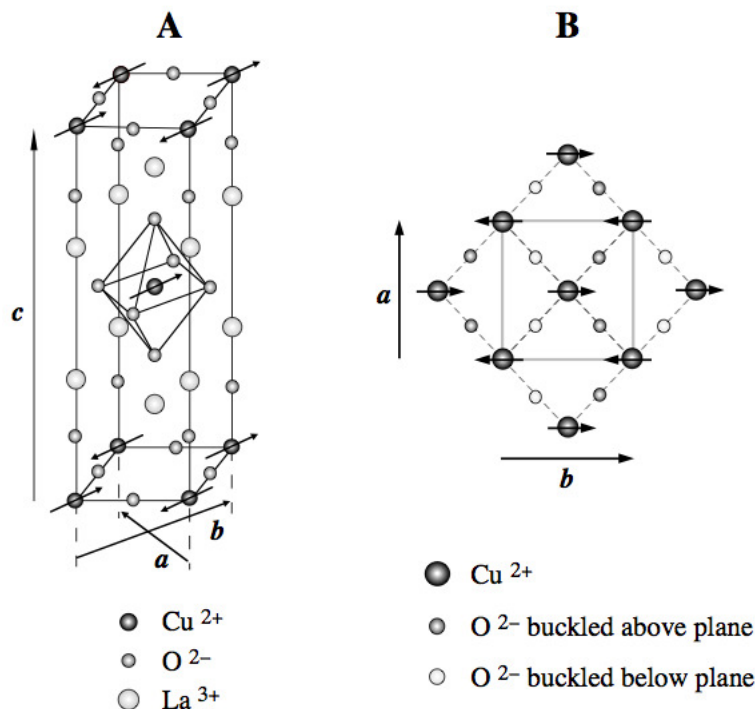


Figura 2.1: Cella unitaria ed assi cristallografici (a) di La_2CuO_4 e (b) del piano CuO_2 (adattata da [15]).

cosiddetto processo di doping. Nel caso in esame di LSCO, la cui formula chimica risulta $La_{2-\delta}Sr_{\delta}CuO_4$ (ove δ rappresenta la concentrazione delle lacune di carica) si è operato nel parent compound la sostituzione di atomi di La con quelli di Sr . Tale esempio era utile in quanto LSCO appartiene alla classe di superconduttori con piani di CuO_2 a singolo strato; non è così ad esempio per materiali come YBCO. Tuttavia risulta fondamentale per le caratteristiche di entrambi la presenza di tali lamine, che sono ingrandite in figura 2.1.b. In essa si nota come il reticolo sia una sovrapposizione di due reticoli quadrati, uno per Cu e l'altro per O , con centro in comune ma ruotati di 45° l'uno rispetto all'altro e come sugli atomi di rame sia stato evidenziato lo spin che resta uguale procedendo in diagonale, generando il cosiddetto ordinamento antiferromagnetico di Néel. Ci si concentri ora sui singoli siti reticolari: il rame è in stato Cu^{2+} , ovvero ammette una lacuna nell'orbitale $3d_{x^2-y^2}$, mentre l'ossigeno ha completato l'ottetto essendo in stato O^{2-} . Sarebbe dunque sensato attendersi un comportamento metallico, potendo ciascun sito di rame promuovere una lacuna in banda di conduzione; in realtà le osservazioni sperimentali garantiscono un carattere isolante per tali sistemi. Tale ribaltamento è essenzialmente dovuto alla forte repulsione coulombiana tra le lacune dei siti di rame, che dunque, non manifestano alcuna mobilità conduttiva giustificando così il comportamento isolante precedentemente descritto. Da quanto presentato si possono dunque evincere le due principali caratteristiche per i piani di CuO_2 in assenza di doping: in primo luogo essi presentano uno stato fondamentale isolante ed in secondo luogo assumono un ordinamento antiferromagnetico a lungo range descritto da due sottoreticoli di Néel. Tali caratteristiche devono essere ben riproducibili da un modello che descriva fedelmente i superconduttori: storicamente una prima scelta è ricaduta sul modello di Mott-Hubbard per gli isolanti, anche se sorsero delle complicazioni tecniche nella descrizione con l'introduzione del doping. L'idea in origine era di lavorare con un modello a tre bande, che descrivessero rispettivamente gli orbitali d del rame, p dell'ossigeno e la repulsione coulombiana tra le lacune localizzate nei primi; tale scelta si rivelava però inadeguata quando si introduceva del drogaggio, in quanto tutto il sistema poteva essere descritto in termini di una sola banda, riferita al singoletto di Zhang-Rice (vedi paragrafo 1.8). Qualora la lacuna drogante si inserisse negli orbitali del rame, tale scelta è comprensibile, in quanto le interazioni con gli orbitali chiusi dell'ossigeno possono essere descritte da un potenziale efficace (che produca cioè un orbitale ibrido sui siti del rame), mentre la repulsione coulombiana viene inserita come condizione al contorno per la singola occupazione di ogni sito reticolare. Estendere tale ragionamento nel caso in cui la lacuna del doping occupi un sito di ossigeno è più difficile, in quanto si deve studiare un sistema con orbitali $3d^9$ circondato da 4 orbitali $2p^5$, come mostrato in figura 2.2.

Il risultato tuttavia è per molti aspetti analogo al precedente, come mostrato da Zhang e Rice, e dunque è conveniente adottare tale descrizione per il resto della trattazione. Ciò che si deve presentare dunque è un modello con orbitali ibridi tra siti reticolari primi vicini, tra cui la lacuna può spostarsi senza subire repulsioni coulombiane purché ciascuno di essi risulti singolarmente occupato. Come si mostrerà tale effetto viene catturato dal cosiddetto

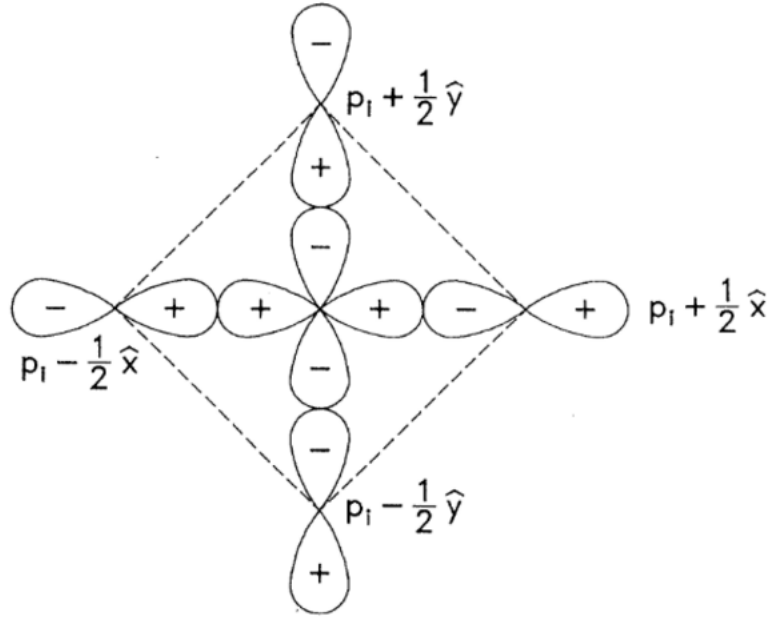


Figura 2.2: Singoletto di Zhang-Rice tra gli orbitali $3d^9$ del rame e $2p^5$ dell'ossigeno (adattata da [14]).

aggiungendo cinetico (o termine di hopping) dell'hamiltoniana di Hubbard, a patto di usare un opportuno proiettore (di Gutzwiller) per il constraint introdotto. La seconda caratteristica delle lamine di CuO_2 riguardante l'ordinamento antiferromagnetico risulta saliente anche in caso di doping, in quanto la lacuna drogante può passare da 2 quartetti di rame-ossigeno adiacenti, solo se consentito dalla direzione dello spin delle lacune già presenti. Tale condizione può essere descritta opportunamente introducendo in seconda quantizzazione, come si farà nel prossimo paragrafo, l'hamiltoniana di Heisenberg antiferromagnetica, ottenendo dunque il termine di potenziale del modello $t - J$. Mettendo insieme le conclusioni raggiunte si arriva all'hamiltoniana utilizzata ampiamente come paradigma per lo studio dei superconduttori ad alta temperatura:

$$\hat{H}_{t-J} = \hat{H}_t + \hat{H}_J = -t \sum_{\langle ij \rangle} P_G (c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha}) P_G + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right), \quad P_G = \prod_i (1 - \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (2.1)$$

ove P_G è il proiettore di Gutzwiller, $c_{i\alpha}^\dagger$ e $c_{i\alpha}$ sono rispettivamente l'operatore di creazione e di distruzione per un fermione nel sito i con spin α , e si è sottintesa nel primo addendo una somma su tale indice. Gli operatori di spin e numero presenti nel secondo sono da intendersi espressi in seconda quantizzazione, cosicché denotando con $\vec{\sigma}$ le matrici di Pauli risulta:

$$\vec{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}, \quad \hat{n}_i = \sum_{\alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} \quad (2.2)$$

Il pregio di tale descrizione risiede nella concisa completezza fornita dalle formule precedenti: nei termini cinetico e potenziale del modello $t - J$ sono difatti contenute tutte le informazioni necessarie riguardanti la repulsione coulombiana tra le lacune, l'ibridizzazione negli orbitali descritti dallo stato di singoletto di Zhang-Rice, ed il sottostante ordinamento antiferromagnetico con la struttura di Néel. La generalità del risultato ottenuto è però più ampia, in quanto come si mostrerà nel prossimo paragrafo, l'hamiltoniana di Hubbard è la forma in seconda quantizzazione per un termine cinetico non diagonale nei siti reticolari ed un potenziale diretto che agisca on site, mentre da essa è possibile ottenere quella del modello $t - J$ tramite una trasformazione canonica, proiettando il risultato al secondo ordine sugli stati singolarmente occupati.

2.3 Modelli di Hubbard e $t - J$ dalla seconda quantizzazione

In questo paragrafo, condotto sulla base di [3], si otterranno sotto opportune ipotesi i modelli di Hubbard e $t - J$ adottando il formalismo della seconda quantizzazione. Si cominci pertanto considerando il contributo cinetico \hat{T}_0 , che contiene oltre agli operatori di creazione $a_{i\sigma}^\dagger$ e di distruzione $a_{i\sigma}$, gli elementi di matrice della parte cinetica

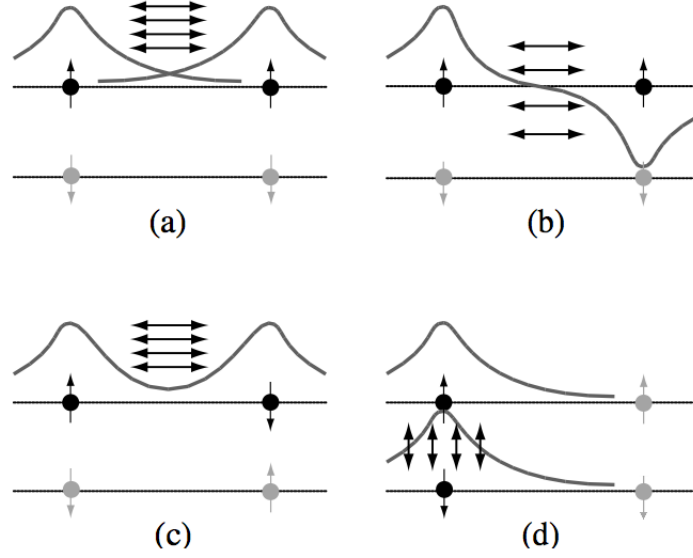


Figura 2.3: Forme assunte dal potenziale di interazione \hat{V}_{ee} : (a) diretta, o di Coulomb, tra siti primi vicini; di scambio, con (b) allineamento parallelo di spin favorito rispetto alla (c) configurazione antiparallela; (d) on-site, tra elettroni occupanti il medesimo sito reticolare (adattata da [3]).

ad un corpo $T(\vec{r})$ non diagonale sui siti reticolari descritti da funzioni d'onda $\psi_{\vec{R}_i}(\vec{r})$:

$$\hat{T}_0 = \sum_{ii'} a_{i\sigma}^\dagger t_{ii'} a_{i'\sigma}, \quad t_{ii'} = \int d^3\vec{r} \psi_{\vec{R}_i}^*(\vec{r}) T(\vec{r}) \psi_{\vec{R}_{i'}}(\vec{r}) \quad (2.3)$$

L'espressione del termine potenziale \hat{V}_{ee} risulta invece funzione di 4 operatori a, a^\dagger combinati tramite l'elemento di matrice del potenziale a 2 corpi $V(\vec{r} - \vec{r}')$ tra gli stati descritti in precedenza:

$$\hat{V}_{ee} = \sum_{ii'jj'} U_{ii'jj'} a_{i\sigma}^\dagger a_{i'\sigma'}^\dagger a_{j'\sigma'} a_{j\sigma}, \quad U_{ii'jj'} = \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \psi_{\vec{R}_i}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{R}_{i'}}^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\vec{R}_j}(\vec{r}) \psi_{\vec{R}_{j'}}(\vec{r}') \quad (2.4)$$

Combinando le 2 precedenti si ottiene il punto di partenza per derivare i risultati voluti:

$$\hat{H} = \hat{T}_0 + \hat{V}_{ee} = \sum_{ii'} a_{i\sigma}^\dagger t_{ii'} a_{i'\sigma} + \sum_{ii'jj'} U_{ii'jj'} a_{i\sigma}^\dagger a_{i'\sigma'}^\dagger a_{j'\sigma'} a_{j\sigma} \quad (2.5)$$

Per ottenere una formulazione piú maneggevole della precedente equazione conviene lavorare sul termine potenziale, ottenendo risultati diversi a seconda dell'effetto che si vuole riprodurre (termine diretto, di scambio o on-site). Si cominci dunque in primo luogo ponendo nel secondo addendo della (2.5) $j = i$ e $j' = i'$. Denotando opportunamente l'elemento di matrice, si ottiene un contributo del tipo:

$$U_{ii'ii'} \equiv V_{ii'} \Rightarrow \hat{V}_{ee} = \sum_{i \neq i'} V_{ii'} \hat{n}_i \hat{n}_{i'}, \quad \hat{n}_i = \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \quad (2.6)$$

ove si sono sfruttate le regole di anticommutazione per gli operatori fermionici. Tale contributo, utile quando gli stati finali sono uguali a quelli iniziali, ha come analogo classico l'energia di repulsione coulombiana tra i diversi siti, ed in termini quantistici con le funzioni d'onda è riportato in figura 2.3.a. Come noto esso rappresenta il contributo di Hartree per le hamiltoniane a molti corpi; di seguito pertanto si proseguirà con quello di Fock che descrive l'interazione di scambio. Ponendo nel secondo addendo della (2.5) $j = i'$ e $j' = i$, si dovrà lavorare con un elemento di matrice del tipo $U_{ii'i'i}$; cambiando indice per comodità, quanto ottenuto risulta:

$$U_{ijji} \equiv J_{ij}^F \Rightarrow \hat{V}_{ee} = \sum_{i \neq j} U_{ijji} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma'}^\dagger a_{i\sigma} a_{j\sigma} = \sum_{i \neq j} J_{ij}^F a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma'}^\dagger a_{i\sigma} a_{j\sigma} \quad (2.7)$$

Risulta utile per scopi futuri riscrivere la precedente espressione in funzione del prodotto di due operatori di spin; per proseguire con i calcoli è dunque necessario utilizzare la relazione di completezza per le matrici di Pauli $\vec{\sigma}$:

$$\sum_i \sigma_{\alpha\beta}^i \sigma_{\gamma\delta}^i = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \quad (2.8)$$

Con la precedente identità si può scrivere il prodotto richiesto tra 2 operatori di spin espressi in seconda quantizzazione dal cui risultato si può ottenere un modo utile per riarrangiare la (2.7):

$$\begin{aligned} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j &= \frac{1}{4} \left(a_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} a_{i\beta} \right) \cdot \left(a_{j\gamma}^\dagger \vec{\sigma}_{\gamma\delta} a_{j\delta} \right) = \frac{1}{4} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}) a_{i\alpha}^\dagger a_{i\beta} a_{j\gamma}^\dagger a_{j\delta} \\ &= \frac{1}{2} a_{i\alpha}^\dagger a_{i\beta} a_{j\beta}^\dagger a_{j\alpha} - \frac{1}{4} \left(a_{i\alpha}^\dagger a_{i\alpha} \right) \left(a_{j\gamma}^\dagger a_{j\gamma} \right) = -\frac{1}{2} a_{i\alpha}^\dagger a_{j\beta}^\dagger a_{i\beta} a_{j\alpha} - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \end{aligned} \quad (2.9)$$

Pertanto si conclude che il termine di scambio della parte potenziale ha la forma:

$$\hat{V}_{ee} = -2 \sum_{i \neq j} J_{ij}^F \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) \quad (2.10)$$

Essendo $J_{ij}^F > 0$, il precedente operatore ricorda la forma dell'hamiltoniana ferromagnetica e difatti è possibile dedurre da un ragionamento qualitativo la necessità di avere gli spin paralleli tra siti primi vicini. Dovendo la funzione d'onda complessiva per i due siti essere antisimmetrica, si hanno 2 possibilità: un primo caso richiede che l'antisimmetria risieda nella parte orbitale (figura 2.3.b), mentre nel secondo essa afferisce alla parte di spin (figura 2.3.c). Poiché l'obiettivo è minimizzare la repulsione coulombiana, solo la prima casistica ottiene tale risultato in quanto vi è probabilità quasi nulla di trovare gli elettroni nella regione centrale tra i due siti; pertanto ad essere favorito è l'allineamento parallelo degli spin, mostrando un ordinamento ferromagnetico come asserito dal calcolo svolto in precedenza. La terza ed ultima casistica per l'espressione del secondo addendo della (2.5) riguarda l'interazione diretta on-site, ottenibile ponendo negli indici $i' = j' = j = i$. Con ciò si trova:

$$U_{iiii} \equiv \frac{U}{2} \Rightarrow \hat{V}_{ee} = \sum_{i, \sigma \neq \sigma'} U_{iiii} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma'}^\dagger a_{i\sigma'} a_{i\sigma} \quad (2.11)$$

ove la condizione sugli indici di spin della sommatoria è dettata dalle proprietà fermioniche degli operatori a, a^\dagger (principio di esclusione di Pauli) come rappresentato in figura 2.3.d. Sistemando opportunamente, dalle proprietà dell'operatore numero, si conclude che:

$$\hat{V}_{ee} = \sum_{i, \sigma \neq \sigma'} \frac{U}{2} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma'}^\dagger a_{i\sigma'} a_{i\sigma} = \sum_i \frac{U}{2} (n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + n_{i\downarrow} n_{i\uparrow}) = \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.12)$$

Tale risultato è il più significativo dei tre presentati e, accoppiandosi ad un termine cinetico limitato ai siti reticolari primi vicini, fornisce l'espressione cercata del modello di Hubbard:

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_U = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.13)$$

ove i coefficienti sono stati per semplicità considerati indipendenti dalla posizione sul reticolo. Descrittivamente, la precedente hamiltoniana rappresenta una situazione in cui è favorito l'effetto tunnel tra orbitali localizzati su siti primi vicini, mentre una doppia occupazione di ciascun sito richiede un'energia U e dunque, nel cosiddetto strong coupling limit, rappresenta la condizione resa in precedenza dal proiettore di Gutzwiller. E' inoltre possibile individuare nella (2.13) una simmetria buca-particella, in quanto essa è invariante per un cambio di segno a tutte le caratteristiche del fermione (momento, spin, carica). Essa rappresenta pertanto la prima peculiarità descritta dal modello $t - J$; per trattare opportunamente la disposizione antiferromagnetica a lungo range è invece necessario effettuare una trasformazione canonica dell'hamiltoniana (2.13), proiettando opportunamente il risultato trovato. Tale procedura è in linea di principio eseguibile per un reticolo con numero arbitrario di siti; tuttavia nel seguito si lavoreranno con 2 siti e 2 elettroni da spartire tra essi rispettando il principio di esclusione di Pauli. In tali ipotesi l'hamiltoniana (2.13) si scrive:

$$\hat{H} = -t \left(a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow} + a_{1\downarrow}^\dagger a_{2\downarrow} + a_{2\uparrow}^\dagger a_{1\uparrow} + a_{2\downarrow}^\dagger a_{1\downarrow} \right) + U \left(a_{1\uparrow}^\dagger a_{1\uparrow} a_{1\downarrow}^\dagger a_{1\downarrow} + a_{2\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow} a_{2\downarrow}^\dagger a_{2\downarrow} \right) \quad (2.14)$$

Per cercarne autovalori ed autovettori, conviene costruire tutti gli stati possibili che descrivano la disposizione dei 2 elettroni, lavorando in seconda quantizzazione a partire dallo stato di vuoto $|\Omega\rangle$:

$$\left\{ a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle, a_{1\downarrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle \right\}, \left\{ |s_1\rangle = a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle, \right. \\ \left. |s_2\rangle = a_{2\uparrow}^\dagger a_{1\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle, |d_1\rangle = a_{1\uparrow}^\dagger a_{1\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle, |d_2\rangle = a_{2\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle \right\} \quad (2.15)$$

Solo i primi 2 hanno una componente lungo z dello spin totale non nulla, ed essi sono anche autostati con autovalore 0, poiché sfruttando le regole di anticommutazione, nella parte cinetica si ha o il prodotto di 2 operatori fermionici uguali, oppure l'azione di uno di distruzione sullo stato di vuoto; inoltre nella parte potenziale, un operatore di distruzione per la direzione di spin opposta a quella dell'autostato sotto analisi, può annichilire lo stato di vuoto:

$$\hat{H} a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle = \hat{H} a_{1\downarrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle = 0 \quad (2.16)$$

ove la seconda uguaglianza è ottenibile considerando la simmetria dell'hamiltoniana per lo scambio delle direzioni di spin. Gli altri 4 stati, essendo ortogonali tra loro, formano una base in uno spazio 4×4 , ed è dunque possibile ottenere in tale spazio l'espressione matriciale dell'hamiltoniana (2.14) che una volta diagonalizzata fornisce autovalori ed autovettori richiesti. Lavorando nel limite $\frac{t}{U} \ll 1$ (il già citato strong coupling limit) si trova che lo stato fondamentale è esprimibile esclusivamente in funzione di stati singolarmente occupati; quanto ottenuto sin qui non è in realtà replicabile per reticoli con un elevato numero di siti, volendo ottenere un risultato da un calcolatore in tempi ragionevoli. Conviene dunque cambiare punto di vista, operando una trasformazione canonica sulla hamiltoniana (2.13), nella quale l'addendo cinetico \hat{H}_t è considerato una perturbazione del termine di interazione di Hubbard \hat{H}_U . L'hamiltoniana trasformata \hat{H}' , che avrà gli stessi autovalori, ma autovettori trasformati, risulta:

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = e^{-t\hat{O}} \hat{H} e^{t\hat{O}} = e^{-t[\hat{O}, \cdot]} \hat{H} \equiv \hat{H} - t [\hat{O}, \hat{H}] + \frac{t^2}{2!} [\hat{O}, [\hat{O}, \hat{H}]] + \dots \quad (2.17)$$

Nella precedente formula la seconda uguaglianza è dimostrabile (al secondo ordine, ma volendo anche ad ordini superiori) espandendo in serie i 2 esponenziali e raccogliendo i termini con la stessa potenza di t ricordando di lavorare con operatori in principio non commutanti fra loro. Si può dimostrare come esista una forma per un siffatto operatore \hat{O} , pari a $t\hat{O} = \frac{\hat{P}_s \hat{H}_t \hat{P}_d - \hat{P}_d \hat{H}_t \hat{P}_s}{U}$, espressa in funzione dei proiettori \hat{P}_s e \hat{P}_d sugli stati della base scelta per diagonalizzare l'hamiltoniana \hat{H} ; tuttavia dal punto di vista fisico è interessante notare come, inserendo la formula per \hat{O} in quella per \hat{H}' , si può ottenere il termine antiferromagnetico di Heisenberg, ricordando di proiettare il risultato sul sottospazio di singola occupazione, in quanto si tiene conto dello strong coupling limit che rende quasi inaccessibile il costo energetico da pagare per avere un sito doppiamente occupato. Ciò mostra dunque come sia naturalmente contenuto in tale condizione di lavoro l'ordinamento antiferromagnetico, esprimibile come:

$$\hat{P}_s \hat{H}' \hat{P}_s \approx J \left(\hat{S}_1^\cdot \cdot \hat{S}_2^\cdot - \frac{1}{4} \hat{n}_1 \hat{n}_2 \right), \quad J = \frac{4t^2}{U} \quad (2.18)$$

Il fatto che 2 spin primi vicini adottino configurazioni antiparallele è spiegabile anche in modo qualitativo, considerando le energie accessibili allo spin come 2 bande: la prima detta LHB (lower Hubbard band) è caratterizzata da stati singolarmente occupati e può avere una larghezza intrinseca dovuta alle piccole correzioni dei termini di hopping; la seconda invece nota come UHB (upper Hubbard band), è più alta in energia della precedente di U , poiché contiene stati doppiamente occupati, e manifesta anch'essa una larghezza intrinseca per gli stessi motivi precedenti.

Si consideri dunque la figura 2.4: il pannello superiore mostra come il principio d'esclusione di Pauli vieti il salto indicato dalla freccia; quello inferiore consente tale operazione in quanto a causa dell'ordinamento antiferromagnetico gli spin sono antiparalleli. Ora però non è drammatico il costo in energia da pagare per la doppia occupazione, in quanto viene in parte compensato dall'ibridizzazione degli orbitali sui siti reticolari adiacenti. Il successo di tale meccanismo avviene però nel secondo passaggio, quando si guadagna un fattore U in energia (per essere ritornati alla LHB) e si mantiene il consueto ordinamento antiferromagnetico. Tale meccanismo noto come superscambio, fu formulato da Anderson ed è un'importante conseguenza dell'espressione (2.18). Essa rappresenta dunque il secondo aspetto cardine evidenziato nel paragrafo precedente per i superconduttori ad alta temperatura; si noti come la scelta dello strong coupling limit come condizione di lavoro permetta in primo luogo di introdurre nel termine cinetico il proiettore di Gutzwiller \hat{P}_G ed in secondo luogo porti naturalmente a considerare il termine antiferromagnetico di Heisenberg come un addendo paritario al precedente nell'espressione dell'hamiltoniana del modello $t - J$:

$$\hat{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \hat{P}_G a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} \hat{P}_G + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\hat{S}_i^\cdot \cdot \hat{S}_j^\cdot - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) \quad (2.19)$$

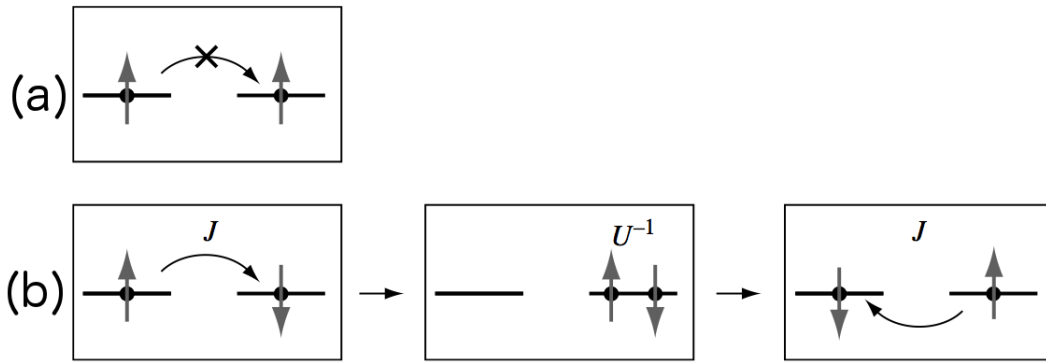


Figura 2.4: (a) Ibridizzazione tra orbitali su siti primi vicini vietata dal principio di esclusione di Pauli; (b) meccanismo di superscambio tra spin antiparalleli formulato da P. W. Anderson (adattata da [3]).

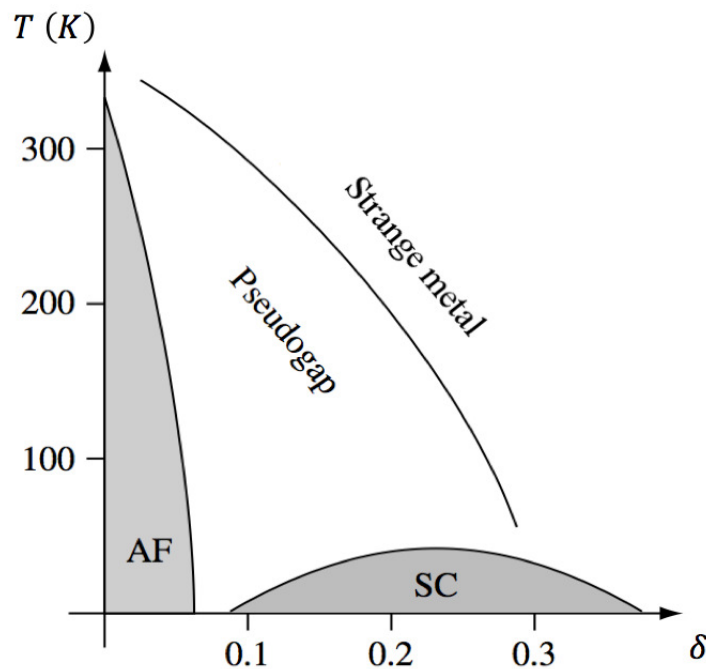


Figura 2.5: Diagramma delle fasi principali di un superconduttore ad alta temperatura (adattata da [3]).

ove per consistenza si sono limitate le somme nei 2 termini ai siti reticolari primi vicini. Tale conclusione è necessaria per l'ottenimento di un'azione tramite il formalismo del path integral, da cui ricavare i propagatori dei campi utilizzati e le quantità fisiche come la suscettività per mezzo delle formule di Kubo.

La derivazione formale condotta in precedenza nasconde però un'importante differenza tra il modello $t - J$ desunto dall'hamiltoniana di Hubbard, e quello propriamente pensato per descrivere i cuprati, come lo si è presentato nel paragrafo precedente. Essa risiede nei valori dei parametri energetici ivi contenuti: difatti nel primo caso, dovendo lavorare nello strong coupling limit, si vede dalle conclusioni precedenti che risulta $\frac{J}{t} = \frac{4t}{U} \ll 1$. Dunque si può formalmente pensare, lungo l'asse delle energie, a due bande ben separate di una quantità dell'ordine di U , delle quali soltanto la prima è occupata, fino ad una energia ε_F pari al potenziale chimico del sistema. Tale banda rappresenta fisicamente gli orbitali $3d$ dei siti di rame, per i quali il vincolo di non doppia occupazione è descritto dal salto U in energia che si deve pagare volendo inserire in essi due lacune. Nel secondo caso, invece, è noto dai valori sperimentali che vale $\frac{J}{t} \sim \frac{1}{3}$; nonostante il risultato sia minore dell'unità, non si può certo affermare con sicurezza che esso rientri propriamente nello strong coupling limit. Tale valore, tuttavia, è altresì giustificabile dal ragionamento seguente: il modello $t - J$ genuino per descrivere i cuprati, utilizzando il singoletto di Zhang-Rice, situa le buche non più negli orbitali $3d$ del rame, bensì in quelli $2p$ dell'ossigeno, opportunamente ibridizzati. Dunque ci si aspetta, lungo l'asse delle energie, due bande (separate tra loro) per entrambi i siti appena analizzati, oltre alla consueta struttura fruibile nel caso di doppia occupazione e distante $\Delta < U$ dalla spalla superiore

delle precedenti. Come si può notare, l'energia di Fermi cade ora nella banda centrale, quella per l'ossigeno, e tale inserimento nello schema presentato per il caso precedente, ha proprio come conseguenza l'innalzamento del rapporto $\frac{J}{t}$. Difatti, nonostante la differenza in energia tra la lower band del rame e la upper band per i siti doppiamente occupati resti U , essendo il sistema singolarmente occupato fino ad ε_F , si nota come bisogna pagare un'energia dell'ordine di Δ per violare tale condizione. Ovvero, rispetto alla deduzione dal modello di Hubbard, si ha un salto molto minore, il che porta ad un aumento del rapporto $\frac{J}{t}$, come è verificato sperimentalmente. Ciò che premeva sottolineare in questo paragrafo era la somiglianza tra la struttura del modello $t - J$ per i cuprati e quella ricavabile dall'hamiltoniana di Hubbard modificata in base alle caratteristiche dei nuovi sistemi da descrivere. Il paradigma che li tratta, tuttavia, riporta situazioni diverse a seconda dei valori di temperatura e drogaggio utilizzati, come rappresentato in figura 2.5. Sperimentalmente si trova che per bassi valori del doping si avrà un sistema isolante alla Hubbard con ordinamento a lungo range di tipo antiferromagnetico e, per basse temperature ma più elevati valori di drogaggio, viene aumentato il numero di portatori del serbatoio di carica, che danno origine ad una fase superconduttiva. Nella regione in alto a destra della figura (alte T e δ), la conducibilità permane, ma appariranno anomalie rispetto ad un metallo normale; più enigmatica resta infine la regione intermedia, nota come pseudogap. In essa si riscontrano 2 scale di energia: una è dovuta alle fluttuazioni antiferromagnetiche ancora sensibili e l'altra alla mobilità delle cariche che descrivono uno stato vicino a quello metallico. Si noti in conclusione come il range di valori di drogaggio ammessi nelle fasi di strange metal e pseudogap, sia limitato a $\delta = 0.03 \div 0.3$; ciò avrà conseguenze molto interessanti nel prossimo capitolo. Le regioni sopra menzionate, nonostante le loro proprietà ibride, risultano accessibili agli esperimenti e pertanto una volta ottenuta l'espressione per la suscettività, è possibile trovare l'andamento del tempo di rilassamento (descritto nel capitolo precedente) ottenendo delle conferme dirette sulla bontà delle approssimazioni adottate per la trattazione del modello $t - J$ e l'elaborazione delle quantità ricavabili da esso, come mostrato nei prossimi paragrafi.

2.4 L'azione nel path integral: bosonizzazione alla Chern-Simons

In questo paragrafo, seguendo la linea di [25], si tradurranno le conclusioni precedenti relative all'hamiltoniana di seconda quantizzazione del modello $t - J$ nel formalismo del path integral, adottando una procedura di bosonizzazione alla Chern-Simons, per ragioni che saranno chiarite in seguito. Il primo ostacolo da affrontare è la trattazione del proiettore di Gutzwiller che impedisce la doppia occupazione di ogni sito reticolare. L'idea risolutiva è quella di utilizzare un operatore fermionico con spin nullo che assicuri la condizione di non doppia occupazione grazie al principio di esclusione di Pauli. Si riscrive dunque l'operatore di distruzione $C_{i\sigma}$ relativo all'elettrone fisico nel modo seguente:

$$C_{i\sigma} = h_i^\dagger s_{i\sigma}, C_{i\sigma}^\dagger = h_i s_{i\sigma}^\dagger \quad (2.20)$$

In essa h_i^\dagger rappresenta l'operatore di creazione di un fermione spinless (noto come holone) mentre $s_{i\sigma}$ denota l'operatore di distruzione di un bosone con spin $\frac{1}{2}$, detto spinone. Come si può notare tali particelle non soddisfano la connessione spin-statistica e dunque non sono fisiche; tuttavia la formula precedente garantisce il rispetto di peculiari proprietà: impedisce la doppia occupazione di uno stesso sito reticolare essendo $h_i^2 = 0$, garantisce lo spin totale corretto per l'elettrone fisico e ne assicura una statistica fermionica. La decomposizione operata in (2.20) riflette la separazione tra i gradi di libertà spinonico (riassunto in s) e di carica (inserito in h), che si mostra essere peculiare nel caratterizzare le fasi di un superconduttore ad alta temperatura. Tuttavia è necessario sottolineare come il processo precedente non sia biiettivo; difatti gli operatori $C_{i\sigma}$ e $C_{i\sigma}^\dagger$ per l'elettrone fisico generano in totale $2 + 2 = 4$ gradi di libertà, mentre considerando le variabili della decomposizione $h_i, h_i^\dagger, s_{i\sigma}, s_{i\sigma}^\dagger$, si hanno in totale $1 + 1 + 2 + 2 = 6$ gradi di libertà. E' dunque necessario inserire due vincoli che possono essere giustificati nel modo seguente: in primo luogo calcolando l'operatore numero per l'elettrone fisico ed utilizzando le regole di anticommutazione per gli holoni, si trova che:

$$\hat{n}_j = \sum_\alpha C_{j\alpha}^\dagger C_{j\alpha} = \sum_\alpha h_j s_{j\alpha}^\dagger h_j^\dagger s_{j\alpha} = \left(\sum_\alpha s_{j\alpha}^\dagger s_{j\alpha} \right) h_j h_j^\dagger = \left(\sum_\alpha s_{j\alpha}^\dagger s_{j\alpha} \right) (1 - h_j^\dagger h_j) \Rightarrow \sum_\alpha s_{j\alpha}^\dagger s_{j\alpha} = 1 \quad (2.21)$$

ove l'ultima uguaglianza risiede nell'aver notato che nel regime di singola occupazione, è sicuro che la somma degli elettroni e delle lacune contenuti nel sito reticolare j è sempre unitaria. In secondo luogo si osserva nella definizione (2.20) una libertà di fase da assegnare a ciascun operatore ovvero:

$$h_j \rightarrow e^{i\phi_j} h_j, s_{j\sigma} \rightarrow e^{i\phi_j} s_{j\sigma} \Rightarrow C_{j\sigma} \rightarrow h_j^\dagger e^{-i\phi_j} e^{i\phi_j} s_{j\sigma} = C_{j\sigma}, C_{j\sigma}^\dagger \rightarrow h_j e^{i\phi_j} e^{-i\phi_j} s_{j\sigma}^\dagger = C_{j\sigma}^\dagger \quad (2.22)$$

La fase precedente può essere descritta dal gruppo $U(1)$, che descrive anche l'invarianza di gauge del campo elettromagnetico. Poiché ivi, in una situazione tridimensionale, descrive un fotone con due direzioni indipendenti di polarizzazione, nel caso $2d$ tratterà invece un solo grado di libertà. Va notato, per evitare equivoci, che

il campo di gauge $U(1)$ associato all'invarianza sopra descritta, non è il campo elettromagnetico. Con le due condizioni precedenti si ha pertanto una decomposizione biunivoca per gli operatori dell'elettone fisico e si può procedere senza alterare le informazioni del modello. In realtà tali conclusioni possono essere raggiunte in modo più formale utilizzando le regole del path integral: dalla teoria è difatti noto come ottenere la funzione di partizione gran canonica partendo dall'hamiltoniana del modello ed utilizzando il formalismo del tempo immaginario. Tale risultato servirà come punto di partenza per il calcolo delle funzioni termodinamiche oppure dei propagatori:

$$\begin{aligned}
Z[\beta, \mu] &= \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* e^{-S_{t-J}}, S_{t-J} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_j \psi_{j\alpha}^* (\partial_\tau - \mu) \psi_{j\alpha} + \hat{H}_{t-J}(\psi_{j\alpha}^*, \psi_{j\alpha}) \right] = \\
& \int_0^\beta d\tau \left[\sum_j \psi_{j\alpha}^* (\partial_\tau - \mu) \psi_{j\alpha} - \sum_{\langle ij \rangle} (t\psi_{i\alpha}^* \psi_{j\alpha} + h.c.) - \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \psi_{i\alpha}^* \psi_{j\sigma}^* \psi_{i\sigma} \psi_{j\alpha} - \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \psi_{i\alpha}^* \psi_{i\alpha} \psi_{j\sigma}^* \psi_{j\sigma} \right] \quad (2.23) \\
&= \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j \psi_{j\alpha}^* (\partial_\tau - \mu) \psi_{j\alpha} - \sum_{\langle ij \rangle} \left[(t\psi_{i\alpha}^* \psi_{j\alpha} + h.c.) + \frac{J}{2} |\psi_{i\alpha}^* \psi_{j\alpha}|^2 \right] + \sum_{ij} u_{ij} \psi_{i\alpha}^* \psi_{j\sigma}^* \psi_{j\sigma} \psi_{i\alpha} \right\}
\end{aligned}$$

ove la variabile grassmaniana ψ soddisfa a condizioni antiperiodiche sull'intervallo di integrazione, mentre è stato introdotto un potenziale u_{ij} che non solo permette di estendere la sommatoria a tutti i siti reticolari, ma ne impedisce la doppia occupazione deprimendo l'esponentiale dell'azione:

$$\psi_{i\alpha}(\tau = 0, \vec{x}) = -\psi_{i\alpha}(\tau = \beta, \vec{x}), \beta = \frac{1}{k_B T}, u_{ij} = \begin{cases} \infty & \text{se } i = j \\ -\frac{J}{2} & \text{per } ij \text{ primi vicini} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (2.24)$$

Essendo presente nella (2.23) un termine contenente 4 campi fermionici, è possibile esprimerlo utilizzando l'identità di Hubbard-Stratonovich, che consta di un integrale gaussiano con variabile complessa. Poiché vale:

$$\begin{aligned}
I &= \int \mathcal{D}X_{ij}^* \mathcal{D}X_{ij} e^{-\frac{2}{J} X_{ij}^* X_{ij} - X_{ij} \psi_i^* \psi_j - X_{ij}^* \psi_j^* \psi_i}, X_{ij} = Y_{ij} - \frac{J}{2} \psi_j^* \psi_i \Rightarrow \\
I &= \int \mathcal{D}Y_{ij}^* \mathcal{D}Y_{ij} e^{-\frac{2}{J} (Y_{ij}^* - \frac{J}{2} \psi_i^* \psi_j) (Y_{ij} - \frac{J}{2} \psi_j^* \psi_i) - (Y_{ij} - \frac{J}{2} \psi_j^* \psi_i) \psi_i^* \psi_j - (Y_{ij}^* - \frac{J}{2} \psi_i^* \psi_j) \psi_j^* \psi_i} = \\
& \int \mathcal{D}Y_{ij}^* \mathcal{D}Y_{ij} e^{-\frac{2}{J} Y_{ij}^* Y_{ij} + Y_{ij}^* \psi_j^* \psi_i + \psi_i^* \psi_j Y_{ij} - \frac{J}{2} \psi_i^* \psi_j \psi_j^* \psi_i - Y_{ij} \psi_i^* \psi_j + \frac{J}{2} \psi_j^* \psi_i \psi_i^* \psi_j - Y_{ij}^* \psi_j^* \psi_i + \frac{J}{2} \psi_i^* \psi_j \psi_j^* \psi_i} \\
&= \int \mathcal{D}Y_{ij}^* \mathcal{D}Y_{ij} e^{-\frac{2}{J} Y_{ij}^* Y_{ij} + \frac{J}{2} \psi_j^* \psi_i \psi_i^* \psi_j} = N e^{\frac{J}{2} \psi_i^* \psi_j \psi_j^* \psi_i}
\end{aligned} \quad (2.25)$$

ove N è una costante numerica di integrazione, allora è possibile riesprimere la (2.23) in funzione di un campo bosonico ausiliare X_{ij} opportunamente normalizzato, ottenendo:

$$S_{t-J}(\psi, X) = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{\langle ij \rangle} \left[\frac{2}{J} X_{ij}^* X_{ij} + (-t + X_{ij}) \psi_{i\alpha}^* \psi_{j\alpha} + h.c. \right] + \sum_i \psi_{i\alpha}^* (\partial_\tau - \mu) \psi_{i\alpha} + \sum_{ij} u_{ij} \psi_{i\alpha}^* \psi_{j\sigma}^* \psi_{j\sigma} \psi_{i\alpha} \right\} \quad (2.26)$$

Quanto presentato sarà dunque il punto di partenza a cui applicare la bosonizzazione alla Chern-Simons, in quanto tale procedura permette di ottenere 2 risultati importanti: in primo luogo viene giustificata la decomposizione degli operatori elettronici presentata ad inizio paragrafo; in secondo luogo introduce delle agevolazioni tecniche per il calcolo di un'azione efficace del modello $t - J$, che nonostante contenga importanti semplificazioni permette il calcolo dei propagatori e dunque di quantità fisiche come la suscettività. Lo strumento invocato in precedenza è tuttavia applicabile solo se sono soddisfatte due ipotesi: è difatti necessario che il sistema sia bidimensionale e che le traiettorie dei campi su cui operare gli integrali funzionali siano disgiunte tra loro. Tali condizioni sono sempre soddisfatte dall'hamiltoniana del modello $t - J$ che descrive le lamine CuO_2 sedi del processo superconduttivo, nelle quali la condizione di non doppia occupazione assicura la disgiunzione dei cammini. Per quanto scritto si possono dunque introdurre i dettagli della bosonizzazione alla Chern-Simons: il primo passo consiste nel ricordare l'espressione della funzione di partizione canonica per un sistema a molti corpi tramite gli integrali di Feynman. L'unica differenza tra il caso bosonico e quello fermionico nella scelta della base ove eseguire la traccia era la presenza di $\xi^{\sigma(\pi)}$, ove ξ denota il segno (+1 per bosoni e -1 per fermioni) mentre $\sigma(\pi)$ è la parità della permutazione degli N corpi considerati nel calcolo. Focalizzandosi sul caso fermionico di interesse, si dimostra che tale fattore è

un invariante e può essere scritto in funzione di una traccia di una combinazione opportuna di un campo di gauge W come:

$$\begin{aligned} (-1)^{\sigma(\pi)} &\equiv \int \mathcal{D}W e^{-k S_{CS}(W)} P \left[e^{i \int (W_a d\omega^a + W_\tau d\tau)} \right], \\ S_{CS}(W) &= \frac{1}{4\pi i} \int_{\mathbb{R}^2 \times [0, \beta]} d\vec{x} d\tau \text{Tr} \left[\varepsilon^{\mu\nu\rho} \left(W_\mu \partial_\nu W_\rho + \frac{2}{3} W_\mu W_\nu W_\rho \right) \right] \end{aligned} \quad (2.27)$$

ove k è una costante opportuna che dipende dalla scelta del gruppo di gauge, $P[\dots]$ è il path-ordering, mentre gli indici latini variano solo sulle componenti spaziali [$a = (1, 2)$] e quelli greci comprendono anche la componente di tempo immaginario [$(\mu, \nu, \rho) = (\tau, 1, 2)$] e S_{CS} è la cosiddetta azione di Chern-Simons. Tale espressione per il fattore di fase legato alla statistica, consente dunque secondo la teoria di Chern-Simons, di riscrivere la funzione di partizione canonica $Q_{fermioni}$ di un sistema fermionico in funzione di variabili bosoniche Φ, Φ^* unite al campo di gauge W ; ricordando le relazioni della meccanica statistica per passare dalla funzione canonica $Q_{fermioni}$ a quella grancanonica $Z_{fermioni}$ è dunque possibile ottenere il punto di partenza per far comparire nell'azione del path integral la decomposizione degli operatori elettronici:

$$\begin{aligned} Q_{fermioni}(N, \beta) &\equiv \int \mathcal{D}W Q_{bosoni}(N, \beta, W) e^{-k S_{CS}(W)}, \quad Z_{fermioni}(\mu, \beta) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu N}}{N!} Q_{fermioni}(N, \beta) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu N}}{N!} \int \mathcal{D}W Q_{bosoni}(N, \beta, W) e^{-k S_{CS}(W)} = \int \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi \mathcal{D}W e^{-S(\Phi^*, \Phi, W) - k S_{CS}(W)} \end{aligned} \quad (2.28)$$

A tale scopo si sceglie come gruppo di simmetria per il campo di gauge $SU(2) \times U(1)$; tale scelta richiede oltre a dei precisi valori per la costante k , anche una scelta sul campo W che dunque si riflette sulla forma dell'azione di Chern-Simons. Questa è il prodotto di due fattori, uno per ciascun gruppo: la parte $U(1)$ è descritta da un campo di gauge abeliano B per il quale vale:

$$S_{CS} = \frac{1}{4\pi i} \int d\tau d\vec{x} \varepsilon^{\mu\nu\rho} B_\mu \partial_\nu B_\rho \quad (2.29)$$

mentre quella $SU(2)$ richiede un campo non abeliano V con azione:

$$S_{CS} = \frac{1}{4\pi i} \int d\tau d\vec{x} \varepsilon^{\mu\nu\rho} \left(V_\mu \partial_\nu V_\rho + \frac{2}{3} V_\mu V_\nu V_\rho \right) \quad (2.30)$$

Mettendo insieme i risultati precedenti è dunque possibile riscrivere la funzione di partizione grancanonica del modello $t - J$, ricordando che per il campo di Grassmann si deve applicare la bosonizzazione con le conseguenze appena descritte, mentre resta inalterato il contributo del campo ausiliario X_{ij} seguito all'utilizzo dell'identità di Hubbard-Stratonovich:

$$Z_{t-J}(\mu, \beta) \equiv \int \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi \mathcal{D}B \mathcal{D}V \mathcal{D}X_{ij}^* \mathcal{D}X_{ij} e^{-S_{t-J}(\Phi, X, B, V)} e^{-2S_{CS}(B)} e^{-S_{CS}(V)} \quad (2.31)$$

I gruppi introdotti danno un'idea delle quantità ad essi associabili: $U(1)$, rappresentando una fase, descrive il grado di libertà di carica, mentre $SU(2)$, essendo generato dalle tre matrici di Pauli, tratta lo spin. In realtà per poter ottenere delle quantità invarianti sotto tali gruppi, che dunque descrivano delle corrette caratteristiche fisiche, è necessario compiere un ulteriore passaggio; si decompone difatti il campo bosonico Φ come segue:

$$\Phi_{i\alpha} = E_i^* \Sigma_{i\alpha}, \quad \Phi_{i\alpha}^* = E_i \Sigma_{i\alpha}^* \quad (2.32)$$

ove, per mantenere la statistica, sia E che Σ sono campi complessi. Per procedere, è tuttavia costume adoperare una procedura analoga alla precedente, detta fermionizzazione di E . Come esaminato nella teoria a molti corpi, l'unica differenza tra le tipologie dei campi presenti nella funzione ripartizione è il segno, il quale risulta esprimibile tramite un campo di gauge; pertanto non sorprende che per mutare natura di E si opti per un cambio di variabile $B \rightarrow B + B'$. Il procedimento consta poi nell'integrare B' , accoppiando così il campo E con il nuovo B superstite. Come è possibile dimostrare, ciò porta ai traguardi desiderati: in primo luogo difatti E assume carattere fermionico, e verrà in seguito denotato come H , mentre in secondo luogo si registra un cambiamento nel segno del coefficiente per l'azione di Chern-Simons. Quanto ottenuto è notevole, poiché si trova che il campo fermionico H_i a spin 0, se legato a B fornisce un invariante sotto $U(1)$, mentre quello bosonico $\Sigma_{i\alpha}$ a spin $\frac{1}{2}$, qualora unito a V , risulta invariante rispetto all'azione di $SU(2)$. Tale conclusione, anticipata ad inizio paragrafo, consente di utilizzare

un'azione con campi multipli su cui integrare, ma nella quale il potenziale u_{ij} che imponeva la singola occupazione è stato riassorbito dal campo H_i . Inoltre essendo esso carico rispetto a $\Sigma_{i\alpha}$, appare automatico il contributo separato alle proprietà dell'azione (e dunque dei materiali superconduttori) dello spin e della carica. Inserendo tutte le considerazioni esposte nel risultato precedente si può desumere la formula di riferimento per la funzione di partizione; in essa si noterà la mancanza dei campi ausiliari X_{ij} e X_{ij}^* avendo eseguito l'integrazione gaussiana rispetto ad essi:

$$\begin{aligned}
Z_{t-J}(\mu, \beta) &\equiv \int \mathcal{D}H^* \mathcal{D}H \mathcal{D}\Sigma^* \mathcal{D}\Sigma \mathcal{D}B \mathcal{D}V \left[e^{-S_{t-J}(H, \Sigma, B, V)} e^{2S_{CS}(B)} e^{-S_{CS}(V)} \delta(\Sigma^* \Sigma - 1) \right], \\
S_{t-J}(H, \Sigma, B, V) &= \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j [H_j^* (\partial_\tau - iB_\tau(j) - \mu - J) H_j + iB_\tau(j) + (1 - H_j^* H_j) \right. \\
&\quad \Sigma_{j\alpha}^* (\partial_\tau + iV_\tau(j)) \Sigma_{j\alpha}] + \sum_{\langle ij \rangle} \left[-t H_j^* e^{i \int_{\langle ij \rangle} B} H_i \Sigma_{i\alpha}^* P \left(e^{i \int_{\langle ij \rangle} V} \right)_{\alpha\beta} \Sigma_{i\beta} \right. \\
&\quad \left. \left. + h.c. + \frac{J}{2} (1 - H_i^* H_i) (1 - H_j^* H_j) \left(\left| \Sigma_{i\alpha}^* P \left(e^{i \int_{\langle ij \rangle} V} \right)_{\alpha\beta} \right|^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Tale espressione, ancora inutilizzabile vista l'intrinseca complicazione, verrà studiata nel prossimo paragrafo cercandone una riscrittura più fruibile; per adesso si noti tuttavia l'importante conclusione della descrizione in termini dell'holone H_i e dello spinone $\Sigma_{i\alpha}$, per il quale la condizione trovata in (2.21) è espressa all'interno del path integral, il quale fornisce un risultato non nullo, solo nel caso in cui valga:

$$\Sigma_{i\alpha}^* \Sigma_{i\alpha} = 1 \tag{2.34}$$

2.5 Verso un'azione efficace: il gauge fixing

In questo paragrafo, composto sull'analogo di [25], ci si occuperà di fissare le gauge dei campi introdotti con il procedimento di bosonizzazione alla Chern-Simons. Si noti però un'importante differenza: le gauge scelte per i campi B e V rispettivamente afferenti ai gruppi $U(1)$ ed $SU(2)$ sono delle loro caratteristiche tecniche, senza alcuna implicazione fisica. Diverso è il fatto per il gruppo $U(1)$ che descrive la simmetria della decomposizione (2.32) e che verrà denotato nel seguito come $U(1)_{h-s}$: scegliere la sua gauge significa eliminare l'unico grado di libertà in eccesso rispetto alla descrizione di partenza del modello $t-J$ e dunque rendere equivalente le due trattazioni. Per convenienza tecnica si fisserà tale gauge solo dopo aver ottenuto un'azione effettiva semplificata del modello, in quanto tale procedimento è richiamabile ad altri già noti in letteratura. Si cominci considerando il gruppo $SU(2)$: sotto la sua azione è invariante lo spinone Σ accoppiato al campo V . Per trattare adeguatamente il sistema superconduttivo, conviene forzare Σ al rispetto dell'ordinamento antiferromagnetico a lungo range; così facendo però viene perso il suo ruolo di campo variabile ed è dunque rimasta la sola integrazione su tutte le trasformazioni di gauge con simmetria $SU(2)$. Come noto, essa è equivalentemente espressa suddividendola in classi di equivalenza g con rappresentante V , a patto di considerare entrambi come campi variabili. Per convenzione, si decide tuttavia di scegliere per V il rispetto della gauge di Coulomb, denotandolo come $V^{(c)}$; dalle considerazioni precedenti emerge dunque come debba essere coerentemente modificata la misura dell'integrazione funzionale:

$$\mathcal{D}\Sigma \mathcal{D}V \sim \mathcal{D}V^{(c)} \mathcal{D}g \tag{2.35}$$

Trattando invece la parte descritta dal gruppo di simmetria $U(1)$ non si impone alcuna condizione sull'holone H , mentre per il campo B si sceglie la gauge di Coulomb, con cui esso verrà denotato come $B^{(c)}$. A differenza del caso precedente, le misure di integrazione nel path integral non subiranno alcuna modificazione, risultando:

$$\mathcal{D}H \mathcal{D}B \text{ con } \partial_\mu B^\mu = 0 \tag{2.36}$$

Da ciò emerge dunque come l'implementazione legata agli holoni presenti una difficoltà intrinseca maggiore rispetto a quella usata per gli spinoni, poiché ora non si può forzare H ad alcun valore prefissato, al fine di rispettare delle proprietà fisiche. Dunque, per procedere, si è deciso di lavorare sul suo campo di gauge B , separandolo in una parte media \bar{B} (indipendente dall'indice reticolare ovvero nel limite continuo dalla posizione) ed in una fluttuazione δB . Come si discuterà nel paragrafo 2.7, una possibile approssimazione che consenta uno sviluppo analitico consiste nel trascurare la parte variabile rispetto al valore costante, adottando la cosiddetta visione di campo medio; come intuibile tuttavia ciò avrà delle marcate conseguenze per le quantità fisiche desunte dal formalismo descritto. Nel

capitolo 3 ad esempio si legherà la trasformata di Fourier della suscettività magnetica uniforme e costante alla funzione di Green della buca fisica, ottenibile tramite un campo che rispecchi le forti correlazioni tra la parte holonica e spinonica del modello $t - J$ [il campo di mediazione di gauge $U(1)$ che emergerà naturalmente dopo un opportuno sviluppo dell'azione presentata]. Come intuibile, nel risultato finale si rifletteranno le approssimazioni assunte per semplificare l'azione ottenuta dalla bosonizzazione alla Chern-Simons, e quella di mean field per B risulterà la principale responsabile del mancato accordo con i dati sperimentali. In quella sede si discuterà di fatti che, considerando unitamente al valor medio le sue fluttuazioni, sarà necessaria una modificazione alla forma della funzione di Green menzionata, che ammetterà più compatibilità con gli andamenti tabulati. Riassumendo i due gauge fixings presentati è dunque possibile riscrivere l'azione del modello $t - J$ in un nuovo scenario: dalle conclusioni del paragrafo precedente è difatti noto che esso riflette la descrizione come carica e spin tramite la dipendenza dai campi holonici e spinonici e da quelli di gauge per $U(1)$ ed $SU(2)$. Ora però tre delle precedenti quattro variabili mutano d'aspetto, a causa del gauge fixing dei gruppi coinvolti nella bosonizzazione alla Chern-Simons e della richiesta di un ordine antiferromagnetico a lungo range. L'efficacia di tale scelta risiede però nella possibilità di spezzare in due contributi il risultato finale dell'azione come segue:

$$\begin{aligned}
S_{t-J}(H, \Sigma, B, V) &\mapsto S_{t-J}(H, g, B^{(c)}, V^{(c)}) = S_1(H, A, U) + S_2(H, U) \Rightarrow \\
S_1(H, A, U) &= \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j [H_j^* (\partial_\tau - \delta) H_j + i (H_j^* H_j) A_j] + \sum_{\langle ij \rangle} [-t H_j^* U_{\langle ij \rangle} H_j + h.c.] \right\}, \\
S_2(H, U) &= \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{\langle ij \rangle} \left[\frac{J}{2} (1 - H_j^* H_j) (1 - H_i^* H_i) \left(|U_{\langle ij \rangle}|^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Nella precedente formula si sono definiti per comodità due nuovi campi legati a quelli iniziali tramite:

$$\begin{cases} iA_j = \left(\sigma_x^{|j|} g_j^\dagger \partial_\tau g_j \sigma_x^{|j|} \right)_{1,1} \\ U_{\langle ij \rangle} = e^{i \int_{\langle ij \rangle} \bar{B}_\mu} \left[\sigma_x^{|i|} g_i^\dagger P \left(e^{i \int_{\langle ij \rangle} V_\mu^{(c)}} \right) g_j \sigma_x^{|j|} \right]_{1,1} \end{cases} \tag{2.38}$$

La decomposizione dell'azione presentata in precedenza fa dunque pensare come in entrambi gli addendi, per la presenza dei campi H , A ed U , si trovino descritte le parti rispettivamente di carica e di interazione con lo spin tramite i campi di gauge; nel secondo addendo è descritto il comportamento degli spin con un accoppiamento dipendente dalla densità di cariche. Ciò permette una connessione qualitativa con la formula dell'hamiltoniana $t - J$: come esaminato negli scorsi paragrafi essa consta di un primo termine di hopping inserito tra due proiettori di Gutzwiller che impediscono la doppia occupazione dei siti reticolari e di un secondo addendo di tipo antiferromagnetico, che come mostrato esplicitamente nella (2.18) è per sua stessa natura già proiettato negli stati singolarmente occupati. La (2.37) servirà pertanto come base per i calcoli futuri, i quali saranno fattibili in modo analitico solo a patto di introdurre opportune approssimazioni, purchè non impoveriscano troppo l'informazione fisica contenuta nel modello. A tali semplificazioni saranno dedicati i prossimi tre paragrafi, tutti ispirati a [25], a partire dal successivo nel quale si cercherà di ottimizzare l'azione con un procedimento concettualmente simile a quello dell'espansione attorno alla soluzione dell'equazione di saddle point.

