

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Efeitos da hibridização e do campo
magnético externo na
Supercondutividade de Modelos
Multibandas

MÁRCIO GOMES DA SILVA

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Coorientador: Prof. Dr. Igor Tavares Padilha

São Carlos-SP

Fevereiro - 2015

Márcio Gomes da Silva

Efeitos da hibridização e do campo
magnético externo na
Supercondutividade de Modelos
Multibandas

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de São Carlos como requisito parcial para obtenção do título de **Doutor em Física**, sob orientação do prof. Dr. José Ricardo de Sousa e coorientação do Prof. Dr. Igor Tavares Padilha.

São Carlos
Fevereiro - 2015

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

S586eh Silva, Márcio Gomes da.
Efeitos da hibridização e do campo magnético externo na
supercondutividade de modelos multibandas / Márcio
Gomes da Silva. -- São Carlos : UFSCar, 2015.
75 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos,
2014.

1. Supercondutividade. 2. Campos magnéticos. 3.
Hibridização. 4. Green, Funções de. I. Título.

CDD: 537.623 (20^a)

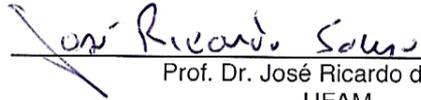


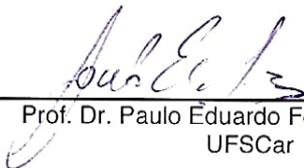
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

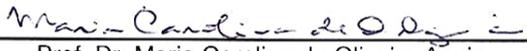
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

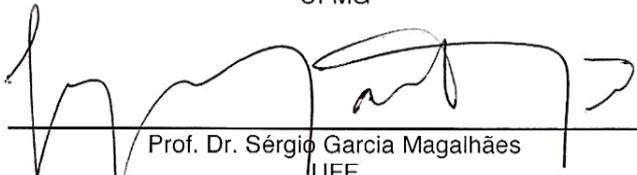
Folha de Aprovação

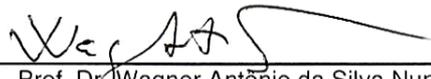
Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Tese de Doutorado do candidato Márcio Gomes da Silva, realizada em 11/02/2015:


Prof. Dr. José Ricardo de Sousa
UFAM


Prof. Dr. Paulo Eduardo Fornasari Farinas
UFSCar


Prof. Dr. Maria Carolina de Oliveira Aguiar
UFMG


Prof. Dr. Sérgio Garcia Magalhães
UFF


Prof. Dr. Wagner Antônio da Silva Nunes
IFAM

Dedicatória

A minha mãe, a minha esposa e ao meu filho.

Agradecimentos

- A Deus por sua fidelidade e bondade infinitas e por me dar o privilégio de realizar esse trabalho.
- Ao meu orientador, Prof. Ricardo, por sua orientação segura, amizade, paciência, e principalmente, pela enorme contribuição na minha formação como cientista. Sempre disposto a falar sobre Física, um exemplo de dedicação e amor pelo que faz.
- Á minha Mãe, a quem tudo devo, o meu eterno agradecimento.
- Á minha esposa, pelo incentivo, compreensão e encorajamento, durante todo este período.
- Ao Prof. Igor pela coorientação e valiosa contribuição.
- Ao Dinola pela colaboração e discussões frutíferas.
- Ao IFAM, por ser minha segunda casa e aos colegas professores: João Neto, Amarildo, Soraya, Stela, Inalda, Cristiane, Isis, Lira, Anglada, Galúcio, Juvenal, Sérgio, Emerson, Márcio Amazonas, Wagner, Rosa, Andréia, por proporcionar um ambiente muito agradável.
- Aos professores da UFAM: Denilson, José Roberto, Marta Gusmão, Angsula, Wilson, Bittencourt, Haroldo, Eduardo Cotta, que direta ou indiretamente contribuíram para minha formação.
- Ao grupo familiar, que sempre esteve orando por mim para o êxito deste trabalho.

- Aos colegas da UFAM: Emanuel, Wendel, Dilson, Edvan, Igor, Arnaldo, Denise, Orlando, Leide, Leandro, Cadu, pelas conversas e distrações, o qual tornavam o dia animado.
- Ao CNPq pelo financiamento do trabalho.

Mas pela graça de Deus sou o que sou; e a sua graça para comigo não foi vã, antes trabalhei muito mais do que todos eles; todavia não eu, mas a graça de Deus, que está comigo.

1 Coríntios 15:10

Resumo

A supercondutividade, um dos fenômenos mais intrigantes da física, vem sendo extensivamente estudada, devido ao seu potencial para aplicações tecnológicas. Apesar do avanço nessa área de pesquisa, como a teoria BCS, teoria microscópica que explica os supercondutores convencionais, ainda não há uma teoria completa que explique os não-convencionais.

Neste trabalho estudamos o comportamento de um sistema supercondutor descrito por um modelo multibandas, pois é uma extensão da teoria BCS a qual descreve bem os supercondutores de baixas temperaturas. Consideramos a interação interbanda, isto é, a interação se dá entre férmions que apresentam propriedades diferentes, tais como, massas distintas, ou mesma massa, mas comportamentos diferentes que se encontram em diferentes bandas, sob a influência da hibridização. Também, estudamos a interação intrabanda com hibridização e campo magnético externo.

Usando o método das funções de Green de Zubarev, calculamos os parâmetros de ordem supercondutor para as interações intra e interbanda a temperatura nula, isto é, $T = 0$ (transições quânticas), e para temperaturas finitas (transições térmicas ou clássicas) afim de obtermos um estudo completo do sistema. Na interação interbanda obtivemos o parâmetro de ordem supercondutor em função da temperatura e da hibridização V . O diagrama de fase T versus V também foi obtido.

As propriedades supercondutoras, tais como energia livre, entropia e calor específico, também foram determinadas na interação intrabanda. Inicialmente, calculamos as propriedades supercondutoras a campo nulo, isto é, para $H = 0$, em seguida, consideramos a

presença do campo magnético externo H diferente de zero. Obtivemos uma equação implícita que relaciona o campo magnético, temperatura e hibridização, o que nos permitiu obter o diagrama de fase T versus H e T versus V .

Nossos resultados mostram que tanto a hibridização V , quanto o campo magnético externo H atuam em detrimento da supercondutividade, suprimindo-a, concordando com outros trabalhos, apesar de não ser isso geral, uma vez que alguns trabalhos mostram que V contribui para a supercondutividade até um determinado valor e para outros valores, suprime-a. Percebemos também que tanto na interação interbanda, quanto na interação intrabanda temos transições de primeira e segunda ordem e um ponto tricrítico, no qual temos o encontro de uma linha de primeira ordem com uma de segunda ordem.

Palavras-chave: Supercondutividade, Modelos Multibandas, Campo magnético, Hibridização, Funções de Green.

Abstract

Superconductivity one of the most intriguing physical phenomena has been extensively studied due to their potential for technological applications. Despite advances in research in physics there is still no complete theory to explain the phenomenon.

We study the behavior of a superconducting system described by a multiband model. We consider the interband interaction, i.e., the interaction is between the fermions with different masses at different bands, under the influence hybridization. Also, we study the intraband interaction with hybridization and external magnetic field.

Using the method of Green's functions of Zubarev, we calculate the superconducting order parameters with intra-and interband interaction at zero temperature, ie, $T = 0$, and for different temperatures of zero. Interband interaction obtained in the superconducting order parameter as a function of temperature and hybridization V . The phase diagram T versus V was also obtained.

The superconducting properties, such as free energy, entropy and specific heat, were also determined in the intraband interaction. Initially, we calculate the superconducting properties in zero field, ie, for $H = 0$, then we consider the presence of external magnetic field H nonzero. obtained an implicit equation that relates the magnetic field, temperature and hybridization, which allowed us to obtain the phase diagram T versus T and T versus V .

Our results show that both the hybridization V , as the external magnetic field H acts at the expense of superconductivity by suppressing it. We noticed also, and confirmed by other studies, that the intraband interaction, we have only second order transition,

since the interaction interbanda, we obtained a superconducting tricritico point where we encounter a line first with a second order. Based on these results, we conclude that left a significant contribution to research in superconductivity.

Keywords: Superconductivity, Multiband Models, Magnetic Field, hybridization, Green's function..

Sumário

Resumo	vii
Abstract	ix
Lista de figuras	xiii
1 Introdução	1
1.1 Propriedades da Supercondutividade	2
1.1.1 O Efeito Meissner	2
1.1.2 A termodinâmica da transição do supercondutor tipo I	4
1.2 Teoria de Landau do Ponto tricrítico	6
1.3 Construção de Maxwell	9
1.4 Transição de fase quântica	11
1.5 Teoria BCS: mecanismo dos pares propostos por Bardeen, Cooper e Schrieffer	13
1.6 Os Férmions Pesados	16
1.7 Supercondutores de Altas Temperaturas	17
1.8 O escopo da tese	18
2 Modelos Multibandas e a Supercondutividade	20
2.1 Fase de Sarma	23
2.1.1 Fase FFLO	24
3 Efeitos da Interação interbanda e da hibridização	26
4 O modelo de duas bandas na presença de um campo magnético externo e hibridização	37

4.1	O modelo	39
4.2	As equações de movimento	40
4.3	Energias de excitação	46
5	Propriedades Termodinâmicas no modelo de Multibandas a campo nulo	56
6	Conclusões e Perspectivas	63
A	Método das Funções de Green	65
B	Contagem dos estados no espaço recíproco	68
	Referências Bibliográficas	71

Lista de Figuras

1.1	Resistência do Mercúrio em função da temperatura. Observe que a resistência se anula próximo de 4.2 K [1].	1
1.2	Efeito Meissner num supercondutor. Para $T > T_c$ o campo magnético penetra no supercondutor; no entanto, para $T < T_c$ o campo magnético é expelido.	3
1.3	Campo magnético aplicado H em função da temperatura T nos supercondutores, a) tipo I e b) tipo II.	4
1.4	Diagrama esquemático (Temperatura-Pressão-Campo magnético) mostrando o comportamento das transições de primeira e segunda ordem, assim como o ponto tricrítico TCP. QCEP é o ponto crítico terminal quântico.	8
1.5	Diagrama esquemático: os pontos que têm a mesma tangente, L e G, são aqueles que dão a mesma área acima e abaixo de p^* na porção instável da isoterma.	9
1.6	Área da região A é igual à área da região B.	11
1.7	Construção de Maxwell: a condição de estabilidade termodinâmica passa a ser satisfeita, linha A'B'. Em $p = p^*$ o sistema apresenta uma descontinuidade no volume entre os pontos A' e B', caracterizando a coexistência entre os estados líquido-gás do sistema.	12

1.8	Esquema do diagrama de fase de uma transição de fase quântica de temperatura T versus parâmetro g . A linha sólida separa a fase ordenada da desordenada. A área sombreada indica a região clássica crítica. A linha tracejada separa a região crítica onde tanto flutuações térmicas quanto quânticas são importantes.	13
1.9	Temperatura crítica do supercondutor em função da massa isotópica para o mercúrio Hg . De acordo com dados experimentais $\alpha = 0.5$	16
1.10	Diagrama esquemático para vários supercondutores não-convencionais, neste caso os Férmions Pesados e os supercondutores de altas temperaturas. Da figura temos a relação da temperatura crítica com a temperatura de Fermi [14].	17
1.11	Evolução de T_c ao longo do tempo.	19
2.1	Comportamento do gap normalizado, o parâmetro de ordem, em função da temperatura para vários valores de V_{sd} . Observamos que o sistema apresenta duas temperaturas críticas para $V_{sd} = 0$	21
2.2	Diagrama de fases T_c versus h obtido por Sarma (ver referencias), mostrando as linhas de transição de fase de segunda e primeira ordem, além do ponto tricrítico, sendo a parte inferior da linha I instável e não física. Δ_2 é o parâmetro de ordem para temperatura finita.	24
2.3	Diagrama de fases T_c versus h onde as transições do estado supercondutor para o normal são sempre de segunda ordem enquanto a transição de fase BCS para FFLO é de primeira ordem [27].	25
3.1	Diagrama esquemático mostrando o plano ab.	27
3.2	Comportamento do parâmetro de ordem Δ como função da temperatura T no modelo interbanda para $\tilde{g} = 0.25$ e vários valores de hibridização \tilde{V} . A linha pontilhada indica a instabilidade do sistema, que com a construção de Maxwell obtemos as discontinuidades dos parâmetros de ordem para $\tilde{V} = 0.06$ e $\tilde{V} = 0.07$	32
3.3	Comportamento do parâmetro de ordem Δ como função da hibridização \tilde{V} no modelo interbanda para $\tilde{g} = 0.25$ e vários valores de hibridização \tilde{V} . As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis.	33

3.4	Comportamento do espectro das quasipartículas ao longo da transição de primeira ordem em $T=0$ para vários valores de V	34
3.5	Diagrama de fase no plano T - V para $g = 0.25$. A linha cheia e a linha pontilhada correspondem às transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto preto corresponde ao ponto tricrítico.	35
3.6	Comportamento da razão r em função da temperatura renormalizada T para vários valores de acoplamento g	36
4.1	Figura representativa do nosso modelo. O termo t representa o <i>hopping</i> , o qual está associado à energia cinética das quasipartículas nos estados s e d . O termo U representa a energia de interação entre quasipartículas de momentos k e $-k$ e de spins opostos, responsáveis pela formação do par. H é o campo magnético aplicado ao longo da direção z	40
4.2	Parâmetro de ordem Δ versus campo magnético aplicado H para vários valores de T . Para $T = 0$ temos uma transição de primeira ordem, já para T diferente de zero, a transição é de segunda ordem.	49
4.3	Parâmetro de ordem Δ versus temperatura T para vários valores de V e campo magnético nulo. Vimos também que a hibridização V contribui para a redução do parâmetro de ordem.	50
4.4	Dependência do parâmetro de ordem em função da temperatura para vários valores de V e a campo magnético $H = 0.1$	51
4.5	Dependência do parâmetro de ordem em função da temperatura, para vários valores de V e a campo magnético $H = 0.2$	52
4.6	dependencia do parâmetro de ordem Δ em função da hibridização V para vários valores de H . Mostramos que para $H = 0$ temos uma transição de segunda ordem, conforme previsto pela teoria BCS. Para valores de campo magnéticos não-nulo temos uma transição de primeira ordem, verificada pela construção de Maxwell.	53
4.7	Dependencia do parâmetro de ordem Δ em função da temperatura T para vários valores de H . O aumento do campo magnético H faz com que o T_c diminua, havendo uma competição entre o campo magético e a temperatura crítica.	54

4.8	Parâmetro de ordem Δ versus hibridização V a campo nulo e vários valores de temperatura T . Do gráfico verificamos que a hibridização crítica V_c diminui com o aumento da temperatura.	55
5.1	Energia livre f versus temperatura T para hibridização $V = 0$ sem campo magnético aplicado.	57
5.2	Energia livre f versus temperatura T para hibridização $V=0.005$	58
5.3	Entropia s versus temperatura para hibridização V nula.	59
5.4	Entropia s versus temperatura para hibridização $V = 0.005$. Temos também a diminuição da temperatura crítica com o aumento da hibridização V . . .	60
5.5	Calor específico c versus temperatura para hibridização $V = 0$. Verificamos a descontinuidade em $T = 0.0011$, indicando uma transição de fase.	61
5.6	Calor específico c versus temperatura para hibridização $V = 0.005$. Verificamos a descontinuidade em $T = 0.0006$, indicando uma transição de fase. Observamos que a temperatura crítica do supercondutor diminui com o aumento da hibridização.	62

Capítulo 1

Introdução

Um ramo da física da matéria condensada que vem sendo bastante estudado desde a sua descoberta é a supercondutividade, devido ao seu grande potencial para aplicações tecnológicas. Neste capítulo, situaremos o leitor quanto ao tema estudado, apresentando alguns conceitos fundamentais, eventos de sua história e as suas principais motivações.