2.6 Step 1: costruzione di una configurazione ottimale

Nel presente paragrafo si delinearanno i passaggi fondamentali per costruire una configurazione ottimale degli spin del modello $t - J$, attorno alla quale espandere le fluttuazioni, lasciando ai due successivi la trattazione delle specifiche approssimazioni da compiere per descrivere la parte spinonica e quella holonica. Il modello che si sta considerando ha due scale di energia ben definite: quella coulombiana, associabile al contributo holonico ed una di tipo antiferromagnetico dovuta a quello spinonico. In una comune situazione sperimentale gli ordini di grandezza mostrano che la seconda è una correzione subleading della prima, perciò riguardo alla funzione di partizione conviene ragionare nel modo seguente: si integrano i gradi di libertà holonici, in quanto di essi interessa un'informazione media non avendo scale di energia sufficienti per studiarne le fluttuazioni. Ovvero partendo da:

$$Z(A, U, \beta, \mu) := \int \mathcal{D}H^* \mathcal{D}H e^{-S_1(H, A, U) - S_2(H, U)} \tag{2.39}$$

si applica il principio di minima azione, trovando così per quali valori dei campi A ed U la (2.39) assume il valore massimo. Tale risultato prende il nome di configurazione spinonica ottimale e sarà il punto di partenza per lo

studio delle fluttuazioni come si mostrerà nel seguito. Tale risultato si basa sulla seguente disuguaglianza:

$$|Z(A, U, \beta, \mu)| \leq \int \mathcal{D}H^* \mathcal{D}H e^{-S_1 - S_2} \Big|_{A=0, \hat{U}} \quad (2.40)$$

ove \hat{U} è il campo che massimizza il lato di destra. Da essa appare dunque chiaro che la configurazione spinonica ottimale è descritta dai campi $A = 0$ e $U = \hat{U}$; da essi è infine possibile ricavare un'espressione per g che denotiamo g_{opt} . Perturbando essa si introducono nel sistema le fluttuazioni spinoniche: si tratta cioè di inserire nell'azione del modello $t - J$ mostrata nello scorso paragrafo, al posto di g il valore g_{opt} più una correzione rappresentabile in questo caso come una matrice R di $SU(2)$. Il risultato è dunque:

$$\begin{aligned} S_{t-J}(H, g, B^{(c)}, V^{(c)}) &\mapsto S_{t-J}(H, R, B^{(c)}, \delta V) = S_s + S_h, S_h(H, R, \delta V, B^{(c)}) = \\ &\int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j H_j^* \left[\partial_\tau - \delta - \left(\sigma_x^{|j|} R_j^\dagger \partial_\tau \sigma_x^{|j|} \right)_{1,1} \right] H_j + \sum_{\langle ij \rangle} \left[-t H_j^* e^{-i \int_{\langle ij \rangle} (\bar{B} - \delta B)} H_i \right. \right. \\ &\left. \left. \left(\sigma_x^{|i|} R_i^\dagger P \left(e^{-i \int_{\langle ij \rangle} (\bar{V} - \delta V)} \right) R_j \sigma_x^{|j|} \right)_{1,1} + h.c. \right] \right\}, S_s(H, R, \delta V) = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j \left(\sigma_x^{|j|} R_j^\dagger \partial_\tau R_j \sigma_x^{|j|} \right)_{1,1} \right. \\ &\left. + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{J}{2} (1 - H_j^* H_j) (1 - H_i^* H_i) \left[\left| \sigma_x^{|i|} R_i^\dagger P \left(e^{-i \int_{\langle ij \rangle} (\bar{V} - \delta V)} \right) R_j \sigma_x^{|j|} \right|^2 - \frac{1}{2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

La sua forma analitica è giustificabile solo da un calcolo diretto; tuttavia quanto presentato è sensato in base alla considerazione seguente: nella nuova azione del modello $t - J$ dopo l'applicazione del principio di minima azione e l'inserimento delle fluttuazioni spinoniche si hanno cambiamenti solo in tale settore. La variabile in $SU(2)$ non è più g bensì R e le fluttuazioni del campo di gauge $SU(2)$ sono descritte da δV . La variazione trattata da R e δV deve rientrare nella parte spinonica che come mostra la sua espressione esplicita è l'erede del termine di ordinamento antiferromagnetico; lo spin però aveva anche un ruolo nel termine di hopping del modello $t - J$, rientrando nel proiettore di Gutzwiller, dunque è sensato che entrambi i campi menzionati in precedenza siano presenti nel termine holonico della (2.41). Inoltre vista l'importanza ubiqua della carica, sia nel termine t che in quello J , è doveroso che il campo holonico che ne eredita la descrizione rientri in entrambi gli addendi della precedente equazione; la loro unica differenza risiede nel campo di gauge $B^{(c)}$, il quale essendo associato al gruppo $U(1)$ può rientrare solo nel settore holonico dell'azione. La formula precedente che conclude il primo step, sarà analizzata separatamente nei due addendi nei prossimi paragrafi, nei quali verranno introdotte le principali approssimazioni necessarie per l'ottenimento di un'azione efficace da cui estrapolare in modo analitico funzioni termodinamiche e propagatori dei campi.

2.7 Step 2: approssimazioni nel settore spinonico

In questo paragrafo si discuteranno le principali approssimazioni da apportare al primo addendo della (2.41) scelte però in modo tale da non impoverirne troppo il contenuto fisico. Rimarchevole è il fatto che, per la prima volta dall'inizio del capitolo, si stiano introducendo delle approssimazioni, cosicché il risultato finale non sarà più del tutto equivalente all'hamiltoniana del modello $t - J$. Di seguito si discutono tali semplificazioni: in primo luogo si è scelto di trascurare le fluttuazioni dei campi di gauge δV e δB . Da un punto di vista intuitivo ciò può essere imputato all'interesse in ultima analisi per lo stato legato, ovvero l'elettrone fisico, decomposto nelle variabili holoniche e spinoniche; poiché ivi non rientrano i campi di gauge, è possibile considerarne un opportuno valore costante determinato coerentemente (nel nostro caso dalla configurazione spinonica ottimale), trascurandone le variazioni. In secondo luogo si è deciso di separare la parte ferromagnetica da quella antiferromagnetica delle fluttuazioni spinoniche, tramite l'introduzione di opportune variabili mostrate nel seguito. Queste prime due approssimazioni hanno degli effetti immediati già nell'espressione in seconda quantizzazione dell'operatore di spin \vec{S}_j :

$$\begin{cases} \vec{S}_j = \frac{1}{2} C_{j\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} C_{j\beta} = \frac{1}{2} \Sigma_{j\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \Sigma_{j\beta} (1 - H_j^* H_j) \\ \Sigma_{j\alpha} \rightarrow \left[\bar{g}_j R_j \sigma_x^{|j|} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]_\alpha \end{cases} \quad (2.42)$$

In essa si è ricordata la decomposizione dell'operatore elettronico e la statistica fermionica dell'holone; inoltre si è riscritto lo spinone con le notazioni sinora adottate: in funzione del campo g di $SU(2)$ affinché si rispetti la

struttura antiferromagnetica e dunque tramite la matrice $R = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ -b_2^* & b_1^* \end{pmatrix}$ una volta introdotte le fluttuazioni spinoniche. Assegnando a tale matrice degli elementi b_j si può dunque operare il seguente sviluppo:

$$b_{j\alpha}^* \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} b_{j\beta} \sim \overrightarrow{\Omega}_j + (-1)^{|j|} \varepsilon L_j \quad (2.43)$$

A causa delle eccitazioni di spin è sensato che nella precedente equazione appaiano due caratteri: uno ferromagnetico descritto dal parametro \overrightarrow{L}_j ed un altro antiferromagnetico trattato da $\overrightarrow{\Omega}_j$. Al solito poiché il modello $t - J$ prescrive solo quest'ultimo tipo di ordinamento, si dovrà integrare sul parametro \overrightarrow{L}_j ; per convenienza infine si scriverà $\overrightarrow{\Omega}_j$ tramite:

$$\overrightarrow{\Omega}_j := z_{j\alpha}^* \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} z_{j\beta} \quad (2.44)$$

ove z_j è un campo complesso (dunque bosonico). Ripercorrendo i ragionamenti precedenti si vede che partendo dallo spinone Σ , tramite g e R , si è giunti ad $\overrightarrow{\Omega}_j$ e dunque a z_j : come si può del resto dimostrare dunque esso eredita le medesime caratteristiche dello spinone, quali spin $\frac{1}{2}$ e carica nulla. Tale cambiamento influenza anche la condizione (2.34) di cui nel seguito vengono mostrati i principali cambiamenti passando dal campo Σ_j a quello z_j :

$$\Sigma_{j\alpha}^* \Sigma_{j\alpha} = 1 \rightarrow g_j^* g_j = 1 \rightarrow b_{j\alpha}^* b_{j\alpha} = 1 \rightarrow z_{j\alpha}^* z_{j\alpha} = \text{const.} \quad (2.45)$$

Tra le approssimazioni compiute si deve annoverare in terzo luogo la scelta di passare ad una notazione continua negli indici dei siti reticolari, esprimibili tramite una coordinata normalizzata rispetto al passo reticolare a . Tale scelta consente altresì un'espansione in a che semplifica ulteriormente la forma del settore spinonico dell'azione. Avendo sinora dato approssimazioni per R , $B^{(c)}$ e δV , conviene trattare in quarto luogo quella per H :

$$\langle H_j^* H_j \rangle \sim \delta, \forall j \quad (2.46)$$

Tale scelta, nota come campo medio, è giustificabile in virtù di quanto esposto ad inizio del paragrafo precedente: essendo non confrontabili le scale di energia holonica e delle fluttuazioni di spin, è sensato considerare un contributo medio degli operatori funzioni del campo H , come per il loro numero considerato nella formula precedente. Inserendo queste 4 approssimazioni nel settore spinonico dell'azione, si arriva al risultato seguente, che però necessiterà di un'ulteriore raffinazione:

$$\begin{aligned} a \rightarrow 0, j \rightarrow \frac{\vec{x}}{a}, z_j(\tau) \rightarrow z(\tau, \vec{x}) \Rightarrow S_s \rightarrow S_s^{eff} = S_s^{(1)} + S_s^{(2)}, S_s^{(1)} = \frac{1}{g} \int_0^\beta d\tau d\vec{x} \left[\left(\partial_\tau \overrightarrow{\Omega} \right)^2 + 2(Ja)^2 \right. \\ \left. \left(\partial_\mu \overrightarrow{\Omega} \right)^2 + \overrightarrow{\Omega}^2 \overline{V}_z^2 \right], S_s^{(2)} = -\frac{1}{g} \int_0^\beta d\tau d\vec{x} \Omega_z^2 \overline{V}_z^2, z_\alpha^*(\tau, \vec{x}) z_\alpha(\tau, \vec{x}) = \text{const.}, (\mu, \alpha) = (1, 2) \end{aligned} \quad (2.47)$$

L'equazione precedente mostra un risultato ancora non del tutto soddisfacente: si tratta della riscrittura della parte spinonica dell'azione come somma di un termine leading più una correzione. In esse, però, compare ancora un residuo del campo di gauge V ; a complicare il tutto vi è inoltre la condizione sul campo complesso z già vista in precedenza. Tale vincolo può essere tuttavia trattato con il formalismo dei moltiplicatori di Lagrange λ . Per ottenere delle espressioni più fruibili è però conveniente applicare una quinta approssimazione, valutando il termine \overline{V}_z^2 in approssimazione quenched; si ottiene:

$$\langle \overline{V}_z^2 \rangle \sim \delta |\ln \delta| := m_s^2, \lambda \sim 0 \quad (2.48)$$

Essa equivale a trascurare il moltiplicatore ed a sostituire il termine con il campo di gauge con il suo valor medio, producendo quest'ultimo una massa efficace spinonica m_s ; si dimostra però che tali scelte risultano valide solo quando le energie ed i momenti delle particelle analizzate risultano abbastanza ridotti, regime noto come scaling limit. Inserendo tale ipotesi nella precedente equazione si trova dunque la forma seguente per la parte spinonica dell'azione:

$$S_s^{eff} \sim \frac{1}{g} \int_0^\beta d\tau d\vec{x} \left[\left(\partial_\tau \overrightarrow{\Omega} \right)^2 + 2(Ja)^2 \left(\partial_\mu \overrightarrow{\Omega} \right)^2 + \overrightarrow{\Omega}^2 m_s^2 \right] \quad (2.49)$$

La presenza nella (2.49) della massa spinonica è peculiare; si cominci dunque considerando il caso di drogaggio nullo, in cui anch'essa vale 0. L'azione è in questa situazione simile alla rappresentazione in spazio reale di quella per il modo di Goldstone $\overrightarrow{\Omega}$. Si può avere conferma di ciò in modo formale scrivendo la precedente equazione nel caso $m_s = 0$ nello spazio di Fourier e notando che per lunghezze d'onda infinite (ovvero vettori d'onda nulli) l'azione svanisce, in quanto descrive correttamente il contributo di un modo soffice (massless) di energia. Più

intuitiva può essere la derivazione esplicita, che sfrutta le equazioni di Eulero-Lagrange applicate alla precedente azione. Si trova:

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_\tau \frac{\partial \mathcal{S}_s^{eff}}{\partial (\partial_\tau \Omega_i)} + \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{S}_s^{eff}}{\partial (\vec{\nabla} \Omega_i)} = 2\partial_\tau (\partial_\tau \Omega_i) + 4(Ja)^2 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \Omega_i) \\ &\Rightarrow \left[\partial_\tau^2 + 2(Ja)^2 \vec{\nabla}^2 \right] \Omega_i = 0 \Rightarrow \left[\partial_t^2 - v_s^2 \vec{\nabla}^2 \right] \Omega_i = 0, \quad v_s = \sqrt{2}Ja \end{aligned} \quad (2.50)$$

Come risulta, il campo Ω_i ammette una soluzione ondulatoria, la cui relazione di dispersione vale:

$$\omega_{\vec{k}} = \left| \vec{k} \right| v_s = \sqrt{2} \left| \vec{k} \right| Ja \quad (2.51)$$

Le caratteristiche di tale onda nel limite $\vec{k} \rightarrow \vec{0}$ sono proprio quelle del bosone di Goldstone, in quanto anche la sua frequenza si annulla coerentemente con il carattere di soft mode. Le due conclusioni precedenti vengono drammaticamente cambiate qualora si consideri anche il termine di massa; il campo Ω_i ammette ancora una soluzione ondulatoria, ma la relazione di dispersione muta, risultando simile alla condizione di mass-shell con energia e momento sostituiti in virtù delle formule di de Broglie, segno che il modo non è più né soft né massless:

$$\begin{aligned} \partial_\tau \frac{\partial \mathcal{S}_s^{eff}}{\partial (\partial_\tau \Omega_i)} + \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{S}_s^{eff}}{\partial (\vec{\nabla} \Omega_i)} &= \frac{\partial \mathcal{S}_s^{eff}}{\partial \Omega_i} \Rightarrow 2\partial_\tau (\partial_\tau \Omega_i) + 4(Ja)^2 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \Omega_i) = 2\Omega_i m_s^2 \\ &\Rightarrow \left[-\partial_t^2 + v_s^2 \vec{\nabla}^2 \right] \Omega_i = m_s^2 \Omega_i \Leftrightarrow \omega_{\vec{k}}^2 - v_s^2 \left| \vec{k} \right|^2 = m_s^2, \quad \omega_{\vec{k}} = \sqrt{v_s^2 \left| \vec{k} \right|^2 + m_s^2} \end{aligned} \quad (2.52)$$

La struttura discussa in precedenza è una conferma della bontà dei calcoli eseguiti: in assenza di doping, come discusso ad inizio capitolo, ha un ruolo fondamentale l'ordinamento antiferromagnetico. Questo, nell'hamiltoniana di tipo Heisenberg, è invariante sotto l'azione del gruppo $SO(3)$; poiché il suo stato fondamentale è costituito da spin di modulo unitario collocati tutti nella stessa direzione arbitraria, si nota come solo le rotazioni $SO(2)$ con tale direzione come asse lo lascino invariato. La diversità tra i gruppi di simmetria per l'azione ed il suo minimo generano una rottura spontanea di simmetria che produce un numero di bosoni di Goldstone pari alla differenza tra i generatori dei due gruppi (in questo caso $3 - 1 = 2$). Essi vivono nello spazio quoziente tra i due gruppi, isomorfo ad S^2 nell'esempio proposto (come era d'altronde intuibile visto che le possibili direzioni degli spin unitari sono mappabili su una superficie sferica). Quanto scritto sinora, come visto, non è più applicabile al caso in cui $m_s \neq 0$ poiché si introducono effetti che si ripercuotono a larga scala sul sistema. Tuttavia le precedenti espressioni mostrano che è possibile associare al campo $\vec{\Omega}$ una velocità v_s che risulterà fondamentale nel calcolo del propagatore di tale campo, noto come magnone. Quanto espresso sinora prova in modo chiaro il ruolo dominante della concentrazione di drogaggio per risolvere la fisica del sistema: nel caso in cui esso si annulli si trova dalle considerazioni precedenti un modello antiferromagnetico che ben descrive l'ordinamento a lungo range dei sistemi superconduttori in tali condizioni. Aumentando il doping si va a distruggere tale struttura che dunque viene declassificata come ordinamento a corto range; la sua lunghezza di correlazione ξ_{AF} si dimostra avere l'andamento:

$$\xi_{AF} \sim \frac{1}{m_s} \sim (\delta |\ln \delta|)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.53)$$

Essa porta alla conclusione verificata sperimentalmente di un ordine (dunque una lunghezza di correlazione) crescente al diminuire del drogaggio. Tutto quanto esposto sinora mostra come la quinta approssimazione da applicare alla (2.47) produca risultati corretti; riscrivendo tale formula sotto questa ipotesi utilizzando l'espansione per il campo magnonico in funzione della variabile z si trova:

$$S_s^{eff} \sim \frac{1}{g} \int_0^\beta d\tau d\vec{x} \left[\frac{1}{v_s^2} |(\partial_\tau - z_\beta^* \partial_\tau z_\beta) z_\alpha|^2 + |(\partial_\mu - z_\beta^* \partial_\mu z_\beta) z_\alpha|^2 + m_s^2 z_\alpha^* z_\alpha \right] \quad (2.54)$$

La precedente azione rappresenta un livello sufficiente di approssimazione e contiene ancora tutte le informazioni fisiche necessarie. La si preferisce però riscrivere in una seconda forma, del tutto equivalente alla precedente, introducendo esplicitamente un campo di gauge A per l'interazione holone-spinone:

$$\begin{aligned} S_s^{eff} &\sim \frac{1}{g} \int_0^\beta d\tau d\vec{x} \left[\frac{1}{v_s^2} |(\partial_\tau - iA_\tau) z_\alpha|^2 + |(\partial_\mu - iA_\mu) z_\alpha|^2 + m_s^2 z_\alpha^* z_\alpha \right], \\ iA_\mu(\tau, \vec{x}) &= (-1)^{|\vec{j}|} z_\alpha^* \partial_\mu z_\alpha, \quad (\mu, \alpha) = (1, 2) \end{aligned} \quad (2.55)$$

La scelta di introdurre un nuovo campo A (da non confondere con quello utilizzato nel paragrafo 5) può essere compresa appieno solo dopo aver ottenuto una forma approssimata della parte holonica dell'azione. Per adesso la si può intendere come una maniera pregnante per riassumere tutte le interazioni che non sono di carattere puramente spinonico nella prima parte di azione considerata. Lo sviluppo della seconda ed il procedimento di gauge fixing per il gruppo $U(1)_{h-s}$ rimasto in sospeso dal paragrafo 5, saranno trattati nel prossimo.

2.8 Step 3: formula per l'azione efficace

In questo paragrafo si concluderà quanto esposto nei due precedenti fornendo una formula per l'azione efficace del modello $t - J$. Per determinarla è necessario prima apportare alcune semplificazioni alla parte holonica dell'azione di partenza. Si è deciso di non discutere nel dettaglio, diversamente da quanto fatto nel precedente paragrafo, tale procedimento: il motivo, oltre ad un'intrinseca difficoltà tecnica, risiede nel solo utilizzo delle manipolazioni riguardanti le variabili del settore spinonico per il calcolo dei propagatori e dunque, tramite la formula di Kubo, della suscettività. Di seguito si riporta solamente il risultato per l'azione efficace holonica; da notare sono le somiglianze con la lagrangiana di Dirac per la QED e la scissione in due casi a seconda che si stia descrivendo un superconduttore nella fase di pseudogap (PG) o di strange metal (SM):

$$\begin{aligned} S_h^{eff, PG} &\sim \int_0^\beta d\tau d\vec{x} \sum_{\nu=1}^2 \bar{\Psi}_\nu [\gamma^\tau (\partial_\tau - iA_\tau - \mu) + v_F \gamma^\rho (\partial_\rho - iA_\rho - \mu)] \Psi_\nu, \\ S_h^{eff, SM} &\sim \int_0^\beta d\tau d\vec{x} \sum_{\nu=1}^2 \bar{\Psi}_\nu \left[\partial_\tau - iA_\tau - \varepsilon_F - \frac{1}{2m^*} (\vec{\nabla} - i\vec{A})^2 \right] \Psi_\nu \end{aligned} \quad (2.56)$$

Nella precedente equazione γ^μ sono le matrici di Dirac in dimensione 2×2 , v_F la velocità di Fermi, ε_F la sua energia ed m^* la massa efficace holonica. Dalle precedenti considerazioni si conclude che l'azione approssimata per il sistema complessivo assume la forma:

$$S_{PG;SM}^{eff} = S_s^{eff} + S_h^{eff, PG;SM} \quad (2.57)$$

Tale conclusione è importante e permette di risolvere un problema non banale. Considerando difatti l'espressione di partenza dell'azione presentata nel paragrafo 5, si era notata la presenza delle interazioni tra holoni e spinoni; volendo dunque separare l'azione efficace nella forma assunta sui 2 settori, si dovrebbe considerare la mutua interazione, portando a notevoli difficoltà. Ipotizzando la configurazione holonica come data in partenza, si può pensare che vari quella spinonica per interazione; pertanto si ha una mutazione anche nel settore holonico dell'azione portando ad un cambiamento della sua configurazione. Tale fatto si ripercuoterà sulla parte di spin e così via, dimostrando come sia indissolubilmente legata la dinamica dei settori holonico e spinonico. Pertanto risulta infruttuosa la ricerca di un parametro perturbativo con cui condurre un'analisi diagrammatica del sistema; a fornire una soluzione analitica è pertanto fondamentale il contributo del campo A . Essendo presente in entrambi gli addendi dell'azione efficace, lo si considera non come una interazione, bensì come una mediazione; il suo ruolo risulta fondamentale anche per risolvere l'ultima questione riguardante il gauge fixing di $U(1)_{h-s}$. Come si può dimostrare dalla sua espressione esplicita, l'azione efficace è invariante sotto il gruppo $U(1)$ locale purchè si compiano le trasformazioni seguenti:

$$U(1)_{loc} \Rightarrow \begin{cases} \Psi_\nu(x) \rightarrow e^{i\Lambda(x)} \Psi_\nu(x) \\ z_\alpha(x) \rightarrow e^{i\Lambda(x)} z_\alpha(x) \\ A_{\tau, \mu}(x) \rightarrow A_{\tau, \mu}(x) + \partial_{\tau, \mu} \Lambda(x) \end{cases} \quad (2.58)$$

Quanto asserito era in realtà intuibile vista la natura simile alla lagrangiana di Dirac dell'azione efficace, ricordando che nel caso di accoppiamento minimale con il campo elettromagnetico, questa è invariante sotto trasformazioni $U(1)$ per i campi, inserendo la libertà di gauge per i potenziali elettromagnetici. Difatti l'ultima riga della precedente equazione è l'equivalente di tale prescrizione per il campo A nel tempo immaginario. La formula precedente ha una natura locale poiché dipende dalla coordinata \vec{x} sul reticolo e dunque discretizzando dall'indice di sito j ; poiché come mostrato dalla (2.22) questo vale anche per le fasi presenti nella decomposizione dell'operatore elettronico, e dunque in visuale alla Chern-Simons per il grado di libertà residuo descritto da $U(1)_{h-s}$, si può affermare che quanto scritto sopra indirizza correttamente il problema da risolvere. Difatti per fissare la gauge di $U(1)_{h-s}$ basterà sceglierne una per il campo A , ad esempio:

$$\partial^\mu A_\mu(x) = 0 \quad (2.59)$$

volendo mantenere la coerenza nella scelta della gauge di Coulomb adottata in precedenza. Da quanto appena mostrato si può interpretare A come un campo di gauge $U(1)$ che media le interazioni tra le parti holonica e spinonica dell'azione efficace; in termini pratici rappresenta dunque una variabile assieme all'analogo z dello spinone ed all'holone H su cui eseguire integrazioni funzionali per ottenere il propagatore del campo magnonico necessario al calcolo della suscettività. Prima di mostrarne lo svolgimento, si dedica però il paragrafo successivo, condotto sulla base di [16], alla presentazione della formula di Kubo necessaria per legare le funzioni di risposta a dei propagatori come le funzioni di Green ritardate.

2.9 Formula di Kubo per la suscettività magnetica

In questo paragrafo si deriverà un risultato importante per le funzioni di risposta, noto come formula di Kubo, che ne lega l'espressione al calcolo di particolari forme di propagatori. Lo studio della teoria della risposta lineare riveste un ruolo preminente in virtù delle sue innumerevoli verifiche sperimentali: applicando ad esempio un campo magnetico esterno, è possibile misurare la magnetizzazione indotta e da essa ricavare la suscettività. Sarà poi la formula di Kubo a decretare la bontà o meno del modello che descrive la situazione sperimentale: essa funge da ponte tra quantità osservabili (come la suscettività) e calcoli formali, tramite i propagatori. Venendo al caso in esame si consideri una perturbazione esterna come il campo magnetico \vec{H} , di forma monocromatica, espressa tramite la sua serie di Fourier come:

$$\vec{H} = \vec{h}_{\vec{q}, \omega} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (2.60)$$

Nel seguito si vuole studiare la magnetizzazione $\vec{M}(\vec{R}, t)$ indotta dal campo $\vec{H}(\vec{R}', t')$, la cui espressione definisce la funzione di risposta nota come suscettività $\chi(\vec{R} - \vec{R}', t - t')$, valida nel caso di sistema invariante per traslazioni spazio-temporali:

$$\vec{M}(\vec{R}, t) = \frac{1}{V} \int d^3 \vec{R}' \int_{-\infty}^t dt' \chi(\vec{R} - \vec{R}', t - t') \vec{H}(\vec{R}', t') \quad (2.61)$$

Si noti che la precedente formula è la versione dinamica di quella presentata nel capitolo 1 poiché somma anche i contributi temporali alla risposta sotto l'ipotesi di causalità: poiché l'effetto di magnetizzazione calcolato in t deve sempre seguire la causa che lo ha generato (campo \vec{H} valutato in t') allora è giustificata la condizione $t' < t$ presente come estremi di integrazione temporale. Inserendo la (2.60) nella precedente equazione, si ottiene la forma della magnetizzazione da richiedere al sistema soggetto alla perturbazione proposta di tipo monocromatico:

$$\begin{aligned} M_\alpha(\vec{R}, t) &= \frac{1}{V} \int d^3 \vec{R}' \int_{-\infty}^t dt' \chi_{\alpha\beta}(\vec{R} - \vec{R}', t - t') h_{\vec{q}, \omega}^\beta e^{i(\vec{q} \cdot \vec{R}' - \omega t')} \rightarrow \vec{R} - \vec{R}' = \vec{x}, t - t' = s \Rightarrow \\ M_\alpha(\vec{R}, t) &= \frac{1}{V} \int d^3 \vec{x} \int_0^{+\infty} ds \left\{ \chi_{\alpha\beta}(\vec{x}, s) h_{\vec{q}, \omega}^\beta e^{i[\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{x}) - \omega(t-s)]} \right\} = e^{i(\vec{q} \cdot \vec{R} - \omega t)} \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) h_{\vec{q}, \omega}^\beta \end{aligned} \quad (2.62)$$

ove nell'ultimo passaggio si è sfruttata la definizione di trasformata di Fourier spatio-temporale per una funzione di risposta causale, dunque con supporto limitato dalle considerazioni precedenti. La formula presentata permetterà di ricavare il risultato voluto per $\chi_{\alpha\beta}$, una volta valutato il primo membro in termini statistici: per proseguire è dunque necessario calcolare la magnetizzazione come valor medio del momento magnetico $m_\alpha(\vec{R}, t)$. In realtà calcolando la media del singolo momento magnetico ad una fissata posizione, si possono riscontrare ancora fluttuazioni nella funzione di risposta; per eliminarle basta integrare sul volume ambo i membri della precedente equazione, dopo un opportuno riarrangiamento:

$$\begin{aligned} M_\alpha(\vec{R}, t) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} &\equiv \langle m_\alpha(\vec{R}, t) \rangle e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} = e^{-i\omega t} \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) h_{\vec{q}, \omega}^\beta \Rightarrow \\ \langle m_\alpha(\vec{q}, t) \rangle &= \frac{1}{V} \int d^3 \vec{R} \langle m_\alpha(\vec{R}, t) \rangle e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} = \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) h_{\vec{q}, \omega}^\beta e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (2.63)$$

Si cominci pertanto con il determinare tale valore di aspettazione ipotizzando di lavorare in un ensemble gran canonico:

$$\langle m_\alpha \rangle = Tr[\rho(t) m_\alpha], \quad \frac{d\rho(t)}{dt} = -i[H + H'(t), \rho(t)] \quad (2.64)$$

Essendo al solito interessati ad una analisi al primo ordine, si può utilizzare un andamento lineare per la matrice densità come ipotesi risolutiva; inserendolo nella sua equazione del moto si trova il risultato seguente:

$$\rho(t) = \rho_0 + f(t) \Rightarrow i \frac{df}{dt} = [H, \rho_0] + [H, f] + [H', \rho_0] + [H', f], \quad [H, \rho_0] = 0 \quad (2.65)$$

ove $\rho_0 = e^{\beta(\Omega - H + \mu N)}$. E' necessario però rispettare coerentemente l'ipotesi lineare; essendo in tale regime f funzione di H' , si conclude che l'ultimo commutatore nella formula precedente svanisce, ottenendo:

$$e^{-itH} \left[i \frac{df}{dt} = [H, f] + [H', \rho_0] \Rightarrow i \frac{df}{dt} - [H, f] = [H', \rho_0] \right. \quad (2.66)$$

La soluzione di tale equazione passa attraverso un'opportuna riscrittura del primo membro, notando che la sua struttura è desumibile dalla derivata temporale di un operatore in visuale di interazione. Con tale accorgimento è dunque possibile ottenere una soluzione formale per la formula precedente:

$$\begin{aligned} e^{-itH} \left[i \frac{d}{dt} (e^{itH} f e^{-itH}) \right] e^{itH} &= i \frac{df}{dt} - [H, f] = [H', \rho_0] \Rightarrow i \frac{d}{dt} (e^{itH} f e^{-itH}) = \\ e^{itH} [H', \rho_0] e^{-itH} &= [H'(t), \rho_0] \Rightarrow f(t) = f(-\infty) - ie^{-itH} \left\{ \int_{-\infty}^t dt' [H'(t'), \rho_0] \right\} e^{itH} \end{aligned} \quad (2.67)$$

La condizione iniziale della precedente equazione è però nulla, in quanto a $t = -\infty$, non essendo presente alcuna correzione H' , la matrice densità non necessita di alcun termine $f(-\infty)$. Pertanto la soluzione risulta proporzionale ad H' : tale comportamento è sensato ricordando di lavorare nelle ipotesi della risposta lineare. Con tale conclusione si può dunque calcolare il valore di aspettazione del momento magnetico, ottenendo:

$$\langle m_\alpha \rangle = Tr [\rho_0 m_\alpha] + Tr [f(t) m_\alpha], \quad Tr [\rho_0 m_\alpha] = 0 \quad (2.68)$$

L'ultima condizione ricorda l'assenza in media di momenti magnetici netti nel sistema imperturbato. Dalle conclusioni delle due precedenti si ricava la forma finale di quanto cercato:

$$\begin{aligned} \langle m_\alpha(\vec{r}, t) \rangle &= -i Tr \left\{ e^{-itH} \left[\int_{-\infty}^t dt' [H'(t'), \rho_0] \right] e^{itH} m_\alpha(\vec{r}) \right\} = \\ &= -i Tr \left\{ \int_{-\infty}^t dt' [H'(t'), \rho_0] e^{itH} m_\alpha(\vec{r}) e^{-itH} \right\} = -i Tr \left\{ \int_{-\infty}^t dt' [H'(t'), \rho_0] m_\alpha(\vec{r}, t) \right\} \end{aligned} \quad (2.69)$$

ove si sono utilizzate la ciclicità della traccia e la definizione di operatore in visuale di interazione. Per ottenere il risultato voluto basta adoperare la linearità della traccia, espandere il commutatore e sfruttare nuovamente la ciclicità:

$$\begin{aligned} Tr \{ [H'(t'), \rho_0] m_\alpha(\vec{r}, t) \} &= Tr [H'(t') \rho_0 m_\alpha(\vec{r}, t) - \rho_0 H'(t') m_\alpha(\vec{r}, t)] = \\ Tr \{ \rho_0 [m_\alpha(\vec{r}, t) H'(t') - H'(t') m_\alpha(\vec{r}, t)] \} &= Tr \{ \rho_0 [m_\alpha(\vec{r}, t), H'(t')] \} \\ \Rightarrow \langle m_\alpha(\vec{r}, t) \rangle &= -i \int_{-\infty}^t dt' \langle [m_\alpha(\vec{r}, t), H'(t')] \rangle \end{aligned} \quad (2.70)$$

E' importante notare come nella precedente equazione sia contenuto il valor medio rispetto al sistema imperturbato di un commutatore tra operatori in visuale di interazione, espresso ivi dalle parentesi angolate. Ciò non costituisce ancora propriamente la conclusione, in quanto è necessario inserire la forma di tipo Zeeman della perturbazione e ricavare dopo tale passaggio la suscettività applicando le formule (2.62) e (2.63). Ricordando anzitutto la forma monocromatica del campo esterno, per l'hamiltoniana H' si trova:

$$\begin{aligned} H'(t) &= \frac{1}{V} \int d^3 \vec{R} \left[-\vec{m}(\vec{R}, t) \cdot \vec{H}(\vec{R}, t) \right] = -\frac{\vec{h}_{\vec{q}, \omega}}{V} \\ \int d^3 \vec{R} \vec{m}(\vec{R}, t) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} &= -\vec{h}_{\vec{q}, \omega} \cdot \vec{m}(-\vec{q}, t) e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (2.71)$$

ove nell'ultimo passaggio si è sfruttata la definizione di trasformata di Fourier spaziale. Inserendo quanto ottenuto nella formula precedente si arriva dunque a:

$$\begin{aligned} \langle m_\alpha(\vec{r}, t) \rangle &= i \int_{-\infty}^t dt' h_{\vec{q}, \omega}^\beta e^{-i\omega t'} \langle [m_\alpha(\vec{r}, t), m_\beta(-\vec{q}, t')] \rangle \\ &= h_{\vec{q}, \omega}^\beta e^{-i\omega t} i \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle [m_\alpha(\vec{r}, t), m_\beta(-\vec{q}, t')] \rangle \end{aligned} \quad (2.72)$$

Calcolando ora la trasformata di Fourier della precedente equazione, in base alla (2.63) si potrà isolare nella sua espressione la forma della funzione di risposta cercata:

$$\begin{aligned}
\langle m_\alpha(\vec{q}, t) \rangle &= h_{\vec{q}, \omega}^\beta e^{-i\omega t} i \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle [m_\alpha(\vec{q}, t), m_\beta(-\vec{q}, t')] \rangle \Rightarrow \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) \\
&= i \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle [m_\alpha(\vec{q}, t), m_\beta(-\vec{q}, t')] \rangle = i \int_{-\infty}^t dt' \left\{ e^{i\omega(t-t')} \right. \\
&\left. \langle [m_\alpha(\vec{q}, t-t'), m_\beta(-\vec{q}, 0)] \rangle \right\} = i \int_0^{+\infty} ds e^{i\omega s} \langle [m_\alpha(\vec{q}, s), m_\beta(-\vec{q}, 0)] \rangle
\end{aligned} \tag{2.73}$$

Nella formula precedente si è sfruttata la stazionarietà per cambiare gli argomenti temporali nel calcolo del valor medio; ciò ha permesso di evidenziare come la suscettività sia proporzionale alla trasformata di Fourier temporale di un importante propagatore, noto come funzione di Green ritardata $D_{\alpha\beta}$. Per calcolare la relazione esatta tra le due si ricorre alla definizione seguente:

$$\begin{aligned}
D_{\alpha\beta}(\vec{q}, t-t') &= -i\theta(t-t') \langle [m_\alpha(\vec{q}, t), m_\beta(-\vec{q}, t')] \rangle = -i\theta(t-t') \cdot \\
\langle [m_\alpha(\vec{q}, t-t'), m_\beta(-\vec{q}, 0)] \rangle &\Rightarrow D_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') e^{i\omega(t-t')} D_{\alpha\beta}(\vec{q}, t-t') \\
&= -i \int_0^{+\infty} ds e^{i\omega s} \langle [m_\alpha(\vec{q}, s), m_\beta(-\vec{q}, 0)] \rangle = -\chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega)
\end{aligned} \tag{2.74}$$

ove nell'ultimo passaggio si è usata la precedente equazione. Tale risultato, noto come formula di Kubo per la suscettività magnetica, offre una conclusione interessante: essendo la suscettività una funzione di risposta causale, come noto ha un supporto limitato dalle condizioni dei suoi argomenti temporali. Qualora la si volesse legare tramite un coefficiente di proporzionalità ad un'altra funzione, è necessario che quest'ultima abbia le medesime proprietà della precedente; volendo sceglierla tra i propagatori quali le funzioni di Green avanzata, causale o ritardata, si osserva che solo l'ultima possiede le caratteristiche richieste. La conclusione precedente sposta dunque l'interesse dal mondo macroscopico delle funzioni di risposta a quello formale descritto dal modello del sistema; poiché nel formalismo $t-J$ si descrive il grado di libertà di spin, è dunque necessario modificare la precedente equazione riesprimendo il momento magnetico in funzione dello spin. Tale riscaldamento produce:

$$\chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = -(g\mu_B)^2 D_{\alpha\beta}^{spin}(\vec{q}, \omega) \tag{2.75}$$

ove g è il fattore di forma elettronico e μ_B il magnetone di Bohr. Per evitare complicanze tecniche si decide di sviluppare i calcoli dei prossimi paragrafi per la funzione di risposta nel caso $T = 0$ (condotti seguendo lo schema di [25]); ciò difatti consente, come è possibile dimostrare, di legare la funzione di Green ritardata a quella causale nello spazio di Fourier $G_{\alpha\beta}^c(\vec{q}, \omega)$ ottenendo:

$$D_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = \text{Re}G_{\alpha\beta}^c(\vec{q}, \omega) + i \text{sgn}(\omega) \text{Im}G_{\alpha\beta}^c(\vec{q}, \omega) \tag{2.76}$$

Da tale condizione emerge come il prossimo obiettivo risieda nel calcolo del propagatore per il campo magnonico, presentato nel paragrafo successivo; solo con tale risultato difatti si potrà ottenere l'espressione della trasformata di Fourier della suscettività, da confrontare con le conclusioni sperimentali sul tempo di rilassamento nucleare, come fatto a fine capitolo.

2.10 Verso la suscettività magnetica: il propagatore magnonico

In questo paragrafo si presenta il calcolo del propagatore magnonico, privilegiando come del resto fatto in precedenza le linee guida rispetto ad una trattazione tecnica. La prima caratteristica da esaminare, come suggerito nel paragrafo precedente, è l'implicazione che ha nel calcolo la scelta di $T = 0$: al fine di ottenere dei risultati analitici, si è deciso di considerare la temperatura come variabile solamente nei parametri dell'azione del modello $t-J$, assegnandole invece il valore costante nullo quando essa appare come estremo superiore di integrazione per ricavare la funzione di partizione nel formalismo del path integral. Tale procedura consente dunque di abbandonare la tecnica del tempo immaginario introdotta da Matsubara, permettendo così di lavorare con sole coordinate spazio-temporali reali. Per convenienza dunque si può adottare per esse la metrica di Minkowski, nella quale la norma del trivettore è definita come:

$$x \cdot x = -t^2 + \vec{x}^2 \tag{2.77}$$

Si noti come la scelta descritta in precedenza possa essere intuitivamente giustificata come segue: mentre nei singoli termini che compaiono nell'azione, è importante avere un profilo in temperatura, quando essa svolge il ruolo di estremo di integrazione, il sistema è considerato globalmente e dunque il suo valore deve essere confrontato con una scala naturale di temperatura per esso. Come si dimostrerà nel seguito, per i livelli di doping ammessi dal paradigma utilizzato, questa risulta di molto superiore ai valori comunemente raggiungibili nelle verifiche sperimentali, cosicché dal punto di vista del sistema, si troveranno risultati plausibili anche approssimando a 0 la temperatura che compare nell'integrazione funzionale. Il punto di partenza per il calcolo richiesto è l'espressione del campo spinonico di cui desumere il propagatore, utilizzando le conclusioni del paragrafo 7:

$$\vec{S}(\vec{x}, t) \sim \frac{1}{2} (1 - H^*H) e^{i\vec{x} \cdot \vec{Q}_{AF}} \vec{\Omega}(\vec{x}, t) \sim \frac{1}{2} (1 - \delta) e^{i\vec{x} \cdot \vec{Q}_{AF}} [z_\alpha^*(\vec{x}, t) \vec{\sigma}_{\alpha\beta} z_\beta(\vec{x}, t)] \quad (2.78)$$

In essa si è utilizzata la statistica fermionica del campo H , ed espanso il magnone $\vec{\Omega}$ in termini di z . Oltre ad aver adottato un'approssimazione di campo medio per valutare il prodotto H^*H , giustificata in base alla nota separazione tra le scale di energia coulombiana e di Zeeman, si nota nella formula precedente la presenza di un fattore esponenziale: ciò è necessario per rendere nelle variabili del modello $t - J$ la bipartizione degli spin fisici in due sottoreticoli di Neel. La funzione di Green richiede, a meno di fattori di proporzionalità di cui ci si occuperà più avanti, la determinazione del propagatore seguente:

$$\langle \Omega_\alpha \Omega_\beta \rangle_T \sim \langle \Omega_\alpha \Omega_\beta \rangle_{A^{stat}} \quad (2.79)$$

In maniera complementare a quanto discusso in precedenza, l'assunzione di lavorare a $T = 0$ può essere giustificata anche in base al ruolo di A come valido rappresentante delle forti correlazioni tra i settori holonico e spinonico. Quanto esposto può essere inteso nel seguente modo: la scelta del valore di temperatura sembra un'approssimazione drastica per le connessioni descritte dal modello $t - J$; una prima importante correzione è considerare una media sul campo statistico A , introdotto nel paragrafo 8, che come noto descrive le interazioni come mediazione tra spinoni ed holoni. Un'analisi più appropriata per il sistema in questione può essere condotta ricordando la presenza della scala di energia Jm_s (in unità internazionali) per la parte spinonica: da essa si può ricavare un valore di temperatura con il quale ragionare sulle fluttuazioni di spin. Tale risultato non riproduce solamente l'ordine di energia Jm_s , in quanto si sta lavorando su un reticolo con passo a e dunque bisogna considerarne le variazioni qualora esso venga sottoposto a riscaldamento. Per farlo basta ricordare che le lunghezze caratteristiche (come quella di correlazione) a causa della variazione della scala di riferimento vengono moltiplicate per un fattore $\frac{1}{a}$; poiché l'energia, e dunque la temperatura, si comporta come l'inverso di una lunghezza, ne segue che per definire una temperatura caratteristica \tilde{T} del sistema è necessario porre:

$$k_B \tilde{T} = J a m_s \quad (2.80)$$

A prima vista si sarebbe portati a concludere che per $T < \tilde{T}$ le fluttuazioni nel settore spinonico siano trascurabili, in quanto esse diventano dominanti solo quando la scala di temperatura lo permette. Tale ragionamento è però valido solo per un sistema isolato; dunque esso va modificato nel caso del modello $t - J$ tenendo conto delle interazioni con il settore holonico. Come noto esso è massless e dunque ammette fluttuazioni per qualsiasi valore di T ; esse poi si trasmettono anche alla parte spinonica grazie alla mediazione del campo statistico A che dunque recupera il contributo termico rendendo evidenti i suoi effetti sugli holoni massless, trasmessi per interazione agli spinoni anche per $T < \tilde{T}$. Quanto esposto vale per entrambe le fasi di pseudogap e strange metal analizzate nel paragrafo 8, essendo ubiqua la natura massless degli holoni; in pratica la temperatura citata nella formula precedente assume i seguenti valori:

$$a = 1, J = 0.1 \text{ eV}, \delta = 0.04 \div 0.24 \Rightarrow k_B T \leq k_B \tilde{T} \rightarrow \begin{cases} k_B T \leq 0.04 \text{ eV} \div 0.06 \text{ eV} \\ T \leq 420 \text{ K} \div 680 \text{ K} \end{cases} \quad (2.81)$$

ove si sono utilizzati i comuni valori sperimentali di J e del drogaggio. Chiarita la necessità di mediare sul campo statistico, è però tecnicamente complicato il suo svolgimento, che utilizza la rappresentazione di Fradkin-Schwinger-Feynman del propagatore. Il primo passo è evidenziare le quantità da mediare, come fatto nella (2.78), rimandando alla fine del calcolo l'inserimento dei coefficienti di proporzionalità:

$$\langle \Omega_\alpha \Omega_\beta \rangle_{T, S^{eff}} \sim \langle \Omega_\alpha \Omega_\beta \rangle_{S^{eff}, A^{stat}} = \sigma_{\mu\nu}^\alpha \sigma_{\rho\eta}^\beta \langle z_\mu^*(x) z_\nu(x) z_\rho^*(y) z_\eta(y) \rangle_{S^{eff}, A^{stat}} \quad (2.82)$$

Nella precedente equazione si deve dunque integrare su S^{eff} poiché è prescritto dal procedimento di media con il path integral, e su A^{stat} per recuperare il contributo termico come visto in precedenza. Il primo calcolo può essere

espletato sfruttando il teorema di Wick sull'integrazione gaussiana. Poiché alla fine si dovrà calcolare una traccia del propagatore magnonico, bisogna valutare:

$$\sum_{\alpha} \langle \Omega_{\alpha} \Omega_{\alpha} \rangle_{S^{eff}, A^{stat}} = \left(\sum_{\alpha} \sigma_{\mu\nu}^{\alpha} \sigma_{\rho\eta}^{\alpha} \right) \langle z_{\mu}^{*}(x) z_{\nu}(x) z_{\rho}^{*}(y) z_{\eta}(y) \rangle_{S^{eff}, A^{stat}}, \quad (2.83)$$

$$\sum_{\alpha} \sigma_{\mu\nu}^{\alpha} \sigma_{\rho\eta}^{\alpha} = 2\delta_{\mu\eta} \delta_{\nu\rho} - \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\eta}$$

ove l'ultima scrittura segue dalla relazione di completezza delle matrici di Pauli. Per calcolare la quantità tra parentesi angolari si utilizza la tecnica dei campi sorgenti ed i risultati sugli integrali gaussiani complessi multivariati noti dai testi di materia condensata (come ad esempio [28]). Di seguito se ne mostra lo svolgimento nel quale per calcolare la derivata si sostituisce l'esponenziale alla sua serie, identificando tutti i possibili termini dopo la derivazione:

$$\langle z_{\mu}^{*}(x) z_{\nu}(x) z_{\rho}^{*}(y) z_{\eta}(y) \rangle_{S^{eff}} = \frac{\partial}{\partial J_{\mu}} \frac{\partial}{\partial J_{\nu}^{*}} \frac{\partial}{\partial J_{\rho}} \frac{\partial}{\partial J_{\eta}^{*}} \langle e^{J_i^{*} z_i + J_i z_i^{*}} \rangle_{S^{eff}} \Big|_{J_i = J_i^{*} = 0} = \frac{\partial}{\partial J_{\mu}} \frac{\partial}{\partial J_{\nu}^{*}} \frac{\partial}{\partial J_{\rho}} \frac{\partial}{\partial J_{\eta}^{*}}$$

$$\left(e^{J_i^{*} M_{ij}^{-1} J_j} \right) \Big|_{J_i = J_i^{*} = 0} = \frac{\partial}{\partial J_{\mu}} \frac{\partial}{\partial J_{\nu}^{*}} \frac{\partial}{\partial J_{\rho}} \frac{\partial}{\partial J_{\eta}^{*}} \left[1 + J_i^{*} M_{ij}^{-1} J_j + \frac{1}{2} (J_i^{*} J_j J_k^{*} J_l M_{ij}^{-1} M_{kl}^{-1}) + \dots \right] \Big|_{J_i = J_i^{*} = 0} = \quad (2.84)$$

$$\frac{1}{2} (M_{\nu\mu}^{-1} M_{\eta\rho}^{-1} + M_{\nu\rho}^{-1} M_{\eta\mu}^{-1} + M_{\eta\mu}^{-1} M_{\nu\rho}^{-1} + M_{\eta\rho}^{-1} M_{\nu\mu}^{-1}) = M_{\nu\mu}^{-1} M_{\eta\rho}^{-1} + M_{\nu\rho}^{-1} M_{\eta\mu}^{-1} =$$

$$\langle z_{\nu}(x) z_{\mu}^{*}(x) \rangle_{S^{eff}} \langle z_{\eta}(y) z_{\rho}^{*}(y) \rangle_{S^{eff}} + \langle z_{\nu}(x) z_{\rho}^{*}(y) \rangle_{S^{eff}} \langle z_{\eta}(y) z_{\mu}^{*}(x) \rangle_{S^{eff}}$$

ove ad ultimo passaggio si è ricordata la forma del valor medio di zz^{*} ottenendo una conclusione nota come teorema di Wick. Il primo addendo del risultato precedente contiene valori medi del prodotto di campi spinonici valutati alla stessa coordinata; come è possibile dimostrare, ciò equivale a calcolare il valore di aspettazione di un singolo spin fisico, che è nullo poiché soddisfa ad un ordinamento antiferromagnetico bipartito su due sottoreticoli di Neel. Con tale semplificazione dalle due precedenti si trova:

$$\sum_{\alpha} \langle \Omega_{\alpha} \Omega_{\alpha} \rangle_{S^{eff}} = (2\delta_{\mu\eta} \delta_{\nu\rho} - \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\eta}) M_{\nu\rho}^{-1} (M_{\mu\eta}^{-1})^{*} = 2M_{\nu\nu}^{-1} (M_{\mu\mu}^{-1})^{*} - M_{\nu\eta}^{-1} (M_{\nu\eta}^{-1})^{*},$$

$$M_{\alpha\beta}^{-1} = \langle z_{\alpha}(x) z_{\beta}^{*}(y) \rangle_{S^{eff}} \Rightarrow \langle z(x) z^{*}(y) \rangle_{S^{eff}} = \frac{1}{2} Tr(M^{-1}) = \frac{1}{2} M_{\mu\mu}^{-1}, M_{\alpha\beta}^{-1} = \quad (2.85)$$

$$\frac{\delta_{\alpha\beta}}{2} Tr(M^{-1}) \Rightarrow \sum_{\alpha} \langle \Omega_{\alpha} \Omega_{\alpha} \rangle_{S^{eff}} = 2(2\langle z(x) z^{*}(y) \rangle_{S^{eff}}) (2\langle z(x) z^{*}(y) \rangle_{S^{eff}})^{*}$$

$$- 2\langle z(x) z^{*}(y) \rangle_{S^{eff}} (\langle z(x) z^{*}(y) \rangle_{S^{eff}})^{*} = 6|\langle z(x) z^{*}(y) \rangle_{S^{eff}}|^2$$

In essa si è utilizzata l'hermiticità della matrice M e si è ipotizzata una sua forma diagonale 2×2 in quanto i suoi elementi si riferiscono ai valori medi di $z_{\alpha}(x) z_{\beta}^{*}(y)$ per un sistema bidimensionale considerato isotropo. Dalla precedente equazione risulta dunque necessario calcolare tali valori medi rispetto all'azione efficace, ed in un secondo momento integrare anche nel campo statistico:

$$\sum_{\alpha} \langle \Omega_{\alpha} \Omega_{\alpha} \rangle_{T, S^{eff}} = 6\langle |\langle z(x) z^{*}(y) \rangle_{S^{eff}}|^2 \rangle_{A^{stat}} := 6\langle G(x, y|A) G^{\dagger}(x, y|A) \rangle_{A^{stat}} \quad (2.86)$$

ove si è definita una funzione G da ottenere tramite la rappresentazione di Schwinger. Essa la paragona ad un elemento di matrice di un opportuno operatore $\mathcal{G}[A]$, calcolabile in modo da dare consistenza al procedimento adottato. Privilegiando come nei paragrafi precedenti la descrizione alla trattazione tecnica, si presentano di seguito i punti salienti del problema:

$$G(x, y|A) = \langle x|\mathcal{G}[A]|y\rangle, \mathcal{A}|x\rangle = A^{stat}(x) \Rightarrow \frac{1}{gv_s} (m_s^2 1 + \Delta_A) \mathcal{G}[A] = 1, \Delta_A|x\rangle = (\partial_{\mu} - A_{\mu})^{\dagger} (\partial^{\mu} - A^{\mu})(x)|x\rangle,$$

$$\mu = (0, 1, 2|0 \leftrightarrow t), x = (v_s t, \vec{x}), A = (v_s A_0, \vec{A}) \Rightarrow \mathcal{G}[A] = igv_s \int_0^{\infty} ds e^{-is(m_s^2 + \Delta_A)} \quad (2.87)$$

Tale calcolo è proseguibile adottando due accorgimenti: in primo luogo si inserisce nella formula precedente un'integrazione rispetto ad una trivelocità ϕ^{μ} , che sarà operata solo come ultimo step del conteggio tramite una

approssimazione iconale. Adottando tale scelta la funzione G introdotta in precedenza risulta ora pari a:

$$G(x, y|A) = igv_s \int_0^\infty ds e^{-ism_s^2} \iiint \mathcal{D}\phi_0 \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{ip_\mu \left[\int_0^s dt \phi^\mu(t) - x^\mu \right] + i \int_0^s dt \left\{ \frac{1}{4} \phi^2(t) + \phi_\mu(t) A^\mu \left[x^\nu + \int_0^t \phi^\nu(t') dt' \right] \right\}} \quad (2.88)$$

In secondo luogo si approssima la dipendenza di G dal campo statistico A in modo simile a quanto si fa in QED con la rappresentazione di Schwinger del propagatore causale, in quanto come mostrato alla fine del paragrafo 8 il comportamento del campo di gauge è simile a quello elettromagnetico. Con ciò si può scrivere:

$$G(x, 0|A_\mu) \simeq e^{i \int_0^x A_\mu(y) dy^\mu} G(x, 0|F), \quad F_{\mu\nu} = \partial_{[\mu} A_{\nu]} \quad (2.89)$$

Mettendo insieme le due precedenti si arriva dunque al primo step del calcolo, riguardante la sola integrazione rispetto all'azione efficace:

$$G(x, y|A) = igv_s \int_0^\infty ds e^{-ism_s^2} \iiint \mathcal{D}\phi_0 \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-ip_\mu x^\mu - i(p^2 + m_s^2)} e^{\frac{i}{4} \int_0^s dt \phi^2(t)} e^{-i \int_0^1 d\lambda \lambda \int_0^s ds' \int_0^{s'} ds'' [\phi^\mu(s') - 2p^\mu] [\phi^\nu(s'') - 2p^\nu] F_{\mu\nu} \left\{ \lambda \int_0^{s'} [\phi^\sigma(s''') - 2p^\sigma] ds''' \right\}} \quad (2.90)$$

La seconda parte, concernente l'integrazione nel campo statistico A , risulta più complicata, in virtù delle diverse approssimazioni da compiere. In primo luogo è necessario trovare un'azione che lo descriva e la scelta ricade sulla seguente:

$$e^{-S_{eff}(A)} = \int \mathcal{D}z \mathcal{D}z^* \mathcal{D}h \mathcal{D}h^* e^{-S_{eff}(z, h, A)} \quad (2.91)$$

Essa, oltre ad avere la proprietà di essere gaussiana, segue naturalmente quando si calcola il valor medio di una funzione $F(h, z)$ dipendente dai campi holonici e spinonici con il sistema descritto dall'azione complessiva del modello $t - J$. Il calcolo, presentato di seguito, parte dal consueto formalismo path integral, introducendo la definizione di azione efficace; raggruppando le integrazioni funzionali nei campi z ed h , ricordando i due contributi all'azione effettiva, si arriva ad una sola media su A nell'ipotesi che la funzione F sia fattorizzabile nelle due variabili:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}A \mathcal{D}z \mathcal{D}h e^{-S(A, z, h)} F(h, z)}{\int \mathcal{D}A \mathcal{D}z \mathcal{D}h e^{-S(A, z, h)}}, \quad e^{-S_{eff}(A)} = \int \mathcal{D}z \mathcal{D}h e^{-S(A, z, h)} \Rightarrow \langle F \rangle = \\ &= \frac{1}{\int \mathcal{D}A e^{-S_{eff}(A)}} \int \mathcal{D}A \mathcal{D}z \mathcal{D}h \left[\int \mathcal{D}z \mathcal{D}h e^{-S(A, z, h)} \right] \left[\frac{e^{-S(A, z, h)} F(h, z)}{\int \mathcal{D}z \mathcal{D}h e^{-S(A, z, h)}} \right] = \frac{1}{\int \mathcal{D}A e^{-S_{eff}(A)}} \cdot \\ &= \int \mathcal{D}A e^{-S_{eff}(A)} \left[\frac{\int \mathcal{D}z \mathcal{D}h e^{-S(A, z, h)} F(h, z)}{\int \mathcal{D}z \mathcal{D}h e^{-S(A, z, h)}} \right], \quad S(A, z, h) = S(A, h) + S(A, z), \quad (2.92) \\ F(h, z) &= F_1(h) F_2(z), \quad F_1^h(A) := \frac{\int \mathcal{D}h F_1(h) e^{-S(A, h)}}{\int \mathcal{D}h e^{-S(A, h)}}, \quad F_2^z(A) := \frac{\int \mathcal{D}z F_2(z) e^{-S(A, z)}}{\int \mathcal{D}z e^{-S(A, z)}} \Rightarrow \\ \langle F \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}A e^{-S_{eff}(A)} F_2^z(A) F_1^h(A)}{\int \mathcal{D}A e^{-S_{eff}(A)}} \equiv \langle F_2^z(A) F_1^h(A) \rangle_A \end{aligned}$$

Quanto riportato inoltre si adatta al caso in esame del propagatore magnonico: difatti anche $\vec{\Omega}$ si scrive come prodotto di una parte holonica per una spinonica, ma nell'approssimazione di campo medio adottata ad inizio paragrafo, emerge solo quest'ultima, avendo espresso la prima tramite la concentrazione di drogaggio. Da tali considerazioni, risulta dunque necessario per proseguire, scrivere esplicitamente l'azione efficace di A ; al solito la scelta è giustificata in letteratura, ma sembra plausibile in quanto ricorda l'azione elettromagnetica espressa in funzione dell'inverso del propagatore di tale campo, che come noto ha una struttura simile a quello di gauge A :

$$S_{eff}(A) \simeq \frac{1}{2} \int d\omega d\vec{q} A_\mu(\omega, \vec{q}) \Pi_{\mu\nu}(\omega, \vec{q}) A_\nu(\omega, \vec{q}), \quad \begin{cases} \Pi_{\mu\nu} = (\Pi_{00}, \Pi_{ij}) \\ \Pi_{00}^{-1} = \langle A_0 A_0 \rangle = \frac{\omega^2}{q^2} \left(\Pi_s^\parallel + \Pi_h^\parallel \right)^{-1} \\ \Pi_{ij}^{-1} = \langle A_i A_j \rangle = \left(\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q^2} \right) \left(\Pi_s^\perp + \Pi_h^\perp \right)^{-1} \\ \Pi_{s,h}^{\mu\nu}(\omega, \vec{q}) = \langle j_{s,h}^\mu j_{s,h}^\nu \rangle \end{cases} \quad (2.93)$$

Similmente alla teoria elettromagnetica, si dimostra che nella precedente equazione domina il settore massless (holonico) ed in esso la componente trasversale del propagatore. Nelle ipotesi già incontrate di scaling limit (energie e momenti trascurabili) si ottiene un'espressione utile di tale quantità che, in base alla formula precedente, è parte della funzione di correlazione per la densità di corrente holonica:

$$\Pi_h^\perp \sim \kappa \left| \frac{\omega}{q} \right| + \chi_h q^2, (\vec{q}, \omega) \rightarrow (\vec{0}, 0) \quad (2.94)$$

Essa ha una struttura interessante: in primo luogo la parte in q^2 ricorda il nucleo dell'azione gaussiana del campo elettromagnetico; in secondo luogo si nota la presenza di quantità fisiche che regolano l'ampiezza dei due addendi, quali lo smorzamento di Landau κ e la suscettività diamagnetica χ_h ; in terzo luogo nelle ipotesi presentate qui sopra si può provare che la precedente espressione diverge per $(\vec{q}, \omega) \rightarrow (\vec{0}, 0)$, assumendo una singolarità di Reizer. Per questo motivo l'azione efficace (2.93) può essere riscritta conservando solamente i termini dominanti:

$$S_{eff}(A) \simeq \frac{1}{2} \int d\omega d\vec{q} A_i(\omega, \vec{q}) \Pi_{ij}(\omega, \vec{q}) A_j(\omega, \vec{q}), (i, j) = (1, 2) \quad (2.95)$$

L'introduzione dei parametri fisici nella (2.94) è un fatto significativo: fino ad ora le osservazioni non si erano mai basate sulla particolare fase del sistema superconduttore, come chiarito esplicitamente quando si è presentata la derivazione della temperatura \tilde{T} . Ora però le quantità precedenti descrivono la fisica del sistema ed è dunque naturale aspettarsi che assumano forme diverse a seconda della fase considerata. In funzione dei parametri del modello $t - J$ si dimostra che per esse vale:

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_h^{PG} \sim \frac{t}{6\pi\delta} \\ \kappa^{PG} \sim \delta \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} \chi_h^{SM} \sim \frac{t}{6\pi(1+\delta)} \\ \kappa^{SM} \sim (1+\delta) \end{array} \right\} \quad (2.96)$$

Da questo punto in poi ci si attenderanno dunque risultati finali dipendenti dalla fase, come verrà esplicitamente chiarito nella presentazione delle trasformate di Fourier del propagatore magnonico. Oltre alla modificazione dell'azione efficace di A ed alla comparsa di quantità fisiche caratteristiche della fase, è necessario ora esaminare le conseguenze dell'ultima proprietà per la parte trasversale della funzione di correlazione delle correnti holoniche, ovvero la singolarità alla Reizer. Similmente alle precedenti, anch'essa si traduce in una marcatura fisica evidente, che ora riguarda la comparsa di una parte immaginaria nella massa efficace del settore spinonico, funzione del cosiddetto momento caratteristico (o di Reizer) Q_T a temperatura T :

$$\left\{ \begin{array}{l} PG : m_s \rightarrow \left(m_s^2 - 3.3i \frac{T}{\chi} \right)^{\frac{1}{2}} \\ SM : m_s \rightarrow m_s - 0.1i \frac{TQ_T}{m_s^2 \chi} \end{array} \right\}, Q_T = \left(\frac{T}{\kappa \chi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.97)$$

Tale effetto è peculiare e mostra l'impossibilità di tracciare una linea univoca nelle relazioni tra holoni e spinoni: se difatti esse avevano portato inizialmente in modo collaborativo alla definizione della scala di energia m_s del settore spinonico, ora in maniera antagonista generano una parte immaginaria dissipativa che diminuisce tale energia. Esaminate tali conseguenze, si può riprendere il calcolo con la determinazione del valor medio rispetto al campo statistico A della quantità GG^* ; rimandando ai testi in bibliografia per i dettagli tecnici, si perviene a:

$$\begin{aligned} \langle GG^* \rangle_A &\simeq (gv_s)^2 \left[\int_0^\infty ds \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{-ip_\mu x^\mu - ip^2 + m_s^2} \iiint \mathcal{D}\phi_0 \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 e^{\frac{i}{4} \int_0^s dt \phi^2(t)} e^{-\frac{i}{2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} B_i(q) \langle \Pi_{ij}^\perp \rangle_T^{-1} B_j(q)} \right]^2, \\ \left\{ \begin{array}{l} B^i(q) = F.T. \left\{ \delta^{(3)} \left\{ y - \lambda \int_0^{s'} [\phi^\sigma(s''') - 2p^\sigma] ds''' \right\} (L^{[0i]} \partial_0 + L^{[ij]} \partial_j) \right\} \\ L^{\mu\nu} = -i \int_0^1 d\lambda \lambda \int_0^s ds' \int_0^{s'} ds'' [\phi(s') - 2p]^\mu [\phi(s'') - 2p]^\nu \\ L^{[ij]} = L^{ij} - L^{ji} \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (2.98)$$

Il cuore della formula precedente risiede nel calcolo della quantità tra parentesi uncinate che, dipendendo dallo smorzamento di Landau e dalla suscettività diamagnetica, avrà forme diverse a seconda della fase a cui si riferisce. Mantenendo per adesso una notazione simbolica essa risulta:

$$\langle \Pi^\perp \rangle_\Lambda^{-1} = \int_{|\omega| \leq \Lambda} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{|\vec{k}|^2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} e^{-i\omega t}}{i\kappa \frac{\omega}{|\vec{k}|} - \chi |\vec{k}|^2} \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) \quad (2.99)$$

Nella precedente equazione si può notare la comparsa di un cutoff Λ in frequenza: essendo la sua integrazione legata alla temperatura, tale quantità è dunque determinabile analizzando le scale di energia. A causa delle approssimazioni compiute, è l'unico punto in cui esse influenzano il risultato finale; definendo Ω la frequenza di una perturbazione esterna (come il campo magnetico alternato per il calcolo della suscettività) si possono distinguere tra regimi:

$$\begin{cases} (i) k_B T \gg \hbar \Omega \Rightarrow \Lambda = T \\ (ii) k_B T \sim \hbar \Omega \\ (iii) k_B T \ll \hbar \Omega \Rightarrow \Lambda = \Omega \end{cases} \quad (2.100)$$

Si presti attenzione a non confondere tale simbologia con quella del campo magnonico. Nel primo caso si distingue l'energia termica come dominante e pertanto il cutoff Λ è dato in unità naturali dalla temperatura T ; nel terzo caso in modo speculare al precedente si attribuisce alla perturbazione esterna il ruolo preminente, per cui risulterà la sua frequenza Ω come cutoff Λ . Come si nota, si è volutamente trascurato il secondo caso, in cui la scala di energia non è dominata da alcun contributo; tale situazione richiederebbe la presenza nel modello di informazioni molto dettagliate, che risultano assenti nel caso in esame, essendo state spazzate via dalle approssimazioni. Difatti, come si mostrerà in seguito, a parte qualche dettaglio, la struttura dei risultati nelle due regioni presentate qui sopra è molto simile, e dunque non contiene la capacità intrinseca di trattare una situazione molto delicata come la (ii) della (2.100). Non potendo ivi definire coerentemente il cutoff Λ , si preferisce evitare di considerare tale caso nel resto della trattazione; limitandosi ai due precedenti, è possibile espletare l'integrazione nella (2.99) in base alle informazioni presentate ed ottenendo quanto segue:

$$\begin{cases} (i) \Rightarrow \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) \sim \frac{2T}{\omega} + \dots \\ \langle \Pi^\perp \rangle_{\Lambda=T}^{-1} \simeq -i \frac{T}{4\pi\chi} e^{-\frac{\vec{x}^2 Q_T^2}{4}} Q_T^2 \\ Q_T = \left(\kappa \frac{T}{\chi}\right)^{\frac{1}{3}} \end{cases}, \quad \begin{cases} (iii) \Rightarrow \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) \sim \operatorname{sgn}(\omega) + \dots \\ \langle \Pi^\perp \rangle_{\Lambda=\Omega}^{-1} \simeq -i \lambda \frac{\Omega}{4\pi\chi} e^{-\frac{\vec{x}^2 Q_\Omega^2}{4}} Q_\Omega^2 \\ Q_\Omega = \left(\kappa \frac{\Omega}{\chi}\right)^{\frac{1}{3}}, \lambda \leq 0.5 \end{cases} \quad (2.101)$$

Per concludere il secondo step riguardante l'integrazione nel campo statistico A basta svolgere quella sulla trive-locità ϕ^μ introdotta ad inizio calcolo; tramite la già citata approssimazione iconale è dunque possibile ottenere il risultato analitico finale:

$$\begin{aligned} \langle GG^* \rangle_A &\simeq (gv_s)^2 \left\{ \int d^3p \int_0^\infty ds e^{-is[p^2 + m_s^2 - \frac{\Lambda}{\chi} f(\alpha)] + i\vec{p} \cdot \vec{x} - s^2 \frac{\Lambda}{\chi} Q_\Lambda^2 g(\alpha)} \right\}^2, \\ &\begin{cases} (i) \Rightarrow \Lambda = T, (iii) \Rightarrow \Lambda = \Omega \\ \alpha = |\vec{p}| s Q_\Lambda \\ f(\alpha) = \alpha^2 \lambda \int_0^1 dll \int_0^1 dl' l' \int_0^1 dvv^2 e^{-\alpha^2 v^2 (l'-l)^2} \\ g(\alpha) = \int_0^1 dll \int_0^1 dl' l' \int_0^1 dvv e^{-\alpha^2 v^2 (l'-l)^2} \\ (i) \Rightarrow \lambda = 1, (iii) \Rightarrow \lambda \leq 0.5 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.102)$$

Per ottenere da esso le informazioni volute, è necessario valutare tutte le funzioni ausiliarie ivi presenti, ricorrendo per il calcolo all'approssimazione di punto sella; ciò che si troverà, come noto è il valore richiesto del propagatore magnonico, in cui si sono considerati impliciti i fattori di proporzionalità. Questi ultimi saranno per comodità inseriti solo nei passaggi finali della determinazione della suscettività magnetica; dovendo in tale sede il propagatore essere inteso come funzione di Green causale tra due spin fisici del modello $t - J$, basterà aggiungervi i fattori ignorati sia nella (2.78) che nella (2.86), riguardanti le costanti numeriche legate allo spin ed alla completezza delle matrici di Pauli, oltre al termine che descrive il drogaggio. Si badi infine che l'esponenziale $e^{i\vec{x} \cdot \vec{Q}_{AF}}$, legato come anticipato alla disposizione in due sottoreticoli di Neel, servirà dopo il calcolo della trasformata di Fourier, a valutare i momenti in tali funzioni a partire dal vettore d'onda antiferromagnetico. Riservandosi così di inserire tali osservazioni solo successivamente, di seguito si presenta la forma conclusiva relativa al solo propagatore magnonico, richiesta ad inizio capitolo:

$$\langle \vec{\Omega}(x) \cdot \vec{\Omega}(0) \rangle \simeq e^{-2i\sqrt{m_s^2 - \frac{\Lambda}{\chi} f(\alpha)} \sqrt{x_0^2 - \vec{x}^2}} \frac{1}{x_0^2 - \vec{x}^2} e^{-\frac{\Lambda}{2\chi} Q_\Lambda^2 g(\alpha) \frac{x_0^2 - \vec{x}^2}{m_s^2 - \frac{\Lambda}{\chi} f(\alpha)}}, \quad \alpha = \frac{|\vec{x}| Q_\Lambda}{2} \quad (2.103)$$

Per sfruttare tale espressione nella formula di Kubo per il calcolo della suscettività magnetica, è però necessario eseguirne la trasformata di Fourier, un'operazione non banale presentata nel prossimo paragrafo.

2.11 La suscettività magnetica nel modello $t - J$

In questo paragrafo si calcolerà la trasformata di Fourier del propagatore magnonico, inserendola poi nella formula di Kubo, per il calcolo della suscettività magnetica; come fatto in precedenza, si privilegerà una trattazione qualitativa, fornendo solo i risultati numerici finali del ragionamento. Come già notato, il calcolo della trasformata di Fourier non è banale, in quanto le conclusioni del paragrafo precedente sono valide solo sotto l'ipotesi di scaling limit. Pertanto si procederà prima con l'integrazione spaziale e poi con quella temporale: a sua volta la prima richiederà un'integrazione sulla fase e poi sul modulo, quest'ultima eseguita con l'approssimazione di punto sella. Si noti però che tale procedura, in virtù dello scaling limit, non può fornire un risultato diretto nella regione di interesse; si deve pertanto ricorrere ad una estrapolazione del dato voluto partendo dai punti sella legittimamente calcolati in base alle ipotesi. Completato tale passaggio si ultima il calcolo con l'integrazione temporale, la quale presenta ulteriori complicazioni a causa dei cutoff introdotti nel paragrafo precedente. I risultati ottenuti saranno di seguito distinti a seconda sia della fase del sistema superconduttore, sia delle caratteristiche della perturbazione esterna rispetto all'energia termica; le dipendenze dai parametri fisicamente importanti quali temperatura, drogaggio, smorzamento di Landau, suscettività diamagnetica e massa spinonica risultano dunque peculiari nei diversi casi. Come già notato in precedenza non si troveranno però dei comportamenti anomali, bensì delle descrizioni qualitativamente diverse fra loro; nel seguito sono mostrate per le casistiche elencate i risultati delle trasformate di Fourier:

$$\left\{ \begin{array}{l} PG, k_B T \gg \hbar\Omega : \langle \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega} \rangle \left[\begin{array}{l} \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \\ \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \end{array} \right] \sim \frac{(m_s^2 - i3.3\frac{T}{\chi})^{\frac{1}{4}} (\frac{\chi}{T})^{\frac{1}{2}} Q_T^{\frac{1}{2}}}{\omega - 2\sqrt{m_s^2 - i3.3\frac{T}{\chi}}} J_0(|\vec{q}| C Q_T^{-1} e^{i\frac{\pi}{4}}) \\ PG, k_B T \ll \hbar\Omega : \langle \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega} \rangle \left[\begin{array}{l} \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \\ \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \end{array} \right] \sim \frac{(m_s^2 - i3.3\lambda\frac{\omega}{\chi})^{\frac{1}{4}} (\frac{\chi}{\omega})^{\frac{1}{2}} Q_\omega^{\frac{1}{2}}}{\omega - 2\sqrt{m_s^2 - i3.3\lambda\frac{\omega}{\chi}}} J_0(|\vec{q}| C Q_\omega^{-1} e^{i\frac{\pi}{4}}) \\ SM, k_B T \gg \hbar\Omega : \langle \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega} \rangle \left[\begin{array}{l} \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \\ \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \end{array} \right] \sim \frac{\chi m_s Q_T}{T} \frac{e^{i(\omega - 2m_s)\varepsilon} Q_T^{-1} e^{-\frac{T}{2\chi m_s^2} g(0)\varepsilon^2}}{\omega - 2m_s + i\frac{T}{\chi m_s^2} g(0) Q_T \varepsilon} \\ SM, k_B T \ll \hbar\Omega : \langle \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega} \rangle \left[\begin{array}{l} \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \\ \left(\frac{\omega}{\vec{q}} \right) \simeq \left(\frac{0}{\vec{0}} \right) \end{array} \right] \sim \frac{\chi m_s Q_\omega}{\omega} \frac{e^{i(\omega - 2m_s)\varepsilon} Q_\omega^{-1} e^{-\frac{\omega}{2\chi m_s^2} g(0)\varepsilon^2}}{\omega - 2m_s + i\lambda\frac{\omega}{\chi m_s^2} g(0) Q_\omega \varepsilon} \end{array} \right. \quad (2.104)$$

Nella formula precedente, oltre alle simbologie utilizzate nel paragrafo 11, J_0 denota la funzione di Bessel di primo tipo, C è un coefficiente numerico desunto dall'approssimazione di punto sella ed ε è una costante che caratterizza il cutoff temporale. La struttura dei 4 risultati esposti è comprensibile, confrontando quelli della stessa fase con cutoff diversi: si nota difatti ovunque la sostituzione di Q_T con Q_ω , passando dalla scala di energia dominata dalla temperatura a quella caratterizzata dalla frequenza. Ciò essenzialmente riflette la diversità dei cutoff, come appare dall'altra differenza rimarchevole tra le precedenti espressioni, ovvero lo scambio di $\frac{\chi}{T}$ con $\frac{\chi}{\omega}$, con l'unico importante accorgimento di inserire in tale passaggio un parametro λ qualora si stia operando con una parte immaginaria. La precedente equazione è ciò che serviva per studiare la fisica dei superconduttori ad alta temperatura tramite le funzioni di risposta; per ottenere la suscettività magnetica è dunque necessario ripartire dalla formula di Kubo, inserendo le nuove ipotesi di lavoro sul tempo immaginario e sull'isotropia del sistema, ricordando infine di conglobare tutti i fattori di proporzionalità sottintesi. Si cominci dunque dalla (2.76) nel caso specifico in cui la frequenza sia legata all'energia e dunque sia definita positiva; ne segue l'uguaglianza tra la funzione di Green ritardata e quella causale, per cui è possibile valutare la suscettività magnetica come:

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) &= -(g\mu_B)^2 D_{\alpha\beta}^{Spin}(\vec{q}, \omega) = -(g\mu_B)^2 G_{\alpha\beta}^c(\vec{q}, \omega) = -\frac{(g\mu_B)^2}{A} \int d^2\vec{x} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \int dt e^{i\omega t} G_{\alpha\beta}^c(\vec{x}, t) \\ &\rightarrow -\frac{(g\mu_B)^2}{A} \int d^2\vec{x} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \int d\tau e^{i\omega_n \tau} [-iG_{\alpha\beta}^c(\vec{x}, -i\tau)] \end{aligned} \quad (2.105)$$

ove nell'ultimo passaggio si è applicata la continuazione analitica $\tau = it$, definendo le frequenze complesse $\omega_n = -i\omega$. L'integrando può essere ora riscritto ricordando le relazioni tra le funzioni di Green e Green-Matsubara, ottenendo:

$$\begin{aligned} G_{AB}^{Mats}(\tau) &= -\langle T_\tau [A(\tau) B(0)] \rangle, \tau = it \Rightarrow G_{AB}^{Mats}(it) = \frac{1}{i} G_{AB}^c(t), G_{AB}^c(-i\tau) = iG_{AB}^{Mats}(\tau) \Rightarrow \\ \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) &= -\frac{(g\mu_B)^2}{A} \int d^2\vec{x} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \int d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{\alpha\beta}^{Mats}(\vec{x}, \tau) = -(g\mu_B)^2 G_{\alpha\beta}^{Mats}(\vec{q}, \omega_n) \end{aligned} \quad (2.106)$$

Ora però si ricorda che nelle ipotesi di lavoro a temperatura nulla utilizzate nello scorso paragrafo, la funzione di Green-Matsubara contiene un solo contributo, in quanto nel time-ordering si deve sempre richiedere che il

tempo immaginario τ legato alla temperatura sia positivo. Da ciò si può richiamare l'espansione operata ad inizio del paragrafo precedente, che legava il propagatore di spin a quello magnonico tramite una costante dipendente dal doping e quest'ultimo al propagatore del campo bosonico z per mezzo di un fattore numerico desunto dalla completezza delle matrici di Pauli. Con tali termini si ottiene:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{Mats}(\vec{x}, \tau) &= - \left\langle \left[\theta(\tau) S_{\alpha}(\vec{x}, \tau) S_{\beta}(\vec{0}, 0) + \theta(-\tau) S_{\beta}(\vec{0}, 0) S_{\alpha}(\vec{x}, \tau) \right] \right\rangle \\ &= - \left\langle S_{\alpha}(\vec{x}, \tau) S_{\beta}(\vec{0}, 0) \right\rangle \Rightarrow \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}^{Mats}(\vec{x}, \tau) = \\ &= - \frac{6}{4} (1 - \delta)^2 \left\langle | \langle z(x) z^*(0) \rangle_{Seff} |^2 \right\rangle_{Astat} = - \frac{3}{2} (1 - \delta)^2 \langle G(x, 0) G^*(x, 0) \rangle_{Astat} \end{aligned} \quad (2.107)$$

Dalle due precedenti è possibile ricavare la suscettività magnetica isotropa χ , definendo $\mathcal{G}(\vec{q}, \omega)$ come le trasformate di Fourier presenti nella (2.104) da scegliere a seconda della fase del superconduttore e del valore della frequenza rispetto alla temperatura:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}^{Mats}(\vec{q}, \omega_n) &= - \frac{3}{2} (1 - \delta)^2 \mathcal{G}(\vec{q}, \omega) \Rightarrow \chi = \frac{1}{3} Tr(\chi_{\alpha\beta}) = \\ &= - \frac{(g\mu_B)^2}{3} \left[\sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}^{Mats}(\vec{q}, \omega_n) \right] = \frac{(g\mu_B)^2}{2} (1 - \delta)^2 \mathcal{G}(\vec{q}, \omega) \end{aligned} \quad (2.108)$$

Essendosi calcolata la trasformata di Fourier di una funzione che presentava un fattore esponenziale $e^{i\vec{x} \cdot \vec{Q}_{AF}}$, come osservato nello scorso paragrafo, era implicito nelle precedenti equazioni che \vec{q} si misurasse a partire da \vec{Q}_{AF} ; tuttavia si preferisce rendere ciò manifesto al fine di evitare ogni ambiguità. Ciò si rende necessario solo come monito volendo utilizzare la (2.108) come formula di riferimento:

$$2\mu_B^2 (1 - \delta)^2 \mathcal{G}(\vec{q} - \vec{Q}_{AF}, \omega) \equiv 2\mu_B^2 (1 - \delta)^2 \langle \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega} \rangle (\vec{q} - \vec{Q}_{AF}, \omega) \quad (2.109)$$

Questo risultato sarà ampiamente sfruttato nel seguito ed un primo esempio in relazione con il tempo di rilassamento nucleare verrà mostrato in conclusione di capitolo.

2.12 Conclusioni

In questo paragrafo, basato su [24], si mostrerà una prima applicazione delle trasformate di Fourier della suscettività magnetica per trovare il tempo di rilassamento nucleare introdotto nel capitolo precedente. Come osservato in tale sede la quantità fisica risulta funzione della parte immaginaria della suscettività magnetica, calcolata ad un valore di \vec{q} filtrato dal fattore di forma. Considerando concretamente il caso del rame, si era notato come il contributo dominante, e dunque l'unico apprezzabile in un esperimento, si trovasse per valori di \vec{q} prossimi al vettore d'onda antiferromagnetico \vec{Q}_{AF} , e corrispondentemente si potesse considerare nulla la frequenza a cui valutare la trasformata di Fourier. Da misure sperimentali è noto inoltre che il tensore magnetico iperfino relativo ai siti di rame non è rappresentabile in spazio reciproco come uno stretto picco intorno al vettore d'onda antiferromagnetico, bensì ammette un supporto centrato in \vec{Q}_{AF} su cui assume valori non nulli. Si può approssimare tale regione ad un disco di raggio pari al momento di Reizer Q_T ; si noti la scelta della sua versione in temperatura coerentemente con l'esiguità della frequenza caratteristica del sistema rispetto all'energia termica. Dunque riprendendo la formula di Moriya, si dovrebbe in linea di principio eseguire un'integrazione sui momenti, una volta operato il passaggio al continuo della somma; tuttavia le considerazioni appena esposte permettono di semplificare il calcolo. In primo luogo difatti, approssimando a costante il comportamento del fattore di forma sulla regione indicata, esso può essere sfilato dall'integrale, nel cui argomento restano dunque solamente la parte immaginaria della trasformata di Fourier e la frequenza del sistema. Per svolgere tale operazione è necessario in secondo luogo ricordare la forma delle variabili fisiche menzionate, concentrandosi per fissare le idee sulla fase di pseudogap: $\chi''(|\vec{q} - \vec{Q}_{AF}|, \omega)$ è proporzionale alla funzione di Bessel J_0 valutata nel modulo della differenza tra il vettore d'onda considerato e quello antiferromagnetico. Dunque essa è massima al centro del disco di integrazione, decrescendo lievemente allontanandosi da esso lungo il raggio Q_T ; sostituire invece alla frequenza ω il valore di Larmor risulta un'approssimazione sbagliata per lo studio che si sta conducendo. Tutte le variabili nella formula del rate di rilassamento misurato sui siti di rame difatti devono afferire all'intorno di \vec{Q}_{AF} in spazio reciproco: perciò con ω va intesa la frequenza del campo magnonico, che dall'analisi condotta nei paragrafi precedenti, è nota essere in relazione lineare tramite la velocità v_s con il momento, espresso nell'ipotesi di scaling limit entro la regione di

integrazione coerentemente con le altre quantità presenti nella formula di Moriya. Per completezza si riferisce che in quelle sedi si era considerata una correzione a v_s , sommandola in quadratura con la massa spinonica; tuttavia una verifica esplicita mostra che rispetto all'espressione riportata di v_s , m_s ne rappresenta una debole correzione per i livelli di drogaggio ammissibili nel modello $t - J$. Da tali precisazioni emerge dunque in terzo luogo la strada per risolvere l'integrazione richiesta: a causa della forma rapidamente decrescente della funzione di risposta, è equivalente considerare la sua versione statica, annullando il valore della frequenza presente in essa. Con questa semplificazione, notando la simmetria sferica, l'integrando nel modulo del momento si riduce alla parte immaginaria della suscettività magnetica. Come si ricorderà, la scala che dà lo smorzamento alla funzione di Bessel J_0 è proprio il momento di Reizer Q_T , che risulta anche l'estremo superiore del dominio di integrazione: dunque la funzione ivi darà contributi non nulli ed il risultato dell'operazione in questione può essere stimato dimensionalmente come il prodotto tra il raggio Q_T ed il valore assunto da χ'' al centro della regione menzionata. Il ragionamento condotto è riassunto dalla seguente formula, valida per ricavare il rate di rilassamento spin-reticolo di un sistema superconduttivo in fase di pseudogap:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{63T_1T} &= \frac{k_B\gamma_n^2}{2\mu_B^2} \sum_{\vec{q}} |63A(\vec{q})|^2 \frac{\chi''\left(\left|\vec{q} - \overrightarrow{Q_{AF}}\right|, \omega\right)}{\omega} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{k_B\gamma_n^2}{2\mu_B^2} \int d^2\vec{q} |63A(\vec{q})|^2 \frac{\chi''\left(\left|\vec{q} - \overrightarrow{Q_{AF}}\right|, \omega\right)}{\omega} \\
&\simeq \frac{k_B\gamma_n^2}{2(2\pi)^2\mu_B^2} |63A(\overrightarrow{Q_{AF}})|^2 \int_{\left|\vec{q} - \overrightarrow{Q_{AF}}\right| \leq Q_T} d^2\vec{q} \frac{\chi''\left(\left|\vec{q} - \overrightarrow{Q_{AF}}\right|, \omega\right)}{\omega} \simeq \frac{k_B\gamma_n^2}{2(2\pi)^2\mu_B^2} |63A(\overrightarrow{Q_{AF}})|^2 \\
&\int_{\left|\vec{q} - \overrightarrow{Q_{AF}}\right| \leq Q_T} d^2\vec{q} \frac{\chi''\left(\left|\vec{q} - \overrightarrow{Q_{AF}}\right|, \omega = 0\right)}{v_s \left|\vec{q} - \overrightarrow{Q_{AF}}\right|} = \frac{k_B\gamma_n^2}{2(2\pi)^2\mu_B^2} |63A(\overrightarrow{Q_{AF}})|^2 \int_{\left|\vec{k}\right| \leq Q_T} d^2\vec{k} \frac{\chi''\left(\left|\vec{k}\right|, \omega = 0\right)}{v_s \left|\vec{k}\right|} \\
&= \frac{k_B\gamma_n^2}{4\pi\mu_B^2} |63A(\overrightarrow{Q_{AF}})|^2 \int_0^{Q_T} dk k \frac{\chi''(k, \omega = 0)}{v_s k} \simeq \frac{k_B\gamma_n^2}{4\pi\mu_B^2} |63A(\overrightarrow{Q_{AF}})|^2 Q_T \frac{\chi''(k = 0, \omega = 0)}{v_s} = \\
&\frac{k_B\gamma_n^2 Q_T}{4\pi v_s \mu_B^2} |63A(\overrightarrow{Q_{AF}})|^2 \chi''\left(\vec{q} = \overrightarrow{Q_{AF}}, \omega = 0\right)
\end{aligned} \tag{2.110}$$

Dalla (2.109) è dunque possibile ottenere la parte immaginaria della trasformata di Fourier della suscettività magnetica calcolata negli argomenti descritti in precedenza:

$$\begin{aligned}
\chi''\left(\overrightarrow{Q_{AF}}, \omega \simeq 0\right) &\stackrel{\varepsilon \rightarrow 0^+}{\simeq} 2\mu_B^2(1 - \delta)^2 \left(\frac{\chi}{T}\right)^{\frac{1}{2}} Q_T^{\frac{1}{2}} Im \left\{ \frac{\left(m_s^2 - ic\frac{T}{\chi}\right)^{\frac{1}{4}}}{\omega - 2\sqrt{m_s^2 - ic\frac{T}{\chi}}} J_0 \left[\varepsilon \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + i\frac{\sqrt{2}}{2} \right) \right] \right\}, \\
J_0(z) &\equiv J_0(x + iy) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2m} = 1 - \left(\frac{z}{2}\right)^2 + \dots = 1 - \frac{x^2 - y^2 + 2ixy}{4} + \dots \Rightarrow \\
Re J_0 &\equiv a = 1 + O(\varepsilon^2), \quad Im J_0 \equiv -b = -\frac{xy}{2} = O(\varepsilon^2) \Rightarrow a > 0, b \gtrsim 0
\end{aligned} \tag{2.111}$$

Nella precedente equazione, oltre alle notazioni del paragrafo 11, si sono inserite per generalità delle costanti positive c di ordine dell'unità ed ε infinitesima, mostrando altresì la funzione di Bessel del primo ordine calcolata nei valori richiesti, da cui si desumono le sue parti reale ed immaginaria. Valutando in essa il limite di frequenza nulla è infine possibile ottenere quanto voluto adottando per il radicale complesso la forma polare:

$$\begin{aligned}
\chi''\left(\overrightarrow{Q_{AF}}, \omega \simeq 0\right) &= -\mu_B^2(1 - \delta)^2 \left(\frac{\chi}{T}\right)^{\frac{1}{2}} Q_T^{\frac{1}{2}} Im \left[z^{-\frac{1}{4}} (a - ib) \right], \quad z = m_s^2 - ic\frac{T}{\chi} \equiv \rho e^{i\theta} \Rightarrow \rho = \\
&\sqrt{m_s^4 + \left(\frac{cT}{\chi}\right)^2}, \quad \theta = 2\pi - \arctan\left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right) \in \left[\frac{3\pi}{2}, 2\pi\right] \Rightarrow \chi''\left(\overrightarrow{Q_{AF}}, \omega \simeq 0\right) = -\mu_B^2(1 - \delta)^2 \\
&\left(\frac{\chi}{T}\right)^{\frac{1}{2}} Q_T^{\frac{1}{2}} \rho^{-\frac{1}{4}} Im \left\{ \left[\cos\left(\frac{\theta}{4}\right) - i \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \right] (a - ib) \right\} = \mu_B^2(1 - \delta)^2 \left(\frac{\chi}{T}\right)^{\frac{1}{2}} Q_T^{\frac{1}{2}} \rho^{-\frac{1}{4}} \left[b \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) + a \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \right]
\end{aligned} \tag{2.112}$$

Si noti che nella formula precedente tutte le quantità presenti sono positive, e ciò è conseguenza dell'aver tenuto solo il valor principale del radicale complesso, utilizzando inoltre in θ l'argomento principale situato nel quarto quadrante del piano di Gauss. Per ottenere informazioni confrontabili con i risultati sperimentali, la precedente

equazione risulta poco utile, in quanto sarebbe auspicabile sostituire in sua vece uno sviluppo in serie; per far ciò è però necessario assicurarsi l'esiguità degli argomenti dello sviluppo. Ciò a priori non è banale in quanto tali quantità sono fortemente legate tra loro dalle procedure eseguite nei paragrafi 10 e 11. Per procedere risulta utile definire dunque degli intervalli di validità, da cui desumere i range delle quantità fisiche variabili nell'esperimento, come la temperatura; tale costruzione assicura difatti legittimità alle approssimazioni di punto sella invocate nel calcolo del propagatore magnonico (2.103) e della sua trasformata di Fourier (2.104). Le condizioni da far soddisfare alle quantità fisiche presenti nel modello $t - J$ sono riportate nel seguito, unitamente all'intervallo ottimale di temperatura in cui scegliere i risultati sperimentali; si badi però che i suoi limiti non pongono un'ulteriore richiesta sulla quantità di drogaggio ammessa dal paradigma citato:

$$\begin{cases} m_s^2 = \delta |\ln \delta|, \chi = \frac{t}{6\pi\delta} : m_s^2 \geq \frac{T}{\chi} \rightarrow \delta |\ln \delta| \geq \frac{6\pi\delta T}{t} \rightarrow T \leq \frac{t}{6\pi} |\ln \delta| \\ Q_T = \left(\kappa \frac{T}{\chi}\right)^{\frac{1}{3}}, \kappa = \delta : \frac{T}{\chi} \geq m_s Q_T \rightarrow \left(\frac{T}{\chi}\right)^{\frac{2}{3}} \geq m_s \kappa^{\frac{1}{3}} \rightarrow T^{\frac{2}{3}} \left(\frac{6\pi\delta}{t}\right)^{\frac{2}{3}} \geq \delta^{\frac{1}{2}} |\ln \delta|^{\frac{1}{2}} \delta^{\frac{1}{3}} \\ \rightarrow T^{\frac{2}{3}} \geq |\ln \delta|^{\frac{1}{2}} \left(\frac{t}{6\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \delta^{\frac{1}{6}} \rightarrow T \geq \left(\frac{t}{6\pi}\right) |\ln \delta|^{\frac{3}{4}} \delta^{\frac{1}{4}} \end{cases} \quad (2.113)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{t}{6\pi} |\ln \delta|^{\frac{3}{4}} \delta^{\frac{1}{4}} \leq T \leq \frac{t}{6\pi} |\ln \delta| \\ |\ln \delta|^{\frac{3}{4}} \delta^{\frac{1}{4}} \leq |\ln \delta| \rightarrow \delta^{\frac{1}{4}} \leq |\ln \delta|^{\frac{1}{4}} \rightarrow \delta \leq |\ln \delta| \rightarrow 0 \leq \delta \leq 0.567 \end{cases}$$

Si noti come nella precedente equazione per coerenza, lo smorzamento di Landau e la suscettività diamagnetica abbiano assunto le rispettive forme nella fase di pseudogap. Le condizioni che essa contiene risulteranno utili per ottenere uno sviluppo in serie della parte immaginaria della suscettività magnetica; nel seguito si comincia con l'addendo proporzionale a b , ottenendo:

$$\chi_b''(\overrightarrow{Q_{AF}}, 0) = \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left(\frac{\chi Q_T}{T}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sin\left[\frac{1}{4} \arctan\left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)\right]}{\left[m_s^4 + \left(\frac{cT}{\chi}\right)^2\right]^{\frac{1}{8}}} \quad (2.114)$$

Ponendo $x := \frac{cT}{\chi m_s^2}$, per $x \ll 1$ si può espandere la precedente formula, ottenendo:

$$\begin{aligned} \chi_b''(\overrightarrow{Q_{AF}}, 0) &\simeq \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left[\kappa^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\chi}{T}\right)^{\frac{2}{3}}\right]^{\frac{1}{2}} \frac{\sin\left[\frac{1}{4} \left(x - \frac{1}{3}x^3 + \dots\right)\right]}{m_s^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{1}{8}x^2 + \dots\right)} = \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left[\frac{\kappa}{m_s} \left(\frac{\chi}{\kappa T}\right)^{\frac{2}{3}}\right]^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{1}{8}x^2 + \dots\right) \cdot \\ &\left(\frac{1}{4}x - \frac{33}{384}x^3 + \dots\right) \approx \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left(\frac{\kappa}{m_s}\right)^{\frac{1}{2}} Q_T^{-1} \frac{cT}{4\chi m_s^2} \left[1 - \frac{45c^2}{96} \left(\frac{T}{\chi m_s^2}\right)^2\right] = \mu_B^2 (1 - \delta)^2 Q_T^{-1} \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot \\ &\frac{6\pi cT}{4t |\ln \delta|} \left[1 - \frac{45c^2}{96} \left(\frac{6\pi T}{t |\ln \delta|}\right)^2\right] \end{aligned} \quad (2.115)$$

Nell'ultimo passaggio si è manifestata per scopi futuri la dipendenza da drogaggio e parametri del modello delle sole quantità sviluppate in serie, evitando di applicare la medesima procedura al prefattore poiché esso sarà semplificato calcolando il tempo di rilassamento, come mostrato nel seguito. Ora si può ripetere quanto operato in precedenza per l'addendo proporzionale ad a della parte immaginaria della suscettività magnetica, ottenendo:

$$\chi_a''(\overrightarrow{Q_{AF}}, 0) = \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left(\frac{\chi Q_T}{T}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\cos\left[\frac{1}{4} \arctan\left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)\right]}{\left[m_s^4 + \left(\frac{cT}{\chi}\right)^2\right]^{\frac{1}{8}}} \quad (2.116)$$

Per $x \ll 1$, espandendo come in precedenza, si trova:

$$\begin{aligned} \chi_a''(\overrightarrow{Q_{AF}}, 0) &\simeq \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left[\kappa^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\chi}{T}\right)^{\frac{2}{3}}\right]^{\frac{1}{2}} \frac{\cos\left[\frac{1}{4} \left(x - \frac{1}{3}x^3 + \dots\right)\right]}{m_s^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{1}{8}x^2 + \dots\right)} = \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left[\frac{\kappa}{m_s} \left(\frac{\chi}{\kappa T}\right)^{\frac{2}{3}}\right]^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{1}{8}x^2 + \dots\right) \cdot \\ &\left(1 - \frac{1}{32}x^2 + \dots\right) \approx \mu_B^2 (1 - \delta)^2 \left(\frac{\kappa}{m_s}\right)^{\frac{1}{2}} Q_T^{-1} \left[1 - \frac{5c^2}{32} \left(\frac{T}{\chi m_s^2}\right)^2\right] = \mu_B^2 (1 - \delta)^2 Q_T^{-1} \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|}\right)^{\frac{1}{4}} \left[1 - \frac{5c^2}{32} \left(\frac{6\pi T}{t |\ln \delta|}\right)^2\right] \end{aligned} \quad (2.117)$$