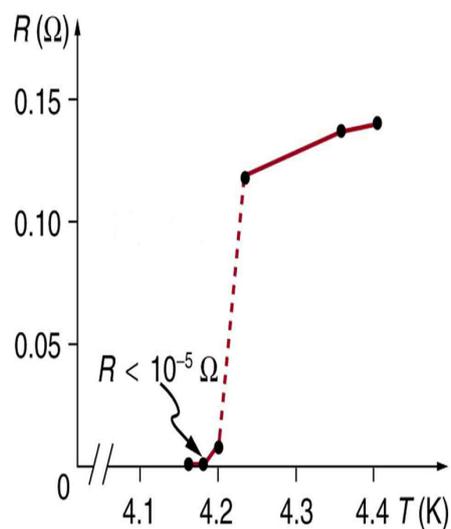


Figura 1.1: Resistência do Mercúrio em função da temperatura. Observe que a resistência se anula próximo de 4.2 K [1].

A supercondutividade foi descoberta em 1911, pelo físico holandês Heike Kamerlingh Onnes, quando estudava a condutividade elétrica dos metais a baixas temperaturas. Ele percebeu que a resistividade do mercúrio caía bruscamente a zero numa temperatura

bem definida e próxima de 4.2 K [1], tal como mostra esquematicamente a figura 1.1. A interpretação deste fenômeno supõe a ocorrência de uma transição de fase em que o mercúrio passa de um estado metálico com comportamento elétrico normal, isto é, resistivo, a um estado supercondutor, no qual a resistência elétrica é nula. Em 1913, Onnes recebeu o prêmio Nobel por esta descoberta.

Ao fenômeno em que ocorre o desaparecimento completo da resistência elétrica de um material quando resfriado abaixo de uma temperatura característica, chamamos de supercondutividade. Esta temperatura, designada por temperatura de transição de fase ou temperatura crítica T_c , varia para diferentes materiais. O estado supercondutor é mantido se a temperatura do sistema estiver abaixo de T_c . Por exemplo, temos $T_c(Hg) = 4.15$ K, $T_c(Pb) = 8.5$ K e $T_c(NbN) = 16$ K.

Uma transição de fase pode ser definida como uma mudança abrupta nas propriedades termodinâmicas do sistema em resposta à variação contínua de algum parâmetro externo tais como: temperatura, pressão, etc [2]. Segundo a definição de Ehrenfest, as transições de fase podem ser classificadas pelo comportamento da energia livre em função de algum parâmetro termodinâmico [3], conforme o comportamento da derivada de menor ordem da energia livre que apresenta uma descontinuidade. Várias transições, tais como, sólido-líquido-gás são classificadas como transições de primeira ordem porque envolvem uma mudança descontínua na densidade, a qual é a primeira derivada na energia livre em relação ao potencial químico. Transições de fase de segunda ordem seriam aquelas cuja primeira derivada da energia livre é contínua durante a transição, mas sua segunda derivada é descontínua. No supercondutor, a transição pode ser de primeira ou segunda ordem. No supercondutor do tipo I, a ordem da transição é de segunda ordem, isso significa que não há calor latente. No entanto, na presença de um campo magnético externo, há calor latente e, portanto, transição de primeira ordem.

1.1 Propriedades da Supercondutividade

1.1.1 O Efeito Meissner

Depois da descoberta da resistividade nula por Onnes em 1911 para $T < T_c$, vinte e dois anos se passaram até uma importante descoberta por Meissner e Ochsenfeld. Eles descobriram experimentalmente que o estado supercondutor possuía uma segunda carac-

terística: O diamagnetismo perfeito, ou seja, que um campo magnético aplicado a uma amostra supercondutora poderia ser expelido do supercondutor quando resfriado abaixo de T_c [4]. A figura 1.4 mostra o efeito Meissner nos supercondutores. Considerando $\vec{B} = 0$

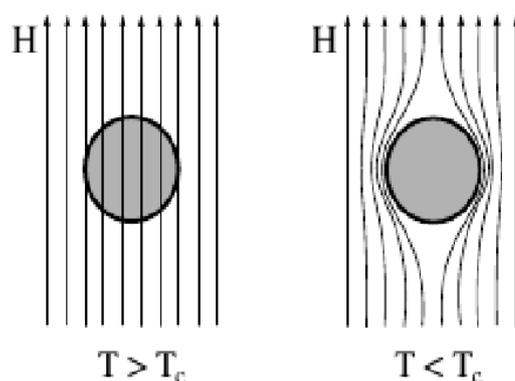


Figura 1.2: Efeito Meissner num supercondutor. Para $T > T_c$ o campo magnético penetra no supercondutor; no entanto, para $T < T_c$ o campo magnético é expelido.

no interior do supercondutor e a sua magnetização \vec{M} , temos:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) = 0,$$

e conseqüentemente, a magnetização

$$\vec{M} = -\vec{H}.$$

Definindo a susceptibilidade por

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H},$$

temos então para o supercondutor $\chi = -1$, enquanto o diamagneto tem $-1 < \chi < 0$.

O efeito Meissner é observado em todos os supercondutores se o campo magnético aplicado for suficientemente fraco. No entanto, a resposta magnética dos supercondutores face a campos quaisquer (porém inferiores ao campo crítico H_c , o campo magnético no qual a supercondutividade desaparece) leva a classificação destes sistemas em dois tipos: os supercondutores do tipo I e os supercondutores do tipo II.

Nos supercondutores do tipo I, se o campo magnético aplicado for inferior ao campo crítico H_c não ocorre nenhuma penetração de fluxo magnético. Já nos supercondutores do

tipo II, temos dois campos críticos, H_{c1} e H_{c2} . Abaixo de H_{c1} todo campo é expelido do supercondutor. Entre H_{c1} e H_{c2} , temos uma fase mista, na qual parte do campo penetra no material[5]. Acima de H_{c2} , a supercondutividade é destruída, e então temos o estado normal, como mostra a figura 1.3.

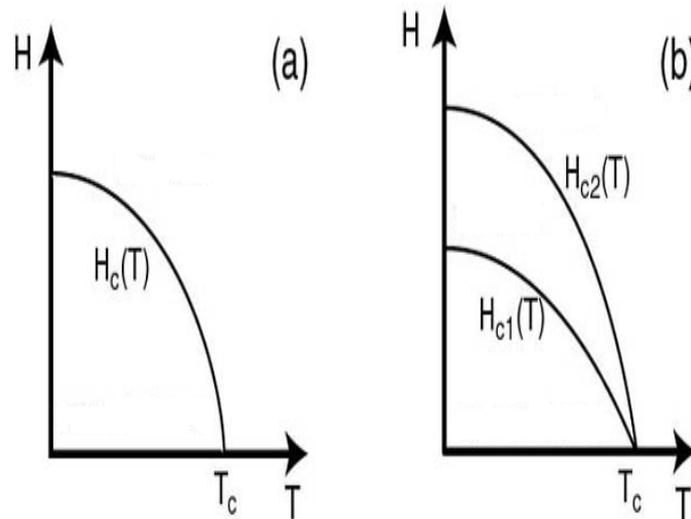


Figura 1.3: Campo magnético aplicado H em função da temperatura T nos supercondutores, a) tipo I e b) tipo II.

1.1.2 A termodinâmica da transição do supercondutor tipo I

A compreensão teórica dos fenômenos que caracterizam o estado supercondutor foi desenvolvida inicialmente com base em equações fenomenológicas e considerações de natureza essencialmente macroscópicas. O sucesso destas descrições deve-se a que a supercondutividade é uma propriedade resultante de um estado quântico que se realiza em escala macroscópica. Assim, os princípios gerais da termodinâmica se aplicam ao estado supercondutor e, em especial, à transição normal-supercondutor[6].

As variáveis intensivas relevantes para a descrição termodinâmica do estado supercondutor são a temperatura T , a pressão p e o campo magnético H , pois são estas as quantidades cujas variações permitem o controle efetivo da transição supercondutora. Nestas circunstâncias, o potencial termodinâmico adequado para a descrição do estado

supercondutor é a energia livre de Gibbs, definida por

$$G = U - TS + pV - \mu_0 \mathbf{H} \cdot \mathbf{m},$$

onde U é a energia interna, S é a entropia e V é o volume da amostra. A constante $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Tm/A}$ é a permeabilidade do vácuo e \mathbf{m} é o momento magnético total da amostra, dado por

$$\mathbf{m} = \int \mathbf{M} d^3 \mathbf{r},$$

onde \mathbf{M} é a magnetização.

Se o processo termodinâmico ocorrer a pressão e volume constantes, no caso de amostras supercondutoras cilíndricas longas, cujo eixo é orientado paralelamente ao campo aplicado \vec{H} , usando o fator que $\vec{M} = -\vec{H}$, então podemos escrever a energia de Gibbs na forma

$$G_s = F_s + \mu_0 H^2 V.$$

Na fase normal, a energia livre de Gibbs pode ser escrita por

$$G_n = F_n + \frac{1}{2\mu_0} B^2 V,$$

onde $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ e $F_i = U_i - TS_i$, onde $i = n, s$.

Quando o campo aplicado atinge o valor crítico $H_c(T)$, temos $G_s = G_n$. Nesta situação ocorrerá a transição supercondutora-normal e teremos

$$F_s + \mu_0 H_c^2 V = F_n + \frac{\mu_0}{2} H_c^2 V,$$

ou seja,

$$f_s - f_n = \frac{1}{2} \mu_0 H_c^2,$$

onde $f = \frac{F}{V}$ simboliza a densidade de energia livre de Helmholtz. A equação acima nos fornece exatamente a quantidade de energia livre (por unidade de volume) ganha pelo sistema através do processo eletrônico que conduz à condensação no estado supercondutor.

As energias livres e o campo crítico H_c são funções apenas da temperatura, no caso em que os efeitos da pressão não são considerados. Então, se derivarmos a relação acima com relação à temperatura, obtemos

$$\frac{df_n}{dT} - \frac{df_s}{dT} = \mu_0 H_c \frac{dH_c}{dT}.$$

Porém, por definição,

$$\frac{df}{dT} = -s,$$

onde s simboliza a entropia por unidade de volume, logo teremos

$$s_n - s_s = -\mu_0 H_c \frac{dH_c}{dT}.$$

O calor latente por unidade de volume de uma transição de fase é definido como

$$L = T(s_n - s_s).$$

Portanto, na transição normal-supercondutor, teremos um calor latente

$$L = -\mu_0 T H_c \frac{dH_c}{dT}.$$

A existência de um calor latente implica em que a transição de fase de um supercondutor de tipo I na presença de um campo magnético é uma transição de primeira ordem. Num diagrama $H - T$, as fases supercondutora e normal são separadas por uma linha de pontos $H_c(T)$, tal como é esquematizado na figura 1.3.

Na figura 1.3, observa-se que a derivada $\frac{dH_c}{dT}$ é sempre negativa, de modo que L é sempre positivo. Em T_c , porém $H_c = 0$, $\frac{dH_c}{dT}$ é finita e, portanto, $L = 0$. Isto significa que, em campo magnético nulo, a transição normal-supercondutor é de segunda ordem.

1.2 Teoria de Landau do Ponto tricrítico

Ponto tricrítico separa uma linha de transição de primeira ordem (linha de coexistência de fase) de uma linha de transição de segunda ordem. Landau (1937) deu uma descrição teórica para transições de fase de primeira ordem (mudança ocorre descontinuamente) e o ponto em que elas mudam para uma transição de segunda ordem (mudança ocorre continuamente). Tal ponto foi chamado, mais tarde, de ponto tricrítico por Griffiths (1970) [7]. Pontos tricríticos ocorrem em uma variedade de sistemas físicos, exemplos, metamagnetismo, transição estrutural, fusão do grafite, etc.