Le due conclusioni precedenti, anche se diverse in forma, manifestano una struttura comune, come è possibile notare inserendo tutte le variabili fisiche in una quantità adimensionale y , di cui i due contributi alla parte immaginaria della suscettività magnetica risultano funzione, come mostrato nel seguito:

$$f\left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right) = \mu_B^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{\chi}{T}\right)^{\frac{1}{3}} \kappa^{\frac{1}{6}} \frac{\left(\frac{\cos}{\sin}\right) \left[\frac{1}{4} \arctan\left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)\right]}{m_s^{\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)^2\right]^{\frac{1}{8}}}, \quad y = \frac{cT}{T^*} := \frac{cT}{\chi m_s^2} = \frac{6\pi cT}{t |\ln \delta|} \Rightarrow \quad (2.118)$$

$$f(y) = \mu_B^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{c}{m_s^2}\right)^{\frac{1}{3}} \kappa^{\frac{1}{6}} y^{-\frac{1}{3}} \frac{\left(\frac{\cos}{\sin}\right) \left[\frac{1}{4} \arctan(y)\right]}{m_s^{\frac{1}{2}} (1+y^2)^{\frac{1}{8}}} = \mu_B^2 (1-\delta)^2 \frac{c^{\frac{1}{3}}}{\delta^{\frac{5}{12}} |\ln \delta|^{\frac{7}{12}}} \frac{\left(\frac{\cos}{\sin}\right) \left[\frac{1}{4} \arctan(y)\right]}{y^{\frac{1}{3}} (1+y^2)^{\frac{1}{8}}}$$

La determinazione di tali funzioni universali, data in precedenza come osservazione, riveste però un ruolo chiave nella fisica dei superconduttori ad alta temperatura, soprattutto in previsione di una verifica sperimentale. Quanto esposto sinora è l'elemento mancante da inserire nella formula di Moriya per il calcolo del tempo di rilassamento; di seguito se ne riporta la forma specializzata al caso $x \ll 1$:

$$\frac{1}{63 T_1 T} = \frac{k_B \gamma_n^2 Q_T}{4\pi v_s \mu_B^2} \left| {}^{63}A(\overrightarrow{Q_{AF}}) \right|^2 \chi''(\vec{q} = \overrightarrow{Q_{AF}}, \omega = 0) = \frac{k_B \gamma_n^2 Q_T}{4\pi v_s \mu_B^2} \left| {}^{63}A(\overrightarrow{Q_{AF}}) \right|^2 \mu_B^2 (1-\delta)^2 Q_T^{-1} \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

$$\left\{ a \left[1 - \frac{5c^2}{32} \left(\frac{6\pi T}{t |\ln \delta|}\right)^2 \right] + b \frac{6\pi cT}{4t |\ln \delta|} \left[1 - \frac{45c^2}{96} \left(\frac{6\pi T}{t |\ln \delta|}\right)^2 \right] \right\} = \frac{k_B \gamma_n^2}{4\pi v_s} \left| {}^{63}A(\overrightarrow{Q_{AF}}) \right|^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

$$\left\{ a \left[1 - \frac{5}{32} \left(\frac{6\pi cT}{t |\ln \delta|}\right)^2 \right] + \frac{b}{4t |\ln \delta|} \left[1 - \frac{45}{96} \left(\frac{6\pi cT}{t |\ln \delta|}\right)^2 \right] \right\}$$
(2.119)

Dopo la sostituzione dei risultati precedenti, si possono compiere le seguenti osservazioni: in primo luogo l'ampiezza del rate di rilassamento è modulata da fattori costanti dipendenti dall'assetto sperimentale, come la quantità di drogaggio ed il rapporto giromagnetico γ_n dei nuclei su cui si compiono le misurazioni (nel caso sotto indagine pari a quelli di rame). In secondo luogo si nota la presenza, all'interno del modulo quadro, del fattore di forma; è prassi però considerare tale contributo come liscio ovvero non in grado di alterare sensibilmente gli andamenti delle curve del rate di rilassamento. Resta pertanto in terzo luogo assegnare il profilo dei risultati ancora una volta una funzione universale dipendente dalla variabile y introdotta precedentemente, che ne rappresenta difatti uno sviluppo in serie. Tale risultato è molto utile poiché consente la verifica dei modelli teorici tramite l'interpolazione dei dati sperimentali. A tale proposito si presenta nel seguito la formula finale del calcolo del tempo di rilassamento, ottenuto trascurando ulteriormente i termini quadratici nell'espansione:

$$\frac{1}{63 T_1 T} = \frac{k_B \gamma_n^2}{4\pi v_s} \left| {}^{63}A(\overrightarrow{Q_{AF}}) \right|^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|}\right)^{\frac{1}{4}} \mathcal{F}\left(\frac{6\pi cT}{t |\ln \delta|}\right), \quad \mathcal{F}(x) := a \left(1 - \frac{5}{32} x^2\right) + \frac{b}{4} x \left(1 - \frac{45}{96} x^2\right) \Rightarrow$$

$$\mathcal{F}_1(x) \approx a + \frac{b}{4} x \Rightarrow \frac{1}{63 T_1 T} \approx \frac{k_B \gamma_n^2}{4\pi v_s} \left| {}^{63}A(\overrightarrow{Q_{AF}}) \right|^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|}\right)^{\frac{1}{4}} \left(a + \frac{b}{4t |\ln \delta|} \frac{6\pi cT}{t |\ln \delta|}\right) := A + BT, \quad m_s^2 \gg \frac{cT}{\chi} \quad (2.120)$$

L'andamento lineare ottenuto per $x \ll 1$ risulta ben confermato dai dati sperimentali, utilizzando coerentemente sistemi superconduttori nella fase di pseudogap; tuttavia è da notare come la precedente equazione sia valida in una regione specifica nello spazio dei parametri. Volendo analizzare altrove il comportamento del rate di rilassamento, bisogna assicurarsi il rispetto delle condizioni (2.113). Fatto ciò basta inserire nella formula di Moriya lo sviluppo completo della parte immaginaria della suscettività magnetica, e sistemare i vari addendi in funzione delle approssimazioni adottate. Qualora si voglia studiare una regione in cui le parti reale ed immaginaria della massa efficace spinonica nella fase di pseudogap siano confrontabili, si nota come i soli denominatori dell'espressione trovata forniscano l'andamento nelle variabili, in quanto le funzioni goniometriche al numeratore sono approssimabili con valori limitati l_1 ed l_2 . Da tale analisi, ricordando l'ininfluenza del fattore di forma nella determinazione degli andamenti, si dimostra per il caso citato che risulta:

$$\frac{1}{63 T_1 T} = \frac{k_B \gamma_n^2}{4\pi v_s} \left| {}^{63}A(\overrightarrow{Q_{AF}}) \right|^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|}\right)^{\frac{1}{4}} \left\{ a \frac{\cos \left[\frac{1}{4} \arctan\left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)\right]}{\left[1 + \left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)^2\right]^{\frac{1}{8}}} + b \frac{\sin \left[\frac{1}{4} \arctan\left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)\right]}{\left[1 + \left(\frac{cT}{\chi m_s^2}\right)^2\right]^{\frac{1}{8}}} \right\}$$

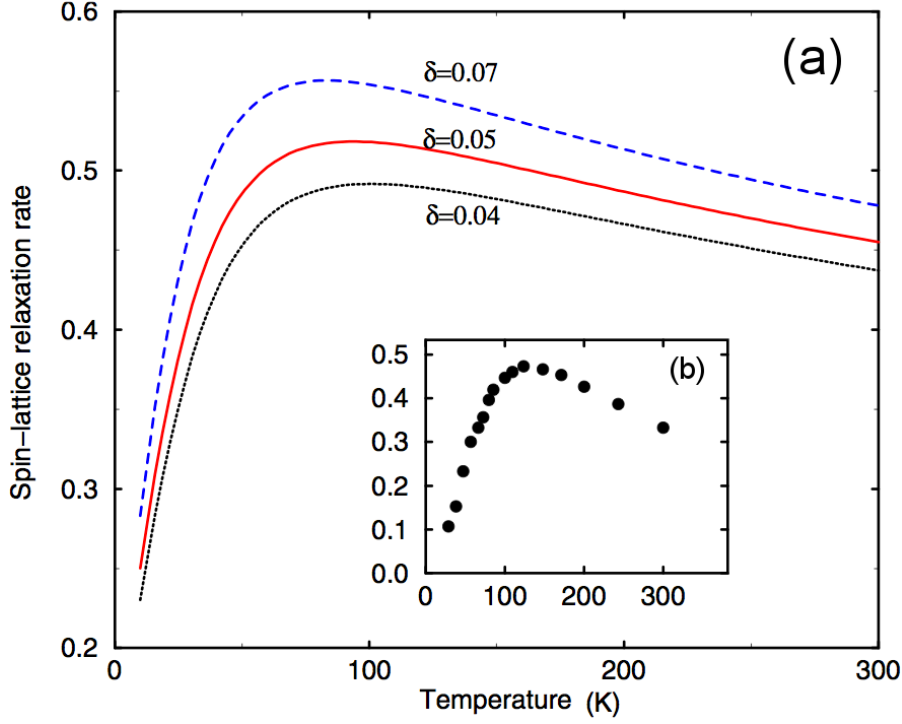


Figura 2.6: $\frac{1}{63T_1T}$ misurato per un cristallo di YBCO nella fase di pseudogap in funzione della temperatura: (a) risultati teorici; (b) dati sperimentali (adattata da [19]).

$$m_s^2 \underset{\approx}{\sim} \frac{cT}{\chi} \frac{k_B \gamma_n^2}{4\pi v_s} \left| {}^{63}A \left(\overrightarrow{Q_{AF}} \right) \right|^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{al_1 + bl_2}{\left(\frac{cT}{\chi m_s^2} \right)^{\frac{1}{4}}} \right] = \frac{k_B \gamma_n^2}{4\pi v_s} \left| {}^{63}A \left(\overrightarrow{Q_{AF}} \right) \right|^2 (1-\delta)^2 \left(\frac{\delta}{|\ln \delta|} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.121)$$

$$\left(\frac{\chi m_s^2}{c} \right)^{\frac{1}{4}} (al_1 + bl_2) T^{-\frac{1}{4}} \propto T^{-\frac{1}{4}}, \quad m_s^2 \sim \frac{cT}{\chi}$$

Al termine di tale calcolo si mostra in figura 2.6 un grafico per $\frac{1}{63T_1T}$ valutato nella fase di pseudogap, ove si può notare la corrispondenza tra risultati teorici e misure tabulate, essendo queste ultime riportate nell'inserto del diagramma menzionato. Astruendo dalle complicazioni tecniche che si sono affrontate, la conclusione raggiunta è notevole e compendia in sé le principali caratteristiche del comportamento dei sistemi superconduttori intorno al vettore d'onda antiferromagnetico. Difatti in tale settore dello spaio reciproco è lecito attendersi che le variabili fisiche come la suscettività magnetica mostrino un incremento a causa delle fluttuazioni di spin, finché esse rivestono un ruolo dominante nella scala di energia, ovvero non vengono surclassate dal contributo termico. Avendo accesso dalle misure del rate di rilassamento alla parte immaginaria della funzione di risposta centrata in $\overrightarrow{Q_{AF}}$, un buon modello analitico deve riprodurre la crescita menzionata per bassi valori di temperatura; come mostrato in precedenza ciò accade, in quanto qualora $x \ll 1$, allora $\frac{1}{63T_1T}$ assume un andamento lineare in T . Andando a sondare valori più alti di temperatura, è intuibile come le fluttuazioni antiferromagnetiche non possano più influenzare le misure sperimentali; in tale intervallo tuttavia, come sottolineato nei paragrafi precedenti, tende ad assumere un ruolo rilevante la parte immaginaria della massa spinonica, il cui effetto si tradurrà in una dissipazione energetica. Essendo il campo magnetico esterno costante, ciò si rifletterà in una diminuzione dei momenti magnetici e pertanto della suscettività di spin; dunque anche la forma del rate di rilassamento menzionata in precedenza dovrà ribadire tale decrescita. Essa è ben riscontrabile nel tratto in discesa del grafico che appare come inserto nella figura 2.6 ed è riprodotta in modo soddisfacente dal modello $t - J$, poiché il calcolo precedente basato su di esso, ha dimostrato che per $x \sim 1$ si debba avere un profilo in temperatura pari a $T^{-\frac{1}{4}}$. Le due formule precedenti sono dunque ben verificate e rappresentano un primo esempio di applicazione al calcolo di proprietà fisiche dei risultati formali dedotti nel presente capitolo; il caso esaminato riguardava propriamente il tempo di rilassamento nucleare, poiché dai suoi dati è possibile inferire l'esattezza o meno delle approssimazioni condotte sul modello $t - J$, necessarie per raggiungere una conclusione analitica. Tale attenzione agli esperimenti verrà mantenuta anche nel prossimo capitolo, ove si presenteranno i procedimenti per il calcolo della suscettività magnetica nella cornice della teoria di gauge fornita dal modello $t - J$, che costituiscono il fulcro del presente lavoro di tesi.

Capitolo 3

Teoria di gauge della suscettività magnetica

3.1 Introduzione

Il presente capitolo, che costituisce il cuore dell'intero lavoro di tesi, offrirà conclusioni notevoli sulla suscettività magnetica, mostrando come le formule derivate nei paragrafi precedenti sfruttando il modello $t - J$ e quelle ricavate nella teoria non interagente con il formalismo di Matsubara, possano essere desunte dalla formula di Kubo grazie alle proprietà del campo di gauge. Tale presentazione si articola nel modo seguente: nel secondo paragrafo verrà derivata la funzione di Green-Matsubara per il caso non interagente e discussa la sua relazione con la funzione di Green ritardata, di fondamentale importanza nel calcolo di funzioni di risposta per un sistema fisico. Da tale cornice generale si cercherà nel terzo paragrafo un modo per procedere, introducendo il peso spettrale e studiandone l'importanza in vari ambiti della teoria. Per completare la rassegna dei prerequisiti tecnici necessari a proseguire i calcoli, si descrive nel quarto paragrafo la somma sulle frequenze di Matsubara; una sua prima applicazione si mostra nel paragrafo cinque, ove concisamente si desumerà un'espressione per il calcolo della suscettività magnetica che risulterà, in un opportuno limite, coerente con quella incontrata nel capitolo 1 nello studio dei sistemi metallici. Tale lavoro preparatorio, condotto sulla base di [16], mostra i suoi frutti nel paragrafo sei, ove si ripercorrono le tracce esposte in precedenza per derivare un risultato analitico sulla parte reale della trasformata di Fourier uniforme e costante della suscettività magnetica; tale formula difatti emerge naturalmente quando si va a calcolare il contributo della funzione di risposta intorno al vettore d'onda nullo come conseguenza della teoria di gauge, applicata nel capitolo precedente per ottenere l'azione efficace del modello $t - J$. Da tale conclusione, riportata nel paragrafo sette, emerge la necessità di ottenere una formula per la densità degli stati, i cui dettagli concettuali sono presentati nel paragrafo otto, lasciando a quello successivo l'onere del calcolo analitico, seppur approssimato, ripreso in appendice A nel caso in cui i parametri del sistema implicino uno scattering rate Γ nullo per la buca fisica. Conclude infine tale capitolo, come di consueto, un riferimento alle attività sperimentali, dai cui risultati sul Knight shift si potrà desumere la bontà delle previsioni sinora ottenute.

Avvertenza: come fatto nel capitolo precedente, anche in questo si adotterà la convenzione sulle unità naturali $\hbar = 1$; particolare cautela va perciò riservata alla presentazione dei risultati finali, da confrontarsi con gli andamenti sperimentali. Pertanto in tali luoghi si avrà premura di riportare i parametri delle formule in unità internazionali, per evitare qualsiasi ambiguità.

3.2 Funzione di Green-Matsubara nel caso libero

Si presenta in questo paragrafo, tramite il formalismo di Matsubara introdotto nel capitolo precedente, il calcolo del propagatore nel caso non interagente. Si ricorda dunque che la funzione di Green-Matsubara $\mathcal{G}(\vec{p}, \tau)$ è definita come:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\vec{p}, \tau) &= -\left\langle T_\tau C_{\vec{p}\sigma}(\tau) C_{\vec{p}\sigma}^\dagger(0) \right\rangle = -Tr \left[e^{-\beta(K-\Omega)} T_\tau \left(e^{\tau K} C_{\vec{p}\sigma} e^{-\tau K} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger \right) \right], \\ e^{-\beta\Omega} &= Tr \left[e^{-\beta K} \right] \equiv Tr \left[e^{-\beta(H-\mu N)} \right] \end{aligned} \quad (3.1)$$

ove T_τ rappresenta l'operatore di ordinamento temporale introdotto nel capitolo precedente, $C_{\vec{p}\sigma}$ e $C_{\vec{p}\sigma}^\dagger$ sono rispettivamente gli operatori fermionici di distruzione e creazione di una particella nello stato $\vec{p}\sigma$ e si è adottato

per il calcolo un ensemble grancanonico. In esso le hamiltoniane H e K assumono una forma particolare nel caso libero pari a:

$$H = H_0 = \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma}, \quad K = K_0 = \sum_{\vec{p}\sigma} \xi_{\vec{p}} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma}, \quad \xi_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} - \mu \quad (3.2)$$

Da esse è possibile ottenere la forma degli operatori fermionici in visuale di Heisenberg sfruttando un corollario della formula di Baker-Campbell-Hausdorff noto come lemma di Hadamard:

$$e^A C e^{-A} = C + [A, C] + \frac{1}{2!} [A, [A, C]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, C]]] + \dots \quad (3.3)$$

Calcolandone difatti i commutatori presenti, si perviene a:

$$\begin{aligned} [K_0, C_{\vec{p}\sigma}] &= -\xi_{\vec{p}} C_{\vec{p}\sigma} \Rightarrow e^{\tau K_0} C_{\vec{p}\sigma} e^{-\tau K_0} = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\tau \xi_{\vec{p}})^n \right] C_{\vec{p}\sigma} = e^{-\tau \xi_{\vec{p}}} C_{\vec{p}\sigma}, \\ [K_0, C_{\vec{p}\sigma}^\dagger] &= \xi_{\vec{p}} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger \Rightarrow e^{\tau K_0} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger e^{-\tau K_0} = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\tau \xi_{\vec{p}})^n \right] C_{\vec{p}\sigma}^\dagger = e^{\tau \xi_{\vec{p}}} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger \end{aligned} \quad (3.4)$$

Da quanto ottenuto è possibile desumere la funzione di Green-Matsubara non interagente $\mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, \tau)$ ricordando che la media statistica dell'operatore numero espresso in seconda quantizzazione equivale alla funzione di distribuzione di Fermi n_F ; indicando tra parentesi angolari il valor medio si avrà così:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, \tau) &= -\Theta(\tau) e^{-\tau \xi_{\vec{p}}} \langle C_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger \rangle + \Theta(-\tau) e^{-\tau \xi_{\vec{p}}} \langle C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma} \rangle = \\ &= -e^{-\tau \xi_{\vec{p}}} \{ \Theta(\tau) [1 - n_F(\xi_{\vec{p}})] - \Theta(-\tau) n_F(\xi_{\vec{p}}) \} = -e^{-\tau \xi_{\vec{p}}} [\Theta(\tau) - n_F(\xi_{\vec{p}})] \end{aligned} \quad (3.5)$$

In essa la forma di n_F è nota dalla teoria e gode delle seguenti notevoli proprietà:

$$\begin{aligned} n_F(\xi_{\vec{p}}) &= \langle C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma} \rangle \Rightarrow n_F(\xi_{\vec{p}}) = \frac{1}{e^{\beta \xi_{\vec{p}}} + 1} \Rightarrow 1 - n_F(\xi_{\vec{p}}) \\ &= 1 - \frac{1}{e^{\beta \xi_{\vec{p}}} + 1} = \frac{e^{\beta \xi_{\vec{p}}}}{e^{\beta \xi_{\vec{p}}} + 1} = \frac{1}{e^{-\beta \xi_{\vec{p}}} + 1} = n_F(-\xi_{\vec{p}}) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Tale risultato rappresenta quanto cercato in spazio reale; tuttavia come mostrato nei capitoli precedenti è conveniente estendere la trattazione allo spazio reciproco di Fourier, ove la funzione di Green-Matsubara è esprimibile come una somma su frequenze discrete (dette di Matsubara) di un peso esponenziale per la trasformata della funzione in esame, come mostrato di seguito:

$$\mathcal{G}(\vec{p}, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\vec{p}, \tau), \quad \mathcal{G}(\vec{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\vec{p}, i\omega_n), \quad \omega_n = (2n+1) \frac{\pi}{\beta} \quad (3.7)$$

Da tali definizioni generali è possibile ottenere il risultato voluto nel caso libero, introducendo le conclusioni mostrate prima:

$$\mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, \tau) = -[1 - n_F(\xi_{\vec{p}})] \int_0^\beta d\tau e^{\tau(i\omega_n - \xi_{\vec{p}})} = -\frac{[1 - n_F(\xi_{\vec{p}})] [e^{\beta(i\omega_n - \xi_{\vec{p}})} - 1]}{i\omega_n - \xi_{\vec{p}}} \quad (3.8)$$

Tuttavia questa forma non è ancora definitiva, in quanto lavorando con le proprietà della distribuzione di Fermi e delle frequenze fermioniche di Matsubara si ottiene:

$$\begin{aligned} i\beta \omega_n &= i(2n+1)\pi \rightarrow e^{i\beta \omega_n} = -1, \quad 1 - n_F(\xi_{\vec{p}}) = \frac{1}{e^{-\beta \xi_{\vec{p}}} + 1} \\ \Rightarrow \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, i\omega_n) &= \frac{[1 - n_F(\xi_{\vec{p}})] [e^{-\beta \xi_{\vec{p}}} + 1]}{i\omega_n - \xi_{\vec{p}}} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{p}}} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Tale risultato rappresenta il punto di arrivo del caso non interagente; a dispetto della sua apparente semplicità, esso contiene però tutte le informazioni necessarie su frequenza, energia e temperatura, servendo dunque come blocco da costruzione per una teoria interagente. La potenza del formalismo del tempo immaginario risiede tuttavia nella

capacità di collegare, tramite un procedimento noto come continuazione analitica, la funzione di Green-Matsubara con quella di Green ritardata, ottenendo:

$$i\omega_n \leftrightarrow \omega + i\delta \Rightarrow \mathcal{G}(\vec{p}, i\omega_n) \leftrightarrow G_{ret}(\vec{p}, \omega) \quad (3.10)$$

ove δ è un fattore di convergenza reale positivo ed infinitesimo. Questa stretta relazione ha importanti conseguenze anche sui sistemi fisici: difatti, come noto, la funzione di Green ritardata ammette un supporto temporale tale da poter descrivere la risposta ad una perturbazione esterna applicata ad essi in precedenza. Pertanto basterà calcolare la funzione di Green-Matsubara, e sfruttare la precedente equazione per inserirla nelle formule della teoria della risposta lineare, come quella di Kubo. Tuttavia la funzione ritardata non si limita ad essere proporzionale a variabili fisiche, potendo fornire il peso spettrale per il sistema e rientrando così nella determinazione di quantità particolarmente significative per esso, descritte nel prossimo paragrafo.

3.3 La funzione di densità spettrale

In questo paragrafo si presenterà una quantità molto importante nota come funzione di densità spettrale, o più semplicemente peso spettrale; esso è legato alla parte immaginaria della funzione di Green ritardata tramite le relazioni seguenti:

$$\pi R(\omega) = -Im [\bar{U}_{ret}(\omega)], \quad \pi A(\vec{p}, \omega) = -Im [G_{ret}(\vec{p}, \omega)] \quad (3.11)$$

ove si sono considerati i due casi bosonico e fermionico. Analizzando per concretezza il peso spettrale relativo all'operatore U , è necessario avere una formula per la sua funzione di Green ritardata per proseguire il calcolo. la soluzione comunemente adottata consiste nello scegliere la rappresentazione in una base completa ed ortonormale di autostati dell'hamiltoniana grancanonica K ; essa però si rivela difficilmente fruibile per i fini pratici, in quanto gli autostati non sono a priori noti. Anche se è possibile rimediare a tale carenza utilizzando la visuale di interazione, per ora tale problema non sussiste in quanto la derivazione richiede l'esistenza di tali autostati ma non la loro espressione esplicita. Con tali premesse la forma richiesta risulta:

$$\bar{U}_{ret}(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega + E_n - E_m + i\delta} \quad (3.12)$$

Da essa è possibile estrarre la parte immaginaria tramite l'identità di Dirac che asserisce:

$$\frac{1}{\omega + E_n - E_m + i\delta} = P \frac{1}{\omega + E_n - E_m} - i\pi\delta(\omega + E_n - E_m) \quad (3.13)$$

Con ciò si ottiene dunque il valore cercato per $R(\omega)$:

$$R(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \delta(\omega + E_n - E_m) \quad (3.14)$$

La formula precedente può essere però riscritta sfruttando le proprietà della delta di Dirac dopo un opportuno riarrangiamento:

$$e^{-\beta E_n} [1 - e^{-\beta(E_m - E_n)}] \Rightarrow R(\omega) = (1 - e^{-\beta\omega}) e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n} \delta(\omega + E_n - E_m) \quad (3.15)$$

L'utilità della scrittura precedente risiede nel fatto di poter rappresentare la funzione di Green ritardata in termini del peso spettrale mediante un opportuno integrale; adottando inoltre il procedimento di continuazione analitica si può ottenere il medesimo risultato anche per la funzione di Green-Matsubara $\mathcal{U}(i\omega_n)$. Le due forme sono presentate nel seguito:

$$\bar{U}_{ret}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{R(\omega')}{\omega - \omega' + i\delta}, \quad \mathcal{U}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{R(\omega')}{i\omega_n - \omega'} \quad (3.16)$$

Entrambe sono dimostrabili ricorrendo ad un calcolo esplicito, ove si adottino la forma per il peso spettrale esposta in precedenza e le consuete proprietà della delta di Dirac. I calcoli completi sono mostrati qui sotto:

$$\begin{aligned}
\bar{U}_{ret}(\omega) &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{(1 - e^{-\beta\omega'}) \delta(\omega' + E_n - E_m)}{\omega - \omega' + i\delta} \right] = \\
&= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n} \left[\frac{1 - e^{-\beta(E_m - E_n)}}{\omega - (E_m - E_n) + i\delta} \right] = e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega + E_n - E_m + i\delta}, \\
\mathcal{U}(i\omega_n) &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{(1 - e^{-\beta\omega'}) \delta(\omega' + E_n - E_m)}{i\omega_n - \omega'} \right] = \\
&= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n} \left[\frac{1 - e^{-\beta(E_m - E_n)}}{i\omega_n - (E_m - E_n)} \right] = e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|U|m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{i\omega_n + E_n - E_m}
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Quanto ottenuto dimostra la validità della scrittura supposta in precedenza, nota come rappresentazione di Lehmann delle funzioni di Green, la cui utilità risulterà più esplicita nel seguito. Volendo calcolare invece il peso spettrale per un sistema fermionico, è necessario partire dalla funzione di Green ritardata elettronica; la sua forma sarà simile alla (3.12) con due correzioni importanti: in primo luogo l'operatore U sarà sostituito da quello fermionico di distruzione $C_{\vec{p}\sigma}$, mentre in secondo luogo si dovrà mettere a numeratore della frazione un segno + tra i termini esponenziali in quanto ad essere mediato nella definizione è un anticommutatore. Il risultato cercato è dunque:

$$G_{ret}(\vec{p}, \omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{n,m} |\langle n|C_{\vec{p}\sigma}|m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{\omega + E_n - E_m + i\delta} \tag{3.18}$$

Da esso, tramite l'identità di Dirac, è possibile ricavare la funzione di densità spettrale, che risulta:

$$A(\vec{p}, \omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{n,m} |\langle n|C_{\vec{p}\sigma}|m\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \delta(\omega + E_n - E_m) \tag{3.19}$$

Confrontando la formula precedente con la (3.15) del caso bosonico, si nota una marcata differenza: nel caso fermionico il peso spettrale è definito positivo, mentre in quello bosonico esso lo è solo per frequenze $\omega > 0$, mentre risulta negativo qualora si abbia $\omega < 0$. Ciò permette dunque per il sistema fermionico di identificare il suo peso spettrale come densità di probabilità, mentre per quello bosonico tale connessione è garantita solo per frequenze (e dunque energie) positive, rappresentanti tuttavia la situazione fisica; tale scelta è altresì confermata dalla condizione di normalizzazione. Concentrandosi, per fissare le idee, sul primo caso essa risulta:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\vec{p}, \omega) \tag{3.20}$$

Per dimostrare tale risultato è necessario in prima battuta utilizzare le definizioni precedenti, dalle quali per le proprietà della delta di Dirac si ricava:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\vec{p}, \omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{n,m} |\langle n|C_{\vec{p}\sigma}|m\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \tag{3.21}$$

Per ottenere un risultato unitario dalla precedente equazione si devono ora ripercorrere in senso inverso i passi che hanno portato alla scrittura nella base di autostati dell'hamiltoniana grancanonica per la funzione di Green ritardata; pertanto si provvederà a scambiare gli indici muti nel secondo termine della sommatoria precedente, trovando:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\vec{p}, \omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left[\langle n|C_{\vec{p}\sigma}|m\rangle \langle m|C_{\vec{p}\sigma}^\dagger|n\rangle + \langle n|C_{\vec{p}\sigma}^\dagger|m\rangle \langle m|C_{\vec{p}\sigma}|n\rangle \right] \tag{3.22}$$

Da ciò sfruttando la partizione dell'unità e le regole di anticommutazione fermioniche si conclude che:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\vec{p}, \omega) = e^{\beta\Omega} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n| [C_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger + C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma}] |n\rangle \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\vec{p}, \omega) = e^{\beta\Omega} Tr [e^{-\beta K}] = 1 \tag{3.23}$$

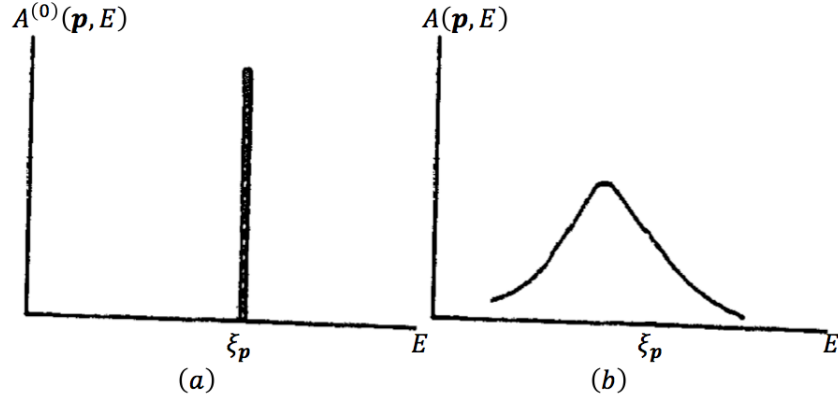


Figura 3.1: Funzione di densità spettrale per un elettrone a fissato momento \vec{p} : (a) caso libero; (b) caso interagente (adattata da [16]).

ove nell'ultimo passaggio si è ricordata la definizione di gran potenziale Ω . Si noti la validità di tale conclusione anche per un sistema bosonico, in quanto il commutatore che emerge all'interno dell'elemento di matrice tra gli operatori di distruzione e creazione, risulta in questa statistica anch'esso unitario. Continuando, per futuro interesse, a trattare il caso fermionico, dopo aver mostrato l'importanza della sua funzione di densità spettrale, conviene procedere con qualche esempio di applicazione, optando in primo luogo per il caso libero, nel quale l'operatore di distruzione fermionico in visuale di Heisenberg risulta:

$$K_0 = H_0 - \mu N \Rightarrow C_{\vec{p}\sigma}(t) = e^{-it\xi_{\vec{p}}} C_{\vec{p}\sigma} \quad (3.24)$$

avendo sfruttato il lemma di Hadamard in modo simile a quanto fatto nel paragrafo 2. Da ciò è possibile ottenere la funzione di Green ritardata utilizzandone la definizione, unitamente alle regole di anticommutazione fermioniche:

$$G_{ret}^{(0)}(\vec{p}, t - t') = -i\Theta(t - t') e^{-i(t-t')\xi_{\vec{p}}} \left\langle \left(C_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger + C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma} \right) \right\rangle = -i\Theta(t - t') e^{-i(t-t')\xi_{\vec{p}}} \quad (3.25)$$

Si procede ora al calcolo della sua trasformata di Fourier ottenibile inserendo nel peso esponenziale dell'integrando un fattore $\delta > 0$ che assicuri la convergenza:

$$\begin{aligned} G_{ret}^{(0)}(\vec{p}, E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ret}^{(0)}(\vec{p}, t - t') e^{iE(t-t')} = \int_{-\infty}^{+\infty} ds G_{ret}^{(0)}(\vec{p}, s) e^{iEs} \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} ds \Theta(s) e^{i(E-\xi_{\vec{p}})s} = -i \int_0^{+\infty} ds e^{i(E-\xi_{\vec{p}}+i\delta)s} = \frac{1}{E - \xi_{\vec{p}} + i\delta} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Da essa, tramite la consueta identità di Dirac, è possibile desumere la funzione di densità spettrale per un sistema fermionico non interagente:

$$A^{(0)}(\vec{p}, E) = \delta(E - \xi_{\vec{p}}) \quad (3.27)$$

La sua forma è mostrata in figura 3.1 nei casi di sistema libero ed interagente.

Essa può essere utilmente interpretata ricordando l'analogia tra peso spettrale e densità di probabilità: considerando un elettrone a fissato momento \vec{p} , qualora si studi il caso libero, ci si aspetta con probabilità 1 che la sua energia sia $E = \xi_{\vec{p}}$, lasciando pertanto a probabilità nulla gli altri valori. La forma grafica della funzione di densità spettrale è pertanto coerente con una delta di Dirac piccata in $\xi_{\vec{p}}$, resa in figura con una barra spessa per necessità grafiche; considerando poi il caso interagente, è doveroso attendersi che l'elettrone subisca processi di scattering con le altre particelle, lasciando incerti i suoi valori finali sia di momento che di energia. Pertanto il peso spettrale avrà supporto su un intervallo non nullo di valori di E e la sua normalizzazione rende sensata la forma assunta in figura precedente. Come ultima applicazione si considera il calcolo del numero medio di particelle a fissato momento \vec{p} :

$$n_{\vec{p}} = \left\langle C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma} \right\rangle \quad (3.28)$$

Nel caso libero esso è dato dalla distribuzione di Fermi (3.6), mentre in quello interagente è ottenibile utilizzando per la traccia la base di autostati dell'hamiltoniana grancanonica; inserendo la risoluzione dell'identità, si trova:

$$n_{\vec{p}} = e^{\beta\Omega} \sum_{n, m} \left\langle m | e^{-\beta K} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger | n \right\rangle \left\langle n | C_{\vec{p}\sigma} | m \right\rangle = e^{\beta\Omega} \sum_{n, m} e^{-\beta E_m} \left| \left\langle n | C_{\vec{p}\sigma} | m \right\rangle \right|^2 \quad (3.29)$$

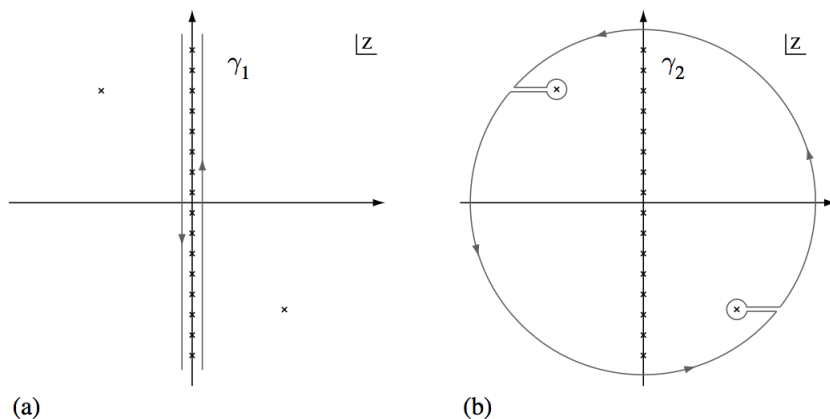


Figura 3.2: Contorni utilizzati per l'integrazione sul piano delle frequenze complesse z : (a) caso iniziale; (b) caso deformato (adattata da [3]).

L'obiettivo è ora di legare la precedente equazione alla formula (3.19); esse differiscono difatti per il fattore seguente, riarrangiato tramite le proprietà della delta di Dirac:

$$\begin{aligned} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \delta(E + E_n - E_m) &= e^{-\beta E_m} [e^{-\beta(E_n - E_m)} + 1] \\ \delta(E + E_n - E_m) &= e^{-\beta E_m} (e^{\beta E} + 1) \delta(E + E_n - E_m) \end{aligned} \quad (3.30)$$

Con tale scrittura è dunque possibile legare il peso spettrale al calcolo del numero medio di occupazione, tramite le proprietà sotto integrazione della funzione delta:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{A(\vec{p}, E)}{e^{\beta E} + 1} = e^{\beta \Omega} \sum_{n, m} e^{-\beta E_m} |\langle n | C_{\vec{p}\sigma} | m \rangle|^2 = n_{\vec{p}} \Rightarrow n_{\vec{p}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE n_F(E) A(\vec{p}, E) \quad (3.31)$$

Tale scrittura, a posteriori, risulta molto plausibile: per trovare il numero medio degli elettroni a fissato momento \vec{p} , basta sommare su tutte le energie il fattore di occupazione (funzione di Fermi) pesato per la probabilità di trovare una particella a quel dato valore di E . Ma quest'ultima quantità risulta in base alle considerazioni precedenti essere proprio il peso spettrale; tale ragionamento giustifica dunque la formula presentata, la quale nel caso libero, restituisce come atteso la funzione di distribuzione di Fermi. Volendo estendere tale conclusione al sistema bosonico, il cambiamento di segno che si deve apportare alle due equazioni precedenti, lascia identica la seconda parte della (3.31) con la sola accortezza di riferire le variabili fisiche ivi presenti al caso sotto esame. Ovvero si ottiene ancora il calcolo del valore di aspettazione della distribuzione statistica di Bose, con peso fornito dalla densità spettrale; il dominio di energia può con sicurezza estendersi su tutto l'asse, poiché è quest'ultima funzione ad avere supporto limitato in $E > 0$ qualora si vogliano descrivere situazioni reali. Quanto mostrato chiarisce dunque l'ubiqua importanza di tale strumento concettuale, nei casi sia libero che interagente; resta infine per completare il formalismo del tempo immaginario, da discutere la tecnica di somma sulle frequenze di Matsubara, più volte impiegata nel resto del capitolo, come si avrà modo di constatare. A tale esposizione sarà dunque dedicato il prossimo paragrafo.

3.4 Sommatorie sulle frequenze di Matsubara

In questo paragrafo si discuterà una tecnica molto utile per eseguire le somme sulle frequenze di Matsubara. Per cominciare si consideri il seguente integrale sul piano delle frequenze complesse z , il cui contorno è mostrato in figura 3.2.a; esso è ottenibile dal teorema dei residui, una volta notato che il contorno racchiude solo i poli della distribuzione di Fermi, mentre quelli della funzione f , anch'essi indicati con una x , cadono al di fuori:

$$I = \oint_{\gamma_1} \frac{dz}{2\pi i} f(z) n_F(z) = \sum_i f(z_i) \text{Res}_i [n_F(z)] \quad (3.32)$$

Il calcolo dei residui è fattibile ricordando la forma funzionale della distribuzione di Fermi; da ciò risulta come l'integrale sia proporzionale ad una sommatoria della funzione f valutata nelle frequenze di Matsubara (in questo

caso fermioniche):

$$z^* = i(2n+1)\frac{\pi}{\beta} \Rightarrow Res_{n^*}[n_F(z)] = \lim_{z \rightarrow z^*} \frac{z - z^*}{e^{\beta z} + 1} = \frac{1}{\beta e^{\beta z^*}} = -\frac{1}{\beta} \Rightarrow I = -\frac{1}{\beta} \sum_n f(i\omega_n) \rightarrow \sum_n f(i\omega_n) = -\beta I \quad (3.33)$$

Come emerge è dunque necessario valutare l'integrale precedente, e per farlo si ricorre alla deformazione del contorno illustrata in figura 3.2.b: da essa emerge come l'unico contributo risulti attorno ai residui di f percorso in senso orario. Difatti al limite i termini lungo le linee orizzontali si elidono essendo in versi opposti, mentre lungo il contorno di raggio infinito non si avrà alcun risultato a causa della rapida depressione esponenziale a cui è soggetto l'integrando. Da ciò basta calcolare gli α residui di f , indicati nell'ultimo passaggio come apice sulla sommatoria:

$$I = \oint_{\gamma_2} \frac{dz}{2\pi i} f(z) n_F(z) = -2\pi i \sum_{\alpha} Res \left[\frac{f(z) n_F(z)}{2\pi i} \right]_{z=\alpha} \Rightarrow \sum_n f(i\omega_n) = \beta \sum' Res [f(z) n_F(z)] \quad (3.34)$$

Tale risultato generale è subito testato in due esempi seguenti che emergono naturalmente nello studio di sistemi fortemente interagenti quali il gas di Coulomb. Ricordando la forma della trasformata di Fourier della funzione di Green-Matsubara nel caso libero, essendo ω_n frequenze bosoniche, si ottiene quanto voluto dalle proprietà della distribuzione di Fermi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, ip_n) \mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, ip_n + i\omega_n) &= \frac{1}{\beta} \sum_{p_n} \left[\frac{1}{ip_n - \xi_{\vec{p}}} \frac{1}{ip_n + i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \right] = \beta \sum' Res \left[\frac{1}{z - \xi_{\vec{p}}} \right. \\ &\left. \frac{1}{z + i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \frac{n_F(z)}{\beta} \right] \Rightarrow \begin{cases} z_1 = \xi_{\vec{p}} \rightarrow Res_1 = \frac{n_F(\xi_{\vec{p}})}{\xi_{\vec{p}} + i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \\ z_2 = \xi_{\vec{k}} - i\omega_n \rightarrow Res_2 = \frac{n_F(\xi_{\vec{k}} - i\omega_n)}{\xi_{\vec{k}} - i\omega_n - \xi_{\vec{p}}} = \frac{1}{\xi_{\vec{k}} - i\omega_n - \xi_{\vec{p}}} \frac{1}{e^{\beta(\xi_{\vec{k}} - i\omega_n)} + 1} = -\frac{n_F(\xi_{\vec{k}})}{\xi_{\vec{p}} + i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \end{cases} \\ \Rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, ip_n) \mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, ip_n + i\omega_n) &= \frac{n_F(\xi_{\vec{p}}) - n_F(\xi_{\vec{k}})}{\xi_{\vec{p}} + i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Con le stesse notazioni della formula precedente si può calcolare anche la seconda sommatoria, nella quale ad ultimo passaggio si è utilizzata la proprietà (3.6) della funzione di Fermi:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, ip_n) \mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n - ip_n) &= \frac{1}{\beta} \sum_{p_n} \left[-\frac{1}{ip_n - \xi_{\vec{p}}} \frac{1}{i\omega_n - ip_n - \xi_{\vec{k}}} \right] = \beta \sum' Res \left[\frac{1}{z - \xi_{\vec{p}}} \right. \\ &\left. \frac{1}{z - i\omega_n + \xi_{\vec{k}}} \frac{n_F(z)}{\beta} \right] \Rightarrow \begin{cases} z_1 = \xi_{\vec{p}} \rightarrow Res_1 = \frac{n_F(\xi_{\vec{p}})}{\xi_{\vec{p}} + \xi_{\vec{k}} - i\omega_n} \\ z_2 = i\omega_n - \xi_{\vec{k}} \rightarrow Res_2 = \frac{n_F(i\omega_n - \xi_{\vec{k}})}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{p}}} = -\frac{n_F(-\xi_{\vec{k}})}{\xi_{\vec{p}} + \xi_{\vec{k}} - i\omega_n} \end{cases} \Rightarrow -\frac{1}{\beta} \sum_n \left\{ \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, ip_n) \right. \\ \left. \mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n - ip_n) \right\} &= \frac{n_F(\xi_{\vec{p}}) - n_F(-\xi_{\vec{k}})}{\xi_{\vec{p}} + \xi_{\vec{k}} - i\omega_n} = \frac{n_F(-\xi_{\vec{k}}) - n_F(\xi_{\vec{p}})}{i\omega_n - \xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{k}}} = \frac{1 - n_F(\xi_{\vec{k}}) - n_F(\xi_{\vec{p}})}{i\omega_n - \xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{k}}} \end{aligned} \quad (3.36)$$

L'utilità delle somme sulle frequenze di Matsubara emerge chiara quando si dimostra la scelta di regolarizzare all'operatore numero l'ordinamento temporale con argomenti uguali; si cominci difatti calcolando con le tecniche mostrate in precedenza la seguente sommatoria:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, ip_n) &= \beta \sum' Res \left[\frac{1}{z - \xi_{\vec{p}}} \frac{n_F(z)}{\beta} \right] \Rightarrow z_1 = \xi_{\vec{p}} \\ \rightarrow Res_1 &= n_F(\xi_{\vec{p}}) \Rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, ip_n) = n_F(\xi_{\vec{p}}) \end{aligned} \quad (3.37)$$

Essa però è la serie di Fourier per la funzione di Green-Matsubara nel caso non interagente valutata a $\tau = 0$; per un argomento temporale generico essa vale:

$$\mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-ip_n \tau} \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, ip_n) = -_0 \langle T_{\tau} C_{\vec{p}\sigma}(\tau) C_{\vec{p}\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \quad (3.38)$$

Prendendo il limite richiesto si nota come a seconda della parte da cui ci si avvicina a $\tau = 0$, si ottengano risultati diversi, in seguito alle relazioni di anticommutazione fermioniche:

$$\mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, \tau = 0^+) = -_0 \langle C_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{p}\sigma}^\dagger \rangle = -[1 - n_F(\xi_{\vec{p}})], \quad \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, \tau = 0^-) = {}_0 \langle C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma} \rangle = n_F(\xi_{\vec{p}}) \quad (3.39)$$

Come appare dunque solo la seconda delle formule precedenti rappresenta l'alternativa corretta, in quanto il suo risultato è ottenuto anche attraverso le tecniche di somma mostrate. Risulta così giustificata la scelta in base alla quale la funzione di Green-Matsubara nel caso libero, valutata per identici argomenti temporali, equivale alla distribuzione di Fermi, ovvero alla media imperturbata dell'operatore numero:

$$-_0 \langle T_\tau C_{\vec{p}\sigma}(\tau) C_{\vec{p}\sigma}^\dagger(\tau) \rangle = {}_0 \langle C_{\vec{p}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma} \rangle = n_F(\xi_{\vec{p}}) \quad (3.40)$$

Gli esempi presentati sinora riguardano somme di funzioni di Green-Matsubara non interagenti; qualora si volesse trattare il caso generale è conveniente utilizzare la rappresentazione di Lehmann che lega la trasformata di Fourier del caso perturbato a quella libera tramite un'integrazione con peso dato dalla densità spettrale. Tale scelta consente per linearità di eseguire la somma richiesta con le tecniche descritte in precedenza, ottenendo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(\vec{p}, ip_n) \mathcal{G}(\vec{k}, ip_n + i\omega_n) &\Rightarrow \mathcal{G}(\vec{p}, ip_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(\vec{p}, \omega')}{ip_n - \omega'}, \quad \mathcal{G}(\vec{k}, ip_n + i\omega_n) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{A(\vec{k}, s)}{ip_n + i\omega_n - s} \Rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(\vec{p}, ip_n) \mathcal{G}(\vec{k}, ip_n + i\omega_n) = \beta \sum' Res \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(\vec{p}, \omega')}{z - \omega'} \right. \\ &\left. \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{A(\vec{k}, s)}{z + i\omega_n - s} \frac{n_F(z)}{\beta} \right] = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ A(\vec{p}, \omega') A(\vec{k}, s) \sum' Res \left[\frac{1}{z - \omega'} \frac{n_F(z)}{z + i\omega_n - s} \right] \right\} \quad (3.41) \\ &\Rightarrow \begin{cases} z_1 = \omega' \rightarrow Res_1 = \frac{n_F(\omega')}{\omega' + i\omega_n - s} \\ z_2 = s - i\omega_n \rightarrow Res_2 = \frac{n_F(s - i\omega_n)}{s - i\omega_n - \omega'} = -\frac{n_F(s)}{\omega' + i\omega_n - s} \end{cases} \Rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(\vec{p}, ip_n) \mathcal{G}(\vec{k}, ip_n + i\omega_n) = \\ &\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ A(\vec{p}, \omega') A(\vec{k}, s) \left[\frac{n_F(\omega') - n_F(s)}{\omega' + i\omega_n - s} \right] \right\} \end{aligned}$$

Tale risultato, ancora in forma grezza, può essere migliorato una volta forniti i pesi spettrali; per generalità non si prosegue oltre, notando però che nel caso libero essi sono pari a delle delta di Dirac piccate sulle energie delle rispettive particelle. Grazie alle proprietà delle funzioni delta sotto integrazione si riottiene come atteso l'espressione (3.35). La tecnica sviluppata in questo paragrafo si rivelerà molto utile in seguito, a partire dal prossimo, nel quale si adatteranno le conclusioni sulla formula di Kubo del capitolo precedente con quanto sinora presentato.