Segundo a teoria de Landau, um parâmetro de ordem ϕ vai a zero ao redor do ponto crítico, e portanto ele supôs que a energia livre $g(T, \phi)$ apresenta a seguinte expansão analítica em lei de potência de ϕ :

$$g(T, \phi) = \frac{a}{2}\phi^2 + \frac{b}{4}\phi^4 + \frac{c}{6}\phi^6, \quad (1.1)$$

onde escolhemos $c > 0$, mas a e b são parâmetros variáveis. Minimizando a equação da energia livre em função do parâmetro de ordem ϕ , ficaremos com:

$$\frac{\partial g}{\partial \phi}(T, \phi) = a\phi + b\phi^3 + c\phi^5 = 0 \quad (1.2)$$

e

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2}(T, \phi) = a + 3b\phi^2 + 5c\phi^4 > 0. \quad (1.3)$$

Da equação 1.2 encontramos cinco raízes, que são

$$\phi = 0, \pm\phi_+, \pm\phi_-$$

onde $\phi_{\pm} = \frac{1}{2c}(-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})$. Se $a < 0$, a solução $\phi = 0$ é um ponto de máximo, então apenas as soluções $\pm\phi_{\pm}$ são fisicamente aceitáveis, e assim sendo a equação 1.3 ficará restrita nesta solução por

$$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2}(T, \phi) \right)_{\phi=\phi_{\pm}} = \pm \frac{1}{c} \left(\sqrt{b^2 - 4ac} \right) \phi_{\pm}^2 \quad (1.4)$$

portanto, ϕ_- corresponde um ponto de máximo e ϕ_+ a um ponto de mínimo.

Considere agora $a > 0$, então a solução $\phi = 0$ é um ponto de mínimo. Se $b > 0$, as soluções $\phi = \pm\phi_{\pm}$ são complexas. Assim sendo, o único ponto de mínimo é a solução desordenada $\phi = 0$, e dizemos que o eixo positivo $b > 0$ é uma linha crítica.

Por outro lado, se $a > 0$ e $b < 0$, as três soluções $\phi = 0, \pm\phi_+$ são pontos de mínimos. Escolhendo como referência $g(T, 0) = 0$, obtemos da equação 1.1

$$\phi_+^2 = -\frac{4a}{b}, \quad (1.5)$$

e comparando com a solução $\phi_+ = \frac{1}{2c}(-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})$ obtida acima, obteremos

$$b = -4\sqrt{\frac{ac}{3}}, \quad (1.6)$$

que é uma linha de primeira ordem, onde ϕ tem uma descontinuidade que vai a zero na forma

$$\phi_+ = \sqrt{\frac{-4a}{b}} = \left(\frac{3a}{c}\right)^{1/4}. \quad (1.7)$$

Na figura 1.4 mostramos esquematicamente o diagrama de fase tridimensional no espaço dos parâmetros (T, P, H) . Na teoria de Landau o diagrama no plano (T, P) , mostra os comportamentos esquemáticos das transições de primeira e segunda ordem, assim como o ponto tricrítico. Com a aplicação do campo, abaixo do TCP, temos três linhas críticas que interceptam-se no TCP.

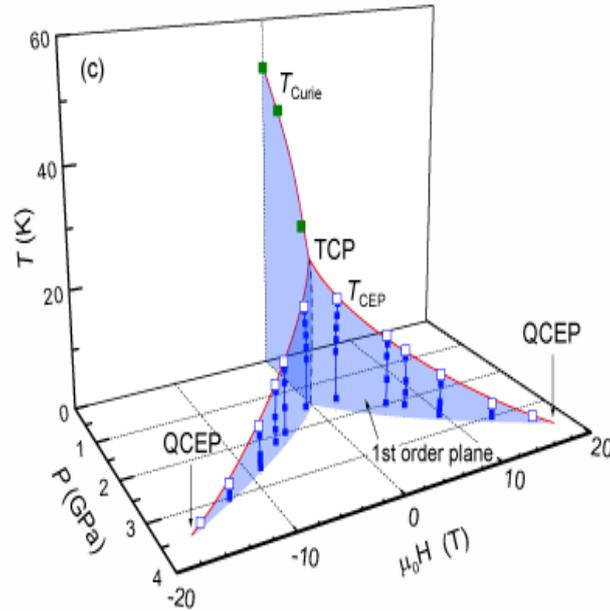


Figura 1.4: Diagrama esquemático (Temperatura-Pressão-Campo magnético) mostrando o comportamento das transições de primeira e segunda ordem, assim como o ponto tricrítico TCP. QCEP é o ponto crítico terminal quântico.

1.3 Construção de Maxwell

A teoria de van der Walls nos proporciona uma descrição quantitativa da transição líquido-vapor e do correspondente ponto crítico. Embora não descreva de forma precisa o comportamento das propriedades termodinâmicas nas proximidades do ponto crítico, ela nos fornece uma descrição adequada da coexistência de fases e sua relação com o ponto crítico.

A equação de van der Walls é dada por

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \quad (1.8)$$

em que a e b são constantes. Ela descreve de forma aproximada o comportamento de gases e da transição líquido-vapor. O parâmetro a está relacionado á força de atração entre as moléculas e b relacionado à repulsão, devido à rigidez das moléculas.

A relação fundamental do fluido de van der Walls, na representação da energia livre de Helmholtz, se obtém integrando $p = -\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T$. Utilizando 1.8, obtemos

$$f = -RT \ln(v-b) - \frac{a}{v} - KT \quad (1.9)$$

onde K depende apenas da temperatura.

Na figura 1.5 mostramos o diagrama esquemático da energia livre *versus* o volume v .

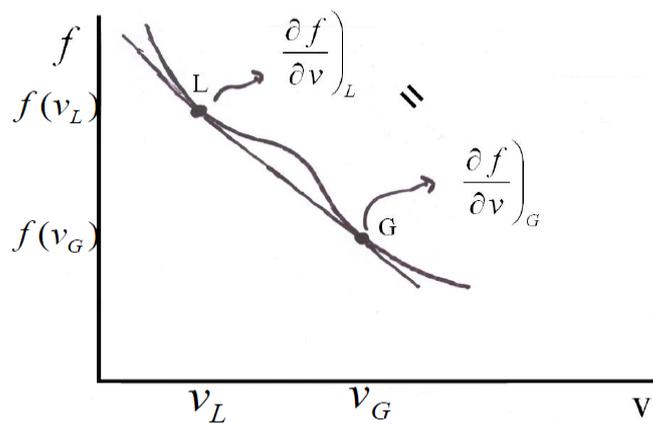


Figura 1.5: Diagrama esquemático: os pontos que têm a mesma tangente, L e G, são aqueles que dão a mesma área acima e abaixo de p^* na porção instável da isoterma.

No equilíbrio termodinâmico, uma condição necessária para a estabilidade é que a pressão P não aumente com o aumento do volume V . No caso do gás de van der Walls

temos uma região de instabilidade, pois há um aumento da pressão quando o volume aumenta. Diante disso, Maxwell propôs uma construção (de áreas iguais) para eliminar esse problema. A construção de Maxwell é derivada da condição de que as energias livres do gás e do líquido devem ser iguais na coexistência.

Isotermas de van der Waals: para $T < T_c$ há um patamar que indica a coexistência, a uma determinada pressão, de uma fase líquida com volume v_L e uma fase gasosa com volume v_G . À medida que T aumenta, o parâmetro de ordem $\psi = v_G - v_L$ diminui. No ponto crítico, $\psi \rightarrow 0$. Para $v = v_L$ e $v = v_G$, temos:

$$p(v_L) = p(v_G) = p^* \quad (1.10)$$

L e G pertencem à mesma reta, cuja tangente é $-p^*$, então:

$$\frac{f(v_L) - f(v_G)}{v_L - v_G} = -p^* \quad (1.11)$$

ou

$$f(v_L) - f(v_G) = p^*(v_G - v_L) \quad (1.12)$$

sendo

$$f(v_G) - f(v_L) = - \int_{v_L}^{v_G} p(v) dv \quad (1.13)$$

Então comparando as equações 1.12 e 1.13 obtemos

$$\int_{v_L}^{v_G} p(v) dv = p^*(v_L - v_G) \quad (1.14)$$

na figura 1.6 mostramos o diagrama esquemático da isoterma e sua área.

A integral do lado esquerdo corresponde à área da região pintada. O lado direito é igual à área do retângulo de base $(v_G - v_L)$ e altura p^* . Logo, a área da região A é igual à área da região B.

A construção de Maxwell consiste na transformação mostrada na figura 1.7, deste modo

$$\frac{\partial p}{\partial v} \leq 0$$

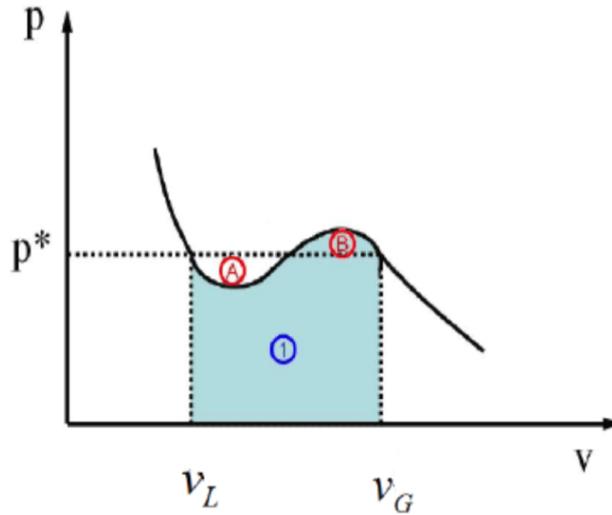


Figura 1.6: Área da região A é igual à área da região B.

em toda a isoterma.

A figura 1.7 mostra a construção de Maxwell e a condição de estabilidade termodinâmica, mostrando que em $p = p^*$ o sistema apresenta uma descontinuidade no volume entre os pontos A e B, caracterizando a coexistência entre os estados líquido-gás do sistema.

1.4 Transição de fase quântica

A transição de fase quântica ocorre em $T = 0$. Na região crítica quântica o sistema apresenta comportamento crítico determinado por um parâmetro de ordem não térmico g , como campo magnético ou pressão, onde o comportamento é sempre determinado pelas flutuações quânticas, mas é desviado da criticalidade por flutuações térmicas. Então, a física na região crítica quântica é controlada pelas excitações térmicas do estado fundamental quântico, cuja principal característica é a ausência de excitações convencionais do tipo quasipartículas[8].

Na fase desordenada o estado fundamental é separado do primeiro estado excitado por um gap de energia. À medida que se aproxima do ponto crítico, g_c , o gap se torna progressivamente menor, criando um ponto não analítico. Um ponto não-analítico na

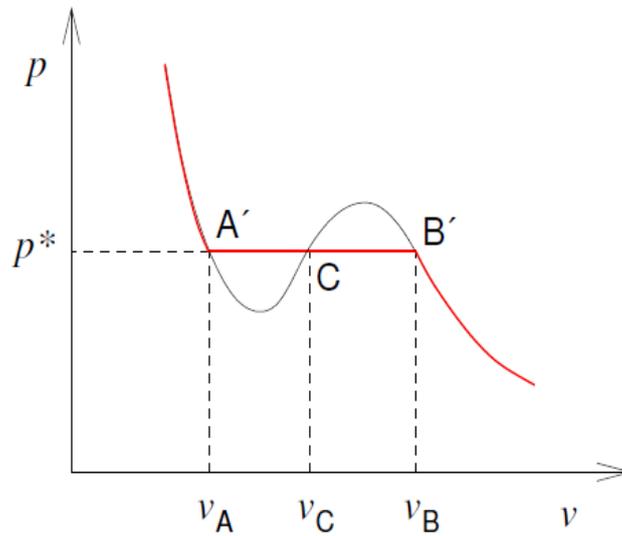


Figura 1.7: Construção de Maxwell: a condição de estabilidade termodinâmica passa a ser satisfeita, linha A'B'. Em $p = p^*$ o sistema apresenta uma descontinuidade no volume entre os pontos A' e B', caracterizando a coexistência entre os estados líquido-gás do sistema.

energia do estado fundamental caracteriza uma transição de fase quântica.

Como todos os experimentos são necessariamente realizados a alguma temperatura diferente de zero, a teoria de transição de fase quântica é construída de modo a descrever as consequências dessa singularidade em $T = 0$ quando analisamos propriedades físicas em $T > 0$.

Em sistemas tridimensionais a ordem pode persistir até uma temperatura finita. Na região $T > 0$ e $g < g_c$ existe, portanto, uma linha de transições contínuas $T_c(g)$ na qual as flutuações térmicas destroem a ordem do sistema. À medida que g se aproxima de g_c , as flutuações quânticas contribuem para desordenar o sistema e reduzem a temperatura da transição até o ponto crítico quântico onde $T_c(g_c) = 0$. Na figura 1.8, mostramos o diagrama de fase de temperatura em função do parâmetro g para sistema que passa por transição quântica. A área sombreada indica a região clássica crítica. A linha tracejada separa a região crítica onde tanto flutuações térmicas quanto quânticas são importantes [9].

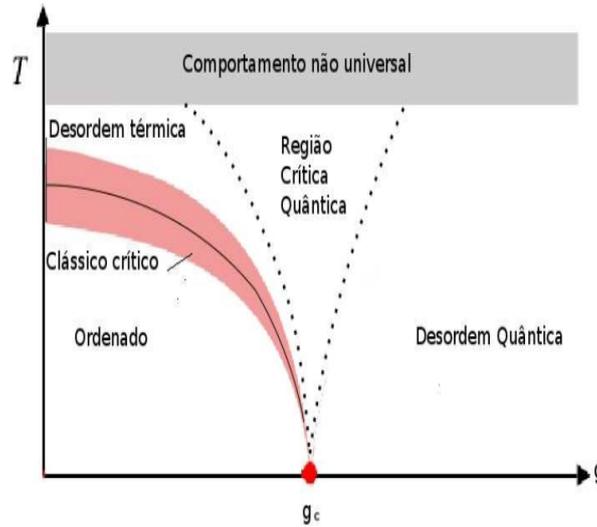


Figura 1.8: Esquema do diagrama de fase de uma transição de fase quântica de temperatura T versus parâmetro g . A linha sólida separa a fase ordenada da desordenada. A área sombreada indica a região clássica crítica. A linha tracejada separa a região crítica onde tanto flutuações térmicas quanto quânticas são importantes.