3.5 Formula di Kubo per la suscettività paramagnetica di Pauli

In questo paragrafo si adatteranno le conclusioni esposte nel capitolo precedente al formalismo del tempo immaginario di Matsubara, consentendo così di ritrovare coerenza tra le tecniche per il calcolo della suscettività magnetica presentate dall'inizio del lavoro di tesi. Utilizzando per la funzione di Green ritardata dei momenti magnetici nella formula di Kubo la continuazione analitica, si trova che la trasformata di Fourier della funzione di risposta, è l'opposto di quella della funzione di Green-Matsubara, ovvero:

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) &= -D_{\alpha\beta}^{ret}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\omega + i\delta \rightarrow i\omega_n}{=} -D_{\alpha\beta}^{Mats}(\vec{q}, i\omega_n) \Rightarrow \\ \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} [{}_0 \langle T_\tau m_\alpha(\vec{q}, \tau) m_\beta(-\vec{q}, 0) \rangle] \end{aligned} \quad (3.42)$$

ove il pedice 0 delle parentesi angolari ricorda che la formula di Kubo utilizza valori di aspettazione per il sistema non interagente. Come secondo passo si tratterà di derivare un'espressione nello spazio reciproco per i momenti magnetici espressi in seconda quantizzazione; la teoria per ottenere tale scrittura sia in spazio reale che in trasformata di Fourier, è stata presentata nel primo capitolo. Dunque si possono utilizzare le conclusioni lì fornite poiché assumevano gli stati liberi come base per il calcolo degli elementi di matrice, un procedimento coerente con

la presente scelta di mediare rispetto al sistema imperturbato:

$$\begin{aligned}
M_z(\vec{R}) &= -\mu_B \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}} \left(C_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} - C_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\downarrow} \right) \equiv -\mu_B \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}} \sigma C_{\vec{k}'\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} \Rightarrow \\
M_z(\vec{q}) &= \frac{1}{V} \int d^3\vec{R} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} M_z(\vec{R}) = -\frac{\mu_B}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma} \sigma C_{\vec{k}'\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{q}) = -\mu_B \frac{(2\pi)^3}{V} \cdot \\
\sum_{\vec{k}, \sigma} \sigma \int d^3\vec{k}' \frac{V}{(2\pi)^3} C_{\vec{k}'\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{q}) &= -\mu_B \sum_{\vec{k}, \sigma} \sigma C_{\vec{k}-\vec{q}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma}, \quad M_x(\vec{R}) = -\mu_B \cdot \\
\sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}} \left(C_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\downarrow} + C_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} \right) &\Rightarrow M_x(\vec{q}) = -\mu_B \sum_{\vec{k}} \left(C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\downarrow} + C_{\vec{k}-\vec{q}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} \right), \quad M_y(\vec{R}) \\
= -\mu_B \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}} \left(-iC_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\downarrow} + iC_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} \right) &\Rightarrow M_y(\vec{q}) = \mu_B i \sum_{\vec{k}} \left(C_{\vec{k}-\vec{q}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}\downarrow} - C_{\vec{k}-\vec{q}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}\uparrow} \right)
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Il terzo passo consiste infine nell'unire le due precedenti conclusioni per calcolare la componente zz del tensore di suscettività magnetica nel caso statico a frequenza nulla. Il computo del valor medio è poi ottenibile dal teorema di Wick, per cui si ha:

$$\begin{aligned}
\chi_{zz}(\vec{q}, 0) &= \mu_B^2 \sum_{\vec{p}, \vec{k}, ss'} ss' \int_0^\beta d\tau \left[{}_0\langle T_\tau C_{\vec{p}-\vec{q}s}^\dagger(\tau) C_{\vec{p}s}(\tau) C_{\vec{k}+\vec{q}s'}^\dagger(0) C_{\vec{k}s'}(0) \rangle \right] \\
&= \mu_B^2 \sum_{\vec{p}, \vec{k}, ss'} ss' \int_0^\beta d\tau \left\{ \left[{}_0\langle T_\tau C_{\vec{p}-\vec{q}s}^\dagger(\tau) C_{\vec{k}s'}(0) \rangle \right] \left[{}_0\langle T_\tau C_{\vec{p}s}(\tau) C_{\vec{k}+\vec{q}s'}^\dagger(0) \rangle \right] \right. \\
&\quad \left. + \left[{}_0\langle T_\tau C_{\vec{p}-\vec{q}s}^\dagger(\tau) C_{\vec{p}s}(\tau) \rangle \right] \left[{}_0\langle T_\tau C_{\vec{k}+\vec{q}s'}^\dagger(0) C_{\vec{k}s'}(0) \rangle \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Dei due prodotti ottenuti dopo l'espansione con il teorema di Wick si preserva solo il primo, in quanto il secondo è proporzionale a $\delta_{\vec{q}, \vec{0}}$: tale termine dunque non contribuisce ad eccezione di un insieme di misura nulla nello spazio reciproco, ove fornisce un risultato divergente. Come si intuisce, l'addendo in questione rappresenta una situazione non fisica, e dunque si conviene di trascurarlo nel prosieguo della trattazione. Con ciò la formula precedente può essere riscritta, scambiando gli operatori all'interno dell'ordinamento temporale, con l'aggiunta di un segno essendo il sistema fermionico, per ottenere la definizione della funzione di Green-Matsubara nel caso libero; eseguendo le somme con le delta di Kronecker e sviluppando ogni funzione in serie di Fourier, si trova:

$$\begin{aligned}
\chi_{zz}(\vec{q}, 0) &= -\mu_B^2 \sum_{\vec{p}, \vec{k}, ss'} ss' \int_0^\beta d\tau \left[{}_0\langle T_\tau C_{\vec{k}s'}(0) C_{\vec{p}-\vec{q}s}^\dagger(\tau) \rangle \right] \left[{}_0\langle T_\tau C_{\vec{p}s}(\tau) C_{\vec{k}+\vec{q}s'}^\dagger(0) \rangle \right] \\
&= -\mu_B^2 \sum_{\vec{p}, \vec{k}, ss'} ss' \int_0^\beta d\tau \mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, -\tau) \mathcal{G}^{(0)}(\vec{p}, \tau) \delta_{s, s'} \delta_{\vec{p}, \vec{k}+\vec{q}} = -2\mu_B^2 \cdot \\
\sum_{\vec{k}} \int_0^\beta d\tau \mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, -\tau) \mathcal{G}^{(0)}(\vec{k} + \vec{q}, \tau) &= -\frac{2\mu_B^2}{\beta^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} \sum_{p_n} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} e^{-ip_n \tau} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \frac{1}{ip_n - \xi_{\vec{k}+\vec{q}}}
\end{aligned} \tag{3.45}$$

L'integrale temporale è ora eseguibile ricordando la forma delle frequenze di Matsubara fermioniche; dal suo risultato è possibile riscrivere la precedente equazione come:

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - p_n)\tau} &= \begin{cases} \frac{e^{i(\omega_n - p_n)\beta} - 1}{i(\omega_n - p_n)} = 0, & \omega_n \neq p_n, \omega_n - p_n = \frac{2\pi}{\beta}(n - m) \\ \beta, & \omega_n = p_n \end{cases} \Rightarrow \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - p_n)\tau} \\
= \beta \delta_{\omega_n, p_n} \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{q}, 0) &= -\frac{2\mu_B^2}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{p_n} \frac{1}{ip_n - \xi_{\vec{k}}} \frac{1}{ip_n - \xi_{\vec{k}+\vec{q}}} \equiv -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} S_{\vec{k}, \vec{q}}
\end{aligned} \tag{3.46}$$

La sommatoria S indicata nella precedente equazione può essere espletata ricordando le conclusioni del paragrafo scorso; tale risultato consente così di ottenere la medesima forma presentata nel primo capitolo, studiando le

proprietà dello stato metallico:

$$S_{\vec{k}, \vec{q}} = \beta \sum' Res \left[\frac{1}{z - \xi_{\vec{k}}} \frac{1}{z - \xi_{\vec{k} + \vec{q}}} \frac{n_F(z)}{\beta} \right] \Rightarrow \begin{cases} z_1 = \xi_{\vec{k}} \rightarrow Res_1 = \frac{n_F(\xi_{\vec{k}})}{\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k} + \vec{q}}} \\ z_2 = \xi_{\vec{k} + \vec{q}} \rightarrow Res_2 = \frac{n_F(\xi_{\vec{k} + \vec{q}})}{\xi_{\vec{k} + \vec{q}} - \xi_{\vec{k}}} \end{cases} \Rightarrow \quad (3.47)$$

$$S_{\vec{k}, \vec{q}} = \frac{n_F(\xi_{\vec{k}}) - n_F(\xi_{\vec{k} + \vec{q}})}{\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k} + \vec{q}}} \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{q}, 0) = -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \left[\frac{n_F(\xi_{\vec{k}}) - n_F(\xi_{\vec{k} + \vec{q}})}{\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k} + \vec{q}}} \right]$$

Da essa è infine possibile giungere alla formula di Pauli ricordando che essa è il valore assunto dalla trasformata di Fourier della componente zz della suscettività magnetica per temperatura, frequenza e vettore d'onda tutti nulli. Dunque basta studiare il limite $\vec{q} \rightarrow \vec{0}$ e ricordare la forma della derivata della distribuzione di Fermi per $T = 0$; dalla definizione sulla densità totale degli stati N_{tot} valutata all'energia di Fermi, pari al potenziale chimico del sistema, si conclude così:

$$S_{\vec{k}, \vec{q}} = \frac{-\frac{\partial n_F(\xi_{\vec{k}})}{\partial \xi_{\vec{k}}} \frac{\partial \xi_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{q} + O(\vec{q}^2)}{-\frac{\partial \xi_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{q} + O(\vec{q}^2)} \xrightarrow{\vec{q} \rightarrow \vec{0}} \frac{\partial n_F(\xi_{\vec{k}})}{\partial \xi_{\vec{k}}} \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) = \quad (3.48)$$

$$- 2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \left[\frac{\partial n_F(\xi_{\vec{k}})}{\partial \xi_{\vec{k}}} \right] \xrightarrow{T \rightarrow 0} 2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \delta(\xi_{\vec{k}}) = \mu_B^2 \sum_{\vec{k}\sigma} \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) \equiv \mu_B^2 N_{tot}(E_F)$$

La formula precedente è un chiaro segno della consistenza della teoria sviluppata; in particolare essa lega il valore della suscettività magnetica al calcolo della densità degli stati. Tale legame verrà dimostrato essere valido qualora si consideri come sistema imperturbato su cui mediare quello descritto dal modello $t - J$, che non può essere formalmente interpretato come caso libero a causa delle forti correlazioni tra le sue componenti. I calcoli verranno mostrati nel prossimo paragrafo ove si otterrà altresì una formula di centrale importanza per il lavoro di tesi.

3.6 Suscettività magnetica e densità degli stati

In questo paragrafo si mostrerà la validità del legame tra suscettività magnetica e densità degli stati, pervenendo ad un'importante formula valida nel caso di sistema correlato a temperatura qualsiasi. Per cominciare si riprende l'espressione (3.45) nel caso di frequenza generica trovando:

$$\chi_{zz}(\vec{q}, iq_n) = -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_0^\beta d\tau e^{iq_n\tau} \mathcal{G}(\vec{k}, -\tau) \mathcal{G}(\vec{k} + \vec{q}, \tau) = \quad (3.49)$$

$$- \frac{2\mu_B^2}{\beta^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{p_n} \sum_{\omega_n} \mathcal{G}(\vec{k}, ip_n) \mathcal{G}(\vec{k} + \vec{q}, i\omega_n) \left(\int_0^\beta d\tau e^{iq_n\tau} e^{ip_n\tau} e^{-i\omega_n\tau} \right)$$

In essa vanno sottolineati due aspetti: in primo luogo l'assenza dell'apice 0 sulle funzioni di Green-Matsubara chiarisce che si sta trattando un sistema correlato, descritto nel suo stato imperturbato dal modello $t - J$; in secondo luogo la frequenza q_n della suscettività è bosonica, in quanto tale funzione di risposta è desunta da operatori fisici quali i momenti magnetici. Da quest'ultima considerazione è poi possibile ottenere il risultato dell'integrazione temporale grazie alle proprietà delle frequenze di Matsubara:

$$\int_0^\beta d\tau e^{iq_n\tau} e^{ip_n\tau} e^{-i\omega_n\tau} = \begin{cases} \frac{e^{i(q_n+p_n-\omega_n)\beta} - 1}{i(q_n+p_n-\omega_n)} = \beta \frac{e^{2\pi i(l+m-n)} - 1}{2\pi i(l+m-n)} = 0, \omega_n \neq p_n + q_n \\ \beta, \omega_n = p_n + q_n \end{cases} \quad (3.50)$$

$$\Rightarrow \int_0^\beta d\tau e^{i(q_n+p_n-\omega_n)\tau} = \beta \delta_{\omega_n, p_n+q_n}$$

Dalle due precedenti sfruttando la delta di Kronecker nella sommatoria, si conclude che:

$$\chi_{zz}(\vec{q}, iq_n) = -\frac{2\mu_B^2}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{p_n} \mathcal{G}(\vec{k}, ip_n) \mathcal{G}(\vec{k} + \vec{q}, ip_n + iq_n) \quad (3.51)$$

Per ottenere una conclusione da tale forma, è conveniente adottare la rappresentazione di Lehmann per le funzioni di Green-Matsubara in termini del peso spettrale; a priori esso non è noto per un sistema interagente, tuttavia

questa mancanza di informazioni può essere opportunamente indirizzata su un'altra quantità, la densità degli stati, che permetterà di trovare delle formule simili a quelle del paragrafo precedente. Riarrangiando l'espressione trovata, si ha:

$$\begin{aligned}
\chi_{zz}(\vec{q}, iq_n) &= -\frac{2\mu_B^2}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{p_n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k}, \omega')}{ip_n - \omega'} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{A(\vec{k} + \vec{q}, s)}{ip_n + iq_n - s} \\
&= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} ds A(\vec{k}, \omega') A(\vec{k} + \vec{q}, s) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{p_n} \frac{1}{ip_n - \omega'} \frac{1}{ip_n + iq_n - s} \right) \\
&:= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} ds A(\vec{k}, \omega') A(\vec{k} + \vec{q}, s) S(iq_n, \omega', s)
\end{aligned} \tag{3.52}$$

La sommatoria S definita nella formula precedente può essere calcolata con le tecniche esposte nel paragrafo 3.4, ottenendo dalle proprietà delle frequenze bosoniche q_n :

$$\begin{aligned}
S(iq_n, \omega', s) &= \beta \sum' Res \left[\frac{1}{z - \omega'} \frac{1}{z + iq_n - s} \frac{n_F(z)}{\beta} \right] \Rightarrow \\
\left\{ \begin{array}{l} z_1 = \omega' \rightarrow Res_1 = \frac{n_F(\omega')}{\omega' + iq_n - s} \\ z_2 = s - iq_n \rightarrow Res_2 = \frac{n_F(s - iq_n)}{s - iq_n - \omega'} = -\frac{n_F(s)}{\omega' + iq_n - s} \end{array} \right. &\Rightarrow S(iq_n, \omega', s) = \frac{n_F(\omega') - n_F(s)}{\omega' + iq_n - s}
\end{aligned} \tag{3.53}$$

Inserendo tale risultato nella precedente equazione è dunque possibile ottenere una formula generale per la trasformata di Fourier della componente zz del tensore di suscettività magnetica:

$$\chi_{zz}(\vec{q}, iq_n) = -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[A(\vec{k}, \omega') A(\vec{k} + \vec{q}, s) \frac{n_F(\omega') - n_F(s)}{\omega' + iq_n - s} \right] \tag{3.54}$$

Per quanto studiato alla fine del capitolo 1 è possibile misurare i valori statici a frequenza nulla della formula precedente; avendo già studiato il caso di vettore d'onda vicino a quello antiferromagnetico \vec{Q}_{AF} nel capitolo 2, conviene trattare la casistica $\vec{q} = \vec{0}$:

$$\begin{aligned}
\chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[A(\vec{k}, \omega') A(\vec{k}, s) \frac{n_F(\omega') - n_F(s)}{\omega' - s} \right] \\
&\stackrel{\omega' = s+t}{=} -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[A(\vec{k}, s+t) A(\vec{k}, s) \frac{n_F(s+t) - n_F(s)}{t} \right]
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Nel caso libero la precedente equazione possiede tutte le proprietà richieste per fornire la formula di Pauli, qualora ci si ponga a temperatura nulla; tale derivazione, anche se ampiamente presentata nel paragrafo precedente, risulta utile in questo contesto per testare l'espressione ottenuta. Inserendo dunque il peso spettrale del sistema scorrelato, dalle proprietà della delta di Dirac, dopo un'espansione in serie, si trova:

$$\begin{aligned}
A^{(0)}(\vec{k}, s) &= \delta(s - \xi_{\vec{k}}), \quad A^{(0)}(\vec{k}, s+t) = \delta(s+t - \xi_{\vec{k}}) \Rightarrow \chi_{zz}^{(0)}(\vec{0}, 0) \\
&= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[\delta(s+t - \xi_{\vec{k}}) \delta(s - \xi_{\vec{k}}) \frac{n_F(s+t) - n_F(s)}{t} \right] = \\
&- 2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ \delta(s - \xi_{\vec{k}}) \delta(t) \left[\frac{\partial n_F(s)}{\partial s} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n_F(s)}{\partial s^2} t + O(t^2) \right] \right\} \\
&= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[\delta(s - \xi_{\vec{k}}) \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \right] = -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \frac{\partial n_F(\xi_{\vec{k}})}{\partial \xi_{\vec{k}}}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Quanto ottenuto permette inoltre di legare la suscettività magnetica alla densità degli stati, definendo quest'ultima a partire dal peso spettrale. Nel seguito sono mostrati i calcoli nel caso tridimensionale libero, che conducono al valore in unità naturali noto dai corsi di fisica dello stato solido; per ottenerlo si sono sfruttate particolari proprietà della delta di Dirac dopo essere passati al continuo nella sommatoria sui momenti \vec{k} , esprimendo il dominio

d'integrazione in coordinate sferiche. Qui sotto è inoltre riportata la formula per la suscettività magnetica nel caso scorrelato a temperatura qualsiasi, da cui si desume correttamente il risultato di Pauli ricordando la forma della derivata della distribuzione di Fermi a $T = 0$:

$$\begin{aligned}
2 \sum_{\vec{k}} A^{(0)}(\vec{k}, s) &= 2 \sum_{\vec{k}} \delta(s - \xi_{\vec{k}}) = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty dk k^2 \delta(s - \varepsilon_k + \mu) \Rightarrow \delta\left(s + \mu - \frac{k^2}{2m}\right) = 2m \cdot \\
\delta[2m(s + \mu) - k^2] &= 2m \left\{ \frac{\delta\left[k - \sqrt{2m(s + \mu)}\right] + \delta\left[k + \sqrt{2m(s + \mu)}\right]}{2\sqrt{2m(s + \mu)}} \right\} \Rightarrow 2 \sum_{\vec{k}} A^{(0)}(\vec{k}, s) = \\
\frac{V}{\pi^2} \frac{m[2m(s + \mu)]}{\sqrt{2m(s + \mu)}} &= \frac{V}{2\pi^2} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{s + \mu} \equiv N_{tot}^{(0)}(s + \mu) \Rightarrow \chi_{zz}^{(0)}(\vec{0}, 0) = -\mu_B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \left[2 \sum_{\vec{k}} \delta(s - \xi_{\vec{k}}) \right] \\
&= -\mu_B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} ds \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \left[2 \sum_{\vec{k}} A^{(0)}(\vec{k}, s) \right] = -\mu_B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[\frac{\partial n_F(s)}{\partial s} N_{tot}^{(0)}(s + \mu) \right]
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Avendo constatato il corretto funzionamento delle formule nel caso libero, si passa ora a discutere quello correlato: come anticipato in esso non è nota a priori la forma del peso spettrale. Per procedere si opta in primo luogo per una sua separazione in funzione di una parte coerente e di un'altra incoerente; nella condizione esaminata in precedenza ciò era infruttuoso, poiché l'unico contributo non nullo risultava il primo, pari alla funzione delta. Ora tuttavia ciò non è più vero; difatti per un sistema interagente sono presenti entrambi i termini, con una dominanza del primo sull'ultimo per energie intorno al potenziale chimico. Un'altra importante caratteristica risiede nella sovrapposizione dei supporti dei due tipi di peso spettrale: il suo comportamento non è univoco e dipende dalle caratteristiche fisiche delle particelle che vengono descritte. Nel seguito si adotterà l'ipotesi più naturale, in base alla quale l'energia di Fermi è la scala dominante di energia rispetto alle altre presenti, come ad esempio lo scattering rate Γ . Ciò è intuibile, poiché essendo Γ^{-1} pari alla vita media in condizioni non relativistiche, si sta studiando un insieme di particelle non evanescenti, la cui risposta a perturbazioni esterne come il campo magnetico è osservabile e misurabile; la validità della condizione fornita ha in realtà conseguenze più profonde, in quanto per consistenza si dovrà lavorare in tale limite anche analizzando il comportamento della suscettività magnetica uniforme e costante per i cuprati descritti dal modello $t - J$. Assicurati sulla bontà dell'ipotesi, è possibile provare che le parti coerente ed incoerente della densità spettrale sono approssimativamente disgiunte e dunque è ammissibile trascurare il loro prodotto; con simili premesse, è possibile riscrivere il risultato della (3.55) come:

$$\begin{aligned}
\chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ \left[A_c(\vec{k}, s + t) A_c(\vec{k}, s) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + A_i(\vec{k}, s + t) A_i(\vec{k}, s) \right] \left[\frac{n_F(s + t) - n_F(s)}{t} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.58}$$

E' poi sensato attendersi che ciascun peso spettrale ammetta valori non nulli in un supporto limitato. Tale ipotesi è plausibile e si dimostrerà corretta nel paragrafo 3.8, relativamente alla parte coerente, quando si riporteranno le conclusioni sulla densità degli stati per il modello $t - J$; essa dunque permette di considerare il prodotto tra le due funzioni di densità spettrale solo quando i rispettivi argomenti sono poco distanti tra loro. Si noti che l'obiettivo finale dell'assunzione è assicurare la trascurabilità dei termini al primo ordine e superiori in frequenza t nello sviluppo della funzione a fattore delle densità spettrali. Dunque qualora si dovesse confrontare l'andamento della suscettività magnetica così desunta con i dati sperimentali, si otterranno informazioni indirette sulla liceità dell'ipotesi sotto indagine ed equivalentemente sulla restrizione del supporto energetico dei contributi coerenti ed incoerenti. Assumendo valido quanto descritto, nella precedente formula va inserita la condizione:

$$\begin{cases} A_c(\vec{k}, s + t) A_c(\vec{k}, s) \neq 0 \\ A_i(\vec{k}, s + t) A_i(\vec{k}, s) \neq 0 \end{cases} \Leftrightarrow t \approx 0 \tag{3.59}$$

Con essa è dunque possibile riorganizzare la (3.58), secondo il proposito enunciato in precedenza di espandere in serie nella piccola frequenza t , ottenendo:

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ \left[A_c(\vec{k}, s+t) A_c(\vec{k}, s) + A_i(\vec{k}, s+t) A_i(\vec{k}, s) \right] \right. \\ &\left. \left[\frac{\partial n_F(s)}{\partial s} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n_F(s)}{\partial s^2} t + O(t^2) \right] \right\} \approx -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ A_c(\vec{k}, s) \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt A_c(\vec{k}, s+t) \right] \right. \\ &\left. + A_i(\vec{k}, s) \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt A_i(\vec{k}, s+t) \right] \right\} \quad (3.60) \end{aligned}$$

Gli integrali in t presenti nell'equazione precedente sono risolvibili ricorrendo a quanto discusso nei paragrafi precedenti. Ivi però si era trattata la normalizzazione del peso spettrale complessivo; per ricavare quelle delle singole parti è necessario ricordare che il contributo coerente, per $\mu \gg \Gamma$ è scrivibile come il prodotto di un fattore di rinormalizzazione Z per una funzione delta centrata sulla relazione di dispersione grancanonica. Ad una simile forma tenderà anche il peso spettrale della buca fisica riportato nel paragrafo 3.8 per temperature maggiori della soglia di pairing per gli holoni, quando cioè si annulla l'energy gap Δ del sistema; ne segue dunque come il propagatore fornito in quella sede rappresenti la sola parte coerente, l'unica che contribuisce alla suscettività magnetica come si mostrerà. Pertanto non serve scendere così nei dettagli per l'analogo incoerente, limitandosi ad osservare come la sua integrazione nelle frequenze debba rispettare la condizione di normalizzazione enunciata in precedenza. Da tali osservazioni è dunque ammissibile rimaneggiare la formula (3.60), definendo formalmente per i due costituenti il peso spettrale, una densità degli stati come operato in precedenza:

$$\begin{aligned} A(\vec{k}, s) &= A_c(\vec{k}, s) + A_i(\vec{k}, s) = Z\delta(s - \xi_{\vec{k}}) + A_i(\vec{k}, s) \Rightarrow \begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} ds A_c(\vec{k}, s) = \\ \int_{-\infty}^{+\infty} ds A_i(\vec{k}, s) = \end{cases} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} ds A(\vec{k}, s) - \int_{-\infty}^{+\infty} ds A_c(\vec{k}, s) &= 1 - Z \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) = -\mu_B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \left[2 \sum_{\vec{k}} A_c(\vec{k}, s) \right] \right. \\ &\left. \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx A_c(\vec{k}, x) \right] + \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \left[2 \sum_{\vec{k}} A_i(\vec{k}, s) \right] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx A_i(\vec{k}, x) \right] \right\} = -\mu_B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[Z \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \right. \\ &\left. N_{tot}^c(s + \mu) + (1 - Z) \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} N_{tot}^i(s + \mu) \right] \quad (3.61) \end{aligned}$$

L'obiettivo è ora di riscrivere la conclusione precedente in termini della densità degli stati e delle sue derivate, tutte calcolate all'energia di Fermi, pari al potenziale chimico del sistema. Tale scelta, se da una parte sembrerebbe appesantire l'espressione finale della suscettività magnetica uniforme e costante, dall'altra sortisce un effetto molto proficuo, eliminando del tutto la parte incoerente dal calcolo. Per il valore di energia in questione si è difatti discusso inizialmente come il contributo dominante risulti quello coerente, rappresentando l'altro una correzione trascurabile; nel proposito di lavoro è dunque possibile procedere con la sola prima parte della formula (3.61), riarrangiando per valori qualsiasi di temperatura la derivata della distribuzione di Fermi. Si noti come si possa tralasciare l'apice nella densità degli stati, poiché come si è osservato, la funzione di Green-Matsubara da cui la si desumerà nel paragrafo 3.9 produce in maniera automatica la sola parte coerente, essendo definita in un intorno della superficie di Fermi:

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= -Z\mu_B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[\frac{\partial n_F(s)}{\partial s} N_{tot}(s + \mu) \right] \Rightarrow n_F(s) = \frac{1}{e^{\beta s} + 1}, 1 - n_F(s) \\ &= 1 - \frac{1}{e^{\beta s} + 1} = \frac{e^{\beta s}}{e^{\beta s} + 1} \rightarrow \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} = -\frac{\beta e^{\beta s}}{(e^{\beta s} + 1)^2} = -\beta n_F(s) [1 - n_F(s)] \quad (3.62) \end{aligned}$$

La funzione ottenuta a fattore assume valori non nulli in una regione larga β^{-1} attorno ad $s = 0$, cosicché nell'integrazione precedente risulta sensato espandere la densità degli stati attorno all'origine delle frequenze, essendo le correzioni rese poco importanti dalla rapida depressione esponenziale della derivata della distribuzione

di Fermi. Con tale scelta si deve calcolare:

$$\begin{aligned}
N_{tot}(\mu + s) &= N_{tot}(\mu) + \left. \frac{\partial N_{tot}(s)}{\partial s} \right|_{s=\mu} s + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 N_{tot}(s)}{\partial s^2} \right|_{s=\mu} s^2 + O(s^3) \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) = Z\beta\mu_B^2 \cdot \\
&\int_{-\infty}^{+\infty} ds \left\{ n_F(s) [1 - n_F(s)] \left[N_{tot}(\mu) + \left. \frac{\partial N_{tot}(s)}{\partial s} \right|_{s=\mu} s + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 N_{tot}(s)}{\partial s^2} \right|_{s=\mu} s^2 + O(s^3) \right] \right\} = \\
Z\beta\mu_B^2 &\left\{ N_{tot}(\mu) \int_{-\infty}^{+\infty} ds n_F(s) [1 - n_F(s)] + \left. \frac{\partial N_{tot}(s)}{\partial s} \right|_{s=\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} ds s n_F(s) [1 - n_F(s)] + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 N_{tot}(s)}{\partial s^2} \right|_{s=\mu} \cdot \right. \\
&\left. \int_{-\infty}^{+\infty} ds s^2 n_F(s) [1 - n_F(s)] + O(s^3) \right\} := Z\beta\mu_B^2 \left[N_{tot}(\mu) A + \left. \frac{\partial N_{tot}(s)}{\partial s} \right|_{s=\mu} B + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 N_{tot}(s)}{\partial s^2} \right|_{s=\mu} C + \dots \right] \quad (3.63)
\end{aligned}$$

Il primo integrale A è fattibile ricordando la forma della derivata della funzione di Fermi; il secondo integrale B invece svanisce poiché l'integrando è dispari su un dominio simmetrico:

$$\begin{aligned}
A &= \int_{-\infty}^{+\infty} ds n_F(s) [1 - n_F(s)] = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \left[-\frac{1}{\beta} \frac{\partial n_F(s)}{\partial s} \right] = -\left. \frac{n_F(s)}{\beta} \right|_{s=-\infty}^{s=+\infty} = \frac{1}{\beta}, \quad B = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \{ s n_F(s) \\
&[1 - n_F(s)] \} = \int_{-\infty}^{+\infty} ds (-s) n_F(-s) [1 - n_F(-s)] = \int_{-\infty}^{+\infty} ds (-s) [1 - n_F(s)] n_F(s) \equiv -B \Rightarrow B = 0
\end{aligned} \quad (3.64)$$

ove negli ultimi passaggi si sono sfruttate le proprietà della distribuzione di Fermi. Per il terzo contributo C il calcolo risulta più complicato; esso è riportato nella formula seguente dopo averne discusso il percorso logico seguito. Utilizzando le proprietà di simmetria e l'integrazione per parti si arriva ad un calcolo notevole che può essere affrontato legando la distribuzione di Fermi a quella di Bose; utilizzando per quest'ultima la serie geometrica, dopo un cambio di variabile si riconosce la funzione Γ di Eulero, pari al fattoriale nel caso di numeri interi positivi. Riarrangiando quanto ottenuto si può esprimere il tutto tramite la ζ di Riemann, i cui valori sono tabulati; con essi si trova così quanto voluto:

$$\begin{aligned}
C &= \int_{-\infty}^{+\infty} ds s^2 n_F(s) [1 - n_F(s)] \stackrel{x=\beta s}{=} \frac{1}{\beta^3} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{2}{\beta^3} \int_0^{+\infty} dx x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{2}{\beta^3} \left(-\frac{x^2}{e^x + 1} \Big|_{x=0}^{x=+\infty} \right. \\
&+ 2 \int_0^{+\infty} dx \frac{x}{e^x + 1} \Big) = \frac{4}{\beta^3} \int_0^{+\infty} dx \frac{x}{e^x + 1} := \frac{4}{\beta^3} I_1, \quad I_n = \int_0^{+\infty} dx \frac{x^n}{e^x + 1} \Rightarrow -\frac{1}{e^x + 1} + \frac{1}{e^x - 1} = \frac{2}{e^{2x} - 1} \rightarrow \\
\frac{1}{e^x + 1} &= \frac{1}{e^x - 1} - \frac{2}{e^{2x} - 1} \Rightarrow I_n = \int_0^{+\infty} dx x^n \left(\frac{1}{e^x - 1} - \frac{2}{e^{2x} - 1} \right) = \int_0^{+\infty} dx \frac{x^n}{e^x - 1} - 2 \int_0^{+\infty} \frac{dt t^n}{2} \frac{1}{2^n e^t - 1} = \\
(1 - 2^{-n}) &\int_0^{+\infty} dx \frac{x^n}{e^x - 1}, \quad \frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{1}{1 - e^{-x}} - 1 = \sum_{l=0}^{\infty} (e^{-x})^l - 1 = \sum_{l=1}^{\infty} e^{-xl} \Rightarrow I_n = (1 - 2^{-n}) \cdot \\
\sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{+\infty} dx x^n e^{-xl} &\stackrel{xl=y}{=} (1 - 2^{-n}) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{n+1}} \int_0^{+\infty} dy y^n e^{-y} := (1 - 2^{-n}) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1)}{l^{n+1}} = n! (1 - 2^{-n}) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{n+1}} \\
&:= n! (1 - 2^{-n}) \zeta(n+1), \quad \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \Rightarrow C = \frac{1}{\beta^3} \frac{\pi^2}{3}
\end{aligned} \quad (3.65)$$

Dalle tre formule precedenti si può dunque desumere un'espressione approssimata per la trasformata di Fourier della suscettività magnetica uniforme e costante:

$$\chi_{zz}(\vec{0}, 0) = Z\mu_B^2 \left[N_{tot}(\mu) + \frac{1}{\beta^2} \frac{\pi^2}{6} \left. \frac{\partial^2 N_{tot}(s)}{\partial s^2} \right|_{s=\mu} + \dots \right] \quad (3.66)$$

Essa risulta utile qualora si voglia limitare il calcolo al secondo ordine in temperatura; per lavorare invece con una formula completa è necessario tenere tutti gli ordini pari dello sviluppo in serie. Dai risultati esaminati in precedenza sulle integrazioni, si perviene dunque a:

$$\chi_{zz}(\vec{0}, 0) = Z\beta\mu_B^2 \left\{ \frac{N_{tot}(\mu)}{\beta} + \sum_{n \text{ pari } \geq 2} \left[\frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n N_{tot}(s)}{\partial s^n} \right|_{s=\mu} \frac{2}{\beta^{n+1}} \int_0^{+\infty} dx x^n \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} \right] \right\} \quad (3.67)$$

L'integrale presente nella precedente equazione è una generalizzazione di quello calcolato nella (3.65); dopo una prima integrazione per parti, dalle conclusioni di quella formula si trova:

$$\frac{2}{\beta^{n+1}} \int_0^{+\infty} dx x^n \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{2n}{\beta^{n+1}} \int_0^{+\infty} dx \frac{x^{n-1}}{e^x + 1} \equiv \frac{2n}{\beta^{n+1}} I_{n-1} = \frac{2n}{\beta^{n+1}} (n-1)! (1 - 2^{-n+1}) \zeta(n) \quad (3.68)$$

Dalle due precedenti, tramite le proprietà del fattoriale, si può ottenere il risultato preannunciato ad inizio paragrafo:

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= Z \mu_B^2 \left\{ N_{tot}(\mu) + \sum_{n \text{ pari} \geq 2} \left[\frac{1}{n!} \frac{\partial^n N_{tot}(s)}{\partial s^n} \Big|_{s=\mu} \frac{2}{\beta^n} n(n-1)! (1 - 2^{-n+1}) \zeta(n) \right] \right\} \\ \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= Z \mu_B^2 \left\{ N_{tot}(\mu) + \sum_{n \text{ pari} \geq 2} \left[\frac{2(1 - 2^{1-n})}{\beta^n} \zeta(n) \frac{\partial^n N_{tot}(s)}{\partial s^n} \Big|_{s=\mu} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Esso mostra anche nel caso di sistema correlato il legame tra suscettività magnetica e densità degli stati; quanto ottenuto in questo paragrafo rientra però in una teoria più generale qualora si riprendano le conclusioni del capitolo 2 che legavano la suscettività magnetica all'opposto della funzione di Green ritardata tra momenti magnetici e dunque nel caso di temperatura nulla e frequenza definita positiva all'opposto di quella causale per i medesimi operatori. Partendo da tale punto nel prossimo paragrafo si mostrerà come le formule per la suscettività calcolate a diversi valori del vettore d'onda siano in realtà desumibili dalla stessa espressione generale adottando approssimazioni differenti.

3.7 Espansione in bolle di 4 propagatori

In questo paragrafo si cercherà di legare le conclusioni sulla trasformata di Fourier della suscettività magnetica ottenute in precedenza e nel capitolo 2. Da quanto esposto prima si deve dunque calcolare la funzione di Green causale tra i momenti magnetici, ovvero dopo un riscaldamento, tra gli operatori di spin. Adottando il formalismo di Matsubara con tempo definito positivo in quanto inserito nella teoria del path integral, resta dunque da valutare un solo valor medio, preoccupandosi alla fine di inserire i coefficienti di proporzionalità. Si lavorerà con un sistema descritto dal modello $t - J$, esprimendo la sua azione tramite l'approssimazione che la considera come somma di un contributo spinonico ed uno holonico, con il campo di gauge a svolgere il ruolo di mediazione tra i due settori. La quantità da calcolare è riportata nel seguito, ricordando l'espressione per l'operatore fisico di spin ottenuta nel capitolo 2 e che l'organizzazione in due sottoreticoli di Neel richiede il fattore $(-1)^{|x-y|}$:

$$\begin{aligned} \langle \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(y) \rangle &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A \mathcal{D}z \mathcal{D}h \left\{ e^{-[S_h(A, h) + S_z(A, z)]} (-1)^{|x-y|} \right. \\ &\quad \left. [1 - h^*(x) h(x)] [1 - h^*(y) h(y)] z_\alpha^*(x) \vec{\sigma}_{\alpha\beta} z_\beta(x) \cdot z_\gamma^*(y) \vec{\sigma}_{\gamma\delta} z_\delta(y) \right\} \end{aligned} \quad (3.70)$$

Prima di procedere con il calcolo esplicito, è vitale operare la seguente osservazione: la decomposizione dello spin fisico in funzione dell'holone h e dello spinone z , con conseguente inserimento del fattore di fase per mimare lo spin flip nello schema a due reticoli, è ammissibile soltanto se essa fornisce quantità localmente gauge invarianti, poiché come è stato dimostrato nel capitolo 2, il paradigma utilizzato gode di questa proprietà. Come si mostrerà in seguito, attraverso vari passaggi, si perverrà a tre contributi che descrivono la funzione a due punti di spin: dovendo essa illustrare il ruolo di connettore operato dal campo di gauge tra le trasformate di Fourier della componente zz della suscettività magnetica in $\vec{q} = \vec{0}$ e $\vec{q} = \vec{Q}_{AF}$, è quanto mai doveroso ritrovare, relativamente al vettore antiferromagnetico, i risultati esposti nel precedente capitolo. Dunque ci si attenderà, in campo reale, che uno dei tre termini risulti pari alla media sul campo statistico del modulo quadro della funzione $G(x, y|A)$ ivi definita, legata agli operatori spinonici. Ciò consente di asserirne l'invarianza richiesta rispetto a trasformazioni $U(1)$; come si proverà, analogo comportamento sarà riscontrato anche nel secondo addendo, poiché la sua forma è il prodotto di due strutture uguali alla precedente, una dipendente da campi z e l'altra da campi h . Fin qui dunque è garantita la correttezza della scelta operata inizialmente per scrivere lo spin nel formalismo adottato; destino diverso tuttavia è riservato al terzo contributo della funzione di correlazione. Come si dimostrerà, esso sarà dato dal prodotto di due funzioni di Green per la buca fisica, ciascuna ottenuta mediando sul campo di gauge il fattore $G(x, y|A)$ per il corrispondente $H^\dagger(x, y|A)$ definito nel settore holonico. Da quanto discusso è dunque intuibile come non sia più scontato desumere ora l'invarianza sotto l'azione del gruppo $U(1)$; precisamente, ciò potrà accadere solamente a patto di una revisione della decomposizione spin-carica proposta all'inizio, nella quale si vieti ora lo spin flip. Come si mostrerà in seguito difatti, nello schema a due reticoli A e B adottato in spazio reale, il

campo z assume due espressioni diverse a seconda che l'indice reticolare ad argomento (ovvero nel limite continuo la sua coordinata) appartenga ad A oppure a B . Tale libertà risulterà tuttavia soppressa volendo mantenere la condizione richiesta; il responsabile di questa scelta è la forma dell'addendo che si sta descrivendo, ovvero in ultima analisi il campo statistico che ha accoppiato in maniera peculiare holoni e spinoni, ricostruendo la buca fisica. A causa del comportamento fissato per z dall'invarianza di gauge, si deve pertanto escludere in spazio reale il fattore di fase $(-1)^{|x-y|}$ che ne mimava la possibilità di disporsi su ciascuno dei due sottoreticoli. Quanto discusso serve dunque per intendere nel giusto modo la formula precedente: in essa la scrittura dello spin fisico nelle variabili del modello $t-J$ deve fornire per costruzione dei contributi localmente gauge invarianti. Dunque finché si discuteranno i primi due addendi prodotti dall'equazione (3.70) dopo l'applicazione del teorema di Wick, si potrà mantenere la struttura con i campi h e z presentata; quando invece si dovrà trattare il terzo addendo sarà necessaria, prima di procedere, un'accurata disamina che giungerà alle conclusioni descritte in precedenza e permetterà di legare così il prodotto di due funzioni di Green per la buca fisica senza fasi aggiuntive al calcolo della suscettività magnetica uniforme e costante tramite la densità degli stati, come si è esposto nei due paragrafi precedenti. In breve dunque, il campo z dell'equazione (3.70) va così inteso: esso rappresenta propriamente lo spinone qualora nei diagrammi di espansione della funzione a due punti di spin, il campo di gauge accoppi linee di particella di ugual natura (spinoni con se stessi ed holoni con se medesimi). Nel caso in cui invece risultasse una mediazione tra campi diversi, per dare origine alla buca fisica, sarà necessario rimpiazzare la parte di spin nella scrittura degli operatori elettronici con i coefficienti b definiti nel capitolo 2; da essi tuttavia sarà formalmente possibile passare ad una notazione in z purché si elimini la diversità di comportamento nello schema a due reticoli, garantendo in tal modo l'invarianza di gauge. Chiarito dunque il significato profondo del formalismo utilizzato, conviene ora passare alla manipolazione dell'equazione (3.70), adoperando tutta una serie di conclusioni accessorie; in primo luogo si deve inserire la nota relazione di completezza tra le matrici di Pauli. In secondo luogo essendo la funzione integranda fattorizzabile in una parte holonica ed una spinonica, si può utilizzare la conclusione del capitolo precedente che riesprime il valor medio rispetto ad un'azione efficace dipendente dal solo campo di gauge, considerando però come argomenti i valori di aspettazione delle due parti rispetto ai settori holonico e spinonico. I due risultati appena descritti assumono la forma seguente:

$$\overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \overrightarrow{\sigma}_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}, \quad F \equiv F_1(h) F_2(z) \Rightarrow \langle F \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A \left[e^{-S_{eff}(A)} \langle F_1(h) \rangle_{S_h} \langle F_2(z) \rangle_{S_z} \right] \quad (3.71)$$

Da essi si trova così che la precedente equazione diviene:

$$\begin{aligned} \langle \overrightarrow{S}(x) \cdot \overrightarrow{S}(y) \rangle &= \frac{(-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta})}{Z} \int \mathcal{D}A \left\{ e^{-S_{eff}(A)} \right. \\ &\left. \langle [1 - h^*(x)h(x)][1 - h^*(y)h(y)] \rangle_{S_h} \langle z_\alpha^*(x)z_\beta(x)z_\gamma^*(y)z_\delta(y) \rangle_{S_z} \right\} \end{aligned} \quad (3.72)$$

La terza conclusione necessaria per procedere riguarda il calcolo dei valori medi sui settori holonico e spinonico; per esso si sfrutta la linearità ed il teorema di Wick ottenendo nell'integrando precedente delle semplificazioni notevoli:

$$\begin{aligned} \langle [1 - h^*(x)h(x)][1 - h^*(y)h(y)] \rangle_{S_h} &= 1 - \langle h^*(y)h(y) \rangle_{S_h} - \langle h^*(x)h(x) \rangle_{S_h} + \langle h^*(x)h(x)h^*(y)h(y) \rangle_{S_h} \\ &= 1 - \langle h^*(y)h(y) \rangle_{S_h} - \langle h^*(x)h(x) \rangle_{S_h} + \langle h^*(x)h(x) \rangle_{S_h} \langle h^*(y)h(y) \rangle_{S_h} + \langle h^*(x)h(y) \rangle_{S_h} \langle h(x)h^*(y) \rangle_{S_h} \\ &= [1 - \langle h^*(x)h(x) \rangle_{S_h}] [1 - \langle h^*(y)h(y) \rangle_{S_h}] + \langle h^*(x)h(y) \rangle_{S_h} \langle h(x)h^*(y) \rangle_{S_h}, \\ \langle z_\alpha^*(x)z_\beta(x)z_\gamma^*(y)z_\delta(y) \rangle_{S_z} &= \langle z_\alpha^*(x)z_\beta(x) \rangle_{S_z} \langle z_\gamma^*(y)z_\delta(y) \rangle_{S_z} + \langle z_\alpha^*(x)z_\delta(y) \rangle_{S_z} \langle z_\beta(x)z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \end{aligned} \quad (3.73)$$

Quanto ottenuto può essere ulteriormente semplificato notando una quarta proprietà: essendo lo spin disposto in due sottoreticoli di Neel, il suo valor medio complessivo risulta nullo. Con il formalismo del path integral ciò porta ad una conclusione notevole sfruttando la seconda parte della (3.71):

$$\begin{aligned} \langle \overrightarrow{S}(x) \rangle &= \frac{(-1)^{|x|}}{Z} \int \mathcal{D}A \mathcal{D}z \mathcal{D}h \left\{ e^{-[S_h(A,h) + S_z(A,z)]} [1 - h^*(x)h(x)] z_\alpha^*(x) \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} z_\beta(x) \right\} \\ &= \frac{(-1)^{|x|}}{Z} \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} \int \mathcal{D}A \left\{ e^{-S_{eff}(A)} \langle [1 - h^*(x)h(x)] \rangle_{S_h} \langle z_\alpha^*(x)z_\beta(x) \rangle_{S_z} \right\} \simeq \\ &\frac{(-1)^{|x|}(1-\delta)}{Z} \int \mathcal{D}A \left[e^{-S_{eff}(A)} \langle z_\alpha^*(x) \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} z_\beta(x) \rangle_{S_z} \right] = \overrightarrow{0} \Leftrightarrow \langle z_\alpha^*(x) \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} z_\beta(x) \rangle_{S_z} = \overrightarrow{0} \end{aligned} \quad (3.74)$$

ove si è sfruttata l'approssimazione di campo medio che lega l'operatore numero holonico alla sua concentrazione δ . Da tale conclusione si può riscrivere il valor medio iniziale come:

$$\begin{aligned} \langle z_\alpha^*(x) z_\beta(x) z_\gamma^*(y) z_\delta(y) \rangle_{S_z} &= \langle z_\alpha^*(x) z_\delta(y) \rangle_{S_z} \langle z_\beta(x) z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \Rightarrow \langle \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(y) \rangle = \\ &= \frac{(-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta})}{Z} \int \mathcal{D}A e^{-S_{eff}(A)} \{ [1 - \langle h^*(x) h(x) \rangle_{S_h}] [1 - \langle h^*(y) h(y) \rangle_{S_h}] \\ &+ \langle h^*(x) h(y) \rangle_{S_h} \langle h(x) h^*(y) \rangle_{S_h} \} \left[\langle z_\alpha^*(x) z_\delta(y) \rangle_{S_z} \langle z_\beta(x) z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \right] := I + II \end{aligned} \quad (3.75)$$

I due termini definiti nella formula precedente sono calcolabili ricorrendo ad alcune approssimazioni; per il primo di essi si sfrutta, oltre alla già citata ipotesi di campo medio per l'operatore numero holonico, l'isotropia del sistema cosicché ciascun valor medio risulta non nullo solo se gli indici spinoriali sono uguali. Ricordando che il campo z è bosonico si può definire similmente a quanto fatto nel capitolo 2 una funzione finale da mediare rispetto al campo statistico, trovando:

$$\begin{aligned} I &= \frac{(-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta})}{Z} \int \mathcal{D}A \left\{ e^{-S_{eff}(A)} [1 - \langle h^*(x) h(x) \rangle_{S_h}] [1 - \langle h^*(y) h(y) \rangle_{S_h}] \left[\langle z_\alpha^*(x) z_\delta(y) \rangle_{S_z} \right. \right. \\ &\left. \left. \langle z_\beta(x) z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \right] \right\} \simeq \frac{(-1)^{|x-y|}}{Z} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}) (1-\delta)^2 \int \mathcal{D}A \left\{ e^{-S_{eff}(A)} \left[\langle z_\alpha^*(x) z_\delta(y) \rangle_{S_z} \langle z_\beta(x) z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \right] \right\} \\ &= (1-\delta)^2 (-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}) (\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \left\langle \left| \langle z^*(x) z(y) \rangle_{S_z} \right|^2 (A) \right\rangle_{A^{stat}} = (1-\delta)^2 (-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\gamma\delta}) \cdot \\ &\left\langle \left| \langle z^*(x) z(y) \rangle_{S_z} \right|^2 (A) \right\rangle_{A^{stat}} = 6(1-\delta)^2 (-1)^{|x-y|} \left\langle \left| \langle z^*(x) z(y) \rangle_{S_z} \right|^2 (A) \right\rangle_{A^{stat}} := 6(1-\delta)^2 (-1)^{|x-y|}. \\ &\langle G(x, y|A) G^\dagger(x, y|A) \rangle_{A^{stat}}, G(x, y|A) = \langle z^*(x) z(y) \rangle_{S_z} (A) \end{aligned} \quad (3.76)$$

Tale formula è identica alla sua analoga presentata in quella sede e la presenza del fattore $(-1)^{|x-y|}$ è un'ulteriore conferma di compatibilità con quanto calcolato nel capitolo 2, poiché esso impone nello spazio di Fourier di misurare i vettori d'onda a partire da quello antiferromagnetico \vec{Q}_{AF} , come si era ivi discusso. Il secondo termine della formula (3.75) è espandibile utilizzando la seguente logica, desunta dal teorema di Wick: esso difatti non può essere direttamente applicato poiché si tratta di mediare rispetto ad una densità di probabilità gaussiana non prodotti di componenti del campo di gauge, bensì funzioni che dipendono da esso. In tale situazione il risultato finale sarebbe più complicato della somma sulle possibili contrazioni; tuttavia è intuibile come esso vi dipenda, non in somma bensì tramite altre combinazioni. Pertanto si decide di biforcare il percorso della derivazione in due strade, a seconda del tipo di contrazione scelta: tale procedura è altresì giustificabile a posteriori poiché come si dimostrerà esse risultano dominanti in regioni ben distinte dello spazio reciproco, perciò quando interessa il comportamento in una di esse si può al limite trascurare l'effetto della contrazione che ivi non presenta massimo. Il risultato è mostrato di seguito ove si è sfruttata l'ipotesi di isotropia enunciata prima; per la definizione delle funzioni finali si badi al fatto che h è un campo fermionico:

$$\begin{aligned} II &= (-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}) \left\langle \langle h^*(x) h(y) \rangle_{S_h} \langle h(x) h^*(y) \rangle_{S_h} \langle z_\alpha^*(x) z_\delta(y) \rangle_{S_z} \langle z_\beta(x) z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \right\rangle_{A^{stat}} \simeq \\ &(-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}) \left\{ \left\langle \langle h^*(x) h(y) \rangle_{S_h} \langle h(x) h^*(y) \rangle_{S_h} \right\rangle_{A^{stat}} \left\langle \langle z_\alpha^*(x) z_\delta(y) \rangle_{S_z} \langle z_\beta(x) z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \right\rangle_{A^{stat}} \right. \\ &\left. \left\langle \langle h^*(x) h(y) \rangle_{S_h} \langle z_\beta(x) z_\gamma^*(y) \rangle_{S_z} \right\rangle_{A^{stat}} \left\langle \langle h(x) h^*(y) \rangle_{S_h} \langle z_\alpha^*(x) z_\delta(y) \rangle_{S_z} \right\rangle_{A^{stat}} \right. \\ &= (-1)^{|x-y|} (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}) (\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \left\{ - \left\langle \left| \langle h^*(x) h(y) \rangle_{S_h} \right|^2 \right\rangle_{A^{stat}} \left\langle \left| \langle z^*(x) z(y) \rangle_{S_z} \right|^2 \right\rangle_{A^{stat}} \right. \\ &\left. - \left| \left\langle \langle h^*(x) h(y) \rangle_{S_h} \langle z(x) z^*(y) \rangle_{S_z} \right\rangle_{A^{stat}} \right|^2 \right\} = \\ &6(-1)^{|x-y-1|} \left\{ \left\langle H(x, y|A) H^\dagger(x, y|A) \right\rangle_{A^{stat}} \left\langle G(x, y|A) G^\dagger(x, y|A) \right\rangle_{A^{stat}} \right. \\ &\left. \left\langle H(x, y|A) G^\dagger(x, y|A) \right\rangle_{A^{stat}} \left\langle H^\dagger(x, y|A) G(x, y|A) \right\rangle_{A^{stat}} \right\} := \begin{cases} IIA \\ IIB \end{cases}, \\ &H(x, y|A) = \langle h^*(x) h(y) \rangle_{S_h} (A), G(x, y|A) = \langle z^*(x) z(y) \rangle_{S_z} (A) \end{aligned} \quad (3.77)$$

L'analisi dettagliata sin qui condotta dei vari costituenti la funzione a due punti di spin è il necessario prelude tecnico per dimostrare come da un propagatore ottenuto mediando sul campo di gauge, si possano desumere termini piccati in spazio reciproco sia sul vettore d'onda antiferromagnetico che a $\vec{q} = \vec{0}$. Tale punto sarà

dettagliato nel seguito per ciascuno di essi, riservando la parte finale del paragrafo a desumere tramite la formula di Kubo, la forma della suscettività magnetica nei due limiti citati. Questo programma di lavoro non deve però far dimenticare il profondo significato fisico del risultato a cui si è pervenuti: è il campo di gauge a rappresentare il “collante” tra due situazioni che altrimenti non avrebbero alcunché in comune. Difatti intorno a $\vec{q} = \vec{Q}_{AF}$ ci si aspetta che le diverse quantità (propagatori, funzioni di risposta, ...) siano caratterizzate da un marcato carattere spinoriale, poiché è in questa regione che dominano le fluttuazioni antiferromagnetiche di spin. Vicino al momento nullo invece, è attesa una visione su larga scala del sistema, che deve rifletterne la neutralità e non essere sensibile alle peculiarità di sue ristrette porzioni: da tale ragionamento si evince dunque come sia sensato che, per $\vec{q} = \vec{0}$, sia la buca fisica a rivestire il ruolo di pietra di paragone per tutte le variabili fisiche, che ad essa perciò naturalmente afferiranno. Tali conclusioni troveranno ampie risposdenze nel seguito; per convincersene è necessario come primo passo analizzare i vari contributi della funzione di correlazione tra spin fisici nello spazio reciproco; per cominciare si studia l’espressione delle quantità $\langle HH^\dagger \rangle$ e $\langle GG^\dagger \rangle$, che come esaminato nel capitolo precedente, risultano pari ai propagatori per il campo holonico e magnonico. Per fissare le idee si presenta la loro forma nel caso libero, che come visto in quella sede verrà corretta dagli effetti dell’interazione mantenendo tuttavia una struttura non dissimile ad essa: nel caso spinonico la sua espressione sarà pari a quella di un propagatore nello spazio dei momenti descritto dalla massa m_s ; in quello holonico va invece prestata particolare attenzione, poiché ad essere mediato è un campo scalare e dunque contribuirà la componente 00 nel kernel dell’azione gaussiana per il campo di gauge. Come dimostrabile, nell’ipotesi di scaling limit per i momenti (ovvero nel limite del continuo $a \rightarrow 0$) e di frequenze dell’ordine della temperatura, essa è scrivibile in funzione della massa termica m_0 associabile in tali condizioni al campo A_0 ; gli andamenti complessivi cercati risultano così:

$$\begin{cases} \langle HH^\dagger \rangle \simeq \Pi_{00} = \langle A_0 A_0 \rangle^{-1}(\vec{q}, \omega) \simeq m_0^2 \\ \langle GG^\dagger \rangle \simeq \frac{1}{p^2 - m_s^2} = \frac{1}{\omega^2 - (|\vec{k}|^2 + m_s^2)} \end{cases}, \quad \vec{k} \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right] \times \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right], \quad a \rightarrow 0 \quad (3.78)$$

Dalla precedente equazione risulta dunque che $\langle GG^\dagger \rangle$ è piccata sul vettore d’onda nullo; essa dunque unita al fattore di fase $(-1)^{|x-y|}$ mostra come in spazio reciproco si stia considerando un’espressione a distanza nulla da \vec{Q}_{AF} , ovvero che i termini I e IIA dominano al vettore d’onda antiferromagnetico. Per concludere tale prima parte resta da stabilire la forma in spazio reciproco delle quantità $\langle HG^\dagger \rangle$ e $\langle H^\dagger G \rangle$; tale combinazione peculiare si dimostra emergere nel calcolo della funzione di Green-Matsubara per la buca fisica, in cui i suoi operatori di creazione e distruzione siano espansi in termini di holone e spinone:

$$\begin{aligned} G^{hole} &= -\langle C_\sigma(x) C_{\sigma'}^\dagger(y) \rangle = -\langle h^\dagger(x) s_\sigma(x) h(y) s_{\sigma'}^\dagger(y) \rangle \\ &= -\langle h^\dagger(x) h(y) s_\sigma(x) s_{\sigma'}^\dagger(y) \rangle \simeq -\langle HG^\dagger \rangle \simeq -\langle H^\dagger G \rangle \end{aligned} \quad (3.79)$$

Prima di analizzare però la forma in spazio reciproco del contributo IIB alla funzione a due punti di spin, come anticipato ad inizio paragrafo, va giustificata l’assenza dalla sua espressione del fattore di fase $(-1)^{|x-y|}$, legandola all’invarianza di gauge del modello $t - J$, garantita a priori dalla sua implementazione utilizzata. Si cominci dunque ricordando che in tale ambito, la genuina decomposizione dell’operatore di distruzione elettronico $C_{i\alpha}$, senza approssimazioni, consta dell’holone h_i , della parte di spin $b_{i\alpha}$ e di una fase legata ai valori medi \bar{B} e \bar{V} dei campi di gauge adoperati nella bosonizzazione alla Chern-Simons, ovvero:

$$C_{j\alpha} = h_j^\dagger e^{i \int_\gamma \bar{B}} \left(e^{i \int_\gamma \bar{V}} \right)_{\alpha\beta} b_{j\beta} \quad (3.80)$$

Nella precedente formula sono importanti due aspetti: in primo luogo, si utilizza la parte di spin $b_{i\alpha}$ invece dello spinone $z_{i\alpha}$ poiché non si è ancora adottato lo schema a due reticoli, in base al quale si sceglie il campo bosonico z per rispettare l’ordinamento antiferromagnetico; in secondo luogo, il cammino di integrazione γ è pensabile come una stringa, il cui percorso è ben noto nel caso di funzioni di correlazione a due punti. Difatti andando a calcolare la funzione di Green legata agli operatori elettronici, necessaria ad esempio alla determinazione della densità degli stati per la buca fisica, γ collega il punto \vec{x} in cui si crea la particella (ovvero si applica C_α^\dagger) ad \vec{y} ove la si distrugge (argomento di C_α); nello spazio-tempo, è possibile deformare tale cammino scegliendo un percorso che collega una prima stringa $\gamma_{\vec{x}}$ che partendo da \vec{x} arriva ad infinito, con un’altra $\gamma_{\vec{y}}$, la quale ritornando da infinito perviene ad \vec{y} , in un istante di tempo superiore al precedente. Da ciò si ha lo schema riprodotto in figura 3.3.a.