1.5 Teoria BCS: mecanismo dos pares propostos por Bardeen, Cooper e Schrieffer

No metal normal os estados dos elétrons estão cheios até o nível de Fermi, E_F , e há uma densidade de estados finita no nível de Fermi, $g(E_F)$. O estado fundamental de um gás de elétrons livres, ou seja, o seu estado de menor energia, é obtido distribuindo-se os N elétrons nos diversos estados k , em ordem ascendente de energia, obedecendo-se ao princípio de exclusão de Pauli. O valor de k correspondente ao mais alto valor de energia é chamado vetor de onda de Fermi, representado por \vec{k}_F . O vetor de Fermi define o raio de uma esfera no espaço dos momentos, chamada esfera de Fermi e a energia no espaço dos momentos, $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$.

Entretanto, na presença de uma interação atrativa, este estado pode torna-se instável. A instabilidade pode ser entendida considerando apenas dois elétrons de coordenadas r_1 e r_2 , os demais elétrons sendo tratados como um gás de elétrons livres; fazemos tais considerações para proibir que os dois elétrons ocupem os estados $k < k_F$ pelo princípio

de exclusão [10],[11],[12]. $\psi(r_1, r_2)$ é a função de onda dos dois elétrons. A função de onda do par pode ser escrita na forma

$$\psi(r_1, r_2) = \sum_k g(k) e^{ik(r_1 - r_2)}, \quad (1.15)$$

onde $g(k)$ é a densidade de probabilidade de encontrar um par com momento k e outro com momento $-k$. Visto que os estados $k < k_F$ já estão ocupados, o princípio de exclusão de Pauli impõe

$$g(k) = 0, k < k_F.$$

A equação de Schrödinger para os dois elétrons é dado por [13]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(r_1 - r_2) \right] \psi(r_1, r_2) = (E + 2E_F) \psi(r_1, r_2) \quad (1.16)$$

onde E é a energia do par em relação ao nível de Fermi e $V(r_1 - r_2)$ é a energia potencial de interação elétron-elétron. Substituindo a função de onda do par na equação de Schrödinger, tomando a transformada de Fourier, teremos:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m} g(k) + \sum_{k'} g(k') V_{kk'} = (E + 2E_F) g(k) \quad (1.17)$$

sendo

$$V_{kk'} = \frac{1}{L^3} \int V(r) e^{i(k-k')r} dr^3,$$

é o elemento de matriz da interação elétron-elétron e L^3 é o volume. Para $E > 0$, temos a descrição de um espectro contínuo devido à colisão dos dois elétrons de estado inicial $(k, -k)$ e estado final $(k', -k')$. Mas, se a interação V é atrativa, podemos ter uma solução de estado ligado, com $E < E_F$:

$$V_{kk'} = \begin{cases} -V, & \text{se } |\varepsilon_k|, |\varepsilon_{k'}| \leq \hbar\omega_D, \\ 0, & \text{outros casos.} \end{cases}$$

sendo

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

onde k_F é o momento de Fermi e ω_D , a frequência de Debye, frequência máxima de oscilação do fônon. Rearranjando a equação 1.17, ficaremos:

$$g(k) \left[\frac{\hbar^2 k^2}{m} - E - 2E_F \right] = V \sum_{k'} g(k') = C$$

onde C é uma constante que independe de k . Isolando $g(k)$, obtemos

$$g(k) = \frac{V \sum_{k'} g(k')}{\left[\frac{\hbar^2 k^2}{m} - E - 2E_F \right]};$$

somando em k em ambos os lados da equação, encontramos a relação

$$\frac{1}{V} = \sum_k \frac{1}{\left[\frac{\hbar^2 k^2}{m} - E - 2E_F \right]}$$

consequentemente, teremos:

$$\frac{1}{V} = \sum_k \frac{1}{2\varepsilon_k - E}.$$

Mudando o somatório por uma integral e introduzindo a densidade de estados, temos:

$$1 = V \int_0^{\hbar\omega_D} N(\varepsilon) \frac{1}{2\varepsilon - E} d\varepsilon;$$

visto que nos metais $\hbar\omega_D \ll E_F$ ($E_F \approx 5eV$ e $\hbar\omega_D \approx 25meV$), portanto, $N(\varepsilon) \approx N(0)$.

Diante disso, temos:

$$1 = \frac{N(0)V}{2} \ln \left[\frac{E - 2\hbar\omega_D}{E} \right].$$

Logo,

$$E = - \frac{2\hbar\omega_D}{\left[e^{\frac{2}{N(0)V}} - 1 \right]} \approx -2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{N(0)V}},$$

para $N(0)V \ll 1$. $E < 0$ indica que os dois elétrons formam um estado ligado e, consequentemente, outros elétrons podem se condensar neste estado. Essa energia que mantém os pares ligados é o parâmetro de ordem supercondutor, chamado de *gap*.

O efeito isótopo

Uma das evidências mais fortes da importância da interação elétron-fônon no estabelecimento do estado supercondutor é o chamado efeito isótopo. Para isótopos diferentes

de um dado elemento de um sistema supercondutor observa-se que a temperatura crítica obedece a uma relação do tipo:

$$A^\alpha T_c = cte,$$

onde A é a massa isotópica, como mostramos na figura 1.9.

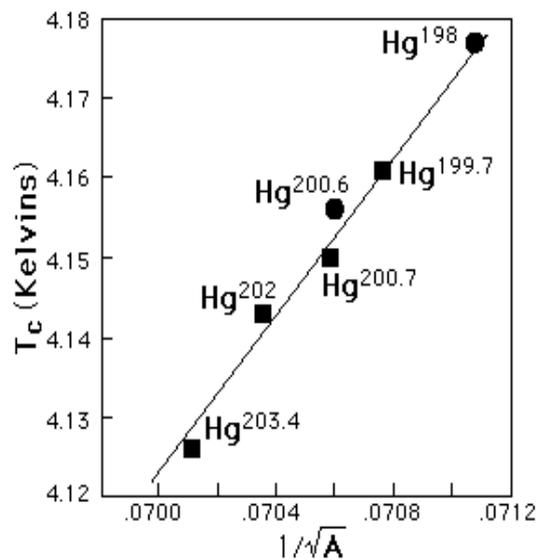


Figura 1.9: Temperatura crítica do supercondutor em função da massa isotópica para o mercúrio Hg . De acordo com dados experimentais $\alpha = 0.5$.

1.6 Os Férmions Pesados

Férmions Pesados são compostos onde os elétrons, em geral da camada f de energia, ora apresentam um comportamento itinerante (elétron livre), ora localizado (fixo). Esse comportamento dual ocorre, por exemplo nos elementos de início e fim das terras raras, como o Cério (Ce) e Itérbio (Yb).

À temperatura ambiente, os compostos férmions pesados se comportam como uma coleção de momentos magnéticos fracamente interagentes. Com a redução da temperatura, os momentos magnéticos localizados se acoplam com os spins dos elétrons de condução, causando um aumento da massa efetiva dos últimos. Devido ao aumento de suas massa efetivas recebem o nome de Férmions Pesados.

Nos casos em que o estado supercondutor se manifesta, um mecanismo de atração entre elétrons originado das flutuações dos momentos magnéticos parece ser o responsável pela supercondutividade, ao invés da troca de fônons que ocorre nos supercondutores convencionais, descritos pela teoria BCS.

Na figura 1.10 mostramos uma representação esquemática da relação da temperatura crítica com a temperatura de Fermi para vários supercondutores não-convencionais. Verificamos uma relação linear entre T_c e T_F destes supercondutores.

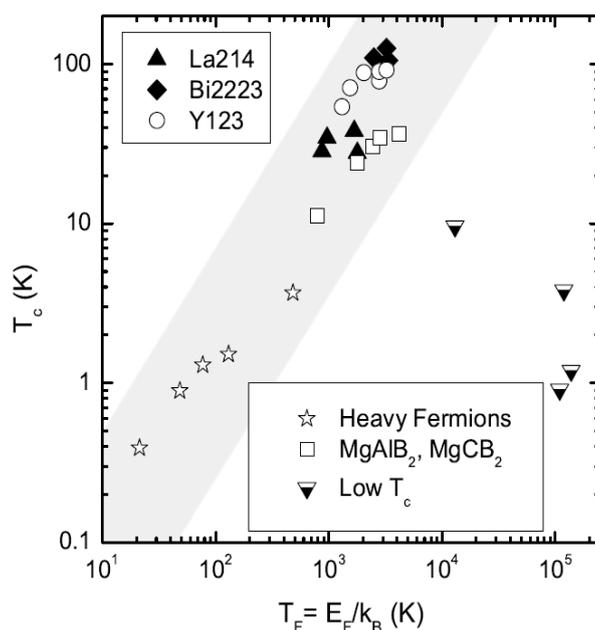


Figura 1.10: Diagrama esquemático para vários supercondutores não-convencionais, neste caso os Férmions Pesados e os supercondutores de altas temperaturas. Da figura temos a relação da temperatura crítica com a temperatura de Fermi [14].

1.7 Supercondutores de Altas Temperaturas

O termo "supercondutores de alto T_c " refere-se a um grupo de materiais com temperaturas críticas acima de $23K$. A história da supercondutividade de alto T_c teve início em 1986, quando Bednorz e Muller encontraram evidência para a supercondutividade a $30 K$ no composto cerâmico La-Ba-Cu-O[15]. Esta descoberta deu um novo ânimo nas pesquisas

da supercondutividade. Antes de 1986, a temperatura crítica mais alta conhecida para um supercondutor era a do composto de Nb_3Ge com $T_c = 23,3K$.

Em 1987, grupos das universidades do Alabama e Houston, sob à direção de Wu e Chu, respectivamente, anunciaram que o Y-Ba-Cu-O torna-se supercondutor a $93 K$. Um ano depois, 1988, supercondutores cupratos a base de Bi e Tl tornavam-se supercondutores a 110 e $125 K$, respectivamente. Cupratos referem-se a supercondutores cuja estrutura contém átomos de cobre e oxigênio. Finalmente, um $T_c = 135 K$ foi descoberto nos cupratos a base de Hg em 1993 (sob pressão, T_c atinge $164 K$). Todos estes cupratos são dopados por buracos. Os cupratos dopados por elétrons foram descobertos em 1989. Na figura 1.11 é mostrada a evolução no crescimento de T_c em função do ano.

Além do seu alto T_c , os supercondutores cupratos apresentam características bem diferentes dos supercondutores de baixas temperaturas (chamados de supercondutores convencionais, pois são descritos pela teoria BCS). Eles são compostos de camadas, tetragonal ou ortorrômbica, contém planos de CuO_2 perpendiculares à direção c . A supercondutividade reside basicamente nestes planos.

As aplicações dos supercondutores na construção de imãs supercondutores são comuns. Imãs supercondutores capazes de criar campos magnéticos muitos intensos são usados na técnica de imagem por ressonância magnética (MRI), em medicina, a qual permite a obtenção de imagens dos tecidos moles com resolução bastante superior à dos tradicionais raios X. Estes imãs também são usados na investigação da estrutura de moléculas complicadas, através da ressonância magnética nuclear (NMR).

1.8 O escopo da tese

Nesta tese, estudaremos teoricamente a supercondutividade por meio de um modelo tipo Hubbard de duas bandas com campo magnético externo e hibridização, onde usaremos o método das Funções de Green para obter as propriedades termodinâmicas. O desenvolvimento dos capítulos deste trabalho está dividido da seguinte forma:

No Capítulo 2, apresentamos os modelos multibandas, que são uma extensão da teoria BCS e que serviram de motivação para o nosso trabalho.

No Capítulo 3, estudamos o fenômeno da supercondutividade, considerando a interação entre elétrons de duas bandas diferentes, interação interbanda, para formação de

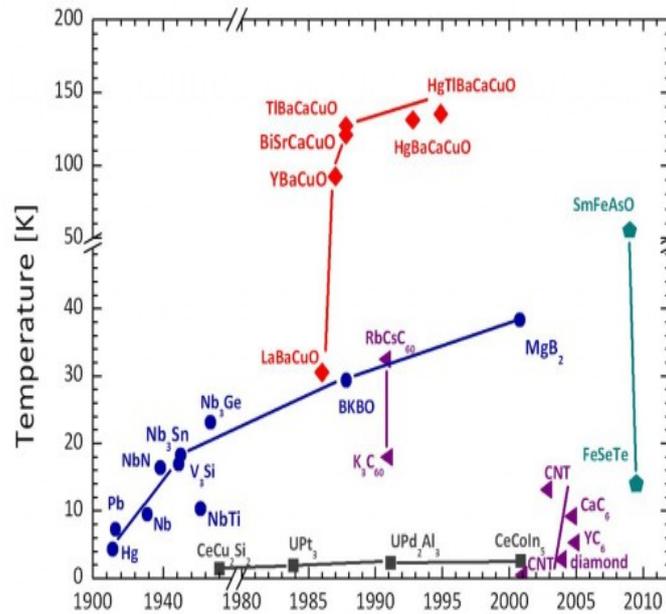


Figura 1.11: Evolução de T_c ao longo do tempo.

pares, e a hibridização entre as bandas, que supomos ser devido à mistura das funções de onda dos elétrons de bandas diferentes. Analisamos o parâmetro de ordem supercondutor em função da temperatura e da hibridização.

No Capítulo 4, descrevemos e analisamos a supercondutividade no modelo de bandas com a presença de um campo magnético externo. Descrevemos o efeito da hibridização e do campo no sistema intrabanda. Foi feita também uma breve discussão sobre a hibridização crítica V_c que destrói a supercondutividade nesses sistemas.

No Capítulo 5, analisamos as propriedades termodinâmicas do supercondutor intrabanda, tais como, energia livre, entropia e calor específico considerando o efeito da hibridização e do campo magnético externo.

No Capítulo 6, apresentamos nossas conclusões e as considerações finais quanto ao trabalho exposto e, além do mais, propomos alguns trabalhos como perspectivas futuras.

Modelos Multibandas e a Supercondutividade

A primeira teoria microscópica da supercondutividade, teoria BCS[16], proposta em 1957, descrevia apenas uma banda de elétrons (banda s) interagentes. Nesta descrição, desprezava todas as formas de espalhamento que não sejam relacionadas com a formação e transição de pares eletrônicos. O Hamiltoniano BCS reduzido é dado por :

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - V_{ss} \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}, \quad (2.1)$$

onde V_{ss} é a interação atrativa na banda s . Os operadores $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) criam (aniquilam) um elétron com momento k e spin σ . A energia cinética dos elétrons é dada pela relação de dispersão $\varepsilon_k = \hbar k^2/2m$, com m sendo a massa do elétron. A teoria BCS limita a região onde são formados os pares de Cooper. Essa região compreende uma estreita camada definida pela energia de Debye $\hbar\omega_D$ em torno do nível de Fermi E_F . Nessa região a interação atrativa entre os elétrons é mediada pelos fônons, e no caso de $\hbar\omega_D \ll E_F$ a densidade de estados eletrônica $N(0)$ é constante no nível de Fermi. A teoria BCS considera o regime de acoplamento dos pares como sendo fraco, tal que $N(0)V \ll 1$. No limite BCS, a distribuição de momentos somente é modificada em uma pequena região exponencial - a mesma onde ocorre o emparelhamento - próxima ao nível de Fermi[13].

Dois anos depois da teoria BCS, Suhl, Mathias e Walker [17] generalizaram para sistemas com sobreposição de bandas, surgindo assim o primeiro modelo de sistemas multibandas, neste caso de duas bandas. O modelo incluía formação de pares de elétrons da mesma banda, interação intrabanda, e pares de elétrons entre bandas diferentes, inter-

banda. A ideia era analisar sistemas supercondutores mais complexos e realistas. Assim eles propuseram o seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{SMW} = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k^s c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \varepsilon_k^d d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma}) - V_{ss} \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - V_{dd} \sum_{kk'} d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} - V_{sd} \sum_{kk'} (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} + d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}), \quad (2.2)$$

sendo ε_k^s e ε_k^d as energias cinéticas das bandas s e d , com $c_{k\sigma}$ ($c_{k\sigma}^\dagger$) e $d_{k\sigma}$ ($d_{k\sigma}^\dagger$) os correspondentes operadores de aniquilação (criação). Além disso, V_{ss} e V_{dd} são as interações atrativas efetivas na mesma banda, e V_{sd} é uma interação interbanda atrativa, que se diferencia da usual intrabanda por ser mediada entre elétrons itinerantes s e d . No geral, a equação 2.2 é um Hamiltoniano de duas bandas que se cruzam, e o propósito disso é descrever elementos de transição que apresentem uma resistividade afetada pelo espalhamento entre elétrons itinerantes dos níveis s - d . Um modelo semelhante foi proposto por Machida e colaboradores [18]. A figura 2.1 mostra o comportamento do gap normalizado em função da temperatura para vários valores de V_{sd} .

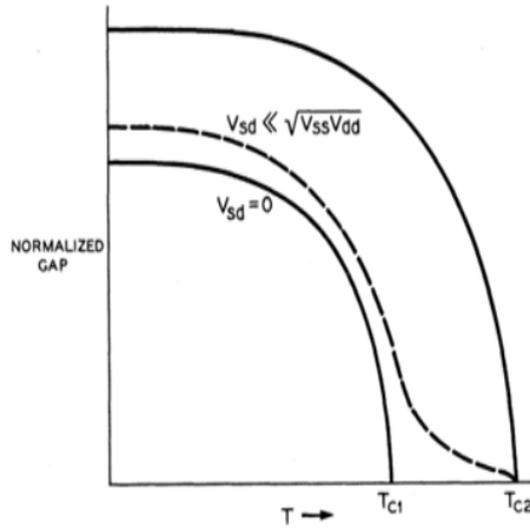


Figura 2.1: Comportamento do gap normalizado, o parâmetro de ordem, em função da temperatura para vários valores de V_{sd} . Observamos que o sistema apresenta duas temperaturas críticas para $V_{sd} = 0$.

Recentemente Moreo e colaboradores [19] usaram a supercondutividade em sistemas multibandas no contexto dos compostos de Fe , os pnictídeos, em que enfatizou-se a importância da interação interbanda. Os cálculos mostraram o aparecimento de três regimes devido à interação interbanda: 1) O estado normal, em que o estado fundamental não é supercondutor; 2) um estado supercondutor exótico, onde uma das bandas apresenta gap no nível de Fermi e a outra não e 3) um estado supercondutor, semelhante ao BCS.

A existência de supercondutividade exótica também foi estudada por Liu e Wilczek [20] em átomos frios e na cromodinâmica quântica. O modelo LWC¹ é basicamente descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{LWC} = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \varepsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - V \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma}, \quad (2.3)$$

sendo a e b as duas espécies de partículas, cuja dispersão é parabólica $\varepsilon_k^\alpha = k^2/2m_\alpha - \mu_\alpha$ com $\alpha = a, b$. Para Liu e Wilczek, o objetivo era estudar o emparelhamento fermiônico dos gases atômicos ultra-frios. Esse emparelhamento ocorre entre espécies cujos vetores de Fermi não coincidem na superfície de Fermi no limite de acoplamentos fracos. Eles obtiveram um resultado que indicou ter encontrado um sistema que contém ambos estados coexistindo: superfluido e líquido de Fermi (Normal). As excitações relacionadas a cada estado seriam com e sem *gap*, respectivamente. Em um sólido, isso definiria praticamente um novo estado da matéria, sendo um material simultaneamente supercondutor e metálico. Porém, Caldas [21] mostrou de maneira geral que a fase BCS nesses sistemas com emparelhamento interbanda desaparece de maneira descontínua indicando uma transição de 1ª ordem para $T = 0$. Além disso, foi visto que o possível novo estado da matéria de Liu e Wilczek é energeticamente instável, correspondendo a máximos na energia livre, sendo desfavorável a ser um estado fundamental do sistema.

A descoberta da supercondutividade no diboreto de magnésio MgB_2 [22], com temperatura crítica de 40 K, oferece a possibilidade de estudo e aplicações de uma nova classe de materiais supercondutores com baixo custo de fabricação. Até o momento, este composto apresenta a maior temperatura crítica entre os compostos intermetálicos. O MgB_2 tem sido alvo de bastantes estudos que visam esclarecer a natureza de suas propriedades físicas. Dentre estas propriedades estão o alto campo crítico e a sua simetria de pares de

¹Relativo às iniciais Liu, Wilczek e Caldas.

Cooper, que é do tipo onda-s.

2.1 Fase de Sarma

Uma das motivações para a realização deste trabalho foi o modelo proposto por Sarma [23]. Ao contrário da teoria BCS, o modelo de Sarma tem duas superfícies de Fermi em $T = 0$ que aumentam quando $T > 0$. Este modelo estuda o efeito da ação de um campo magnético uniforme sobre os spins dos elétrons de condução de um supercondutor, utilizando o formalismo da teoria BCS, desprezando o efeito orbital. Desta maneira foi proposto o seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{Sarma} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_{kk'} V_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + h \sum_{k\sigma} \sigma c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.4)$$

onde ε_k é a relação de dispersão, h é o campo magnético uniforme aplicado e $V_{kk'}$ está relacionado à interação atrativa responsável pela supercondutividade.

Este modelo pode ser considerado multibanda, no caso duas, pois o campo magnético uniforme separa os dois elétrons de spins opostos, criando uma banda de spins \uparrow e outra de spins \downarrow . A importância deste trabalho vem pelo fato do aparecimento natural e a consideração de um desdobramento multibanda em um modelo que originalmente trataria de sistemas de uma única banda [24].

Mostrou-se que a temperatura nula, isto é, $T = 0$ K, tem-se: 1) para $\Delta = 0$, temos o paramagnetismo de Pauli no metal normal; 2) para $\Delta > h$, encontra-se o estado fundamental BCS não polarizado; 3) para $\Delta < h$, as superfícies de Fermi deslocam-se, gerando um *mismatch* entre elas, sendo o gap supercondutor definido por

$$\Delta = \frac{V}{N} \sum_{k'} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\downarrow} \rangle. \quad (2.5)$$

Analisando para temperatura finita foi obtido o diagrama de fases no plano $T - h$ apresentado na figura 2.2, que descreve as linhas de transição de fase de segunda e primeira ordem, além do ponto tricrítico, sendo o campo magnético crítico dado por $H_c = \frac{\Delta_2}{\sqrt{2}}$, que é exatamente o campo crítico obtido por Chadrsekhar e Clogston [25] para um supercondutor BCS.

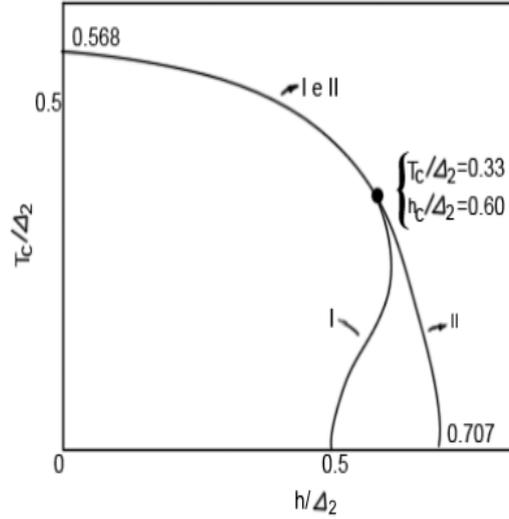


Figura 2.2: Diagrama de fases T_c versus h obtido por Sarma (ver referencias), mostrando as linhas de transição de fase de segunda e primeira ordem, além do ponto tricrítico, sendo a parte inferior da linha I instável e não física. Δ_2 é o parâmetro de ordem para temperatura finita.

Estes trabalhos nos deram motivação para a realização do nosso trabalho de doutorado, no qual analisamos a supercondutividade, considerando a interação intra e interbanda; estudamos também os efeitos da hibridização e do campo magnético externo nas propriedades supercondutoras, tais como gap supercondutor, energia livre, entropia e calor específico.

2.1.1 Fase FFLO

Larkin e Ovchinnikov [26] em 1965 e independentemente Fulde e Ferrel [27] em 1964 mostraram que um campo magnético externo causa um afastamento dos vetores de Fermi, causando assim uma instabilidade no emparelhamento Cooper. Nestas circunstâncias é favorável uma translação relativa entre as superfícies de Fermi, causando um emparelhamento com momento total q não nulo, definido por

$$\Delta_q = - \sum_k V_k \langle a_{-k+q/2} a_{k+q/2} \rangle$$

Na figura 2.3 apresentamos o diagrama de fases previsto por Fulde e Ferrel, e por Larkin e Ovchinnikov (FFLO). No diagrama mostramos T_c versus h onde as transições do estado supercondutor para o normal são sempre de segunda ordem enquanto a transição de fase BCS para FFLO é de primeira ordem.

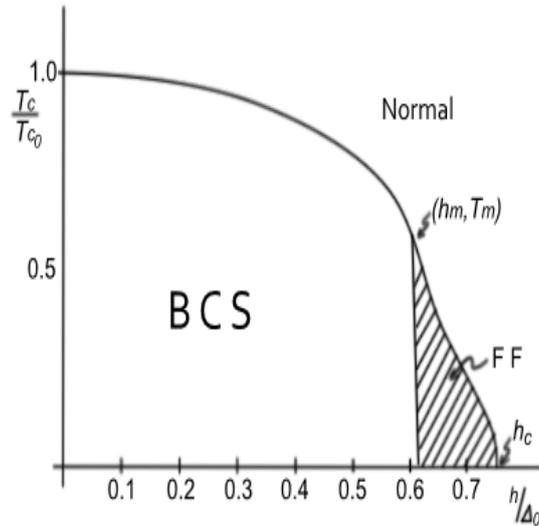


Figura 2.3: Diagrama de fases T_c versus h onde as transições do estado supercondutor para o normal são sempre de segunda ordem enquanto a transição de fase BCS para FFLO é de primeira ordem [27].

Efeitos da Interação interbanda e da hibridização

Neste capítulo estuda-se um sistema supercondutor pouco convencional, em que os pares de Cooper são formados pelos férmions de diferentes bandas descritos pelo modelo de duas bandas com hibridização V [29]. Investiga-se a transição de fase supercondutora e os efeitos da hibridização. Em consequência, obtivemos um ponto tricrítico (TCP) no diagrama de fases, semelhante ao que é observado experimentalmente em sistemas de supercondutores com um campo magnético aplicado. No entanto, em nossa descrição, o parâmetro de controle é a hibridização.

A transição de fase supercondutora (SC) para a fase normal (N) é de interesse fundamental no estudo da supercondutividade. Recentemente, uma transição de fase de primeira ordem foi observada no composto Sr_2RuO_4 . Medições de efeito magnetocalórico forneceram um conjunto de dados que mostram uma transição de primeira ordem a baixas temperaturas [28] e em campos magnéticos aplicados paralelos ao plano ab , conforme mostrado na figura 3.1. No entanto, para este caso, as origens da transição de primeira ordem não estão relacionados com um mecanismo convencional que foi previamente discutido. Aqui, a razão microscópica está relacionado com uma interação não-trivial, onde temos pares formados por spins de mesmo sentido.

Consideramos um modelo com dois tipos de quase-partículas fermiônicas, as quais chamamos por a e b , com uma interação atrativa g entre elas, interação interbanda e

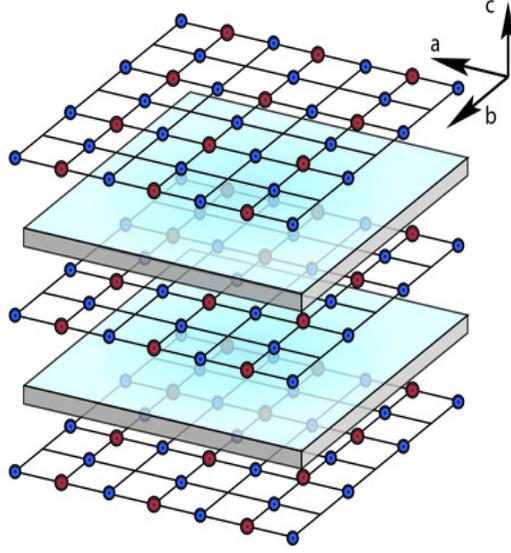


Figura 3.1: Diagrama esquemático mostrando o plano ab.