Tutte queste considerazioni emergono utili a mostrare l’assenza del fattore di fase nel calcolo delle suscettività magnetica tramite la densità degli stati; difatti scrivendo l’operatore spin fisico nel modello $t - J$, si nota come anch’esso sia funzione del campo di spin b . Per poterlo legare all’espressione mostrata nel capitolo 2, ed usata in

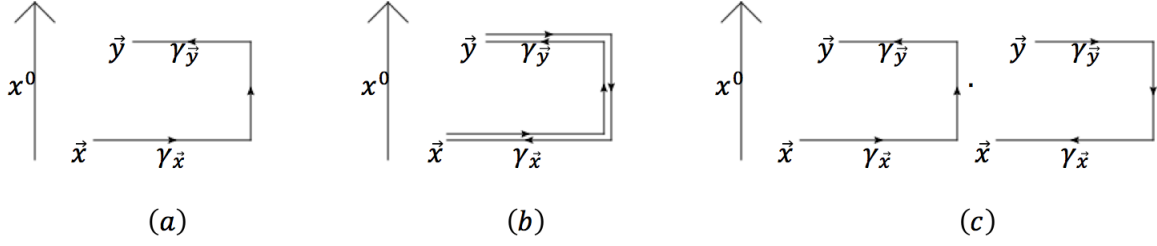


Figura 3.3: Percorsi delle stringhe dei campi di gauge nel calcolo di: (a) funzione di Green della buca fisica; (b) funzione a due punti di spin nel modello $t - J$; (c) suscettività magnetica uniforme e costante.

precedenza per calcolare la funzione a due punti di spin, è necessario adottare lo schema a due reticoli A e B , il quale richiede automaticamente l'inserimento del fattore di fase per mimare lo spin flip tra di essi:

$$\vec{S}_i = \frac{1}{2} \left(1 - h_i^\dagger h_i \right) b_{i\alpha}^\dagger \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} b_{i\beta}, \quad b_{i\alpha} \rightarrow \begin{cases} i \in A: z_{i\alpha} \\ i \in B: \varepsilon_{\alpha\beta} z_{i\beta}^* \end{cases} \Rightarrow \vec{S}_i \rightarrow \frac{(-1)^{|x|}}{2} \left(1 - h_i^\dagger h_i \right) z_{i\alpha}^* \overrightarrow{\sigma}_{\alpha\beta} z_{i\beta} \quad (3.81)$$

Quanto presentato sinora serve dunque per calcolare la correlazione tra spin fisici; poiché essa contiene il prodotto di quattro operatori di distruzione e creazione elettronici C , C^\dagger , è sensato dai ragionamenti precedenti che il percorso delle stringhe legate ai campi della bosonizzazione alla Chern-Simons, dunque a quello di gauge, sia nullomotopo, in quanto come mostra la figura 3.3.b i vari segmenti del tragitto, essendo presenti in versi opposti, si elidono a vicenda. Dunque si ha la conferma che la funzione di correlazione cercata sia gauge invariante, proprietà che deve essere mantenuta anche dalla sua espressione IIB . Da tale richiesta sorge un paradosso se ivi si congloba lo spin flip, dunque il fattore di fase, conseguente al passaggio dal campo di spin b allo spinone z . Difatti, come si è mostrato, è possibile riscrivere il contributo IIB , a meno di fattori di proporzionalità, tramite il prodotto di due funzioni di Green, a loro volta legate agli operatori elettronici da:

$$IIB \propto \langle C^\dagger(x) C(y) \rangle \langle C^\dagger(y) C(x) \rangle \quad (3.82)$$

Essendo ora i valori medi disgiunti tra loro, in seguito all'applicazione del teorema di Wick, il percorso della stringa, seguito in ciascun fattore, è analogo a quanto discusso inizialmente; la rappresentazione si trova, con le opportune modificazioni, in figura 3.3.c. Sarebbe troppo sbrigativo concludere ora che tale espressione è gauge invariante: si può avallare la falsità di tale asserto in maniera intuitiva, considerando ora che ciascuno dei due percorsi delle funzioni di Green è a se stante e dunque non è più contraibile ad un punto di dimensione nulla come nel caso precedente. Più formalmente, si tratta di dimostrare che ciascun propagatore viola l'invarianza sotto l'azione del gruppo $U(1)$: difatti ammettendo che un operatore b appartenga al reticolo A , mentre l'altro rientri in quello B , si trova un'assurdità qualora si supponga lo spin flip nel passaggio dall'uno all'altro. Difatti sotto tale ipotesi la funzione di Green assume la forma:

$$\mathcal{G}^{hole} \propto \langle h_i^\dagger b_{i\alpha} h_j b_{j\alpha}^\dagger \rangle, \quad \begin{cases} i \in A: b_{i\alpha} \rightarrow z_{i\alpha} \\ j \in B: b_{j\alpha} \rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta} z_{j\beta}^* \end{cases} \Rightarrow \mathcal{G}^{hole} \propto (-1)^{|x-y|} \langle h_i^\dagger z_{i\alpha} h_j z_{j\alpha} \rangle \quad (3.83)$$

E' ora immediato mostrare come la precedente equazione non sia gauge invariante ammettendo una trasformazione $U(1)$ locale per i campi holonici e spinonici, poiché all'interno delle parentesi angolari resta una fase ineliminabile dal risultato. Ma ciò è assurdo poiché \mathcal{G}^{hole} e dunque l'espressione IIB , essendo desunta dalla funzione a due punti di spin nel modello $t - J$, devono riprenderne le proprietà, e tra esse, devono ammettere invarianza di gauge locale. Tale paradosso è dissolto purché si vieti lo spin flip nello schema tra i due sottoreticoli; qualora si voglia partire poi dal contributo IIB per desumere la suscettività magnetica, le precedenti osservazioni costringono ad eliminare il fattore di fase $(-1)^{|x-y|}$, che era proprio quanto si doveva dimostrare. Essendo in tal caso il calcolo descritto dalla bolla tra due funzioni di Green per la buca fisica, esso fornirà un risultato uniforme (piccato cioè a $\vec{q} = \vec{0}$), consentendo così di riprendere, a meno di fattori di proporzionalità, la relazione tra funzione di risposta e densità degli stati, ricavata nello scorso paragrafo; l'unica accortezza da adottare è, in base ai ragionamenti precedenti, il riferimento di tali termini alla buca fisica. Quanto sin qui mostrato ha permesso di espandere la funzione di correlazione tra spin fisici nel modello $t - J$ tramite tre contributi, la cui rappresentazione grafica è mostrata in figura 3.4.

In essa si sono adottate le seguenti convenzioni per la rappresentazione dei propagatori: la linea tratteggiata denota il campo spinonico z , quella continua il campo holonico h ed il tratto ondulato manifesta l'azione di mediazione da parte del campo di gauge. Il contributo I , in figura 3.4.a, ricorda i diagrammi RPA , ed in esso i

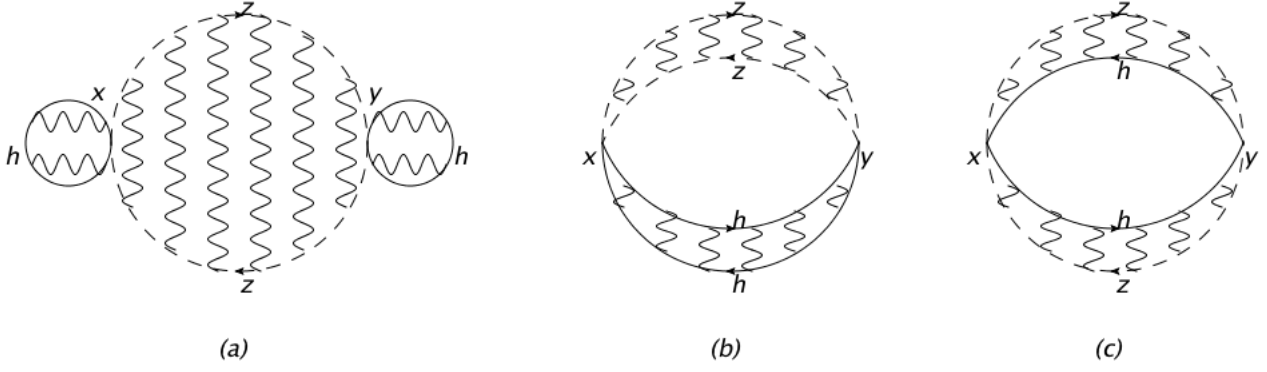


Figura 3.4: Rappresentazione diagrammatica dei termini ottenuti dall'espansione della funzione di correlazione tra spin fisici: (a) *I*; (b) *IIA* e (c) *IIB*.

campi holonici creati e distrutti nello stesso punto riportano schematicamente il fattore di proporzionalità $1 - \delta$ dovuto all'approssimazione di campo medio; per il termine *IIA*, il discorso è differente, rientrando esso nella categoria dei diagrammi ladder (figura 3.4.b). Nella rappresentazione è sottinteso come, dopo il computo dei propagatori $\langle GG^\dagger \rangle$ e $\langle HH^\dagger \rangle$ se ne debba valutare la correlazione; analoghe considerazioni valgono per *IIB* in figura 3.4.c: anch'esso è un diagramma di tipo ladder e delle funzioni di Green per la buca fisica, ottenute con la mediazione del campo di gauge, alla fine va calcolata la bolla. Tali osservazioni risultano di capitale importanza qualora si voglia determinare la suscettività magnetica nei due limiti uniforme ed antiferromagnetico, discussa in questa seconda parte dell'esposizione; basta ricordare il suo legame con la funzione di Green ritardata per gli operatori di spin ed utilizzare per quest'ultima la continuazione analitica che fornisce la funzione di Green-Matsubara mostrata ad inizio paragrafo:

$$\chi = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \left[-(g\mu_B)^2 \frac{1}{4} D_{\alpha\alpha}^{spin}(x, y) \right] = -\frac{\mu_B^2}{3} \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha, spin}^{Mats}(x, y) = +\frac{\mu_B^2}{3} \langle \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(y) \rangle \quad (3.84)$$

Nella formula precedente si notino due importanti caratteristiche: il fattore $\frac{1}{3}$ è legato all'ipotesi di isotropia, come documentato dalla somma sugli indici di spin; la costante $\frac{1}{4}$ è dovuta al riscaldamento scelto per gli operatori di spin, avendo tenuto in essi le sole matrici di Pauli senza prefattori. Passando allo spazio reciproco conviene studiare i due casi d'interesse fisico; intorno al vettore d'onda antiferromagnetico si considerano i soli contributi *I* e *IIA*, dai quali si ha:

$$\vec{q} \simeq \vec{Q}_{AF} \Rightarrow \chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\mu_B^2}{3} TF \left\{ 6(-1)^{|x-y|} \langle G(x, y|A) G^\dagger(x, y|A) \rangle_{Astat} \right. \\ \left. \left[(1 - \delta)^2 - \langle H(x, y|A) H^\dagger(x, y|A) \rangle_{Astat} \right] \right\} \quad (3.85)$$

Ricordando ora che nel calcolo del propagatore magnonico eseguito nel capitolo precedente, si è omessa la parte scalare del kernel dell'azione efficace del campo di gauge, si può dimostrare come il secondo addendo sia una correzione trascurabile rispetto al primo; indicando con \mathcal{F} la trasformata di Fourier della funzione rimasta, si trova che:

$$\chi(\vec{q} \simeq \vec{Q}_{AF}, \omega) \approx 2\mu_B^2 (1 - \delta)^2 \mathcal{F}(\vec{q} - \vec{Q}_{AF}, \omega) \quad (3.86)$$

ove il suo argomento segue dalla proprietà che il fattore di fase $(-1)^{|x-y|}$ impone di calcolare i vettori d'onda a partire da quello antiferromagnetico. Tale conclusione è identica a quella presentata nel capitolo precedente; volendo analizzare infine il caso uniforme, basta considerare il termine *IIB* con la riscrittura (3.79) ottenendo:

$$IIB \simeq -6 (-\mathcal{G}^{hole}) (-\mathcal{G}^{hole}) \Rightarrow \vec{q} \simeq \vec{0} \Rightarrow \chi(\vec{q}, \omega) = -2\mu_B^2 TF (\mathcal{G}^{hole} \cdot \mathcal{G}^{hole}) \quad (3.87)$$

ove si è esportato un segno negativo dal fattore di fase ivi presente essendo il restante stato eliminato, come si è avuto modo di osservare, per garantire l'invarianza di gauge locale al contributo della funzione a due punti di spin analizzato. Quanto ottenuto nella seconda parte della precedente equazione è da confrontarsi con la modalità di calcolo presentata nel paragrafo 3.5; le due espressioni sono identiche e dunque è ammissibile utilizzare le conclusioni del paragrafo precedente senza alcuna aggiunta, con la sola accortezza di riferire tutte le quantità alla buca fisica:

$$\chi(\vec{q} \simeq \vec{0}, 0) = Z\mu_B^2 \left\{ N_{tot}^{hole}(\mu) + \sum_{n \text{ pari} \geq 2} \left[\frac{2(1 - 2^{1-n})}{\beta^n} \zeta(n) \frac{\partial^n N_{tot}^{hole}(s)}{\partial s^n} \Big|_{s=\mu} \right] \right\} \quad (3.88)$$

Le due formule (3.86) e (3.88) rappresentano un importante traguardo e saranno ampiamente sfruttate nel seguito per verificare sperimentalmente la validità sia delle conclusioni fornite dal modello $t - J$ che delle approssimazioni adottate per ottenerle. A tale scopo, avendo già esaminato nel capitolo precedente alcune implicazioni della prima espressione, di seguito ci si concentrerà sulla seconda; un primo risultato che ne facilita l'applicabilità, ovvero il calcolo della densità totale degli stati per la buca fisica, sarà discusso nel prossimo paragrafo.

3.8 Peso spettrale nei cuprati ad alta temperatura

In questo paragrafo, basato su [21], si discuteranno tutte le nozioni preparatorie necessarie al calcolo della densità totale degli stati per la buca fisica da inserire nell'ultima formula precedente sulla suscettività magnetica uniforme. Come fatto nel capitolo 2, anche ora si privilegerà una trattazione qualitativa, mostrando solo i calcoli necessari al raggiungimento dell'obiettivo; si è utilizzato come di consueto il modello $t - J$ con proiezione di Gutzwiller per impedire la doppia occupazione dei siti reticolari scrivendo la buca fisica in termini di un fermione carico spinless noto come holone e di un bosone senza carica a spin $\frac{1}{2}$ detto spinone. Come studiato nel capitolo scorso tale scelta, dopo opportune semplificazioni, porta naturalmente a scrivere un'azione efficace in termini delle due variabili precedenti e di un campo di mediazione di gauge che può essere sfruttato nel calcolo dei valori medi per riprodurre le fluttuazioni termiche; non sorprende dunque che esso sia responsabile dell'attrazione di gauge tra holone e spinone che ricostruisce la buca fisica. E' inoltre naturale, per come si sono definiti i due campi, che la buca assuma le principali caratteristiche holoniche, con però un maggiore scattering rate a causa del contributo spinonico dovuto alla "colla" di gauge. Per studiare le proprietà richieste della buca è conveniente introdurre una serie di scale di energia utilizzate più volte nel seguito: in primo luogo si definisce l'analogo della energy gap per il processo superconduttivo, denotato come $\Delta^h(T)$ che emerge quando si scrive l'hamiltoniana del sistema complessivo in approssimazione BCS. Essa dipende principalmente dal doping, dalla massa spinonica m_s definita nel capitolo 2, dal momento di Fermi k_F e dalla temperatura di pairing per gli holoni T_{ph} . Si noti come k_F possa essere approssimato da 2 espressioni diverse a seconda della fase in cui si trova il sistema:

$$k_F^{PG} = \delta, k_F^{SM} = 1 + \delta \quad (3.89)$$

L'unico parametro ancora da definire è la temperatura T_{ph} : fisicamente essa rappresenta la soglia alla quale è possibile osservare la formazione di coppie incoerenti di holoni. Tale processo è avviato dall'attrazione tra due vortici di spin con chiralità opposta i cui nuclei risiedono su siti appartenenti a diversi sottoreticoli di Neel, lasciando poi al campo di gauge il compito di portare questa attrazione anche nel settore holonico. Chiarito il suo significato, resta da trovare un'espressione per T_{ph} : essa è fornita dal diagramma della figura 3.5, nella quale modelli teorici hanno permesso di ottenere i principali marcatori per le fasi dei cuprati ad alta temperatura (antiferromagnetica AF , di pseudogap PG , di Nernst N , superconduttiva SC e di strange metal SM). Quanto cercato è rappresentato dalla linea gialla, mentre l'analoga temperatura T_{ps} per la formazione di coppie incoerenti spinoniche è evidenziata dal tratto rosso; la temperatura critica T_c che demarca il processo superconduttivo è segnata invece con una linea verde ed infine quella di Neel che caratterizza l'ordinamento antiferromagnetico da un tratteggio puntato. Si può notare da ultima una linea spezzata: essa riporta propriamente il crossover tra le fasi di pseudogap e di strange metal.

Questa presentazione riguardava la prima scala di energia del sistema; risulta naturale poi definirne una seconda $m_\phi(T)$ pari alla massa della fase ϕ^h del campo delle coppie holoniche. Nella interpolazione dei dati sperimentali sulla misurazione di tale quantità (reperibile ad esempio in [21]) si nota come emerge la dipendenza dalle medesime variabili presenti nell'energy gap; gli andamenti delle due scale di energia sono mostrati in figura 3.6: da essa si evince come per temperature sufficientemente basse si possa trascurare il parametro di massa, dovendo però mantenere, almeno come correzione se il dominio di energia lo permette, l'energy gap del sistema.

Utilizzando dei procedimenti simili a quelli del capitolo 2, è possibile ottenere nella cornice della teoria di gauge la funzione di Green per gli holoni. Per calcolarla si è considerata una regione di spessore $2\Lambda \ll k_F$ nello spazio reciproco attorno alla superficie di Fermi, nella quale è lecito linearizzare la relazione di dispersione $E(\vec{k})$ delle particelle, mantenendo solo il primo termine dello sviluppo in serie:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\vec{k}} &= \varepsilon_F + \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \Big|_{\vec{k}=k_F} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_F) + O(|\vec{k}|^2), \quad \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \Big|_{\vec{k}=k_F} = \vec{v}_F \Rightarrow E(\vec{k}) \equiv \\ \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_F &= \vec{v}_F \cdot (\vec{k} - \vec{k}_F) + O(|\vec{k}|^2), \quad v_F \simeq 5 \frac{eV \dot{A}}{\hbar} = 7.6 \cdot 10^5 \frac{m}{s} = 0.76 \cdot 10^8 \frac{cm}{s} \end{aligned} \quad (3.90)$$

ove si è indicato per completezza, seguendo [31], il valore misurato sperimentalmente per il modulo della velocità di Fermi v_F , che non risente in modo determinante della fase in cui si trova il sistema. Nella regione descritta,

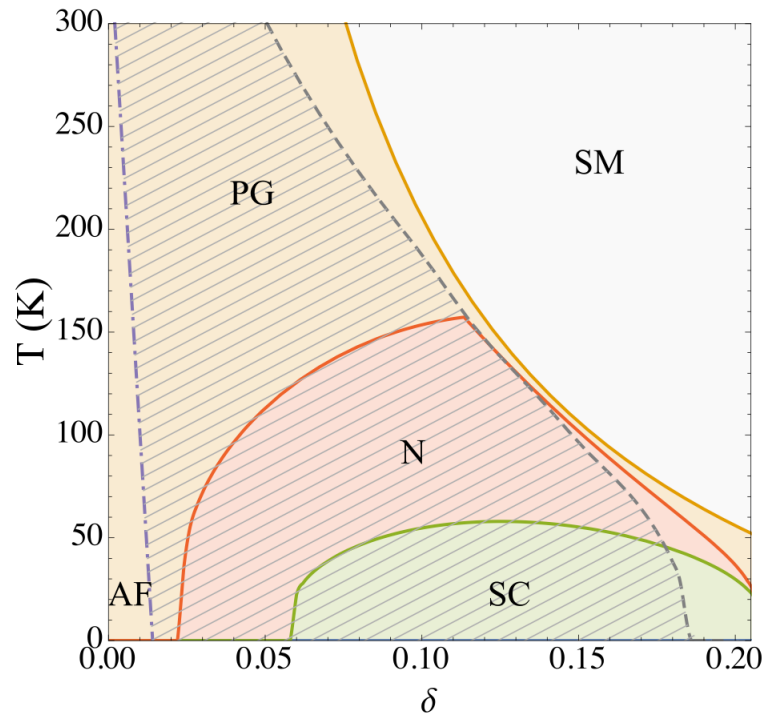


Figura 3.5: Diagramma $T - \delta$ per i cuprati ad alta temperatura con le fasi principali, le linee di transizione ed il tratto di crossover (adattata da [18]).

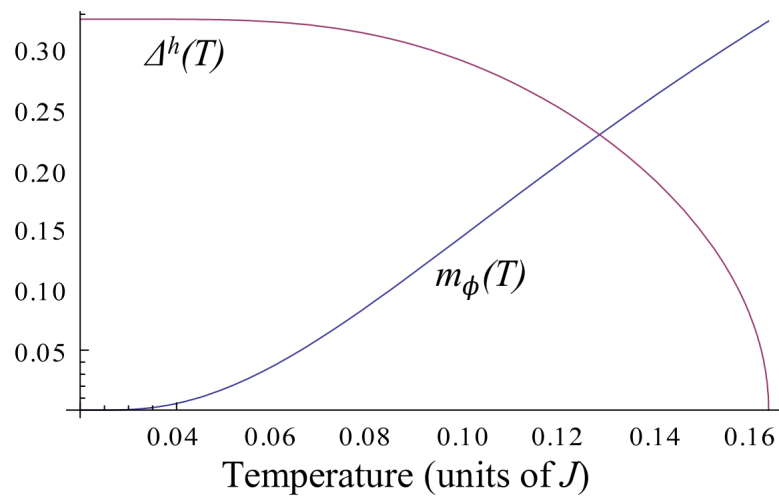


Figura 3.6: Migliori interpolazioni dei dati sperimentali per le 2 scale di energia del sistema, valutate a drogaggio $\delta = 0.18$ (adattata da [21]).

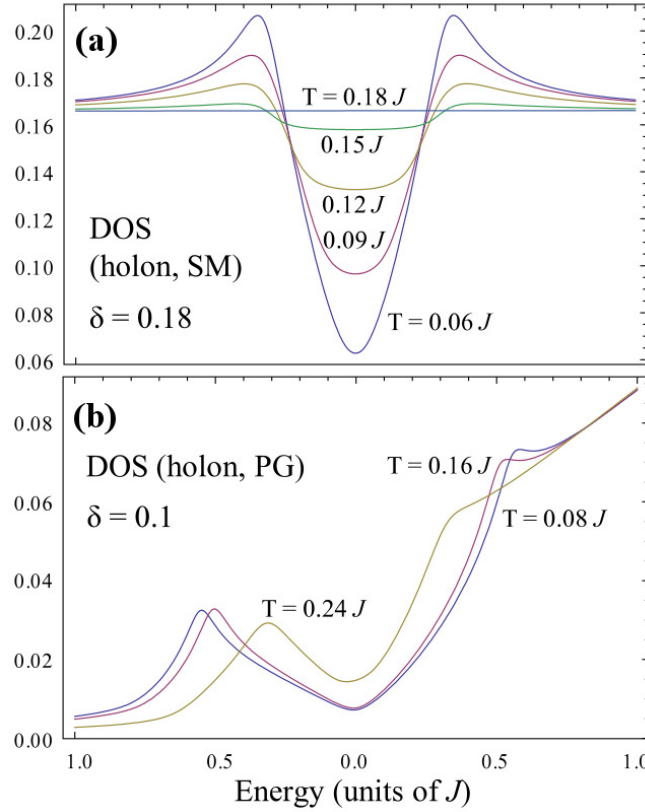


Figura 3.7: Risultato numerico per la densità degli stati degli holoni a diversi valori di temperatura T , ma fissato scattering rate $\eta = 0.05 J$, con il sistema in fase (a) di strange metal e (b) di pseudogap (adattata da [21]).

adottando le approssimazioni precedenti, è possibile ottenere la funzione di Green. Come si mostrerà in seguito, di essa interessano soprattutto alcuni comportamenti limite, a seconda che la frequenza sia molto minore o molto maggiore della massa associata alla fase del campo di coppie holoniche; nel primo caso un'espansione in serie al secondo ordine fornisce una forma simile a quella del caso libero con l'unica correzione dovuta al fattore di rinormalizzazione Z che come intuibile dipende dalle caratteristiche energetiche del campo di cui si calcola la funzione di Green. Nel secondo caso ancora un'espansione in serie rispetto al corretto parametro infinitesimo produce un'espressione molto diversa dalla precedente, che si dimostra essere pari a quella per un superconduttore descritto dalla teoria BCS. La formula generale della funzione di Green ritardata, è poi ottenibile dopo un procedimento di continuazione analitica da quella di Green-Matsubara di cui le precedenti risultano casi particolari. La sua utilità, come esaminato nei paragrafi precedenti, risiede nel fatto che la sua parte immaginaria è proporzionale al peso spettrale:

$$A(\omega, \vec{k}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G^R(\omega, \vec{k})] \quad (3.91)$$

Nelle precedenti va però notato che il parametro η , associato alla continuazione analitica, non rappresenta solo il termine di convergenza, ma assume anche il significato fisico di scattering rate per gli holoni e perciò può essere stimato. L'utilità di quanto presentato risiede nel calcolo della densità degli stati per tali campi, che in base alla definizione risulta:

$$DOS_h(\omega + \mu) = \sum_{\vec{k}} A(\omega, \vec{k}) = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_{\Sigma'} d^2 \vec{k} A(\omega, \vec{k}) \quad (3.92)$$

ove A denota l'area del sistema, considerata unitaria una volta adottate le unità del Sistema Internazionale e l'assenza di un prefattore numerico è coerente con il carattere spinless del campo. L'integrazione indicata dal passaggio al continuo ha per supporto la superficie Σ' che riflette la scelta di lavorare in una regione spessa 2Δ attorno alla superficie di Fermi; senza ulteriori semplificazioni è necessario procedere in modo numerico ed i risultati sono mostrati in figura 3.7.a a diversi valori di temperatura.

Come si evince, per la fase di strange metal, il comportamento nei valori estremali di frequenza è piatto come nel caso libero, mostrando però un'importante deviazione al centro, notevole per bassi valori di temperatura, in quanto si ereditano le caratteristiche della superconduttività. Emergono inoltre due picchi la cui posizione resta

quasi inalterata anche nella fase di pseudogap riportata in figura 3.7.b: qui è da notare come la linearizzazione della relazione di dispersione abbia portato un andamento non più piatto bensì generalmente crescente. Quanto presentato serve ora per desumere la funzione di Green della buca fisica, che nello spazio dei momenti risulta pari al prodotto di quelle per holone e spinone, mediato con l'ausilio del campo di gauge; tale operazione va svolta seguendo la traccia mostrata nel capitolo 2. Essendo tale campo di mediazione tra i due settori dell'azione complessiva, non è possibile condurre un'analisi perturbativa; si dovrà dunque arrivare a calcolare il valore di aspettazione rispetto ad un'azione efficace, in cui risulta dominante la componente trasversale del propagatore del campo di gauge. Per concludere la derivazione ci si avvale dell'approssimazione iconale usata nel capitolo precedente, prestando infine attenzione a scegliere i punti sella dominanti nello svolgere le integrazioni connesse alla trasformata di Fourier. Per condurre tale calcolo si è scelto di parametrizzare lo spazio reciproco del contributo holonico con la decomposizione tomografica di Luther Haldane: in termini sommari, essa è simile ad un sistema di coordinate polari, essendo costituita da tanti settori quadrati descritti da una normale $\vec{n}(\theta)$, ove θ è l'angolo tra il semiasse positivo dei momenti k_x ed il centro di tali regioni. Inoltre si considera una stretta porzione dello spazio reciproco, lavorando entro Λ dalla superficie di Fermi, ove si è posto:

$$\Lambda = \frac{k_F}{\lambda}, \lambda \gg 1 \quad (3.93)$$

Con tali premesse si nota come sia equivalente ai fini pratici considerare θ come l'angolo polare, mentre basti fissare il modulo del momento attorno a quello di Fermi, con oscillazioni di ordine Λ . Tuttavia, anche l'adozione della decomposizione di Luther Haldane risulta infruttuosa per un calcolo analitico; è necessario dunque ricorrere ad ulteriori approssimazioni, continuando a lavorare per consistenza sulla parte holonica del propagatore per la buca fisica. Per la funzione di Green-Matsubara dell'holone si scelgono così i due andamenti a bassa ed alta frequenza esaminati in precedenza; l'azione del campo di gauge media le sue caratteristiche con quelle della medesima funzione per lo spinone, ottenendo un risultato peculiare. La buca fisica ha difatti una funzione di Green-Matsubara con i seguenti tratti: in primo luogo lo scattering rate Γ della buca è molto maggiore di quello holonico η , come preannunciato ad inizio paragrafo. La sua espressione risulta differente a seconda non solo della fase del sistema, ma anche del rapporto tra energie termica e del campo esterno, ovvero in unità naturali tra temperatura e frequenza; ciò era intuibile ricordando le medesime casistiche spinoniche esaminate nel capitolo 2, trasmesse alla buca dal campo di gauge:

$$\begin{cases} SM, T \gg \omega : \Gamma_T^{SM} = \frac{T(1+\delta)Q_T^{SM}}{tm_s^2}, Q_T^{SM} = [T(1+\delta)^2]^{\frac{1}{3}} \\ SM, T \ll \omega : \Gamma_\omega^{SM} = \frac{\omega(1+\delta)Q_\omega^{SM}}{tm_s^2}, Q_\omega^{SM} = [\omega(1+\delta)^2]^{\frac{1}{3}} \\ PG, T \gg \omega : \Gamma_T^{PG} = \frac{T\delta}{tm_s}, Q_T^{PG} = (T\delta^2)^{\frac{1}{3}} \\ PG, T \ll \omega : \Gamma_\omega^{PG} = \frac{\omega\delta}{tm_s}, Q_\omega^{PG} = (\omega\delta^2)^{\frac{1}{3}} \end{cases} \quad (3.94)$$

In secondo luogo la funzione di Green-Matsubara della buca fisica eredita da quella holonica il fattore di normalizzazione, in cui emergono però come in precedenza le diverse casistiche quando si presenta la sua espressione:

$$\begin{cases} SM, T \gg \omega : Z_T^{SM} = [(1+\delta)m_s Q_T^{SM}]^{\frac{1}{2}} \\ SM, T \ll \omega : Z_\omega^{SM} = [(1+\delta)m_s Q_\omega^{SM}]^{\frac{1}{2}} \\ PG, T \gg \omega : Z_T^{PG} = (\delta m_s Q_T^{PG})^{\frac{1}{2}} \\ PG, T \ll \omega : Z_\omega^{PG} = (\delta m_s Q_\omega^{PG})^{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (3.95)$$

In terzo luogo la relazione di dispersione che compare nella funzione cercata, sarà normalizzata rispetto ad un potenziale chimico riscalato dal valore della massa spinonica, un chiaro segno della mediazione del campo di gauge tra holoni e spinoni:

$$\tilde{\mu} := \mu + m_s \Rightarrow E_\Psi(\vec{k}) = \varepsilon_{\vec{k}} - \tilde{\mu} = \varepsilon_{\vec{k}} - (\mu + m_s) \quad (3.96)$$

In quarto ed ultimo luogo, il risultato conclusivo sarà somma di due addendi uguali in forma, con l'energia del secondo aumentata di un fattore $2m_s$; tale struttura può essere propriamente giustificata dal solo calcolo analitico, tuttavia risulta sensata. Difatti la buca fisica deve ricollegare in sé due contributi differenti: il grado di libertà di carica dal campo holonico e quello di spin dal campo spinonico; l'espressione riscalata della funzione di Green-Matsubara è dunque attribuibile a quest'ultimo, poiché si dimostra essere pari a quella di una risonanza elettrone-magnone, che essendo un'onda di spin, è inquadrabile nel settore spinonico dell'azione. Le quattro osservazioni presentate trovano puntuale riscontro nella formula finale, riportata di seguito nella versione ritardata ottenibile

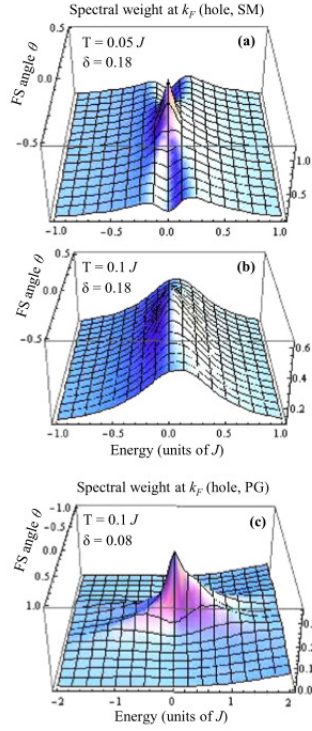


Figura 3.8: Peso spettrale per la buca fisica al momento di Fermi, funzione dell'angolo polare θ (in unità di π) e della frequenza E (il caso fisico è per $E > 0$), quando il sistema è in fase di strange metal [(a) e (b)] o di pseudogap [(c)] (adattata da [21]).

tramite la consueta continuazione analitica:

$$\begin{aligned}
 G_{\Psi}[T, \omega, \theta] &= Z(T, \omega) \left\{ \frac{\omega + i\Gamma(T, \omega) + E_{\Psi}(\vec{k})}{[\omega + i\Gamma(T, \omega)]^2 - [E_{\Psi}(\vec{k})]^2 - \Delta_h^2(T) [\sin(\theta)]^2 S(T, \omega)} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\omega + i\Gamma(T, \omega) + E_{\Psi}(\vec{k}) + 2m_s}{[\omega + i\Gamma(T, \omega)]^2 - [E_{\Psi}(\vec{k}) + 2m_s]^2 - \Delta_h^2(T) [\sin(\theta)]^2 S'(T, \omega)} \right\}, \\
 S(T, \omega) &= 1 - \frac{m_{\phi}(T)}{\left\{ [m_{\phi}(T)]^2 + [E_{\Psi}(\vec{k})]^2 - [\omega + i\Gamma(T, \omega)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}}, \\
 S'(T, \omega) &= 1 - \frac{m_{\phi}(T)}{\left\{ [m_{\phi}(T)]^2 + [E_{\Psi}(\vec{k}) + 2m_s]^2 - [\omega + i\Gamma(T, \omega)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}}.
 \end{aligned} \tag{3.97}$$

Da essa è desumibile il peso spettrale con la formula (3.91).

La sua rappresentazione è mostrata in figura 3.8, nei casi in cui il sistema sia in fase di strange metal [pannelli (a) e (b)] o di pseudogap [pannello (c)]. L'importanza della funzione di densità spettrale risiede però nel calcolo della densità totale degli stati, il cui valore permetterà di predire un andamento della suscettività magnetica uniforme da confrontarsi con i dati sperimentali. Tale derivazione, sotto opportune approssimazioni, risulta analitica e sarà discussa nel prossimo paragrafo.

3.9 Ricostruire la buca fisica: densità totale degli stati

In questo paragrafo si calcolerà la densità totale degli stati per la buca fisica, partendo dalla conclusione precedente sulla funzione di Green ritardata con delle opportune approssimazioni che consentano una derivazione analitica. Per impostare il procedimento, si utilizzeranno le formule (3.92) e (3.97), ove nella relazione di dispersione gran canonica,

fornita dalla (3.96), si adotti per convenienza la forma libera per $\varepsilon_{\vec{k}}$. Come noto tuttavia l'espressione presentata nel capitolo precedente sulla funzione di Green ritardata della buca, è valida solamente in prossimità della superficie di Fermi. Come emerge da [21], tale regione può essere descritta nello spazio reciproco da una striscia di spessore $2Q$ attorno al cerchio di raggio k_F , ove Q è il momento di Reizer. Dunque per procedere al calcolo della densità degli stati è necessario capire se entrambi gli addendi della funzione ritardata siano paritetici in tale dominio, oppure se uno di essi possa essere trascurato rispetto all'altro. Come noto, a priori, ciascuno di essi genera un momento di Fermi, dato rispettivamente da:

$$k_1^F = \sqrt{2m\tilde{\mu}}, \tilde{\mu} > 2m_s : k_2^F = \sqrt{2m(\tilde{\mu} - 2m_s)} \quad (3.98)$$

In essa si è ricordata la terza osservazione finale del paragrafo precedente sul riscaldamento del potenziale chimico dell'holone per ottenere quello della buca fisica, e la quarta sul cambiamento della relazione di dispersione gran canonica per riprodurre la risonanza elettrone-magnone, che la buca eredita dal settore spinonico tramite l'accoppiamento di gauge. Si noti tuttavia che il secondo momento di Fermi contribuisce solo se sussiste una precisa relazione tra potenziale chimico riscaldato e massa spinonica, che viene indagata di seguito. Si comincia innanzitutto dalla fase di strange metal, inserendo i valori delle due variabili fisiche tratti rispettivamente da [21] e [18], ottenendo:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu} < 2m_s \rightarrow \mu < m_s \rightarrow \frac{t}{2} < \frac{J}{\sqrt{2}}(\delta |\ln \delta|)^{\frac{1}{2}} \rightarrow \delta |\ln \delta| > \frac{1}{2} \left(\frac{t}{J} \right)^2, \frac{J}{t} \simeq \frac{1}{3} \Rightarrow \delta |\ln \delta| > \frac{9}{2}, \\ \left(\frac{2m_s^2}{J^2} \right)^{max} = \frac{2m_s^2(\delta = e^{-1})}{J^2} = e^{-1} \simeq 0.37 < \frac{9}{2} \Rightarrow \nexists \delta | \tilde{\mu} < 2m_s \end{aligned} \quad (3.99)$$

Tale conclusione, valida $\forall \delta \in [0, 1]$, si estende senz'altro all'intervallo di doping ammesso dal modello $t - J$; successivamente si adattano i risultati mostrati alla fase di pseudogap, con l'accortezza di inserire la giusta espressione per il potenziale chimico riscaldato. A causa della presenza di una disequazione trascendente, i calcoli sono eseguibili solo numericamente, fornendo:

$$\tilde{\mu} < 2m_s \rightarrow \mu < m_s \rightarrow 2t\delta < \frac{J}{\sqrt{2}}(\delta |\ln \delta|)^{\frac{1}{2}} \rightarrow |\ln \delta| > 8 \left(\frac{t}{J} \right)^2 \delta, \frac{J}{t} \simeq \frac{1}{3} \Rightarrow |\ln \delta| > 72\delta \Leftrightarrow 0 < \delta < 0.044 \quad (3.100)$$

Come si evince da essi, l'intervallo risolutivo rientra in parte trascurabile nel range di valori di drogaggio consentiti dal modello $t - J$: tali osservazioni consentono dunque di concludere che in entrambe le fasi analizzate, esisterà il momento di Fermi k_2^F legato al secondo addendo della funzione di Green ritardata per la buca fisica. Ciò fa intuire come la sua relazione di dispersione gran canonica ammetta uno zero, che per frequenze trascurabili (coerenti con la richiesta di determinare la suscettività magnetica uniforme e costante), risulta in un polo del propagatore menzionato; esso però può influenzare il calcolo della densità degli stati, solo se si trova nella regione di validità per l'espressione della funzione ritardata. Ciò dunque forza a studiare se:

$$k_2^F \in [k_1^F - Q, k_1^F + Q], Q = \sqrt[3]{T(k_1^F)^2} = \sqrt[3]{2mT\tilde{\mu}}, k_2^F < k_1^F \Rightarrow k_2^F \in [k_1^F - Q, k_1^F + Q] \Leftrightarrow k_2^F > k_1^F - Q \quad (3.101)$$

Per convenienza si preferisce tuttavia dimostrare la disuguaglianza opposta, che implicherà la trascurabilità del secondo addendo della funzione di Green ritardata rispetto al primo, poiché nel dominio di competenza di tale espressione, esso non ammette alcun polo, non azzerdandosi la sua relazione di dispersione. La verifica di tale asserto al solito è condotta separatamente nelle due fasi; essa consta nel provare che la funzione $k_1^F - k_2^F - Q > 0$ nella regione di interesse per le variabili fisiche del sistema, quali doping e temperatura. Per evitare complicazioni tecniche, si preferisce fare uno studio grafico della situazione, riportato in figura 3.9.

Il pannello 3.9.a mostra il risultato nella fase di strange metal, ove inserendo le corrette espressioni del potenziale chimico riscaldato e della massa spinonica, si deve analizzare la positività della seguente funzione:

$$\begin{aligned} \sqrt{2m(\mu + m_s)} - \sqrt[3]{2mT(\mu + m_s)} - \sqrt{2m(\mu - m_s)} &= \left[2m \left(\frac{t}{2} + \frac{J}{\sqrt{2}} \sqrt{\delta |\ln \delta|} \right) \right]^{\frac{1}{2}} - \left[2mT \left(\frac{t}{2} + \frac{J}{\sqrt{2}} \right. \right. \\ &\left. \left. \sqrt{\delta |\ln \delta|} \right) \right]^{\frac{1}{3}} - \left[2m \left(\frac{t}{2} - \frac{J}{\sqrt{2}} \sqrt{\delta |\ln \delta|} \right) \right]^{\frac{1}{2}} := \sqrt{2m} f_{SM}^{\frac{1}{2}}(\delta) - \sqrt[3]{2mT}^{\frac{1}{3}} f_{SM}^{\frac{1}{3}}(\delta) - \sqrt{2m} g_{SM}^{\frac{1}{2}}(\delta), \left\{ \begin{array}{l} f_{SM}(x) \\ g_{SM}(x) \end{array} \right. \\ &= \left(\frac{3}{20} + \frac{1}{10\sqrt{2}} \sqrt{x |\ln x|} \right) \text{ eV} \Rightarrow k_1^F - k_2^F - Q > 0 \Leftrightarrow \sqrt{2m} \left[f_{SM}^{\frac{1}{2}}(\delta) - \left(\frac{T}{\sqrt{2m}} \right)^{\frac{1}{3}} f_{SM}^{\frac{1}{3}}(\delta) - g_{SM}^{\frac{1}{2}}(\delta) \right] > 0 \\ &= \left(\frac{3}{20} - \frac{1}{10\sqrt{2}} \sqrt{x |\ln x|} \right) \text{ eV} \end{aligned} \quad (3.102)$$

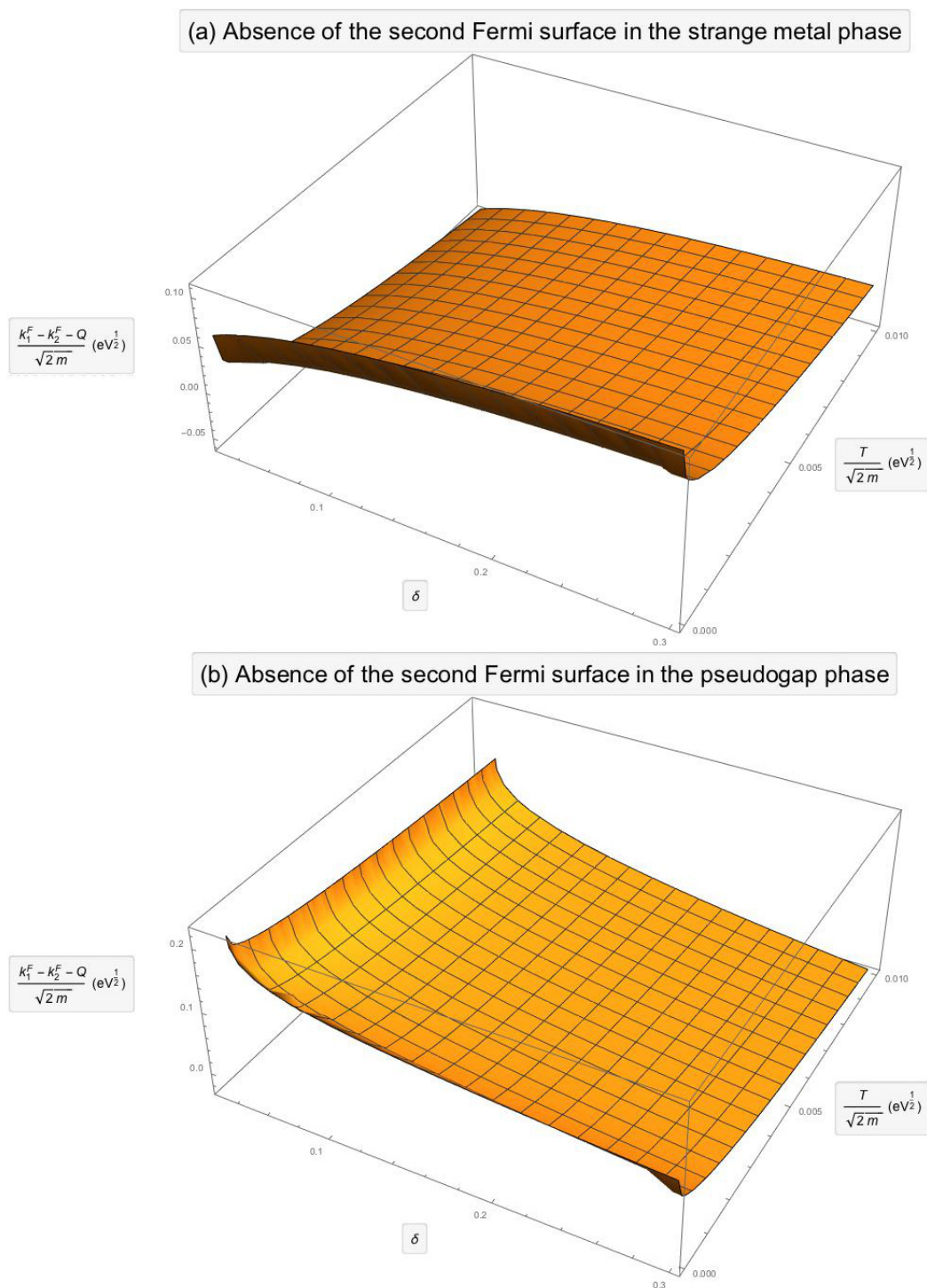


Figura 3.9: Studio per escludere il secondo addendo della funzione di Green ritardata dal calcolo della densità degli stati per la buca fisica nelle fasi di (a) strange metal e (b) pseudogap.