V sendo o termo de hibridização, que está relacionado com a sobreposição das funções de onda e pode ser ajustado por um parâmetro externo, tal como pressão, permitindo explorar o diagrama de fases e as propriedades termodinâmicas deste modelo. Este modelo descreve muito bem o MgB_2 , onde os elétrons provenientes de diferentes orbitais coexistem na superfície de Fermi.

O modelo proposto é descrito pelo seguinte hamiltoniano [30]

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{k\sigma} \varepsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} - \Delta_{ab} \sum_{k\sigma} \left(a_{k\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma}^\dagger + b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \right) \\ & + \sum_{k\sigma} V_k \left(a_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \right) + \frac{\Delta_{ab}^2}{g}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde $a_{k\sigma}^\dagger$ e $b_{k\sigma}^\dagger$ são os operadores das quase-partículas a e b , respectivamente. As relações de dispersão são, ε_k^l definido por $\varepsilon_k^l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_l} - \mu_l$, com μ_l sendo o potencial químico da espécie l ($= a, b$). g é o acoplamento atrativo. O gap supercondutor é definido por

$$\Delta_{ab} = g \sum_{k\sigma} \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle, \quad (3.2)$$

que descreve a transição de fase do estado normal e supercondutor.

Neste trabalho utiliza-se o método da função de Green [31]. A função de correlação anômala $\langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle$ será obtida a partir das funções de Green, a partir dos quais deter-

minaremos as excitações da fase supercondutora. Usando a equação de movimento das Funções de Green, calculamos: $\langle\langle a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \rangle\rangle_\omega$. Quando escrevemos as equações de movimento para funções de Green, novas funções são geradas, algumas destas são de ordem superior, uma vez que contêm um maior número de operadores de criação e aniquilação do que a função de Green inicial. Diante disso, desacoplamos as funções de Green, tipo campo médio.

Para obter o parâmetro de ordem supercondutor interbanda são calculadas as equações de movimento para os propagadores $\langle\langle a_{k-\sigma}; b_{-k\sigma'} \rangle\rangle$, $\langle\langle a_{k-\sigma}^\dagger; b_{-k\sigma'} \rangle\rangle$, $\langle\langle b_{k\sigma}; b_{-k\sigma'} \rangle\rangle$ e $\langle\langle b_{k\sigma}^\dagger; b_{-k\sigma'} \rangle\rangle$. Para calculá-las foi utilizada a expressão geral para a equação de movimento das funções de Green para férmions dada por [31]

$$\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle\{A, B\}\rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]; B \rangle\rangle, \quad (3.3)$$

onde A, B são operadores fermiônicos e \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema.

Usando as relações de anti-comutação para férmions:

$$\begin{aligned} \{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} \\ \{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}\} &= \{b_{k\sigma}^\dagger, b_{k'\sigma'}^\dagger\} = 0 \\ \{b_{k\sigma}, a_{k'\sigma'}\} &= \{b_{k\sigma}^\dagger, a_{k'\sigma'}^\dagger\} = \{b_{k\sigma}, a_{k'\sigma'}^\dagger\} = \{b_{k\sigma}^\dagger, a_{k'\sigma'}\} = 0 \end{aligned}$$

Calculando a primeira equação da função de Green $\langle\langle a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \rangle\rangle_\omega$ dada por

$$\omega \langle\langle a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \rangle\rangle_\omega = \{a_{k\sigma}, b_{-k-\sigma}\} + \langle\langle [a_{k\sigma}, \mathcal{H}]; b_{-k-\sigma} \rangle\rangle, \quad (3.4)$$

teremos,

$$\omega \langle\langle a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \rangle\rangle_\omega = \langle\langle [a_{k\sigma}, \mathcal{H}]; b_{-k-\sigma} \rangle\rangle, \quad (3.5)$$

onde $\langle\{a_{k\sigma}, b_{-k-\sigma}\}\rangle = 0$, e desenvolvendo o lado direito da equação 3.5 fica:

$$\begin{aligned}
\{a_{k\sigma}, \mathcal{H}\} &= \sum_k \left(\epsilon_k^a \{a_{k\sigma}, a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}\} + \epsilon_k^b \{a_{k\sigma}, b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}\} \right) \\
&\quad - \Delta_{ab} \sum_k \left(\{a_{k\sigma}, a_{k\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma}^\dagger\} + \{a_{k\sigma}, b_{-k-\sigma} a_{k\sigma}\} \right) \\
&\quad + \sum_k V_k \left(\{a_{k\sigma}, a_{k\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma}^\dagger\} + \{a_{k\sigma}, b_{-k-\sigma}^\dagger a_{k\sigma}\} \right) - \frac{\Delta_{ab}^2}{g} \{a_{k\sigma}, 1\}
\end{aligned} \tag{3.6}$$

calculando os comutadores, obtemos

$$(\omega - \epsilon_k^a) \ll a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg_\omega = -\Delta_{ab} \ll b_{k\sigma}^\dagger; b_{-k-\sigma} \gg + V_k \ll b_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg. \tag{3.7}$$

Como podemos observar para obtermos $\ll a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg_\omega$, precisamos não só da função de Green $\ll b_{k\sigma}^\dagger; b_{-k-\sigma} \gg$, mas também de $\ll b_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg$. De maneira análoga à feita na equação 4.2, obtivemos as outras funções de Green:

$$(\omega + \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}^\dagger; b_{-k-\sigma} \gg_\omega = \frac{1}{2\pi} - \Delta_{ab} \ll a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg - V_k \ll a_{k\sigma}^\dagger; b_{-k-\sigma} \gg, \tag{3.8}$$

$$(\omega - \epsilon_k^b) \ll b_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg_\omega = \Delta_{ab} \ll a_{k\sigma}^\dagger; b_{-k-\sigma} \gg + V_k \ll a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg, \tag{3.9}$$

e

$$(\omega + \epsilon_k^a) \ll b_{k\sigma}^\dagger; b_{-k-\sigma} \gg_\omega = \Delta_{ab} \ll b_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \gg - V_k \ll b_{k\sigma}^\dagger; b_{-k-\sigma} \gg. \tag{3.10}$$

Então, obtemos um sistema fechado de equações que podem ser resolvidas exatamente usando a regra de Cramer. Considerando $V_k = V$, temos:

$$\langle\langle a_{k\sigma}; b_{-k-\sigma} \rangle\rangle_\omega = \frac{D_1(\omega)}{D_2(\omega)}, \tag{3.11}$$

com

$$D_1(\omega) = [\Delta_{ab}^2 - V^2 - (\omega - \epsilon_k^b)(\omega - \epsilon_k^a)] \Delta_{ab}, \tag{3.12}$$

e

$$D_2(\omega) = \omega^4 + C_1 \omega^2 + C_0, \tag{3.13}$$

onde $C_1 = - [(\varepsilon_k^a)^2 + (\varepsilon_k^b)^2 + 2(\Delta_{ab}^2 + V^2)]$ e $C_0 = [\varepsilon_k^a \varepsilon_k^b - (V^2 - \Delta_{ab}^2)]^2$.

As excitações de energia ω , na fase supercondutora, são obtidas fazendo $D_2(\omega) = 0$. Assim, obtém-se a energia das excitações, $\omega^\pm = \pm\omega_{1,2}(k)$, onde $\omega_{1,2}(k)$ é definida por

$$\omega_{1,2}(k) = \sqrt{A_k \pm \sqrt{B_k}}, \quad (3.14)$$

com

$$A_k = \frac{(\varepsilon_k^a)^2 + (\varepsilon_k^b)^2}{2} + \Delta_{ab}^2 + V^2, \quad (3.15)$$

e

$$B_k = \left(\frac{(\varepsilon_k^a)^2 - (\varepsilon_k^b)^2}{2} \right)^2 + V^2 (\varepsilon_k^a + \varepsilon_k^b)^2 + \Delta_{ab}^2 (\varepsilon_k^a - \varepsilon_k^b)^2 + 4V^2 \Delta_{ab}^2. \quad (3.16)$$

Para simplificar, renormalizamos todas as energias em termos do potencial químico da banda a , μ_a . Além disso, fizemos $\hbar^2/(2m_a\mu_a) = 1$. Neste caso, a relação de dispersão pode ser escrita como $\tilde{\varepsilon}_k^a \equiv \varepsilon_k^a/\mu_a = k^2 - 1$ e $\tilde{\varepsilon}_k^b \equiv \varepsilon_k^b/\mu_a = \alpha k^2 - b$, onde $b \equiv \mu_b/\mu_a$ e $\alpha \equiv m_a/m_b < 1$. O parâmetro de ordem Δ_{ab} será determinado numericamente.

Da equação 3.2 e transformando o somatório numa integral, ver apêndice B, obtivemos a função de gap

$$\frac{1}{\tilde{g}\rho_a} = \sum_{j=1}^2 \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{(-1)^{j+1} d\varepsilon \left[\frac{\tilde{\omega}_j^2(\varepsilon) - \lambda^2(\varepsilon)}{2\tilde{\omega}_j(\varepsilon)} \right] \tanh\left(\frac{\tilde{\omega}_j(\varepsilon)}{2\tilde{T}}\right)}{2\sqrt{\tilde{B}(\varepsilon)}}, \quad (3.17)$$

com

$$\lambda^2(\varepsilon) = \left(\frac{\varepsilon + \alpha\varepsilon - b}{2} \right)^2 + (\Delta_{ab}^2 - \tilde{V}^2), \quad (3.18)$$

$$\tilde{B}(\varepsilon) = \left[\frac{\varepsilon^2 - (\alpha + \alpha\varepsilon - b)^2}{2} \right]^2 + \tilde{V}^2 (\varepsilon + \alpha + \alpha\varepsilon - b)^2 + \Delta_{ab}^2 (\varepsilon - \alpha - \alpha\varepsilon + b)^2 + 4\tilde{V}^2 \Delta_{ab}^2, \quad (3.19)$$

$$\tilde{A}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2 + (\alpha + \alpha\varepsilon - b)^2}{2} + \Delta_{ab}^2 + \tilde{V}^2, \quad (3.20)$$

e

$$\tilde{\omega}_{1,2}(\varepsilon) = \sqrt{\tilde{A}(\varepsilon) \pm \sqrt{\tilde{B}(\varepsilon)}}. \quad (3.21)$$

onde $\tilde{T} \equiv k_B T/\mu_a$ é a temperatura normalizada, $\tilde{g} = g/\mu_a$ o acoplamento normalizado e a quantidade ρ_a é a densidade de estados no nível de Fermi da banda a e ω_D é a frequência de Debye. O lado direito da Eq. (3.17) define a função de gap.

Calculando as energias livres da fase supercondutora e da fase normal, obtemos uma transição de primeira ordem. Para este sistema, a energia livre é dada por

$$\Omega(\Delta_{ab}) = \Omega_o(0) + \frac{\Delta_{ab}^2}{\tilde{g}} - \frac{\tilde{T}}{2} \sum_{j=1}^2 \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\varepsilon \ln \left[1 + \cosh \left(\frac{\tilde{\omega}_j(\varepsilon)}{\tilde{T}} \right) \right], \quad (3.22)$$

Derivando Eq.(3.22) em relação ao parâmetro de ordem e igualando a zero (minimizando a energia), isto é., $\frac{\partial \Omega(\Delta_{ab})}{\partial \Delta_{ab}} = 0$, obtemos a equação de estado (3.17).

Para obter o diagrama de fase no plano $T - V$, em particular $\tilde{T} - \tilde{V}$, uma linha de transição de primeira ordem, usamos construção de Maxwell, que corresponde ao ponto de interseção onde a energia livre entre as fases são iguais. O ponto de interseção, neste caso, $\Omega_{SC}(\Delta_{ab}) = \Omega_N(0)$ da Eq. (3.22) é dado por

$$\frac{\Delta_{ab}^2}{\tilde{g}} = \frac{\tilde{T}}{2} \sum_{j=1}^2 \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\varepsilon \ln \left[\frac{1 + \cosh \left(\frac{\tilde{\omega}_j(\varepsilon)}{\tilde{T}} \right)}{1 + \cosh \left(\frac{\tilde{\omega}_j^o(\varepsilon)}{\tilde{T}} \right)} \right], \quad (3.23)$$

onde $\tilde{\omega}_j^o(\varepsilon) = \lim_{\Delta_{ab} \rightarrow 0} \{\tilde{\omega}_j(\varepsilon)\}$ é a relação de dispersão na fase normal.

Resolvendo as duas equações simultaneamente, Eqs. (3.17) and (3.23), para um dado valor de hibridização, obtivemos a linha de transição de primeira ordem $\tilde{T}_c^*(\tilde{V})$ quando $\Delta_{ab}^* \neq 0$, onde o $\Delta_{ab}^*(\tilde{V})$ corresponde à descontinuidade do parâmetro de ordem Δ_{ab} em $\tilde{T} = \tilde{T}_c^*(\tilde{V})$, enquanto na transição de segunda ordem, temos, $\Delta_{ab} = 0$ em $\tilde{T} = \tilde{T}_c$.

Para descrever um supercondutor não convencional, os férmions pesados, consideramos alguns valores típicos, $\tilde{g} = g/\mu_a = 0.25$ e a frequência de Debye, $\omega_D = 0.025$ [24]. Consideramos a densidade de estados $\rho_a = 0.08$, a razão entre as massas, $\alpha = 1/7$ e $b = 0.30$ [32]. A normalização pelo potencial químico da banda a é comparável a normalização pela energia de Fermi, uma vez que $\mu_a \simeq E_F$ na aproximação *BCS*. Portanto, $V/\mu_a \equiv V/E_F$, $g/\mu_a \equiv g/E_F$ e a razão $k_B T_c/\mu_a$ leva-nos a T_c/T_F [14].

Na Figura 3.2, apresentamos os resultados numéricos para o parâmetro de ordem Δ_{ab} como função da temperatura, $\tilde{T} \equiv k_B T/\mu_a$, para vários valores de hibridização \tilde{V} . Para \tilde{V} entre 0 e 0.05, o sistema apresenta uma transição de segunda ordem, isto é, neste intervalo \tilde{V} o parâmetro de ordem Δ_{ab} vai a zero continuamente. Para este regime, quando $T \rightarrow T_c$, verificamos o comportamento assintótico do parâmetro de ordem, semelhante ao caso *BCS*, $\Delta_{ab} \simeq (T - T_c)^\beta$, onde $\beta = 1/2$. Por outro lado, para $\tilde{V} \geq 0.05$ observamos uma descontinuidade no Δ_{ab} em $\tilde{T} = \tilde{T}_c^*(\tilde{V})$, significando uma transição de primeira ordem.

Para $V \geq 0.05$ a função de gap Δ_{ab} pode incluir uma solução instável, sendo que usamos a construção de Maxwell para eliminar esta instabilidade. Da descontinuidade do gap, foi obtida a temperatura de transição $\tilde{T}_c^*(\tilde{V})$. Observamos, que em ambas transições, \tilde{V} sempre age em detrimento da supercondutividade, em concordância com outros trabalhos [8],[33] e [34]. Em $T = 0$, observamos também que a hibridização não afeta o gap. Este comportamento não foi observado no caso intrabanda [35].

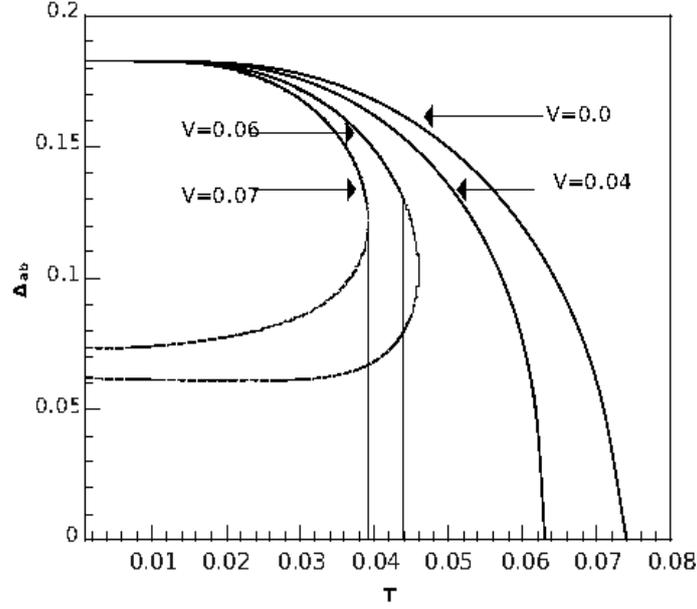


Figura 3.2: Comportamento do parâmetro de ordem Δ como função da temperatura T no modelo interbanda para $\tilde{g} = 0.25$ e vários valores de hibridização \tilde{V} . A linha pontilhada indica a instabilidade do sistema, que com a construção de Maxwell obtemos as descontinuidades dos parâmetros de ordem para $\tilde{V} = 0.06$ e $\tilde{V} = 0.07$.

Para se ter uma visão mais completa das transições de fase do sistema, mostramos na figura 3.3 os resultados numéricos do parâmetro de ordem Δ_{ab} como função da hibridização \tilde{V} para alguns valores de \tilde{T} . Em baixas temperaturas, exemplo, $\tilde{T} = 0$ e $\tilde{T} = 0.04$, determinamos a descontinuidade no parâmetro de ordem Δ_{ab} em $\tilde{V} = \tilde{V}_c^*(\tilde{T})$ (onde $\tilde{V}_c^*(0) \simeq 0.14$ e $\tilde{V}_c^*(0.04) \simeq 0.068$), significando uma transição de primeira ordem. Para valores maiores de temperaturas, exemplo, $\tilde{T} = 0.06$ e 0.07 , o parâmetro de ordem Δ_{ab} vai continuamente a zero quando $\tilde{V} = \tilde{V}_c(\tilde{T})$ (onde $\tilde{V}_c(0.06) \simeq 0.042$ and $\tilde{V}_c(0.07) \simeq 0.020$) caracterizando, assim, uma transição de segunda ordem. Similarmente ao comportamento de $\Delta_{ab} \times \tilde{T}$, em que ambas as transições, \tilde{T} atua em detrimento do estado supercondutor.

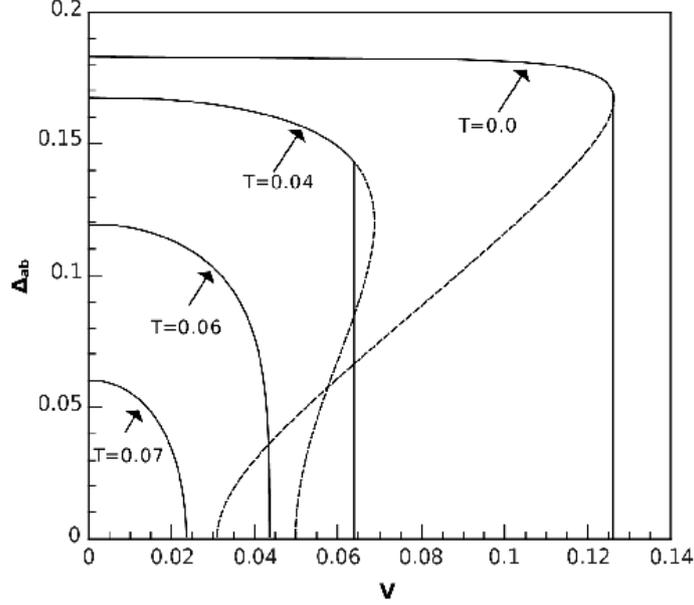


Figura 3.3: Comportamento do parâmetro de ordem Δ como função da hibridização \tilde{V} no modelo interbanda para $\tilde{g} = 0.25$ e vários valores de hibridização \tilde{V} . As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis.

Em geral, o efeito da hibridização no estado supercondutor fica claro em $T = 0$, conforme mostramos na Figura 3.3, que para dissociar o par, a hibridização deve ser muito maior que para temperaturas finitas. Para o primeiro cenário ($\Delta_{ab} \times \tilde{T}$), mesmo quando o sistema começa a apresentar um transição de primeira ordem com o aumento de \tilde{V} , Δ_{ab} permanece inalterado.

A partir de dados numéricos, analisamos a energias de excitações das quasipartículas $\omega_1(k)$ e $\omega_2(k)$ ao longo da linha de transição em $T = 0$ na Fig. 3.4. Observamos que no estado fundamental supercondutor para $V = 0$, $\omega_1(k) = \omega_2(k)$ para um dado $k < k_F^a$, e $\omega_2(k)$ torna-se zero em dois pontos para $k > k_F^a$. Entretanto para $\tilde{V} = 0.07$ o gap não muda. A relação de dispersão $\omega_1(k)$ mostra um mínimo em k_F^a e $\omega_2(k)$ ainda sendo zero em dois pontos para $k > k_F^a$.

A fim de analisar o comportamento tricrítico, expandimos a energia livre, equação (3.22) em séries de potência, em torno do parâmetro de ordem $\Delta_{ab} = 0$, ou seja,

$$\Omega(\Delta_{ab}) \simeq \Omega_o(0) + a_2(\tilde{T}, \tilde{V})\Delta_{ab}^2 + a_4(\tilde{T}, \tilde{V})\Delta_{ab}^4 + a_6(\tilde{T}, \tilde{V})\Delta_{ab}^6 + \dots, \quad (3.24)$$

onde $a_n(\tilde{T}, \tilde{V}) = \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial^n \Omega(\Delta_{ab})}{\partial \Delta_{ab}^n} \right)_{\Delta_{ab}=0}$ são os coeficientes de expansão de Landau.

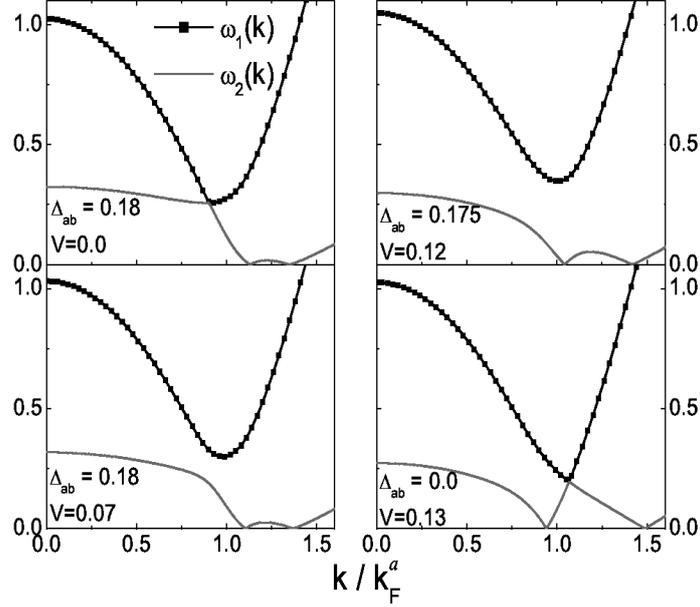


Figura 3.4: Comportamento do espectro das quasipartículas ao longo da transição de primeira ordem em $T=0$ para vários valores de V .

Para a transição de segunda ordem, a temperatura crítica $\tilde{T}_c(\tilde{V})$ é determinada pela condição $a_2(\tilde{T}_c, \tilde{V}) = 0$ e $a_4(\tilde{T}_c, \tilde{V}) > 0$, estável. Se $a_2(\tilde{T}, \tilde{V}) = 0$ e $a_4(\tilde{T}, \tilde{V}) < 0$, há uma solução instável quando $\Delta_{ab} = 0$. Por outro lado, a presença de uma instabilidade no sistema é uma indicação da possível existência de uma transição de primeira ordem, onde o ponto tricrítico está localizado em $(\tilde{T}_t, \tilde{V}_t)$ e é determinado pela condição $a_2(\tilde{T}_t, \tilde{V}_t) = 0$, $a_4(\tilde{T}_t, \tilde{V}_t) = 0$ e $a_6(\tilde{T}_t, \tilde{V}_t) > 0$. A partir destes resultados, vemos que existe um ponto tricrítico (TCP), que liga as linhas de transição de primeira e segunda ordem.

O diagrama de fase no plano $\tilde{T} - \tilde{V}$ é apresentado na Figura 3.5 com uma interação atrativa $\tilde{g} = 0.25$. Observamos que para sistemas não-híbridos a linha de transição é de segunda ordem (linha cheia) para altas temperaturas. Esta linha de segunda ordem termina no ponto tricrítico, localizado em $(\tilde{T}_t = 0.053, \tilde{V}_t = 0.052)$. Do PTC a baixas temperaturas, o sistema apresenta uma transição de primeira ordem (linha pontilhada). Para $T = 0$ a transição de fase termina em $V_c/\mu_a \simeq 0.137$. Nossos resultados para a hibridização $V/\mu_a \equiv V/E_F \sim 10^{-1}$ obtido do diagrama de fase na figura 3.5 é razoável, uma vez que concorda com compostos supercondutores de férmions pesados. Para a razão $T_c/T_F \sim 10^{-2}$ como pode ser visto no diagrama de fase, relaciona-se com os materiais de altas temperaturas, bem como alguns compostos de férmions pesados [36]. Obtivemos,

$T_c \sim 10^1 - 10^2$ K. Para os férmions pesados supercondutores $T_F \sim 10^1 - 10^2$ K levando a $T_c \sim 10^{-1} - 10^0$ K. Portanto, a descrição proposta neste trabalho nos habilitou a obtermos um valor razoável T_c/T_F em relação a resultados experimentais de sistemas não-convencionais.

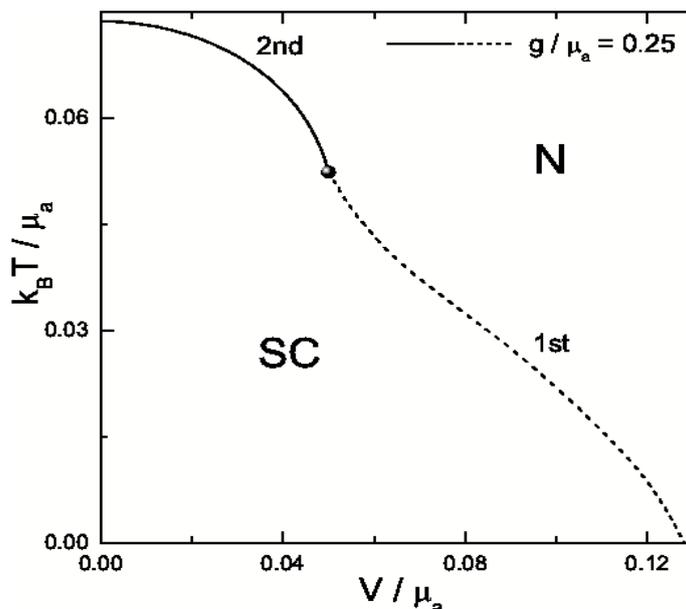


Figura 3.5: Diagrama de fase no plano T-V para $g = 0.25$. A linha cheia e a linha pontilhada correspondem às transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto preto corresponde ao ponto tricrítico.

Observamos um fenômeno interessante entre \tilde{T}_c e \tilde{V}_c no TCP: calculando a razão entre ambas as propriedades, obtivemos $\tilde{T}_t/\tilde{V}_t \simeq 1$. Explorando ainda mais, como na figura 3.6, definimos um novo parâmetro $r \equiv k_B T_c/V_c$ e plotamos em função da temperatura para vários valores de \tilde{g} . Observamos que o TCP é determinado quando $r \simeq 1$, e o \tilde{T}_t é encontrado para $T/T_c(V = 0) \sim 0.7$. Verificamos que existe um comportamento universal, independente do valor de \tilde{g} . Assim, a linha de transição de primeira ordem para segunda ordem ocorre quando o mecanismo de quebra de par devido a flutuações térmicas domina sobre o mecanismo devido a alterações na hibridização, que pode simular efeito de pressão. Além disso, observamos um comportamento universal no diagrama de fases. Observou-se também que mesmo para fortes interações atrativas do sistema, não temos um ponto crítico quântico supercondutor. Isto é porque não é possível observar uma transição de segunda ordem para $T = 0$. Estes resultados estão de acordo com

outros trabalhos, como foi apontado na Ref. [51]. Mesmo para fortes interações atrativas (limite BEC), o sistema interbanda não mostra uma fase de transição de segunda ordem, ao contrário do caso intrabanda que sempre exibe uma transição de segunda ordem.