Per essa si sono scelte le variabili $x \equiv \delta \in [0.03, 0.3]$ ed $y \equiv \frac{T}{\sqrt{2m}} \in [0, 0.01]$ ove per consistenza, y sarà misurata in $(\text{eV})^{\frac{1}{2}}$. Una prima osservazione mostra come il grafico dipenda in maniera poco sensibile dal drogaggio, mentre ammetta più variabilità nell'intervallo di temperatura. Ciò consente dunque di stimare che, per ogni valore di δ , la funzione sotto analisi è positiva purché la temperatura resti inferiore alla soglia $10^{-3}\sqrt{2m}$ eV, il che suggerisce una volta sostituita la massa elettronica in unità naturali, la previsione di 1 eV ($\simeq 10^4$ K) che ben supera tutti i possibili valori a cui possono essere condotte le misure di laboratorio. Una discussione simile si applica anche alla fase di pseudogap, ove la corretta espressione del potenziale chimico cambia la funzione di cui studiare la positività:

$$\begin{aligned} & \sqrt{2m(\mu + m_s)} - \sqrt[3]{2mT(\mu + m_s)} - \sqrt{2m(\mu - m_s)} = \left[2m \left(2t\delta + \frac{J}{\sqrt{2}} \sqrt{\delta |\ln \delta|} \right) \right]^{\frac{1}{2}} - \left[2mT \left(2t\delta + \frac{J}{\sqrt{2}} \right. \right. \\ & \left. \left. \sqrt{\delta |\ln \delta|} \right) \right]^{\frac{1}{3}} - \left[2m \left(2t\delta - \frac{J}{\sqrt{2}} \sqrt{\delta |\ln \delta|} \right) \right]^{\frac{1}{2}} := \sqrt{2m} f_{PG}^{\frac{1}{2}}(\delta) - \sqrt[3]{2mT} f_{PG}^{\frac{1}{3}}(\delta) - \sqrt{2m} g_{PG}^{\frac{1}{2}}(\delta), \left\{ \begin{array}{l} f_{PG}(x) \\ g_{PG}(x) \end{array} \right. \\ & = \left(\frac{3}{5}x + \frac{1}{10\sqrt{2}} \sqrt{x |\ln x|} \right) \text{ eV} \Rightarrow k_1^F - k_2^F - Q > 0 \Leftrightarrow \sqrt{2m} \left[f_{PG}^{\frac{1}{2}}(\delta) - \left(\frac{T}{\sqrt{2m}} \right)^{\frac{1}{3}} f_{PG}^{\frac{1}{3}}(\delta) - g_{PG}^{\frac{1}{2}}(\delta) \right] > 0 \\ & = \left(\frac{3}{5}x - \frac{1}{10\sqrt{2}} \sqrt{x |\ln x|} \right) \text{ eV} \end{aligned} \quad (3.103)$$

Il suo grafico è riportato, nelle medesime variabili descritte in precedenza, in figura 3.9.b. Da essa si evince analogamente la debole dipendenza dal doping, mentre è meno marcata la decrescita in temperatura, che consente di ottenere così una soglia in T dieci volte maggiore della precedente. Da tale disamina si può dunque concludere che, nel range di temperature sperimentali, in entrambe le fasi del sistema superconduttore e per qualsiasi valore ammesso di drogaggio, anche se in linea di principio si presentano due superfici di Fermi, in realtà nella regione di validità per la funzione di Green ritardata, il suo secondo addendo non ammette poli in quanto non si annulla la relazione di dispersione e dunque può essere coerentemente trascurato nel desumere la densità degli stati. Per giungere ad una sua stima analitica, una volta scartato il secondo termine, si può pensare di estendere il dominio di integrazione a tutto lo spazio reciproco, poiché fuori dalla striscia spessa $2Q$ attorno a k_1^F , il momento di Reizer è responsabile di uno skin effect che smorza rapidamente i propagatori e dunque il contributo esterno alla regione menzionata, non altera in maniera significativa il risultato complessivo. Per ottenerlo si tratta di dover affrontare il seguente calcolo:

$$\begin{aligned} N_{tot}^{hole}(s + \mu) & \equiv 2DOS(s), \quad DOS(\omega) = -Im \left[\frac{A}{\pi(2\pi)^2} J_1 \right], \quad J_1 = -Z \int d^2 \vec{k} \frac{\omega + i\Gamma + E(\vec{k})}{E^2(\vec{k}) + \Delta^2 \sin^2 \theta - (\omega + i\Gamma)^2} \\ & = -Z \int_0^\Lambda dk k \left(\omega + i\Gamma + \frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} \right) \cdot \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} \right)^2 - (\omega + i\Gamma)^2 + \Delta^2 \sin^2 \theta}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mu} = \mu + m_s \\ \omega \simeq 0 \\ \Lambda \rightarrow +\infty \end{array} \right. \end{aligned} \quad (3.104)$$

ove Λ è un cutoff per il modulo del momento, che come si mostrerà in seguito può essere mandato ad infinito garantendo la convergenza del risultato. La precedente equazione contiene la importante approssimazione $m_\phi = 0$, che permette ancora di lavorare con una superficie di Fermi chiusa per la buca fisica purché il suo scattering rate Γ non si annulli. Nel seguito si supporrà ciò sempre valido, riservando l'appendice A alla trattazione della suscettività magnetica uniforme nel caso in cui $\Gamma = 0$, che richiede pertanto un calcolo ab initio, partendo dalla bolla tra due funzioni di Green-Matsubara. Il primo passo verso la soluzione della (3.104) consiste nell'integrazione angolare, fattibile in modo analitico e riportata di seguito. Si può innanzitutto notare come alcune considerazioni di simmetria consentano di riesprimere il dominio angolare, riducendolo al primo quadrante:

$$\begin{aligned} I & = \int_0^{2\pi} \frac{dx}{a^2 + \Delta^2 \sin^2 x} := \frac{1}{a^2} \int_0^{2\pi} \frac{dx}{1 + n \sin^2 x}, \quad \left\{ \begin{array}{l} n \equiv \left(\frac{\Delta}{a} \right)^2 \\ a^2 \equiv \left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} \right)^2 - (\omega + i\Gamma)^2, \quad \omega \simeq 0 \end{array} \right. \Rightarrow I = \\ & \frac{1}{a^2} \left(\int_0^\pi \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} + \int_\pi^{2\pi} \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} \right) = \frac{2}{a^2} \int_0^\pi \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} = \frac{2}{a^2} \left(\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} + \int_{\frac{\pi}{2}}^\pi \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} \right) \\ & = \frac{2}{a^2} \left(\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} + \int_{-\frac{\pi}{2}}^0 \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} \right) = \frac{4}{a^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dx}{1 + n \sin^2 x} \end{aligned} \quad (3.105)$$

Per giungere ad un risultato analitico sulla densità degli stati per la buca fisica, è ora conveniente operare una riscrittura dell'integrando della parte angolare della (3.104). Ciò tuttavia non può fornire un'unica espressione; difatti al denominatore si trovano due scale di energia: la prima è proporzionale a Δ^2 , mentre la seconda, indicata con a^2 nella formula precedente, è composta dalle rimanenti variabili (somma in quadratura tra relazione di dispersione grancanonica e scattering rate). Tale distinzione tuttavia è coerente solo per temperature inferiori a quella di pairing per le coppie holoniche T_{ph} , in quanto il superamento di tale soglia comporta per definizione l'annullarsi dell'energy gap Δ e contestualmente la sparizione del primo riferimento energetico menzionato. Dunque è necessario condurre tale analisi al di sotto di T_{ph} , osservando in seguito i cambiamenti da apportare nel caso opposto. Si è deciso tuttavia di scegliere una regione ancora più specifica, pari a $T_c < T \ll T_{ph}$, poiché ivi sussiste una ben determinata relazione tra le variabili Δ e Γ . Rintracciando difatti per una la relazione che meglio interpola i dati sperimentali (riportata ad esempio in [21]) e per l'altra l'espansione inserita nel paragrafo precedente, è possibile dimostrare che per temperature contenute nell'intervallo indicato, vale $\Delta \gg \Gamma$. Con ciò è dunque possibile valutare il comportamento di $\Delta^2 \sin^2 \theta$ ed a^2 procedendo per gradi, come illustrato di seguito. Qualora l'angolo non deprima troppo il primo di essi, conviene trascurare il secondo, avendo ricordato che il contributo più importante alla densità degli stati è concentrato lungo la striscia larga il doppio del momento di Reizer Q attorno all'energia di Fermi k_1^F . Ciò dunque forza, per consistenza, a riesprimere l'intervallo per il modulo del momento come $[k_1^F - Q, k_1^F + Q]$. Se però la funzione goniometrica rendesse quasi nulla la prima scala di energia (il termine in Δ^2), si può contestualmente decidere di operare in questo modo: nel denominatore dell'integrando angolare si usa $\Delta = 0$, lasciando il range precedente $[0, \Lambda]$ per il momento in quanto non si è considerata la sua trascurabilità rispetto all'energy gap. In conclusione a tale ragionamento si nota come, indagando temperature maggiori della soglia T_{ph} , una simile impalcatura sia superflua. In tal caso difatti l'energy gap Δ vale identicamente 0, conferendo simmetria sferica all'intero integrale J_1 che compare nella formula della densità degli stati. Per procedere con il calcolo è infine necessario stabilire il valore di θ che discrimina le due situazioni presentate; per esso non esiste un'espressione precisa e lo si indicherà in maniera generica come $\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)$. Una maniera grezza per sceglierlo potrebbe risultare dalla riespressione delle due scale di energia; ipotizzando che la seconda sia sprovvista della relazione di dispersione grancanonica (decidendo di lavorare per comodità sulla superficie di Fermi, ove si concentrano i risultati dei propagatori e delle funzioni ad essi collegate), resta da paragonare $\Delta^2 \sin^2 \theta$ e Γ^2 . Per temperature inserite in $T_c < T \ll T_{ph}$, la prima risulta dominante sull'ultima purché $\sin^2 \theta$ non scenda a valori troppo al di sotto dell'unità. Una scelta di comodo risulta $\sin^2 [\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)] = \frac{1}{2}$ ovvero $\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) = \frac{\pi}{4}$; tale angolo tuttavia va modificato in base alla temperatura, e precisamente più essa aumenta, allo stesso modo deve comportarsi l'angolo per compensare la decrescita di Δ . Come anticipato, appartenendo la temperatura ad intervalli ben separati tra loro, non conviene seguire l'andamento puntuale di $\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)$; ci si accontenta di osservare che, al limite in cui $T \gtrsim T_{ph}$, si è forzati a considerare $\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) = \frac{\pi}{2}$, estremo che dunque annulla l'integrazione angolare (comprimendo il suo dominio fino ad un punto di dimensione nulla) e contestualmente fa sparire il contributo al calcolo descritto in precedenza, operante sulla striscia attorno al momento di Fermi. Ciò tuttavia è proprio quanto atteso, come si è avuto modo di constatare inserendo la condizione $\Delta \equiv 0$ nella formula (3.104). Tali considerazioni fanno dunque emergere la consistenza del procedimento intrapreso e permettono di esaminarne i risultati; nel seguito si è convenuto, allo scopo di far fruttificare la generalità insita nella strada intrapresa, di lavorare con un generico $\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)$. Nel dettaglio che illustra i valori assunti per i due regimi di temperatura, la proposta di adoperare $\frac{\pi}{4}$ qualora T risultasse molto inferiore a T_{ph} riveste solo un ruolo di completezza. Certamente è plausibile, ma d'altro canto, non essendo univoca, fa ritenere migliore la scelta di procedere con il calcolo dell'integrale per la densità degli stati in modo implicito, come illustrato nel seguito:

$$J_1 = -4Z \int_{k_1^F - Q}^{k_1^F + Q} dkk \left(\omega + i\Gamma + \frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} \right) \int_{\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\Delta^2 \sin^2 \theta} - 4Z \int_0^\Lambda dkk \left(\omega + i\Gamma + \frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} \right) \cdot$$

$$\int_0^{\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)} \frac{d\theta}{\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} \right)^2 - (\omega + i\Gamma)^2} := K_1 + K_2, \quad \begin{cases} \tilde{\mu} = \mu + m_s \\ \omega \simeq 0 \\ \Lambda \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad \bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \begin{cases} \in]0, \frac{\pi}{2}[& \text{e.g. } \frac{\pi}{4} T_c < T \ll T_{ph} \\ = \frac{\pi}{2} T \gtrsim T_{ph} \end{cases} \quad (3.106)$$

Da quanto riportato, si nota come nell'addendo K_1 l'integrazione angolare sia immediata, mentre si possa procedere con minore sforzo in quella sul modulo del momento, dopo aver considerato che, ai fini della densità degli stati per la buca fisica, interessa solo la sua parte immaginaria:

$$Im(K_1) = -4Z \left[\Gamma \frac{k^2}{2} \right]_{k_1^F - Q}^{k_1^F + Q} \left[-\frac{\cot \theta}{\Delta^2} \right]_{\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}^{\frac{\pi}{2}} = -8Z \frac{\Gamma k_1^F Q}{\Delta^2} \cot [\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)] \quad (3.107)$$

Si osservi, sempre ai fini della generalità, un importante punto: a prima vista l'estensione a temperature maggiori di quella di pairing per gli holoni, sembra problematica in quanto fornisce una forma indeterminata. Ciò tuttavia

non deve spaventare in quanto consegue dalle diverse approssimazioni apportate per giungere alla forma (3.106) per l'integrale della densità degli stati; una simile situazione si presenterà anche quando si cercherà di estendere al caso libero il calcolo della bolla tra funzioni di Green per la buca fisica condotto in appendice A. La soluzione risiede nell'inserire le ipotesi nella formula originaria (3.104) ed assegnare al limite precedente il valore che lo renda coerente con il risultato così ottenuto. Poiché nel caso in esame si annulla l'energy gap Δ , allora si ritrova solamente il secondo addendo K_2 di (3.106), con l'estremo superiore di integrazione angolare pari a $\frac{\pi}{2}$. Da ciò risulta come, essendo proprio questo il valore assunto da $\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)$ per $T \gtrsim T_{ph}$, basti porre $K_1 \equiv 0$ per ottenere corrispondenza. Dopo aver concluso la disamina sul termine K_1 , si passa ora ad occuparsi di K_2 , che richiede tuttavia maggiore attenzione: perciò si conviene di calcolarlo prima in modo completo e riservare i passaggi successivi alla determinazione della sua parte immaginaria. Notata la simmetria sferica dell'integrando, si può affrontare la più impegnativa parte sul modulo del momento dopo alcune semplificazioni e tramite opportuni cambi di variabile. Il procedimento dettagliato è qui riprodotto:

$$\begin{aligned}
K_2 &= -4Z\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \int_0^\Lambda dk k \frac{\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} + \omega + i\Gamma}{\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)^2 - (\omega + i\Gamma)^2} = -4Z\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \int_0^\Lambda \frac{dk k}{\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} - (\omega + i\Gamma)}, \begin{cases} \frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} = y \\ \omega + i\Gamma = B \end{cases} \\
\rightarrow K_2 &= -4Z\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \int_{-\tilde{\mu}}^{\frac{\Lambda^2}{2m} - \tilde{\mu}} \frac{m dy}{y - B} = -4Zm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) [\ln |y - (\omega + i\Gamma)|]_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\frac{\Lambda^2}{2m} - \tilde{\mu}} = -4Zm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \cdot \\
&\left\{ \frac{1}{2} \ln \left[(y - \omega)^2 + \Gamma^2 \right] + i \arctan' \left(\frac{-\Gamma}{y - \omega} \right) \right\}_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\frac{\Lambda^2}{2m} - \tilde{\mu}}
\end{aligned} \tag{3.108}$$

Quanto ottenuto è ora sfruttabile per il calcolo della densità totale degli stati prendendone la parte immaginaria ed inserendo i corretti fattori di proporzionalità; si notino però alcune importanti osservazioni. In primo luogo è necessario considerare nella formula del logaritmo complesso adottata in precedenza, il solo argomento principale, definito nell'intervallo $[0, 2\pi[$ e denotato con un apice nella funzione che lo genera; in secondo luogo va eseguito il limite richiesto dal caso che si sta trattando, ovvero l'estensione del cutoff Λ del momento a tutto il semiasse reale positivo. Da ciò si conclude che:

$$\begin{aligned}
Im(K_2) &= -4Zm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \left[\arctan' \left(\frac{-\Gamma}{y - \omega} \right) \right]_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\frac{\Lambda^2}{2m} - \tilde{\mu}} = -4Zm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \left\{ \left[2\pi - \arctan \left(\frac{\Gamma}{\frac{\Lambda^2}{2m} - \tilde{\mu} - \omega} \right) \right] \right. \\
&\left. - \left[\pi + \arctan \left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu} + \omega} \right) \right] \right\} \Rightarrow Im(K_2) \xrightarrow{\Lambda \rightarrow +\infty} -4Zm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \left[\pi - \arctan \left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu} + \omega} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.109}$$

Raggruppando tutti i risultati forniti, è poi immediato ricavare la densità totale degli stati per la buca fisica seguendo i passaggi indicati nella formula (3.104):

$$\begin{aligned}
N_{tot, hole}(s + \mu) \equiv 2DOS(s), \quad DOS(\omega) &= \frac{A}{\pi(2\pi)^2} \left\{ 8Z \frac{\Gamma k_1^F Q}{\Delta^2} \cot[\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)] + 4Zm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma) \left[\pi - \right. \right. \\
&\left. \left. \arctan \left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu} + \omega} \right) \right] \right\} = \frac{AZm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \left\{ \frac{2\Gamma k_1^F Q}{m\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)\Delta^2} \cot[\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)] + \pi - \arctan \left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu} + \omega} \right) \right\}
\end{aligned} \tag{3.110}$$

Per giungere però a ricavare la suscettività magnetica uniforme e costante, oltre al contributo precedente sulla densità degli stati calcolato a valori nulli della frequenza, servono anche le sue derivate pari. Tale compito tuttavia è agevolato notando che il termine desunto dall'addendo K_1 (non nullo come si è visto solo per temperature appartenenti all'intervallo $T_c < T \ll T_{ph}$) non dipende dalla frequenza, come è possibile controllare risalendo a tutte le espressioni delle variabili ivi presenti, riportate nel paragrafo precedente, sotto l'ipotesi $T \gg \omega$. Forti di ciò, si comincia dunque con il calcolare la derivata seconda della densità degli stati, che fornirà la prima correzione alla formula della suscettività magnetica:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\omega} DOS(\omega) &= -\frac{AZm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu} + \omega}\right)^2} \cdot -\frac{\Gamma}{(\tilde{\mu} + \omega)^2} \right] = \frac{AZm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \cdot \frac{\Gamma}{(\tilde{\mu} + \omega)^2 + \Gamma^2} \Rightarrow \\
\frac{d^2}{d\omega^2} DOS(\omega) &= \frac{AZm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \cdot -\frac{2\Gamma(\tilde{\mu} + \omega)}{[(\tilde{\mu} + \omega)^2 + \Gamma^2]^2} \Rightarrow \frac{d^2}{d\omega^2} DOS(\omega) \Big|_{\omega=0} = -\frac{2AZm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \cdot \frac{\Gamma\tilde{\mu}}{(\tilde{\mu}^2 + \Gamma^2)^2}
\end{aligned} \tag{3.111}$$

Dai due risultati precedenti è dunque possibile ottenere un'espressione esplicita per la trasformata di Fourier uniforme e costante della componente zz del tensore di suscettività magnetica, sfruttando la formula (3.88):

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= Z\mu_B^2 \left\{ N_{tot}^{hole}(\mu) + \sum_{n \text{ pari} \geq 2} \left[\frac{2(1-2^{1-n})}{\beta^n} \zeta(n) \frac{\partial^n N_{tot}^{hole}(s)}{\partial s^n} \Big|_{s=\mu} \right] \right\} = Z\mu_B^2 \left\{ \frac{2AZm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \right. \\ &\left. \left[\frac{2\Gamma k_1^F Q}{m\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)\Delta^2} \cot[\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)] + \pi - \arctan\left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu}}\right) \right] + \frac{\pi^2}{6\beta^2} - \frac{4AZm\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \cdot \frac{\Gamma\tilde{\mu}}{(\tilde{\mu}^2 + \Gamma^2)^2} + \dots \right\} = \\ &\frac{2AZ^2\mu_B^2 m\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \left\{ \frac{2\Gamma k_1^F Q}{m\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)\Delta^2} \cot[\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)] + \pi - \arctan\left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu}}\right) - \frac{\pi^2}{3}(k_B T)^2 \frac{\Gamma}{\tilde{\mu}^3} \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{\Gamma}{\tilde{\mu}}\right)^2\right]^2} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (3.112)$$

La conclusione appena mostrata si rivela molto importante, ed è conveniente esprimerne il termine leading nell'ipotesi $\tilde{\mu} \gg \Delta, \Gamma$. Ciò difatti riproduce la comune situazione fisica, come è intuibile dal ragionamento seguente: è noto che $\tilde{\mu}$ rappresenta la scala di energia della buca fisica, essendo pari al potenziale chimico ereditato dall'holone, a cui è stata aggiunta la massa spinonica in seguito all'accoppiamento di gauge. Esso dunque deve rivestire un ruolo preminente sulle restanti variabili energetiche; ciò avviene sia per l'energy gap Δ , risultando una debole correzione rispetto a $\tilde{\mu}$, visto che si è analizzato il sistema in stato normale, che per lo scattering rate Γ . In quest'ultimo caso il discorso è più delicato e per capirlo bisogna riferirsi ad un urto tra buche fisiche: è noto che per velocità non relativistiche, Γ^{-1} fornisce la vita media delle particelle, cosicché in unità naturali, lo scattering rate è confrontabile con la variazione di energia durante il processo. Ma essa non deve soverchiare, né essere paragonabile alla scala tipica $\tilde{\mu}$, volendo che tale evento sia osservabile, come accade qualora si misuri la larghezza in energia di una risonanza nucleare. L'approssimazione $\tilde{\mu} \gg \Delta, \Gamma$ produce due benefiche conseguenze impedendo alla temperatura di raggiungere valori asintotici: dal punto di vista teorico difatti risultano rispettate le condizioni con le quali non solo si è ricavata la suscettività magnetica tramite un'espansione in serie della densità totale degli stati, ma anche si è determinata quest'ultima conservando un solo addendo nella funzione di Green ritardata della buca fisica. Per quanto riguarda la parte sperimentale, il range non troppo elevato di T consente di progettare verifiche materialmente eseguibili, e la vastità dei dati in materia tabulati in letteratura ne è un fulgido esempio. Qualora si trascurino gli ordini uguali o superiori al secondo in temperatura, conviene notare un punto importante sui rimanenti addendi. Essendo $k_1^F Q$ proporzionale a $\tilde{\mu}^{\frac{5}{6}}$, il termine dipendente dall'energy gap Δ è dominante, tuttavia non diverge poiché ammette tra i suoi costituenti il rapporto $\frac{\Gamma}{\Delta}$, che per temperature molto inferiori a quella di pairing per gli holoni, ne smorza l'ampiezza portandolo ad un valore finito. Come già notato in precedenza, qualora si fosse interessati a studiare il caso $T \gtrsim T_{ph}$ tale problema non si pone, poiché l'addendo in questione è stato reso nullo per consistenza. Quanto asserito porta a concludere che un buon punto di partenza per esaminare la suscettività magnetica risiede nella seguente formula:

$$\chi_{zz}(\vec{0}, 0) = \frac{2AZ^2\mu_B^2 m\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)}{\pi^3} \left\{ \frac{2\Gamma k_1^F Q}{m\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)\Delta^2} \cot[\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)] + \pi \right\} \quad (3.113)$$

Volendo cercare conferme per le previsioni fornite con i dati tabulati, è comodo scegliere il limite $T \gtrsim T_{ph}$, poiché viene raggiunto dalle comuni misurazioni, almeno per cristalli con drogaggio ottimale. Per procedere dunque è necessario prima pervenire ad una formula della suscettività magnetica per valori nulli dell'energy gap Δ ; si noti che in tali condizioni si possono considerare formalmente valori qualsiasi della massa m_ϕ associata alla fase del campo di coppie holoniche, poiché il suo contributo svanisce essendo presente in una funzione a fattore di Δ . Il limite descritto, come più volte ribadito nel seguito, si implementa quindi nella scelta di $\bar{\theta}(0, \Gamma) = \frac{\pi}{2}$ ed in un contestuale annullamento del primo addendo della formula (3.113). Ciò che sopravvive è il termine leading dello sviluppo in serie della funzione di risposta, che rappresenta tuttavia il contributo fisico misurabile sperimentalmente, essendo le correzioni di secondo ordine in temperatura o superiori subdominanti nell'ipotesi fisica $\tilde{\mu} \gg \Gamma$. Le condizioni di lavoro sulle variabili appena descritte, fanno intuitivamente paragonare il sistema superconduttore ad un comune metallo, e ciò è confermato dalla forma che assume la funzione di Green-Matsubara con la condizione $\Delta \equiv 0$, pari a quella del caso non interagente discussa nel paragrafo 3.1 (a meno del fattore di rinormalizzazione Z). Pertanto è noto che in due dimensioni, dalla parte immaginaria della sua versione ritardata si ricaverà la consueta densità totale degli stati costante in frequenza, moltiplicata per Z ; in base alla formula (3.88), basterà dunque anteporre il fattore $Z\mu_B^2$ ad essa per ottenere la suscettività magnetica uniforme e costante. Questo risultato coincide con quanto emerge dalla (3.113) sottoposta alle condizioni discusse ed è dunque un buon segnale sulla correttezza dei

calcoli eseguiti e dà ulteriore credito alle conclusioni riportate nelle due espressioni precedenti:

$$\chi_{zz}^{\Delta=0}(\vec{0}, 0) = \frac{2AZ^2\mu_B^2 m \pi^2}{\pi^3} = Z\mu_B^2 \frac{AZm}{\pi} = Z\mu_B^2 N_{tot, hole}^{(0)} = \chi_{zz}^{(0)}(\vec{0}, 0) \quad (3.114)$$

Tale espressione, valida per temperature maggiori di quella di pairing per gli holoni T_{ph} , non viola tuttavia i limiti imposti ad inizio paragrafo per lavorare con un solo addendo della funzione di Green ritardata della buca fisica. Difatti affinché $\tilde{\mu}$ continui a rivestire il ruolo di scala dominante di energia, si nota come si debbano usare valori di temperatura ben al di sotto della soglia di 1 eV discussa inizialmente, garantendo così coerenza allo sviluppo appena mostrato. Un discorso analogo sarà implicito qualora si deriveranno alcuni risultati particolari dal calcolo della bolla tra due funzioni di Green: pure in quella sede, per confronto, si opererà un'espansione per temperature maggiori di T_{ph} , osservando come anche restando sotto la soglia precedente, si possa approssimare la distribuzione di Fermi $n_F(\tilde{\mu})$ a zero essendo il potenziale chimico riscaldato della buca fisica molto maggiore del suo scattering rate, ovvero della temperatura, come documentano le espressioni presentate nel paragrafo precedente. La previsione fornita è un buon check per testare la correttezza delle formule adottate nella derivazione, nonché la sensatezza delle approssimazioni utilizzate nel calcolo; tuttavia il vero riscontro si ottiene una volta confrontato l'andamento della suscettività magnetica (3.112) o (3.113) con i dati sperimentali. Volendo una descrizione completa, si preferisce raffinare il risultato (3.113): sviluppando in serie il terzo addendo della (3.112), si nota come il suo primo termine fornisca una correzione in $\frac{\Gamma}{\tilde{\mu}}$, mentre i restanti contributi al terz'ordine o superiori sono trascurati. Analogo destino devono seguire per coerenza le parti legate alle derivate pari in frequenza della densità degli stati; con tale punto di partenza è dunque possibile stabilire il comportamento della funzione di risposta al variare della temperatura. Utilizzando la formula di inizio paragrafo per il momento di Reizer, ed inserendo le espressioni delle restanti variabili energetiche, è dunque possibile impostare un'analisi dipendente dalla fase del sistema superconduttore. Considerando per semplicità costante l'apporto dell'angolo $\bar{\theta}(\Delta, \Gamma)$, si parte innanzitutto con temperature appartenenti al range $T_c < T \ll T_{ph}$, ottenendo:

$$\begin{aligned} T_c < T \ll T_{ph} : \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &\propto Z^2 \left(\frac{A'\Gamma T^{\frac{1}{3}}}{\Delta^2} + \pi - \frac{\Gamma}{\tilde{\mu}} \right), \Gamma \propto \begin{cases} SM : TQ_T^{SM}, Q_T^{SM} \propto T^{\frac{1}{3}} \\ PG : T, Q_T^{PG} \propto T^{\frac{1}{3}} \end{cases}, \Delta^2 \propto \\ 1 - e^{-2.5\left(1 - \frac{T_{ph}}{T}\right)} \approx O(1) \rightarrow \Delta \gg \Gamma &\Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) \propto \begin{cases} SM : Q_T^{SM} \left(A'Q_T^{SM} T^{\frac{4}{3}} + B' - \varepsilon' Q_T^{SM} T \right) \\ PG : Q_T^{PG} \left(A'T^{\frac{4}{3}} + B' - \varepsilon'T \right) \end{cases} \\ &\propto \begin{cases} SM : T^{\frac{1}{3}} \left(AT^{\frac{5}{3}} + B - \varepsilon T^{\frac{4}{3}} \right) \\ PG : T^{\frac{1}{3}} \left(AT^{\frac{4}{3}} + B - \varepsilon T \right) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.115)$$

Dalla precedente equazione, nella quale ε indica un parametro infinitesimo di convergenza, seguono alcune importanti osservazioni: l'andamento del termine leading (proporzionale ad A) della suscettività magnetica dipende dalla fase del sistema superconduttore. In quella di strange metal, si evince come esso sia quadratico in temperatura, mentre per lo pseudogap, la crescita è più che lineare. Tale diversità tuttavia risulta compatibile in base alle considerazioni sulla densità degli stati esposte nel paragrafo precedente: tale ragionamento è da intendersi in modo qualitativo, poiché in primo luogo il comportamento ivi esaminato riguardava gli holoni ed in secondo si lavorava a fissato scattering rate variando l'energia (ovvero la frequenza). Tuttavia ricordando l'azione di mediazione del campo di gauge che fa ereditare alla buca fisica molte caratteristiche dal settore holonico, e considerando il fatto che per la suscettività magnetica uniforme e costante, l'unica scala di energia risulta la temperatura essendo $\omega = 0$, si attendono conclusioni corrette. Cominciando dunque dalla fase di strange metal, le temperature molto inferiori alla soglia di pairing per gli holoni producevano una marcata deviazione dal risultato costante del caso libero; per basse T dunque la sua crescita, sviluppata in serie di Taylor centrata sul minimo, assumeva andamento parabolico come ottenuto dall'analisi appena condotta. Proseguendo con la fase di pseudogap, si era trovato un profilo per il quale, astraendo dalle specifiche deviazioni concentrate in ridotte regioni dell'asse energetico, il comportamento compreso tra lineare e quadratico risultava una soddisfacente approssimazione: il medesimo risultato desunto in precedenza assicura dunque legittimità e coerenza ai procedimenti svolti. Confortati dalle conferme appena enunciate, si passa dunque ad indagare l'intervallo di temperature a partire da T_{ph} : come più volte ribadito, ivi sparisce il primo addendo della densità degli stati, e dunque il suo sviluppo assume una forma più sintetica. Adattando opportunamente la prima parte della formula precedente ed inserendovi gli sviluppi delle variabili energetiche riportate nel paragrafo 3.8, si ottiene:

$$T \gtrsim T_{ph} : \chi_{zz}(\vec{0}, 0) \propto \begin{cases} SM : Q_T^{SM} (\pi - \varepsilon T Q_T^{SM}) \\ PG : Q_T^{PG} (\pi - \varepsilon T) \end{cases} \propto \begin{cases} SM : T^{\frac{1}{3}} (A - \varepsilon T^{\frac{4}{3}}) \\ PG : T^{\frac{1}{3}} (A - \varepsilon T) \end{cases} \quad (3.116)$$

La previsione fornita risulterà di capitale importanza quando si opererà il confronto con i dati sperimentali: come sarà discusso più in dettaglio nel prossimo paragrafo difatti, la crescita asintotica urta contro l'andamento piatto riportato in modo unanime dai più autorevoli lavori sperimentali sulla suscettività magnetica. Ciò fornirà dunque un chiaro segnale d'allarme sulla necessità di ricontrollare le approssimazioni che hanno portato alla forma della costante di rinormalizzazione Z ; proprio a tale livello, difatti, si deve trovare un comportamento asintotico per avere rispondenza con i dati tabulati. Con una siffatta correzione sembra però concordare una recente revisione sulle implicazioni della statistica adottata per la parte holonica nella decomposizione spin-carica dell'operatore elettronico, come si discuterà in conclusione di capitolo. Il secondo andamento sottoponibile a confronto sperimentale è rispetto al doping δ ; una sua analisi completa dovrebbe considerare molte casistiche, le quali tuttavia possono essere ridotte in base alla figura 3.5. Difatti per valori di drogaggio prossimi all'estremo inferiore ammesso dal modello $t - J$, essendo T_{ph} elevata, è sensato lavorare in condizioni di temperature molto inferiori ad essa. L'espressione da cui partire è presente nella prima parte della penultima formula; in essa, oltre ai comportamenti delle variabili energetiche presentati nelle (3.94) e (3.95), resta infine da studiare il termine $k_1^F Q$. Esso può essere riscritto come fatto ad inizio del presente paragrafo, esprimendo tutto in funzione del potenziale chimico riscaldato $\tilde{\mu}$. La sua forma, analizzata proprio in quella sede, può essere tuttavia semplificata trascurando la massa spinonica e rimanendo con la sola energia di Fermi dell'holone: una simile scelta è giustificabile in base alle osservazioni ivi fornite. Difatti nella fase di strange metal, m_s rappresenta una debole correzione di μ nel caso di half filling, come è possibile constatare dal rapporto tra i coefficienti del modello $t - J$. Nella regione di pseudogap, l'operazione sotto indagine è lecita poiché per valori di drogaggio non a ridosso dell'estremo inferiore ammesso, μ prima equivaleva e poi superava m_s (consentendo per tale fase l'esistenza di una seconda superficie di Fermi, poi scartata non rientrando nella striscia larga il doppio del momento di Reizer attorno a k_1^F). Tale conclusione consente dunque di iniziare lo studio richiesto, che fornisce i risultati seguenti:

$$\begin{aligned} \delta \gtrsim 0.03 \rightarrow T_c < T \ll T_{ph} : \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &\propto Z^2 \left(\frac{A' \Gamma \tilde{\mu}^{\frac{5}{6}}}{\Delta^2} + \pi - \frac{\Gamma}{\tilde{\mu}} \right), \Gamma \propto \begin{cases} SM : (1 + \delta) Q_T^{SM} m_s^{-2}, Q_T^{SM} \propto (1 + \delta)^{\frac{2}{3}} \\ PG : \delta m_s^{-1}, Q_T^{PG} \propto \delta^{\frac{2}{3}} \end{cases} \\ \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &\propto \begin{cases} SM : (1 + \delta) Q_T^{SM} m_s [A' (1 + \delta) Q_T^{SM} m_s^{-2} + B' - \varepsilon' (1 + \delta) Q_T^{SM} m_s^{-2}] \\ PG : \delta Q_T^{PG} m_s (A' \delta m_s^{-1} \delta^{\frac{5}{6}} + B' - \varepsilon' \delta m_s^{-1} \delta^{-1}) \end{cases} \\ &\propto \begin{cases} SM : (1 + \delta)^{\frac{5}{3}} m_s [A(1 + \delta)^{\frac{5}{3}} m_s^{-2} + B - \varepsilon(1 + \delta)^{\frac{5}{3}} m_s^{-2}] \\ PG : \delta^{\frac{5}{3}} m_s (A \delta^{\frac{11}{6}} m_s^{-1} + B - \varepsilon m_s^{-1}) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.117)$$

Il comportamento della densità degli stati (e dunque della suscettività magnetica) per temperature inferiori a T_{ph} in funzione del doping risulta più delicato rispetto al suo profilo in temperatura. Per tale ragione ci si limita ad osservare la diversità di andamento del termine leading (proporzionale ad A) a seconda della fase del sistema superconduttivo. Da ultimo, qualora si aumenti il doping, restando sempre entro il valore massimo consentito dal modello, essendo la curva di T_{ph} decrescente, a patto di non entrare nella regione superconduttiva, sarà plausibile che le condizioni di lavoro rispecchino temperature molto maggiori di T_{ph} . Ovvero si dovranno utilizzare le analoghe conclusioni della formula (3.116) per fornire il profilo in tali situazioni:

$$\begin{aligned} \delta \lesssim 0.3 \rightarrow T \gtrsim T_{ph} \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &\propto \begin{cases} SM : (1 + \delta) Q_T^{SM} m_s [\pi - \varepsilon (1 + \delta) Q_T^{SM} m_s^{-2}] \\ PG : \delta Q_T^{PG} m_s (\pi - \varepsilon \delta m_s^{-1} \delta^{-1}) \end{cases} \\ &\propto \begin{cases} SM : (1 + \delta)^{\frac{5}{3}} m_s [A - \varepsilon(1 + \delta)^{\frac{5}{3}} m_s^{-2}] \\ PG : \delta^{\frac{5}{3}} m_s (A - \varepsilon m_s^{-1}) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.118)$$

L'andamento in funzione del doping è correttamente intuibile e riproduce fedelmente il comportamento della suscettività magnetica desumibile da un ragionamento basato su un modello tipo Fermi liquid; nel caso uniforme e costante richiesto, la coerenza tra esso ed il modello $t - J$ è assicurata dal medesimo risultato ottenuto sia con la funzione di correlazione tra spin fisici che con il calcolo in seconda quantizzazione, con il formalismo del tempo immaginario, della funzione di risposta. Difatti all'innalzarsi del drogaggio si hanno a disposizione più cariche, aumentando perciò i componenti di ensemble di spin elettronico, ovvero favorendo un incremento della suscettività in risposta ad un campo magnetico esterno; si noti che per tale conclusione si è ricordato il suo carattere paramagnetico dovuto al solo contributo spinoriale sotto indagine. Più incerto è il comportamento per valori intermedi di drogaggio; la soluzione risiede sempre nel confrontare la figura 3.5 e controllare il valore di T_{ph} per il doping prescelto. Qualora la temperatura a cui si è condotta la misura sia inferiore a tale soglia, si avrà l'andamento descritto dalla (3.117); in caso contrario di un suo superamento, la forma è invece riprodotta dalla

(3.118). Interessante nelle quattro formule precedenti è il diverso comportamento a seconda della fase in cui si trova il sistema solo per valori della temperatura inferiori a T_{ph} ; difatti si può notare come per T molto maggiore di essa gli esponenti del termine leading siano i medesimi sia in strange metal che in pseudogap. Le situazioni presentate consideravano come scala di energia più bassa la frequenza ω , molto minore delle altre presenti: nel caso $T_c < T \ll T_{ph}$, ω era trascurabile rispetto sia allo scattering rate Γ che all'energy gap Δ , mentre quando $T \gtrsim T_{ph}$, essendo ivi $\Delta \equiv 0$, allora valeva la relazione precedente solo rispetto a Γ . Da ciò si vede come nella cornice presentata, in nessun caso si possa fare a meno della scala di energia Γ , poiché ciò implicherebbe l'assenza di una superficie di Fermi chiusa per la buca fisica avendo scelto di porre nella sua funzione di Green $m_\phi = 0$; è sensato pertanto chiedersi quale procedimento si debba adottare volendo trattare il caso in cui i parametri fisici del sistema porgono $\Gamma = 0$. Da quanto discusso risulta naturale abbandonare la strada che conduce alla suscettività magnetica tramite il calcolo della densità degli stati; l'unica soluzione è dunque ripartire dalla formula di Kubo per tale funzione di risposta che ne suggeriva il calcolo come determinazione di una bolla tra funzioni di Green. Tale derivazione non richiede l'introduzione di ulteriori concetti, ma presenta uno svolgimento molto dettagliato che si è preferito rimandare in appendice A per evitare di appesantire ulteriormente la trattazione. La conclusione a cui si giungerà in quella sede è riassunta dalla formula seguente:

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= \chi_{zz}^{(1)}(\vec{0}, 0) + \chi_{zz}^{(2)}(\vec{0}, 0), \quad \chi_{zz}^{(1)}(\vec{0}, 0) = \frac{2\mu_B^2 \Sigma Z^2}{\pi^2} k_1^F Q \left\{ \left[\frac{\pi}{2} - \bar{\theta}(\Delta) \right] \left[-n'_F(\Delta) \right] + \frac{1 - 2n_F(\Delta)}{2\Delta} \right. \\ &\left. \ln \left[\tan \frac{\bar{\theta}(\Delta)}{2} \right]^{-1} \right\}, \quad \chi_{zz}^{(2)}(\vec{0}, 0) = \mu_B^2 Z^2 \frac{2\Sigma m \bar{\theta}(\Delta)}{\pi^2} \left\{ [1 - n_F(\tilde{\mu})] - \frac{\Delta^2}{4} \left[\frac{n'_F(\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{1}{4\tilde{\mu}^2} + J_3(\infty, \Delta) \right] \right. \\ &\left. \left[1 - \frac{\sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)}{\bar{\theta}(\Delta)} \right] \right\}, \quad \bar{\theta}(\Delta) \begin{cases} \in]0, \frac{\pi}{2}[& T_c < T \ll T_{ph} \\ = \frac{\pi}{2} & T \gtrsim T_{ph} \end{cases}, \quad J_3(\infty, \Delta) := \int_{\Delta}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} \end{aligned} \quad (3.119)$$

L'espressione precedente è abbastanza ricca in quanto comprende le restanti scale di energia qualora si abbia $\Gamma = 0$, date dall'energy gap Δ e dal potenziale chimico riscaldato $\tilde{\mu}$. Per verificare la correttezza del risultato, è conveniente studiare cosa accade a $\chi_{zz}^{(2)}(\vec{0}, 0)$ nel caso libero, in cui cioè si abbia $\Delta \equiv 0$ che, come discusso nell'appendice A, implica di usare $\bar{\theta}(\Delta) = \frac{\pi}{2}$. Innanzitutto è necessario capire come si comporta il termine $\Delta^2 J_3(\infty, \Delta)$, poiché a causa delle molteplici approssimazioni adottate, non è affidabile quanto ottenuto calcolando direttamente il limite; per desumere quanto cercato è doveroso riesaminare l'ultima parte della (A.10) nelle ipotesi sopra elencate. Ponendo ivi $\Delta = 0$, si vede come si annulli l'intera sommatoria con argomento $S'_k{}^{-A, -A}$; il medesimo risultato si ottiene dunque assegnando il valore 0 al limite richiesto. Ricordando poi che analogo destino era riservato all'addendo $\chi_{zz}^{(1)}(\vec{0}, 0)$, si trova la formula della suscettività magnetica di Pauli con l'ulteriore condizione di lavorare a temperature molto basse, in base alla quale si può approssimare la distribuzione di Fermi con la funzione gradino di Heaviside. Inserendo tali assunzioni nell'espressione della suscettività magnetica, per concludere è necessario ricordare la forma nel caso libero sia della densità totale degli stati per la buca fisica (costante in frequenza) che quella della funzione di risposta richiesta, entrambe presenti a metà paragrafo; si troverà così corrispondenza con quanto ivi riportato:

$$\chi_{zz}^{free}(\vec{0}, 0) = \mu_B^2 Z^2 \frac{\Sigma m}{\pi} = Z \mu_B^2 \frac{\Sigma m Z}{\pi} = Z \mu_B^2 N_{tot, hole}^{(0)} = \chi_{zz}^{(0)}(\vec{0}, 0) \quad (3.120)$$

Per concludere, conviene cercare un'altra conferma tra la formula (3.119) e quanto ottenuto a metà paragrafo, nel caso in cui la temperatura sia sufficientemente elevata ($T \gtrsim T_{ph}$) in modo da usare $\Delta \equiv 0$; formalmente si è ridotti a stimare il valore della sola funzione di Fermi. In base a quanto osservato dopo l'espansione (3.114), la scelta di porre $\tilde{\mu} \gg \Gamma \sim T$ nella distribuzione statistica, che pertanto si annulla, è coerente con la decisione di lavorare con un solo addendo nella funzione di Green ritardata per la buca fisica. Quanto sinora discusso consente così di valutare la suscettività magnetica uniforme e costante a temperature maggiori della soglia di pairing per gli holoni; nel seguito è riprodotto il calcolo, che grazie alle identificazioni delle formule precedenti su densità totale degli stati e forma della funzione di risposta, conduce a buon esito la verifica impostata:

$$\chi_{zz}^{\Delta=0}(\vec{0}, 0) = \mu_B^2 Z^2 \frac{\Sigma m}{\pi} [1 - n_F(\tilde{\mu})] \rightarrow Z \mu_B^2 \frac{\Sigma m Z}{\pi} = Z \mu_B^2 N_{tot, hole}^{(0)} = \chi_{zz}^{(0)}(\vec{0}, 0) \quad (3.121)$$

Ciò è molto confortante poiché legittima ulteriormente con il calcolo della bolla tra due funzioni di Green, le previsioni ottenute con la formula che lega suscettività magnetica e densità degli stati. Esso altresì completa la derivazione della funzione di risposta per tutti i possibili valori che le scale di energia Γ e Δ possono assumere in un sistema superconduttore ad alta temperatura; nel paragrafo successivo si cercheranno dei riscontri grafici per tali comportamenti, introducendo i risultati sperimentali sulle misure di Knight shift direttamente proporzionale alla parte reale della suscettività magnetica tramite il tensore di accoppiamento iperfine.

3.10 Conclusioni

In questo paragrafo si discuteranno in modo qualitativo i risultati mostrati in precedenza, cercando corrispondenza nei dati sperimentali. Poiché nel capitolo 2 ci si era occupati del tempo di rilassamento, conviene ora guardare al Knight shift il quale, tramite il tensore di accoppiamento magnetico iperfine introdotto nell'hamiltoniana di Mila-Rice-Shastry, risulta proporzionale alla parte reale della suscettività magnetica di spin, pari a tutta questa funzione di risposta nel caso uniforme e costante. Innumerevoli negli ultimi decenni sono state le indagini sperimentali sul Knight shift, pertanto si è deciso di consultare i dati forniti dai gruppi di Takigawa ed Ishida, riprodotti rispettivamente in [38] e [12], che hanno condotto misurazioni sui siti sia di rame che di ossigeno, sondando per entrambi diverse direzioni cristallografiche, come mostrano i pedici del Knight shift presente in ordinata nella figura 3.10.

Si noti nella figura precedente il cambiamento di scala ed origine per i diversi Knight shift, dovuto ai rispettivi valori del tensore di accoppiamento iperfine; con tale riscaldamento tutti i precedenti risultano pari alla suscettività di spin dei siti di rame come enunciato alla fine del capitolo 1. I cristalli scelti per gli esperimenti appartengono a famiglie differenti: in quella di YBCO rientra il campione $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ adoperato nel pannello 3.10.a; in BSCCO si situa invece il candidato $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ utilizzato in 3.10.b; per ambedue l'indice stechiometrico y , impostato dagli autori, è indicato nel grafico in maniera implicita tramite la temperatura critica T_c , evidenziata da una freccia. I risultati ottenuti per tali sistemi sono in prima approssimazione in accordo con le conclusioni (3.115) e (3.116) desunte in precedenza: ne fungono da corrispondenze il profilo crescente della suscettività magnetica per temperature comprese tra T_c e T_{ph} , una lieve progressione asintotica per $T \gtrsim T_{ph}$ ed un mutamento della concavità tra i due comportamenti esaminati. Questa verifica è un buon check per il modello $t - J$ che è servito come sostrato teorico per eseguire i calcoli dei paragrafi precedenti; avendo a disposizione misure sperimentali accurate nella regione asintotica in temperatura si potrebbe inoltre avere conferma su un punto importante. Difatti ivi l'andamento è dominato in temperatura dal quadrato del fattore di rinormalizzazione Z e dunque la sua dipendenza da T è direttamente confrontabile con i dati sperimentali. La forma usata nelle precedenti derivazioni, ripresa dagli articoli in bibliografia (come ad esempio [24]), è stata di recente messa in discussione a causa di una approssimazione troppo brutale eseguita a monte: durante l'implementazione del modello $t - J$, come si è discusso nel paragrafo 2.7, si è adottata la visione di mean field, trascurando la variazione del campo di gauge B rispetto al suo valor medio. Tale scelta è stata necessaria volendo ricavare una forma analitica per l'azione del paradigma citato, tuttavia sembra condurre ad errate conclusioni qualora si vogliano studiare le interazioni tra i settori holonico e spinonico, che combinano in maniera peculiare le rispettive fluttuazioni a causa delle forti correlazioni tra essi. A tale situazione si arriva senz'altro ricostruendo la buca fisica tramite il campo statistico: difatti da stime preliminari emergerebbe la necessità di riscaldare la costante di rinormalizzazione Z della sua funzione di Green per un fattore che cancelli il contributo $T^{\frac{1}{2}}$, cosicché essa risulti costante in temperatura; ciò porterebbe la suscettività magnetica ad un puro andamento asintotico, in favore del quale concordano molte verifiche sperimentali. La correzione riportata è stata suggerita da alcuni calcoli espliciti ed a tutt'oggi non è ancora suffragata da uno studio definitivo; qualora ciò accadesse tuttavia produrrebbe delle ripercussioni molto gradite ai fini della determinazione della suscettività magnetica, che aderirebbe in maniera ancora più marcata alla figura mostrata in precedenza.

Per chiarire esplicitamente come la formula presentata negli scorsi paragrafi per la funzione di risposta aderisca molto strettamente agli andamenti sperimentali, nella figura 3.11 è fornito il grafico ottenuto dal suo calcolo teorico nelle fasi di strange metal [pannello (a)] e pseudogap [pannello (b)] sotto l'ipotesi appena discussa di costanza in temperatura della rinormalizzazione Z . Nel secondo caso si evince un profilo lineare in T (data nel grafico in unità del parametro energetico J), che è una corretta riproduzione di parte della crescita presente in figura 3.10.b. Ivi difatti, avendo in mente un diagramma di fase standard per i cuprati, è necessario scegliere un livello di doping molto basso per essere certi che i dati in temperatura riportati afferiscano tutti alla fase di pseudogap. Ovvero si considererà preferibilmente un campione underdoped, a cui si riferisce la prima retta dal basso nel diagramma: come è osservabile, la sua crescita risulta lineare e non si arresta nemmeno al valore più alto in temperatura tabulato. Tali peculiarità sono parallelamente riscontrate in figura 3.11.b, mostrando pertanto la correttezza dei risultati a cui si è pervenuti dopo una opportuna manipolazione del modello $t - J$. Considerando invece la fase di strange metal si dovrà paragonare il grafico 3.11.a con le prime due linee dall'alto contenute in 3.10.b; esse difatti descrivono la fase richiesta, raggiungibile per comuni valori di temperatura a patto di aumentare i livelli di drogaggio, lavorando con cristalli optimally doped o addirittura overdoped. Per ribadire la potenza delle conclusioni raggiunte è necessario che i plot teorici riprendano la crescita della suscettività magnetica al di sotto della temperatura di pairing per gli holoni T_{ph} , mostrando una tendenza asintotica oltre essa (sempre nell'ipotesi scelta di riscaldare in temperatura la funzione di rinormalizzazione). Queste due caratteristiche non solo sono riprodotte, bensì risultano anche implementate in quanto come è possibile constatare conducendo misurazioni a temperature maggiori, la funzione di risposta ammette ivi correttamente una lieve decrescenza. In aggiunta alle considerazioni sinora fornite, l'efficacia della descrizione desunta dal modello $t - J$ può essere testata cercando di

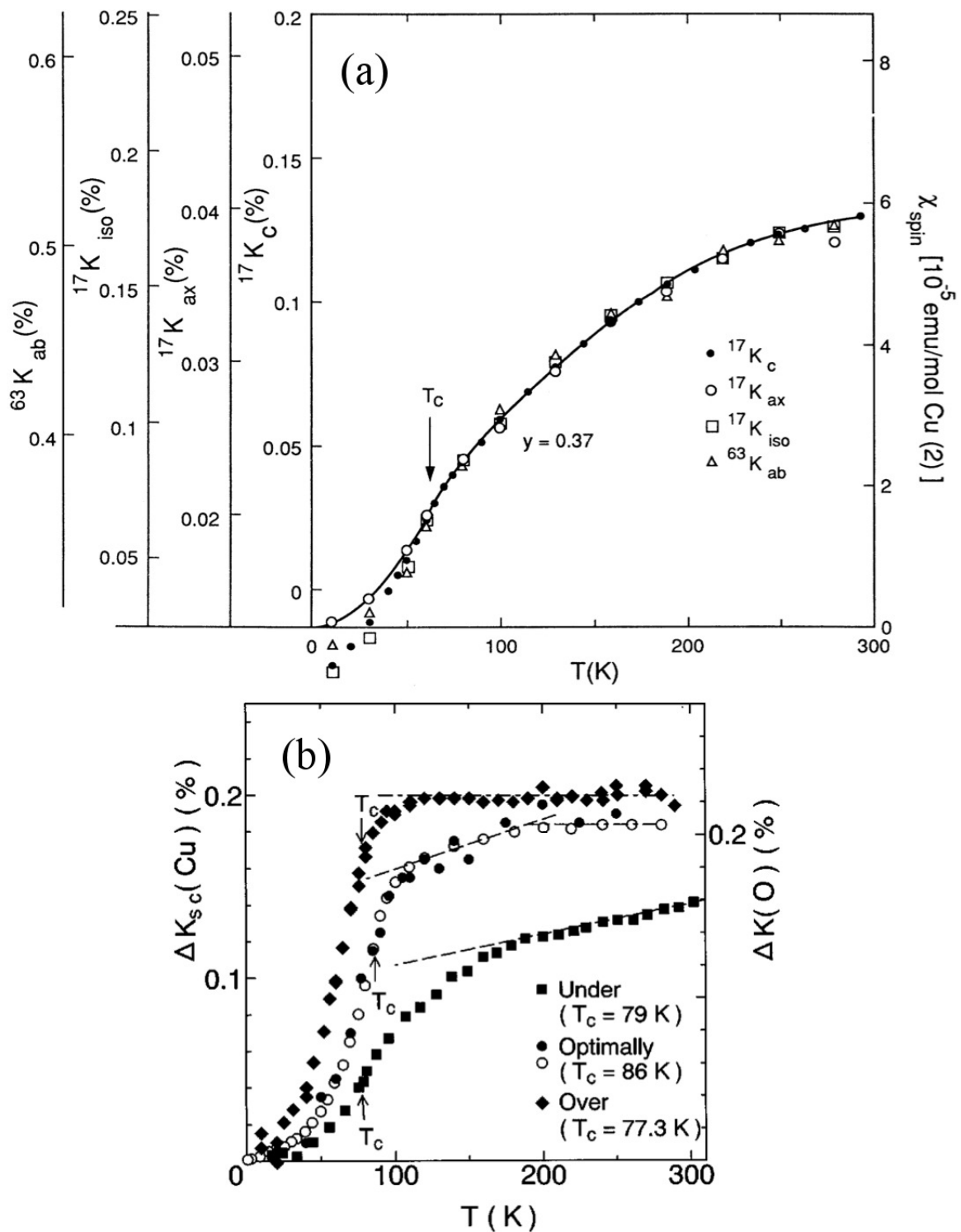


Figura 3.10: Andamento della suscettività magnetica di spin uniforme e costante in funzione della temperatura per cristalli di (a) YBCO e (b) BSCCO (adattate rispettivamente da [38] e [12]).

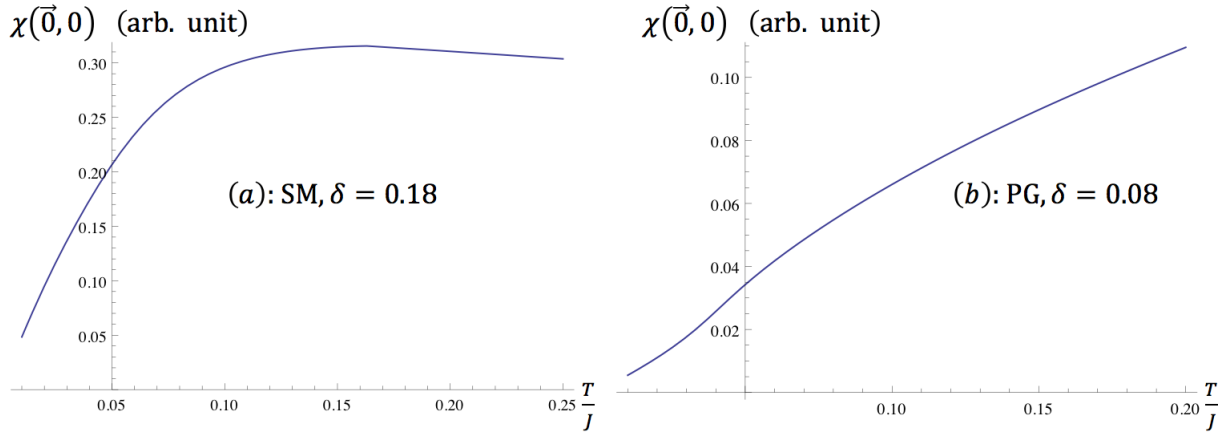


Figura 3.11: Suscettività magnetica uniforme e costante in funzione della temperatura per un sistema in fase di (a) strange metal ($\delta = 0.18$) e (b) pseudogap ($\delta = 0.08$).

riprodurre con un ragionamento qualitativo le due tipicità testé evidenziate per la fase di strange metal. E' noto difatti che la suscettività magnetica è esprimibile come integrale in frequenza tra la densità degli stati e la derivata della distribuzione di Fermi. Al di sotto di T_{ph} è lecito approssimare quest'ultima come l'opposto di una funzione delta, avendo così da considerare solo la prima valutata all'energia di Fermi: in tale intervallo di temperatura è osservabile la formazione di coppie holoniche, che essendo composte da due fermioni, sono considerate bosoni e pertanto non rientrano più nel computo del numero di stati disponibili. Poiché il processo descritto è tanto più importante, quanto più si scende in temperatura, si dovrà osservare in tale direzione la rispettiva diminuzione della densità degli stati, ovvero della suscettività magnetica, come di fatto è riprodotto dai grafici teorici e sperimentali. Più delicato è il comportamento per $T \gtrsim T_{ph}$: ivi non è più possibile operare l'approssimazione per la distribuzione statistica, cosicché si deve considerare la funzione di risposta come l'integrale di partenza. Dunque è necessario avere un profilo in frequenza dei termini che compaiono a suo argomento: per la densità degli stati va ricordata la forma assunta per la fase di strange metal nel caso holonico, con una marcata depressione centrale (per energie quasi nulle) ed una risalita fino ad un valore costante allontanandosi nei due versi dell'asse. Tale andamento non può essere esteso anche alla situazione sotto esame, riguardante la buca fisica, in quanto va considerato l'effetto del campo di gauge nella mediazione con il settore spinonico. Come è possibile dimostrare, in tal caso la principale modifica da apportare riguarda il valore assunto per frequenze nulle: esso non è più depresso rispetto al limite asintotico, risulta anzi molto più piccato a causa del notevole scattering rate della buca che fa aumentare il numero di stati disponibili. Pensando dunque la densità come una forma a campana, resta da vedere come varia in temperatura il suo integrale con la derivata della distribuzione di Fermi: più aumenta la variabile, più quest'ultima funzione apre il suo supporto, selezionando dunque una regione più larga nella quale però in media il valore della densità diminuisce progressivamente. Per intuire tale comportamento si pensi di dover calcolare il valore di aspettazione di una funzione con un profilo a campana, utilizzando un peso statistico che copre regioni maggiori sull'asse delle frequenze aumentando la temperatura. Da ciò appare chiaro come l'operazione descritta fornisca inizialmente solo il massimo della curva, dovendo poi diminuire il suo valore per l'accresciuto peso che assumono le regioni limitrofe ad esso. Tale analogia consente dunque di asserire che per $T \gtrsim T_{ph}$ è corretto osservare una decrescita della suscettività magnetica, che è del resto riportata in tutti i tipi di plot analizzati. Dunque la completezza di trattazione insita nel modello $t - J$ ha consentito di pervenire a conclusioni solide non solo se analizzate da un punto di vista intuitivo ma anche se paragonate alle misurazioni effettuate in laboratorio. Tutta l'impalcatura adottata per raggiungere tali formule, anche se ha permesso importanti deduzioni e confortanti verifiche, rischia tuttavia di celare la vera essenza dei risultati forniti: nel capitolo 2 si è determinata la trasformata di Fourier della suscettività magnetica attorno al vettore d'onda antiferromagnetico, trovando che il suo valore è proporzionale al propagatore magnonico nello spazio dei momenti, il quale risente nella sua forma di tutte le approssimazioni adottate per implementare il modello $t - J$. In questo capitolo, procedendo al calcolo della trasformata uniforme e costante della suscettività si è pervenuti ad un comportamento quasi Fermi liquid, poiché essa è desumibile dalla consueta teoria della risposta lineare nel formalismo a molti corpi, a patto di riferire tutte le quantità alla buca fisica. A prima vista sembra dunque che le due casistiche esposte non abbiano in comune alcunché, anche se ci si sarebbe aspettato di trovare un legame essendo due limiti della stessa variabile fisica; tale discrepanza di comportamento nelle due zone dello spazio reciproco, risulta tuttavia una caratteristica tipica dei cuprati, come è possibile rendersi conto consultando i grafici sperimentali delle quantità fisiche legate alla suscettività magnetica, quali Knight shift e rate di rilassamento spin-reticolo. Difatti nel primo caso, come si è

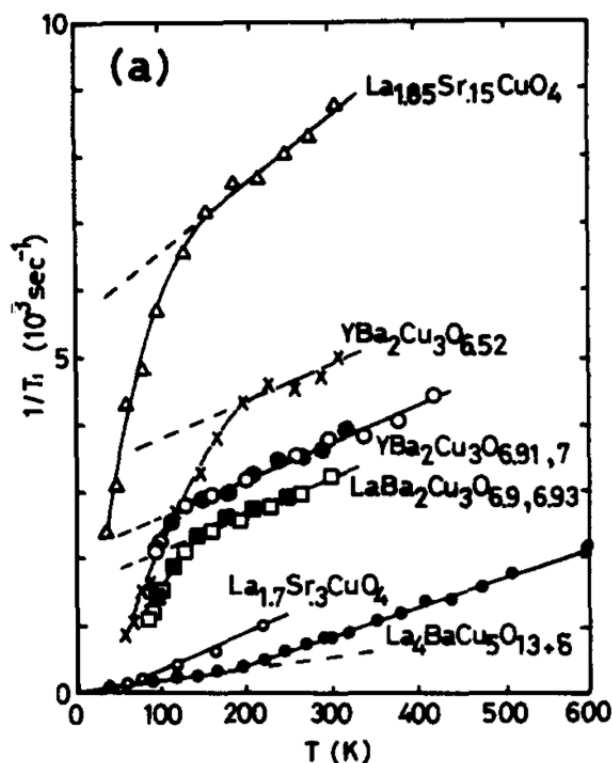


Figura 3.12: Rate di rilassamento spin-reticolo per i siti di rame in funzione della temperatura misurato nei cuprati e nei metalli non superconduttori (adattata da [11]).

avuto modo di constatare in figura 3.10, all'aumentare della temperatura, il contributo uniforme e costante alla suscettività di spin tendeva ad un valore asintotico piatto, tanto più rapidamente quanto maggiore era il drogaggio inserito nel sistema. Ciò risulta sensato, poiché una aumentata presenza di buche fisiche fa rendere più marcato il carattere Fermi liquid, e dunque assicura un più rapido raggiungimento del valore di Pauli assunto da tale sistema nel caso uniforme e costante analizzato. Qualora invece si consultassero delle misure tabulate di $\frac{1}{T_1 T}$ per i siti di rame, si dovrebbe avere un'informazione proporzionale alla trasformata di Fourier della suscettività di spin intorno al vettore d'onda antiferromagnetico, come analizzato al termine del capitolo 1. Dunque la funzione di risposta ottenuta sarà dominata da un forte carattere magnonico, risultando così non inquadrabile in un contesto Fermi liquid.

Tale previsione, che dimostra la coerenza della trattazione sinora presentata, trova puntuale riscontro in figura 3.12: ivi difatti, il rate di rilassamento assume una forma nettamente distinguibile in due categorie. Per gli HTS, come i cuprati, è rappresentabile ad eccezione di regioni troppo vicine alla temperatura critica, come una funzione lineare in T ; i dati sperimentali non lasciano dubbi in proposito, come si evince dalle 4 rette della parte alta del diagramma riprodotto, che manifestano una chiara intercetta non nulla. Si noti, a titolo informativo, che le misure oggetto di discussione sono state condotte sui materiali disponibili nel 1989; per questo, oltre ai più noti cristalli di YBCO e LSCO si può scorgere che l'ultima retta riguarda l'ossido di lantanio, bario e rame (in acronimo LBCO). Come noto, esso ha rivestito un ruolo chiave nella fisica dei superconduttori ad alta temperatura, poiché 3 anni prima fu riconosciuta tale proprietà in un suo campione ad opera di Bednorz e Müller, che ricevettero per il loro lavoro il premio Nobel per la Fisica nel 1987. Tuttavia le due linee più basse della figura 3.12 riguardano metalli non superconduttori (NSM), a causa dei mutati rapporti tra i coefficienti stechiometrici nella loro formula chimica; è dunque sensato che essi siano inquadrabili nella cornice della teoria di Fermi, la quale prescrive che il rate di rilassamento $\frac{1}{T_1}$ sia direttamente proporzionale alla temperatura, dunque la quantità $\frac{1}{T_1 T}$ sia costante in essa. L'assenza di un'intercetta nelle due rette menzionate è un lampante segnale di correttezza per tale previsione; da quanto discusso emerge dunque come il comportamento non Fermi liquid dei cuprati intorno al vettore d'onda antiferromagnetico non solo sia vitale per riprodurre le fluttuazioni di spin che caratterizzano molte quantità fisiche (come il rate di rilassamento) facendo loro assumere una forma diversa da quella tipica dei metalli, ma anche risulti una peculiarità indelebile che deve essere riprodotta da ogni modello che abbia la pretesa di trattare fedelmente questi particolari sistemi. Da ciò segue come solo ammettendo una diversa descrizione per la suscettività magnetica nelle due regioni considerate in spazio reciproco, si è potuto trovare accordo con i dati sperimentali. Ad una simile

conclusione non si sarebbe mai pervenuti in una teoria standard; essa è frutto delle non banali proprietà del modello $t - J$ in base al quale è stata determinata la funzione di Green per gli spin che fornisce la suscettività tramite la formula di Kubo. Come si è avuto modo di esaminare nei paragrafi precedenti, questo apparente paradosso si dipana notando che a seconda del valore assunto dal momento in spazio reciproco, la correlazione tra gli spin fisici è descritta in modo diverso: dal settore spinonico intorno al vettore d'onda antiferromagnetico, trasmettendo alla suscettività le caratteristiche del propagatore magnonico; da quelli holonico e spinonico mediati dall'azione del campo di gauge nel caso $\vec{q} = \vec{0}$ formando la buca fisica, descrivibile da una teoria quasi Fermi liquid a patto che il sistema non sia prossimo alla fase superconduttiva. Si conclude così che è insito nel modello $t - J$ fornire risposte diverse a seconda della regione in cui lo si indaga a causa delle molteplici correlazioni tra i campi in esso presenti che figurano in un comportamento complessivo impossibile da predire a priori; un'altra firma tipica di tale cornice concettuale è la bidimensionalità, sfruttata ad esempio nel calcolo della densità totale degli stati per la buca fisica. Sia nel caso libero che nel limite di temperature maggiori di quella di pairing per gli holoni della formula per la componente zz della trasformata di Fourier uniforme e costante della suscettività, tale carattere $2d$ porta ad una conclusione sorprendente: ritornando al Sistema Internazionale di misura, si deve inserire nel denominatore la quantità \hbar^2 , ponendo altresì $\Sigma \equiv 1$ poiché ora il momento magnetico è normalizzato all'unità d'area per fornire la magnetizzazione totale. Tali cambiamenti eliminano qualsiasi traccia quantistica dall'espressione poiché \hbar^2 si semplifica con il medesimo fattore contenuto in μ_B^2 ; dunque anche se tutta l'impostazione della teoria a molti corpi sia nel formalismo di seconda quantizzazione che in quello del path integral, è intrinsecamente quantistica, tale effetto non compare nel risultato finale. Una simile mascheratura è attribuibile al carattere bidimensionale del sistema, poiché solo in questo caso si trova la dipendenza adatta per eliminare \hbar dalla scrittura terminale. A dispetto di tutte le peculiarità sinora evidenziate, conviene notare una somiglianza tra la trasformata di Fourier uniforme e costante della suscettività di spin per i superconduttori ad alta temperatura e per i sistemi metallici esaminati nel capitolo 1: entrambe sono definite positive, segno di una comune classificazione paramagnetica. Questa osservazione chiude il cerchio del percorso logico seguito nella stesura del presente lavoro di tesi, e di seguito brevemente riassunto: il primo capitolo illustrava le quantità fisiche incontrate nello studio dei cuprati, come il Knight shift ed il tempo di rilassamento, mostrando che entrambi dipendono dalla suscettività magnetica a frequenza nulla, essendo il primo direttamente proporzionale alla sua parte reale statica tramite il tensore di accoppiamento iperfine ed il secondo pari, a meno di costanti, alla sua parte immaginaria centrata nel vettore d'onda filtrato dal fattore di forma. Perciò si è presentato il calcolo in seconda quantizzazione della suscettività magnetica, notando come il modello di Mott-Rice-Shastry permettesse di trovare la sua componente di spin per i soli siti di rame, a causa della loro saliente importanza come nodi nella struttura cristallina del cuprato analizzato. Completata la descrizione delle variabili fisiche, si è passati ad esaminare modelli e formule nel capitolo 2, ove si è data rilevanza alla giustificazione fenomenologica dell'hamiltoniana $t - J$ ed alle approssimazioni con cui ottenere da essa un'azione efficace. Una volta discussa la formula di Kubo per la suscettività magnetica, si è ricavata tale funzione di risposta intorno al vettore d'onda antiferromagnetico, essendo ivi essa proporzionale al propagatore magnonico. Il calcolo della suscettività uniforme e costante è stato invece presentato nel capitolo 3, mostrandolo inizialmente come derivazione nella teoria a molti corpi. Studiando più accuratamente la funzione di Green per gli spin fisici, si è poi osservato di aver raggiunto la conclusione voluta a patto di riferire tutte le quantità alla buca fisica. Nota per essa la densità totale degli stati, si è dunque proceduto con una verifica qualitativa degli andamenti in temperatura e drogaggio. Quanto ottenuto, anche se ha sfruttato risultati assodati nello studio dei cuprati, ha in primo luogo fornito un'espressione originale per il calcolo della componente zz della trasformata di Fourier uniforme e costante della suscettività magnetica; in secondo luogo si è poi evidenziato come essa sia collegabile al caso antiferromagnetico come due limiti distinti per la funzione di spin a due punti nel modello $t - J$, a causa dei suoi non banali effetti dovuti alle molteplici correlazioni. In terzo luogo il confronto con i dati sperimentali riportati, suggerisce un ulteriore approfondimento per le conseguenze sui fattori di rinormalizzazione delle funzioni di Green della scelta di trascurare le fluttuazioni rispetto ai valori medi dei campi di gauge definiti nei settori holonico e spinonico, necessaria altresì alla derivazione analitica di un'azione per il paradigma adottato; tutto ciò rivela come lo studio dei superconduttori ad alta temperatura porti a continue innovazioni e raffinazioni nella teoria esistente e come i cuprati ne costituiscano un valido prototipo, riproducendone la multiforme versatilità.

Appendice A

Calcolo della bolla tra due funzioni di Green per la buca fisica

Come discusso nel paragrafo 3.9, per determinare la componente zz della trasformata di Fourier uniforme e costante della suscettività magnetica nel caso in cui lo scattering rate Γ sia nullo, non è possibile legare la funzione di risposta alla densità totale degli stati per la buca fisica, poiché le approssimazioni necessarie ad un procedimento analitico implicherebbero l'assenza di una superficie di Fermi chiusa. Pertanto non resta che ripartire dal calcolo della bolla tra due funzioni di Green, con l'accortezza di riferire tutte le quantità alla buca fisica, come osservato al termine del paragrafo 3.7; da tali premesse si avrà dunque:

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} \int_0^\beta d\tau \mathcal{G}^{hole}(\vec{k}, -\tau) \mathcal{G}^{hole}(\vec{k}, \tau) = -2\frac{\mu_B^2}{\beta^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} \sum_{p_n} \int_0^\beta d\tau \{e^{i\omega_n\tau} \cdot \\ &\tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, \omega_n) e^{-ip_n\tau} \tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, p_n)\} \equiv -2\frac{\mu_B^2}{\beta^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} \sum_{p_n} \tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, \omega_n) \tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, p_n) I_{\omega_n, p_n} \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Il calcolo dell'integrale temporale nella precedente equazione è fattibile ricordando le proprietà delle frequenze di Matsubara fermioniche; utilizzando la delta di Kronecker per eliminare una sommatoria in esse, si trova:

$$\begin{aligned} I_{\omega_n, p_n} &= \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - p_n)\tau} = \begin{cases} \frac{e^{i(\omega_n - p_n)\beta} - 1}{i(\omega_n - p_n)} = 0, & \omega_n \neq p_n \\ \beta, & \omega_n = p_n \end{cases} \Rightarrow I_{\omega_n, p_n} = \beta \delta_{\omega_n, p_n} \Rightarrow \chi_{zz}(\vec{0}, 0) \\ &= -2\frac{\mu_B^2}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} \sum_{p_n} \tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, \omega_n) \tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, p_n) \delta_{\omega_n, p_n} = -2\frac{\mu_B^2}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} [\tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, \omega_n)]^2 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Dalle osservazioni compiute nel paragrafo 3.6, è emerso come per particelle con energia di Fermi molto maggiore dello scattering rate Γ , sia doveroso attendersi come unico contributo alla suscettività magnetica uniforme e costante quello fornito dalla parte coerente del peso spettrale, desumibile dall'analogo per la funzione di Green ritardata. Lavorando ora a $\Gamma = 0$ cioè continua ad essere senz'altro valido; unendo pertanto le osservazioni riportate nei paragrafi 3.6 e 3.9, la forma richiesta per la trasformata di Fourier della funzione di Green-Matsubara è il primo addendo della continuazione analitica della sua versione ritardata (3.97), riprodotta da [21] discutendo il peso spettrale dei cuprati ad alta temperatura. Essendo stato formalmente eliminato da tale processo lo scattering rate Γ , si può poi porre $m_\phi = 0$ senza conseguenze per la superficie di Fermi della buca fisica. Definendo per agilità di scrittura delle nuove quantità, si dovrà affrontare ora la sommatoria sulle frequenze di Matsubara descritta nella seguente formula:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}^{hole}(\vec{k}, \omega_n) &= Z \cdot \frac{i\omega_n + E(\vec{k})}{(i\omega_n)^2 - [E(\vec{k})]^2 - \Delta^2 \sin^2 \theta} \Rightarrow E(\vec{k}) := A, \Delta \sin \theta := C \rightarrow \\ \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= -2\frac{\mu_B^2}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} \left\{ Z^2 \cdot \left[\frac{i\omega_n + A}{(i\omega_n)^2 - A^2 - C^2} \right]^2 \right\} \equiv -2\mu_B^2 \sum_{\vec{k}} Z^2 S_{\vec{k}}^{-A, -A} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Tale calcolo può essere condotto con le regole e le notazioni esaminate nel paragrafo 3.4; il risultato cercato è dato da:

$$S_{\vec{k}}^{A,A} = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{(i\omega_n - A)^2}{[(i\omega_n)^2 - A^2 - C^2]^2} = \sum' Res \left[\frac{(z - A)^2 n_F(z)}{(z^2 - A^2 - C^2)^2} \right] \quad (\text{A.4})$$

L'ultima sommatoria può essere desunta addizionando al solito i residui della funzione a suo argomento calcolati nei poli della parte che non comprende la distribuzione di Fermi; essi sono doppi e ricordando il metodo per il calcolo residuale in tale situazione, si può ottenere quanto voluto. Il procedimento completo è mostrato di seguito:

$$\begin{aligned} S_{\vec{k}}^{A,A} &= \sum' Res \left[\frac{(z - A)^2 n_F(z)}{(z - \sqrt{A^2 + C^2})^2 (z + \sqrt{A^2 + C^2})^2} \right] \Rightarrow z_1 = \sqrt{A^2 + C^2}, z_2 = -\sqrt{A^2 + C^2} = -z_1 \rightarrow Res_1 \\ &= \lim_{z \rightarrow z_1} \frac{d}{dz} \frac{(z - z_1)^2 (z - A)^2 n_F(z)}{(z - z_1)^2 (z + z_1)^2} = \lim_{z \rightarrow z_1} \frac{[2(z - A) n_F(z) + (z - A)^2 n'_F(z)] (z + z_1)^2 - 2(z + z_1) (z - A)^2 n_F(z)}{(z + z_1)^4} \\ &= \frac{2(z_1 - A) (2z_1) n_F(z_1) [2z_1 - (z_1 - A)] + (z_1 - A)^2 n'_F(z_1) (2z_1)^2}{16z_1^4} = \\ &= \frac{4z_1 (z_1 - A) (z_1 + A) n_F(z_1) + 4z_1^2 (z_1 - A)^2 n'_F(z_1)}{16z_1^4} = \frac{(z_1 - A) [(z_1 + A) n_F(z_1) + z_1 (z_1 - A) n'_F(z_1)]}{4z_1^3}, Res_2 = \\ &= \lim_{z \rightarrow -z_1} \frac{d}{dz} \frac{(z - A)^2 n_F(z)}{(z - z_1)^2} = \frac{2(-z_1 - A) (-2z_1) n_F(-z_1) [-2z_1 - (-z_1 - A)] + (-z_1 - A)^2 n'_F(-z_1) (-2z_1)^2}{16z_1^4} = \\ &= \frac{-4z_1 (z_1 + A) (z_1 - A) n_F(-z_1) + 4z_1^2 (z_1 + A)^2 n'_F(-z_1)}{16z_1^4} = -\frac{(z_1 + A) [(z_1 - A) n_F(-z_1) - z_1 (z_1 + A) n'_F(-z_1)]}{4z_1^3} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Le forme finali ottenute in precedenza, sono tuttavia troppo complicate per portare avanti un calcolo analitico; prima di introdurre però delle approssimazioni è necessario confrontare le due scale di energia A e C introdotte in precedenza, pari rispettivamente alla relazione di dispersione grancanonica e ad un termine proporzionale all'energy gap. La relazione che si sta delineando seguirà la medesima linea tracciata nel paragrafo 3.9; difatti le somme continue sui momenti permettono, dopo una riorganizzazione per simmetria della parte angolare, di ragionare nel seguente modo. Per condurre in modo analitico il calcolo è necessario approssimare l'integrale che ne risulta; qualora l'angolo sia tale da non abbassare troppo il valore di C , si troverà $C \gg A$ nella parte di piano che fornisce il contributo dominante al propagatore, ovvero nella striscia larga il doppio del momento di Reizer centrata sulla superficie di Fermi. Altrove invece l'angolo deprimerà molto C , consentendo così di poter lavorare contestualmente su tutto lo spazio reciproco, ponendo ivi $A \gg C$. Seguendo le stesse convenzioni del paragrafo citato, si identificherà il valore dell'angolo discriminante come $\bar{\theta}(\Delta)$, limitandosi ad asserire la sua appartenenza al primo quadrante per valori di temperatura molto inferiori alla soglia di pairing per gli holoni, e la sua uguaglianza a $\frac{\pi}{2}$ qualora $T \gtrsim T_{ph}$. In tale ultimo caso, proprio per avere corrispondenza con il caso libero, sarà poi necessario assegnare il valore 0 a tutti i limiti delle funzioni contenenti Δ ; con tali assunzioni si può dunque riscrivere la formula per la suscettività magnetica come:

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\vec{0}, 0) &= -2\mu_B^2 \frac{\Sigma}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk k \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} Z^2 \left\{ \frac{i\omega_n + E(k)}{(i\omega_n)^2 - [E(k)]^2 - \Delta^2 \sin^2 \theta} \right\}^2 = -\frac{2\mu_B^2 \Sigma}{\pi^2}. \\ &= \int_0^\infty dk k \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} Z^2 \left[\frac{i\omega_n + A}{(i\omega_n)^2 - A^2 - C^2} \right]^2 = -\frac{2\mu_B^2 \Sigma}{\pi^2} \int_{k_1^F - Q}^{k_1^F + Q} dk k \int_{\bar{\theta}(\Delta)}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} Z^2 \left[\frac{i\omega_n + A}{(i\omega_n)^2 - A^2 - C^2} \right]^2 \\ &\quad - \frac{2\mu_B^2 \Sigma}{\pi^2} \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} Z^2 \left[\frac{i\omega_n + A}{(i\omega_n)^2 - A^2 - C^2} \right]^2 = -\frac{2\mu_B^2 \Sigma}{\pi^2} \int_{k_1^F - Q}^{k_1^F + Q} dk k \int_{\bar{\theta}(\Delta)}^{\frac{\pi}{2}} d\theta Z^2 S_k^{-A, -A} \Big|_{C \gg A} \\ &\quad - \frac{2\mu_B^2 \Sigma}{\pi^2} \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta Z^2 S_k^{-A, -A} \Big|_{A \gg C} \equiv \chi_{zz}^{(1)}(\vec{0}, 0) + \chi_{zz}^{(2)}(\vec{0}, 0), \bar{\theta}(\Delta) \begin{cases} \in]0, \frac{\pi}{2}[& T_c < T \ll T_{ph} \\ = \frac{\pi}{2} & T \gtrsim T_{ph} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Si cominci dunque a calcolare il primo addendo della formula precedente: la sommatoria integranda è data dall'addizione dei due residui calcolati in (A.5). In essi, il polo z_1 assume ora il valore C , trascurando i termini

in A^2 : tale scelta è altresì giustificata dal dominio di integrazione sul modulo del momento, che schiaccia i suoi valori sulla superficie di Fermi deprimendo la relazione di dispersione gran canonica. Sfruttando le proprietà della distribuzione di Fermi e della sua derivata, la funzione integranda risulta:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4C^3} \left\{ (C+A) \left[(C-A)n_F(C) + C(C+A)n'_F(C) \right] - (C-A) \left[(C+A)n_F(-C) - C(C-A)n'_F(-C) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{4C^3} \left[C^2 n_F(C) + C(C+A)^2 n'_F(C) - C^2 n_F(-C) + C(C-A)^2 n'_F(C) \right] = \frac{1}{4C^3} \left\{ C^2 [2n_F(C) - 1] \right. \\ & \left. + 2C^3 n'_F(C) \right\} = \frac{1}{4C} \left[2n_F(C) - 1 + 2C n'_F(C) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Arrivati a ciò, si può subito fornire il risultato per la prima parte della suscettività magnetica $\chi_{zz}^{(1)}(\vec{0}, 0)$, ricordando un'integrazione notevole sulle funzioni goniometriche; per procedere in modo analitico è tuttavia necessaria un'ulteriore approssimazione, riguardante l'argomento della distribuzione di Fermi. Considerando che, per comuni valori di temperatura, essa assieme alla sua derivata, varia in una porzione molto ridotta dell'asse delle energie, è sensato che nel dominio di integrazione angolare i valori assunti cadano in un supporto limitato, cosicché non contribuiscono significativamente a disegnare il profilo della funzione integranda. Coerentemente dunque si è deciso di approssimare C come Δ solo ad argomento della distribuzione statistica; completando infine i calcoli con l'immediata parte del modulo del momento, si ottiene:

$$\begin{aligned} & \int \frac{dx}{\sin x} \stackrel{t=\tan \frac{x}{2}}{=} \int \frac{2}{1+t^2} \frac{1+t^2}{2t} dt = \ln t + \text{const} = \ln \left(\tan \frac{x}{2} \right) + \text{const} \Rightarrow \chi_{zz}^{(1)}(\vec{0}, 0) \approx -\frac{2\mu_B^2 \Sigma Z^2}{\pi^2}. \\ & \int_{k_1^F-Q}^{k_1^F+Q} dk k \int_{\bar{\theta}(\Delta)}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \left[\frac{n'_F(\Delta)}{2} + \frac{2n_F(\Delta) - 1}{4\Delta \sin \theta} \right] = -\frac{\mu_B^2 \Sigma Z^2}{\pi^2} \left[\frac{k^2}{2} \Big|_{k_1^F-Q}^{k_1^F+Q} \left[\theta n'_F(\Delta) + \frac{2n_F(\Delta) - 1}{2\Delta} \ln \left(\tan \frac{\theta}{2} \right) \Big|_{\bar{\theta}(\Delta)}^{\frac{\pi}{2}} \right] \right] \\ &= \frac{2\mu_B^2 \Sigma Z^2}{\pi^2} k_1^F Q \left\{ \left[\frac{\pi}{2} - \bar{\theta}(\Delta) \right] \left[-n'_F(\Delta) \right] + \frac{1 - 2n_F(\Delta)}{2\Delta} \ln \left[\tan \frac{\bar{\theta}(\Delta)}{2} \right]^{-1} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

La conclusione ivi fornita riproduce le corrette caratteristiche già esaminate nel paragrafo 3.9 per la parte dominante della densità degli stati nel caso in cui $T_c < T \ll T_{ph}$: difatti a fattore si nota la combinazione peculiare tra momento di Reizer e di Fermi che emergeva anche in quella sede, mentre l'aggiustamento del segno fa assumere alla precedente equazione un carattere positivo, come è confermato dal comportamento paramagnetico riscontrato in molti esperimenti condotti nel range di temperature descritte per uno scattering rate trascurabile. Difatti tutti i termini presenti sono maggiori di 0, dopo aver osservato che $\bar{\theta}(\Delta)$ appartiene al primo quadrante e ricordato la definizione della funzione di Fermi. Per concludere lo studio dell'addendo $\chi_{zz}^{(1)}(\vec{0}, 0)$ della funzione di risposta, basta notare il suo andamento qualora $T \gtrsim T_{ph}$: come anticipato, a prima vista sembrano sorgere delle forme indeterminate, tuttavia va assegnato il valore 0 a tutti i limiti poiché nella regione in esame, dovendo considerare l'annullamento dell'energy gap Δ , le identificazioni della formula (A.6) assicurano la sopravvivenza solamente del secondo addendo (con il dominio dell'integrazione angolare esteso a tutto il primo quadrante). Nel seguito ci si occuperà di esso, che fornirà le stime della suscettività magnetica confrontabili con gli andamenti sperimentali, poiché come osservato nel paragrafo 3.9, la condizione $T \gtrsim T_{ph}$ risulta facilmente raggiungibile in laboratorio, almeno per cristalli con drogaggio ottimale. Tale fatto induce a presentare uno studio dettagliato di $\chi_{zz}^{(2)}(\vec{0}, 0)$: come in precedenza, il punto iniziale risiede nell'espansione dei poli, ricordando che il corrente dominio di lavoro garantisce che l'energy gap Δ sia una piccola correzione della relazione di dispersione della buca fisica. Tenendo ora, come preannunciato, risultati fino al secondo ordine in C , si dovrà mantenere coerentemente in tutta la derivazione l'ipotesi $A \gg C$. I valori approssimati dei residui risultano così:

$$\begin{aligned} z_1 &\approx A + \frac{C^2}{2A} \Rightarrow Res_1 \approx \frac{\frac{C^2}{2A}}{4(A^3 + \frac{3}{2}AC^2)} \left[\left(2A + \frac{C^2}{2A} \right) n_F \left(A + \frac{C^2}{2A} \right) + \frac{C^2}{2A} \left(A + \frac{C^2}{2A} \right) n'_F \left(A + \frac{C^2}{2A} \right) \right] = \\ & \frac{1}{A^3} \frac{C^2}{8A} \left(1 - \frac{3C^2}{2A^2} \right) \left\{ \left(2A + \frac{C^2}{2A} \right) \left[n_F(A) + \frac{C^2}{2A} n'_F(A) \right] + \frac{C^2}{2A} \left(A + \frac{C^2}{2A} \right) n'_F(A) \right\} = \frac{C^2}{8A^4} \left(1 - \frac{3C^2}{2A^2} \right) \cdot \\ & \left[2An_F(A) + \frac{C^2}{2A} n_F(A) + C^2 n'_F(A) + \frac{C^2}{2} n'_F(A) \right] = \frac{C^2}{8A^4} \left[2An_F(A) + \frac{C^2}{2A} n_F(A) + \frac{3C^2}{2} n'_F(A) - \frac{3C^2}{A} n_F(A) \right] \\ &= \frac{C^2}{8A^4} \left[2An_F(A) - \frac{5C^2}{2A} n_F(A) + \frac{3C^2}{2} n'_F(A) \right] = \frac{C^2}{4A^3} n_F(A), Res_2 \approx -\frac{2A + \frac{C^2}{2A}}{4(A^3 + \frac{3}{2}AC^2)} \left[\frac{C^2}{2A} n_F \left(-A - \frac{C^2}{2A} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left(2A + \frac{C^2}{2A} \right) \left(A + \frac{C^2}{2A} \right) n'_F \left(-A - \frac{C^2}{2A} \right) \Big] = - \frac{1}{4A^3} \left(2A + \frac{C^2}{2A} \right) \left(1 - \frac{3C^2}{2A^2} \right) \left\{ \frac{C^2}{2A} n_F(-A) - \left(2A^2 + \frac{3}{2} C^2 \right) \right. \\
& \left. \left[n'_F(-A) - \frac{C^2}{2A} n''_F(-A) \right] \right\} = - \frac{2A}{4A^3} \left(1 + \frac{C^2}{4A^2} \right) \left(1 - \frac{3C^2}{2A^2} \right) \left[\frac{C^2}{2A} n_F(-A) - 2A^2 n'_F(-A) + AC^2 n''_F(-A) \right. \\
& \left. - \frac{3}{2} C^2 n'_F(-A) \right] = - \frac{1}{2A^2} \left(1 - \frac{5C^2}{4A^2} \right) \left[\frac{C^2}{2A} n_F(-A) - 2A^2 n'_F(-A) - \frac{3}{2} C^2 n'_F(-A) + AC^2 n''_F(-A) \right] = \\
& - \frac{1}{2A^2} \left[\frac{C^2}{2A} n_F(-A) - 2A^2 n'_F(-A) - \frac{3}{2} C^2 n'_F(-A) + AC^2 n''_F(-A) + \frac{5}{2} C^2 n'_F(-A) \right] = \\
& - \frac{1}{2A^2} \left[\frac{C^2}{2A} n_F(-A) + (-2A^2 + C^2) n'_F(-A) + AC^2 n''_F(-A) \right]
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Dal contributo calcolato in precedenza si perviene al secondo addendo della formula della suscettività magnetica attraverso i seguenti passi: in primo luogo lo si separa in una parte libera $\mathcal{S}_k^{A,A}$ ed in un'altra $S'_k{}^{A,A}$ contenente le modificazioni dovute all'energy gap Δ , ovvero proporzionali a C . Come emerge, vi sono dunque due tipologie di integrali da affrontare, a seconda della presenza o meno di Δ ; in secondo luogo si procede allora con il primo tipo, scomposto in tre casi nella formula seguente:

$$\begin{aligned}
S_k^{A,A} &= \mathcal{S}_k^{A,A} + S'_k{}^{A,A} \Rightarrow \chi_{zz}^{(2)}(\vec{0}, 0) = - \frac{2\mu_B^2 \Sigma}{\pi^2} \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta Z^2 \left(S_k^{-A,-A} + S'_k{}^{-A,-A} \right), \int_0^\infty dk k \cdot \\
& \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta S'_k{}^{-A,-A} = \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta - \frac{1}{2A^2} \left\{ - \frac{C^2}{2A} [2n_F(A) - 1] + C^2 n'_F(A) - AC^2 n''_F(A) \right\} = \int_0^\infty dk k \cdot \\
& \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \frac{C^2 [2n_F(A) - 1]}{4A^3} - \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \frac{C^2 n'_F(A)}{2A^2} + \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \frac{C^2 n''_F(A)}{2A} \equiv I + II + III
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Per procedere con criterio, nella precedente equazione si sono evidenziati tre contributi da calcolare; il primo a sua volta può essere spezzato in due sottocasi. Il primo di essi è riconducibile ad un'immediata integrazione tramite dei cambi di variabile adatti. Ricordando la formula per la relazione di dispersione grancanonica A definita in precedenza, nella quale il potenziale chimico della buca fisica è ottenuto aggiungendo all'energia di Fermi il valore della massa spinonica, si ha:

$$\begin{aligned}
I &= \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \frac{\Delta^2 \sin^2 \theta [2n_F(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}) - 1]}{4(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu})^3} = \frac{\Delta^2}{4} \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \sin^2 \theta \cdot \int_0^\infty dk \frac{k [2n_F(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}) - 1]}{(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu})^3} = \\
& \frac{\Delta^2}{4} \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \left(\frac{1 - \cos 2\theta}{2} \right) \cdot \int_0^\infty \frac{dx}{2} \frac{[2n_F(\frac{x}{2m} - \tilde{\mu}) - 1]}{(\frac{x}{2m} - \tilde{\mu})^3} = \frac{\Delta^2}{4} \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\sin 2\theta}{4} \right)_{\theta=0}^{\theta=\bar{\theta}(\Delta)} \cdot \int_{-\tilde{\mu}}^\infty dy \frac{m [2n_F(y) - 1]}{y^3} \\
& = \frac{\Delta^2 m}{8} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^\infty dy \frac{2n_F(y) - 1}{y^3} := I.2 + I.1, I.1 = - \frac{\Delta^2 m}{8} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \cdot \\
& \int_{-\tilde{\mu}}^\infty \frac{dy}{y^3} = - \frac{\Delta^2 m}{8} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left(- \frac{1}{2y^2} \right)_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\infty} = - \frac{\Delta^2 m}{16\tilde{\mu}^2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)]
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Il secondo sottocaso della formula precedente può essere studiato con i medesimi procedimenti, arrivando però ad un integrale fattibile solo con tecniche numeriche; tale punto d'approdo richiede tuttavia una piccola analisi. Difatti formalmente, essendo l'estremo inferiore negativo, il risultato ottenuto sembra divergere; ma ciò non accade poiché l'operazione ivi presente deve tener conto dell'approssimazione tra energy gap Δ ed energia grancanonica y utilizzata nella sua derivazione. Se difatti Δ è molto ridotto rispetto ad y , non si può permettere che il punto di partenza per l'integrazione in y violi tale condizione; ciò palesemente accade se esso è $-\tilde{\mu}$ e dunque bisogna inserire un cutoff inferiore che soddisfi questa richiesta. Una soluzione plausibile, anche se non ottimale, è porlo

uguale a Δ , cosicchè il calcolo richiesto inizialmente può fornire un'espressione finita pari a:

$$\begin{aligned}
I.2 &= \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} \rightarrow \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{\Delta}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} \\
&\equiv \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] J_3(\infty, \Delta), \quad J_n(\infty, \Delta) := \int_{\Delta}^{\infty} n_F(y) y^{-n} dy \Rightarrow I = I.2 + I.1 = \\
&- \frac{\Delta^2 m}{16\tilde{\mu}^2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] + \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] J_3(\infty, \Delta) = \frac{\Delta^2 m}{4} \\
&[\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[-\frac{1}{4\tilde{\mu}^2} + J_3(\infty, \Delta) \right]
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Il secondo termine evidenziato in precedenza, può essere calcolato con le tecniche appena esposte: anzitutto è necessario ottenere una forma più pulita attraverso dei successivi cambi di variabile; arrivati a ciò si procede con un'integrazione per parti ottenendo, oltre ad un termine costante, un contributo pari, a meno di fattori di proporzionalità, all'integrale esaminato nella (A.12). Adottando le identiche considerazioni sul cutoff da inserire, si può ottenere il secondo contributo dipendente da Δ al secondo addendo della suscettività magnetica uniforme e costante:

$$\begin{aligned}
II &= - \int_0^{\infty} dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \frac{\Delta^2 \sin^2 \theta n'_F\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)}{2\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)^2} = -\Delta^2 \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \sin^2 \theta \cdot \int_0^{\infty} dk \frac{k n'_F\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)}{2\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)^2} = -\frac{\Delta^2}{2} [\bar{\theta}(\Delta) \\
&- \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_0^{\infty} \frac{dx}{2} \frac{n'_F\left(\frac{x}{2m} - \tilde{\mu}\right)}{2\left(\frac{x}{2m} - \tilde{\mu}\right)^2} = -\frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{n'_F(y)}{2y^2} = \left\{ -\frac{\Delta^2 m}{2} \right. \\
&[\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left. \frac{n_F(y)}{2y^2} \right\}_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\infty} - \frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} = \frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) \\
&- \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \frac{n_F(-\tilde{\mu})}{2\tilde{\mu}^2} - \frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} \rightarrow \frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \\
&\cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[\frac{n_F(-\tilde{\mu})}{2\tilde{\mu}^2} - \int_{\Delta}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} \right] \Rightarrow II = \frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[\frac{n_F(-\tilde{\mu})}{2\tilde{\mu}^2} - J_3(\infty, \Delta) \right]
\end{aligned} \tag{A.13}$$

L'ultimo termine da calcolare può essere desunto ripercorrendo il procedimento appena descritto, con la leggera complicazione di una doppia integrazione per parti; da essa, oltre ai termini costanti, si ritrova il solito integrale (A.12) in cui inserire il cutoff. Dopo tali passaggi si ottiene così che il terzo contributo dipendente da Δ risulta:

$$\begin{aligned}
III &= \int_0^{\infty} dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \frac{\Delta^2 \sin^2 \theta n''_F\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)}{2\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)} = \frac{\Delta^2}{2} \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \sin^2 \theta \cdot \int_0^{\infty} dk \frac{k n''_F\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)}{\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)} = \frac{\Delta^2}{4} \\
&[\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_0^{\infty} \frac{dx}{2} \frac{n''_F\left(\frac{x}{2m} - \tilde{\mu}\right)}{\left(\frac{x}{2m} - \tilde{\mu}\right)} = \frac{\Delta^2}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{m n''_F(y)}{y} = \\
&\left\{ \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \frac{n'_F(y)}{y} \right\}_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\infty} + \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{n'_F(y)}{y^2} = \\
&\frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \frac{n'_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} + \left\{ \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \frac{n_F(y)}{y^2} \right\}_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\infty} + \frac{\Delta^2 m}{2}.
\end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\begin{aligned}
&[\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} = \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \frac{n'_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{\Delta^2 m}{4} \\
&[\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \frac{n_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}^2} + \frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \int_{-\tilde{\mu}}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} \rightarrow \\
&\frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[\frac{n'_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{n_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}^2} + 2 \int_{\Delta}^{\infty} dy \frac{n_F(y)}{y^3} \right] \Rightarrow \\
&III = \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[\frac{n'_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{n_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}^2} + 2J_3(\infty, \Delta) \right]
\end{aligned}$$

Per ottenere le due somme continue sui momenti necessarie al calcolo del secondo addendo della suscettività magnetica, si deve in terzo luogo affrontare quella che non contiene l'energy gap Δ , ovvero rappresentante il caso libero, con argomento $\mathcal{S}_k^{-A, -A}$. La tecnica di risoluzione è identica a quelle esaminate in precedenza, ovvero dopo una serie di cambi di variabile, si arriva ad un integrale immediatamente eseguibile che fornisce il risultato richiesto:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \mathcal{S}_k^{-A, -A} &= \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta - \frac{1}{2A^2} [-2A^2 n'_F(A)] = \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta n'_F(A) = \\ \int_0^\infty dk k \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta n'_F\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right) &= \int_0^{\bar{\theta}(\Delta)} d\theta \cdot \int_0^\infty dk k n'_F\left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right) = \bar{\theta}(\Delta) \int_0^\infty \frac{dx}{2} n'_F\left(\frac{x}{2m} - \tilde{\mu}\right) \\ &= m\bar{\theta}(\Delta) \int_{-\tilde{\mu}}^\infty dy n'_F(y) = [m\bar{\theta}(\Delta) n_F(y)]_{y=-\tilde{\mu}}^{y=\infty} = -m\bar{\theta}(\Delta) n_F(-\tilde{\mu}) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Ora si hanno a disposizione tutti i termini necessari per calcolare il secondo addendo della funzione di risposta voluta; per agevolarne la forma si decide di valutare in quarto luogo la somma delle correzioni dipendenti dall'energy gap ad esso, ottenendo dopo opportune semplificazioni:

$$\begin{aligned} I + II + III &= \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[-\frac{1}{4\tilde{\mu}^2} + J_3(\infty, \Delta) \right] + \frac{\Delta^2 m}{2} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \cdot \\ &\left[\frac{n_F(-\tilde{\mu})}{2\tilde{\mu}^2} - J_3(\infty, \Delta) \right] + \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[\frac{n'_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{n_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}^2} + 2J_3(\infty, \Delta) \right] = \\ &\frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[\frac{n'_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{1}{4\tilde{\mu}^2} + J_3(\infty, \Delta) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

In quinto luogo si adopera la seconda parte della (A.10), che lega il secondo addendo della suscettività magnetica ai due risultati precedenti a meno di fattori di proporzionalità; nella sua espressione verranno poi utilizzate le consuete proprietà sulla distribuzione di Fermi e la sua derivata. Con tali passaggi si può dunque ottenere il risultato voluto:

$$\begin{aligned} \chi_{zz}^{(2)}(\vec{0}, 0) &= -\frac{2\mu_B^2 \Sigma Z^2}{\pi^2} \left\{ -m\bar{\theta}(\Delta) n_F(-\tilde{\mu}) + \frac{\Delta^2 m}{4} [\bar{\theta}(\Delta) - \sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)] \left[\frac{n'_F(-\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{1}{4\tilde{\mu}^2} + J_3(\infty, \Delta) \right] \right\} \\ &= \mu_B^2 Z^2 \frac{2\Sigma m \bar{\theta}(\Delta)}{\pi^2} \left\{ [1 - n_F(\tilde{\mu})] - \frac{\Delta^2}{4} \left[\frac{n'_F(\tilde{\mu})}{\tilde{\mu}} - \frac{1}{4\tilde{\mu}^2} + J_3(\infty, \Delta) \right] \left[1 - \frac{\sin \bar{\theta}(\Delta) \cos \bar{\theta}(\Delta)}{\bar{\theta}(\Delta)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

La conclusione appena mostrata e l'ultima parte della formula (A.8) rappresentano dunque i due addendi della suscettività magnetica nel caso in cui i parametri fisici del sistema si combinassero in modo da fornire uno scattering rate Γ nullo.

Bibliografia

- [1] A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism* (Oxford University Press, London, 1961).
- [2] H. Alloul, T. Ohno & P. Mendels, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1700 (1989).
- [3] A. Altland & B. Simons, *Condensed Matter Field Theory - Second edition* (Cambridge University Press, New York, 2010).
- [4] E. A. Andreeva, A. I. Andreev & M. V. Eremin, *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **74**, 1360 (2010).
- [5] C. Berthier, J. A. Gillet, T. Auler, Y. Berthier, M. Horvatić, P. Ségransan & J. Y. Henry, *Physica Scripta* **T49**, 131 (1993).
- [6] J. Bok, G. Deutscher, D. Pavuna & S. A. Wolf, *The Gap Symmetry and Fluctuations in High- T_c Superconductors* (Kluwer Academic Plenum Publishers, New York, 1998).
- [7] K. H. J. Buschow, *Concise Encyclopedia of Magnetic and Superconducting Materials - Second Edition* (Elsevier, Amsterdam, 2005).
- [8] V. I. Chizhik, Y. S. Chernyshev, A. V. Donets, V. V. Frolov, A. V. Komolkin & M. G. Shelyapina, *Magnetic Resonance and Its Applications* (Springer International Publishing, Switzerland, 2014).
- [9] T. Cvitanić, D. Pelc, M. Požek, E. Amit & A. Keren, *Phys. Rev.* **B90**, 054508 (2014).
- [10] F. Hammerath, *Magnetism and Superconductivity in Iron-based Superconductors as Probed by Nuclear Magnetic Resonance* (Springer Spektrum, Germany, 2012).
- [11] T. Imai, H. Yasuoka, T. Shimizu, Y. Ueda, K. Yoshimura & K. Kosuge, *PhysicaC* **162-164**, 169 (1989).
- [12] K. Ishida, K. Yoshida, T. Mito, Y. Tokunaga, Y. Kitaoka, K. Asayama, Y. Nakayama, J. Shimoyana & K. Kishio, *Phys. Rev.* **B58**, R5960 (1998).
- [13] A. A. Kordyuk, *Low Temp. Phys.* **41**, 319 (2015).
- [14] V. Z. Kresin, H. Morawitz & S. A. Wolf, *Mechanisms of Conventional and High T_c Superconductivity* (Oxford University Press, New York, 1993).
- [15] Y. S. Lee, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Endoh, S. Wakimoto, K. Yamada, R. W. Erwin, S.-H. Lee & G. Shirane, *Phys. Rev.* **B60**, 3643 (1999).
- [16] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics - Third edition* (Kluwer Academic, New York, 2000).
- [17] S. Marchand, A. Trokiner, A. Yakubovsky, A. Knizhnik & Y. Eckstein, *PhysicaC* **408-410**, 826 (2004).
- [18] P. A. Marchetti & G. Bighin, *Universality in cuprates: a gauge approach*, Paper to be published in *J. Low Temp. Phys.*, arXiv:1602.08936v3 [cond-mat.supr-con] (2016).
- [19] P. A. Marchetti, J. H. Dai, Z. B. Su & L. Yu, *J. Phys. Condens. Matter* **12**, L329 (2000).
- [20] P. A. Marchetti, L. De Leo, G. Orso, Z. B. Su & L. Yu, *Phys. Rev.* **B69**, 024527 (2004).
- [21] P. A. Marchetti & M. Gambaccini, *J. Phys. Condens. Matter* **24**, 475601 (2012).
- [22] P. A. Marchetti, G. Orso, Z. B. Su & L. Yu, *Phys. Rev.* **B71**, 134510 (2005).

- [23] P. A. Marchetti, A. Stella & M. Gambaccini, *Pairing and superconductivity in a spin-charge gauge approach to HTS cuprates* (PhD thesis at the University of Padua, 2011).
- [24] P. A. Marchetti, Z. B. Su & L. Yu, *J. Phys. Condens. Matter* **19**, 125212 (2007).
- [25] P. A. Marchetti & R. Zaetta, *Suscettività di spin dinamica dei superconduttori ad alta T_c dal modello $t - J$* (Master's degree thesis at the University of Padua, 2007).
- [26] T. Moriya, *J. Phys. Soc. Jpn.* **18**, 516 (1963).
- [27] K. A. Müller & G. Bedenek, *Phase Separation in Cuprate Superconductors* (World Scientific Publishing, Singapore, 1993).
- [28] J. W. Negele & H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Westview Press, Aspen, 1998).
- [29] N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors - Experiment, Theory and Applications* (Springer-Verlag, Berlin, 2010).
- [30] A. K. Saxena, *High-Temperature Superconductors* (Springer-Verlag, Berlin, 2012).
- [31] J. R. Schrieffer & J. S. Brooks, *Handbook of High-Temperature Superconductivity - Theory and Experiment* (Springer, New York, 2007).
- [32] F. Seitz, D. Turnbull & H. Ehrenreich, *Solid State Physics: Advances in Research and Applications - Volume 22* (Academic Press, New York, 1968).
- [33] E. Sigmund & K. A. Müller, *Phase Separation in Cuprate Superconductors - Preceedings of the second international workshop* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [34] C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance* (Harper & Row Publishers, New York, 1963).
- [35] C. Stampfl, *Chapter 8 - Magnetism* (Lectures given at the University of Sydney, School of Physics, 2012).
- [36] M. Tachiki & S. Takahashi, *PhysicaC* **185-189**, 1661 (1991).
- [37] M. Takigawa & D. B. Mitzi, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1287 (1994).
- [38] M. Takigawa, A. P. Reyes, P. C. Hammel, J. D. Thompson, R. H. Heffner, Z. Fisk & K. C. Ott, *Phys. Rev.* **B43**, 247 (1991).
- [39] J. L. Tallon & J. W. Loram, *PhysicaC* **349**, 53 (2001).
- [40] R. Valentí, *Green functions: formalism and Matsubara method* (Lectures given at the Goethe Universität, Frankfurt am Main, 2012).
- [41] J. R. Waldram, *Superconductivity of Metals and Cuprates* (Institute of Physics Publishing, Bristol, 1996).
- [42] R. E. Walstedt, *The NMR Probe of High- T_c Materials* (Springer-Verlag, Berlin, 2008).
- [43] W. W. Warren Jr., G. F. Brennert & U. El-Hanany, *Phys. Rev.* **B39**, 4038 (1989).
- [44] X.-G. Wen, *Quantum Field Theory of Many-body Systems - From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons* (Oxford University Press, New York, 2004).
- [45] J. Winter, *Magnetic Resonance in Metals* (Oxford University Press, London, 1971).