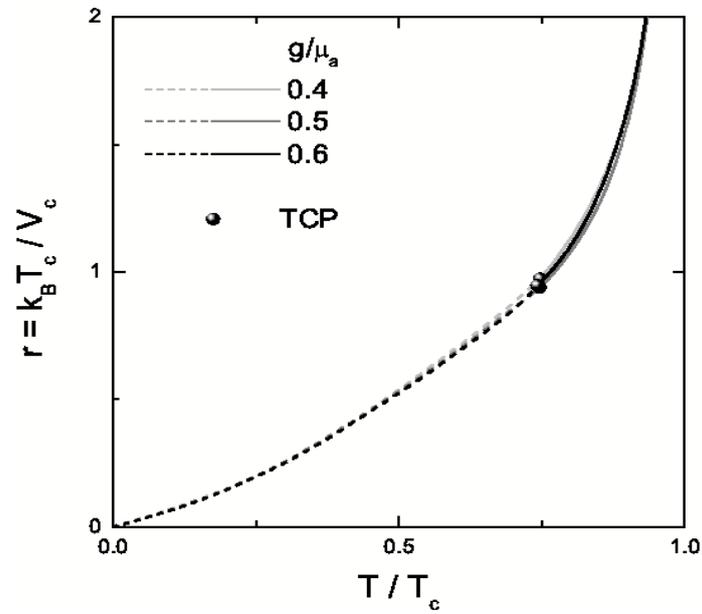


Figura 3.6: Comportamento da razão r em função da temperatura renormalizada T para vários valores de acoplamento g .

O modelo de duas bandas na presença de um campo magnético externo e hibridização

Neste capítulo estudamos a supercondutividade no modelo de duas bandas com campo magnético externo. A partir de 1960, abordou-se o efeito do campo magnético no supercondutor, conforme várias referências a seguir, [23] e [57], e verificou-se que o campo magnético atua em detrimento da supercondutividade. Observamos também que a transição de fase no supercondutor pode mudar de segunda para primeira ordem na presença deste campo [23]–[37]. Um número de supercondutores convencionais foram propostos como candidatos a apresentar uma transição de primeira ordem quando submetidos a um campo magnético crítico H_{c2} [37].

A transição supercondutora no composto $CeCoIn_5$, um férmion pesado, cujo $T_c = 2.3$ K, de primeira ordem ocorre em um campo magnético próximo ao campo crítico $h_{c2}(T = 0) = 4.95T$ quando o campo é aplicado ao longo da direção cristalográfica [001]. A mudança de transição para segunda ordem foi observada em campo nulo e baixos campos, ocorrendo em $T(H = 0) = 0.72$ K = $0.31T_c$ [38].

A ordem da transição normal-supercondutor (NS) nos dá informações de como ocorre a interação. Por exemplo, para um supercondutor do tipo I , a transição é de primeira ordem, devido ao desaparecimento abrupto do parâmetro de ordem. Já para um supercondutor do tipo II , a transição NS é de segunda ordem [16]. Neste caso, o campo magnético cria vórtices dentro do supercondutor. À medida que o campo magnético aumenta, esses vórtices aumentam continuamente, até um valor crítico de campo magnético H_{c2} , o qual

destrói a supercondutividade. A destruição da supercondutividade em supercondutores tipo *II* pode ocorrer também pelo efeito de Pauli [23], onde os spins tendem a se orientar na mesma direção do campo magnético externo. Mostrou-se que o efeito Pauli leva a uma transição de primeira ordem [39] e confirmada por [37]–[26].

Consideraremos um modelo de duas bandas onde as *quasipartículas* (elétron interagindo com milhares de elétrons e núcleos dos átomos do material) possuem massas efetivas diferentes. Uma banda é associada à banda estreita das *quasipartículas* pesadas e a outra, à banda larga, associada aos elétrons de condução não correlacionados. Esse tipo de modelo é ideal para descrever compostos de *Ce*, *Yb* e *U*, onde a banda estreita é formada por camadas não preenchidas dos elétrons *f* e a banda larga descreve as *quasipartículas* *s*, *p* ou *d*. No caso dos pnictídeos de ferro, a banda estreita é formada pelos elétrons *d*. Estudamos o modelo de forma completa levando em consideração as interações intrabanda e interbanda com campo magnético externo, além do termo de hibridização. As origens microscópicas dessas interações não são especificadas, pois suas relativas importâncias variam de sistema para sistema.

O motivo de incluir a hibridização explicitamente no Hamiltoniano é que ela pode ser alterada diretamente pela pressão externa, dopagem e, conseqüentemente, pode ser usada como um parâmetro de controle para explorar o diagrama de fases desses sistemas, como, por exemplo, ser usado na descrição de pontos críticos quânticos supercondutores (PCQS), separando a fase normal da fase supercondutora. Este mesmo modelo pode ser usado para descrever estados supercondutores com diferentes tipos de simetrias [40]. Nos sistemas sólidos o parâmetro mais comum de controle é a dopagem, pressão ou campo magnético. Em particular, a razão da hibridização com a largura da banda pode ser controlada pela pressão externa. Embora seja possível que a magnitude da interação dependa da hibridização, seu efeito mais importante de fato é transferir *quasipartículas* entre as diferentes bandas renormalizadas. Para a supercondutividade intrabanda, que geralmente domina nos metais [17], o efeito da hibridização é enfraquecer a interação atrativa e eventualmente destruir o estado supercondutor. De forma simples, é como se o efeito da hibridização V que estudamos fosse similar à dopagem, porém sem efeitos de desordem.

4.1 O modelo

O modelo é caracterizado por elétrons da banda s e elétrons da banda d . Os elétrons apresentam energia cinética em suas respectivas bandas. As funções de onda dos elétrons se sobrepõem, caracterizando uma hibridização. Admitimos a formação de pares entre elétrons d [41] e também acrescentamos um campo magnético externo H , a fim de analisar os seus efeitos na supercondutividade. Para resolver o modelo proposto, foi usado a técnica das funções de Green, a qual consiste em obter as funções de correlações do sistema, que no nosso caso está relacionada com o gap supercondutor. O Hamiltoniano proposto para descrever o sistema foi o seguinte:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^s c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij}^d d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^d n_{i-\sigma}^d + \sum_{i\sigma} V_{ii} (c_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + d_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \quad (4.1)$$

$$+ H \sum_{i\sigma} \sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + H \sum_{i\sigma} \sigma d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$$

onde t_{ij}^s (t_{ij}^d) representa o *hopping*, o qual está associado à energia cinética das quasipartículas quando transitam do sítio i para o sítio j nos estados s e d . $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) e $d_{i\sigma}^\dagger$ ($d_{i\sigma}$) são os operadores de criação (aniquilação) dos elétrons s e d , respectivamente. V é o termo de hibridização local, U o termo de interação local atrativo efetivo intrabanda e H é o campo magnético externo. Usamos $\frac{U}{2}$ no Hamiltoniano por conveniência, para não ser necessário carregar um fator 2 nos cálculos. Os mecanismos por trás das interações atrativas não serão o foco do trabalho, mas é de conhecimento que em sistemas supercondutores convencionais elas podem ter origem nos fônons, como indica o efeito isotópico nesses materiais, observado, por exemplo, no caso do mercúrio (Hg) [42], nos supercondutores de alta temperatura crítica e nos compostos supercondutores férmions pesados. Os mecanismos por trás das interações atrativas estão relacionados com flutuações de carga ou de spin [43, 44]. A figura 4.1 mostra o nosso modelo resumidamente.

Modelos multibandas, em particular de duas bandas, são usados para descrever uma larga variedade de sistemas, como metais de transição [45], cupratos [46], correlações excitônicas com supercondutividade [34], sistemas férmions pesados [47] e recentemente foi visto que pode ser usado para descrever a supercondutividade nos novos supercondutores baseados em Fe [48], como $FeAs$ e o $FeSe$ [49].

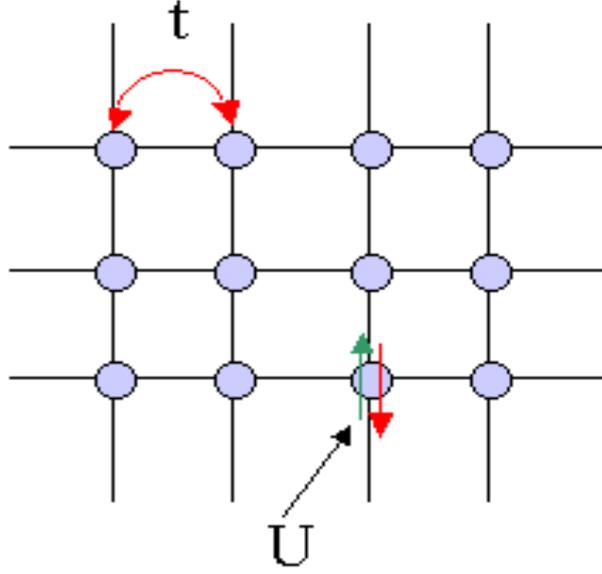


Figura 4.1: Figura representativa do nosso modelo. O termo t representa o *hopping*, o qual está associado à energia cinética das quasipartículas nos estados s e d . O termo U representa a energia de interação entre quasipartículas de momentos k e $-k$ e de spins opostos, responsáveis pela formação do par. H é o campo magnético aplicado ao longo da direção z .

4.2 As equações de movimento

Para obter os parâmetros de ordem supercondutores intra e interbanda e a equação para o número, são calculadas as equações de movimento para os propagadores $\ll d_{j-\sigma}^\dagger; d_{i\sigma}^\dagger \gg$, $\ll c_{j-\sigma}^\dagger; d_{i\sigma}^\dagger \gg$, $\ll d_{j\sigma}; d_{i\sigma}^\dagger \gg$ e $\ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma}^\dagger \gg$. Para calculá-las foi utilizada a expressão geral para a equação de movimento das funções de Green para férmions dada por

$$\omega \ll A; B \gg_\omega = \frac{1}{2\pi} \langle \{A, B\} \rangle + \ll [A, \mathcal{H}]; B \gg \quad (4.2)$$

onde A, B são operadores fermiônicos e \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema.

Usando as relações de comutação para férmions:

$$\begin{aligned} \{d_{i\sigma}, d_{j\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'} \\ \{d_{i\sigma}, d_{j\sigma'}\} &= \{d_{i\sigma}^\dagger, d_{j\sigma'}^\dagger\} = 0 \end{aligned}$$

$$\{d_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = \{d_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\} = \{d_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\} = \{d_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}\} = 0$$

calculamos a nossa primeira correlação, $\ll d_{j\sigma}; d_{i\sigma'}^\dagger \gg$, por meio da relação

$$\omega \ll d_{j\sigma}; d_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{1}{2\pi} \left\langle \left\{ d_{j\sigma}, d_{i\sigma'}^\dagger \right\} \right\rangle + \ll [d_{j\sigma}, \mathcal{H}]; d_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.3)$$

Resolvendo 4.3, usando a relação de anti-comutação, temos:

$$\left\{ d_{j\sigma}, d_{i\sigma'}^\dagger \right\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (4.4)$$

e

$$\begin{aligned} [d_{j\sigma}, \mathcal{H}] &= \sum_{ij\sigma} t_{ij}^s [d_{j\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}] + \sum_{ij\sigma} t_{ij}^d [d_{j\sigma}, d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] \\ &- \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} [d_{j\sigma}, n_{i\sigma}^d n_{i-\sigma}^d] + \sum_{i\sigma} V_{ii} [d_{j\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}] + \sum_{i\sigma} V_{ii} [d_{j\sigma}, d_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}] \\ &+ H \sum_{i\sigma} \sigma [d_{j\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}] + H \sum_{i\sigma} \sigma [d_{j\sigma}, d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}] \end{aligned} \quad (4.5)$$

Resolvendo os comutadores, temos que o primeiro, terceiro e quinto termos do segundo membro são iguais a zero. Portanto,

$$\begin{aligned} \omega \ll d_{j\sigma}; d_{i\sigma'}^\dagger \gg &= \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} + \sum_j t_{ij}^s \ll d_{j\sigma}; d_{i\sigma'}^\dagger \gg - U \ll n_{j-\sigma} d_{j\sigma}; d_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ &+ \sum_j V_{ii} \ll c_{j\sigma}; d_{i\sigma'}^\dagger \gg + H \sigma \ll d_{j\sigma}; d_{i\sigma'}^\dagger \gg, \end{aligned} \quad (4.6)$$

Usando a transformada de Fourier, podemos relacionar os *hoppings* no espaço das posições, $(t_{i,j}^A$ e $t_{i,j}^B$), às energias relativas às duas bandas no espaço dos momentos (E_s e E_d).

$$E_{s,d} = \sum_j t_{ij}^{s,d} e^{ik(r_i - r_j)} \quad (4.7)$$

Da mesma forma com os operadores no espaço das posições, passando os mesmos para o espaço dos momentos, ou seja,

$$d_{k\sigma}^\dagger = \sum_{j\sigma} e^{-ikr_j} d_{j\sigma}^\dagger \quad (4.8)$$

$$d_{k\sigma} = \sum_{j\sigma} e^{ikr_j} d_{j\sigma} \quad (4.9)$$

$$c_{k\sigma}^\dagger = \sum_{j\sigma} e^{-ikr_j} c_{j\sigma}^\dagger \quad (4.10)$$

$$c_{k\sigma} = \sum_{j\sigma} e^{ikr_j} c_{j\sigma} \quad (4.11)$$

substituindo na equação de movimento, obtemos:

$$\begin{aligned} \omega \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg = \frac{1}{2\pi} + E_d \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg + V \ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg + \frac{U}{N} \sum_{k''} \ll d_{k\sigma} d_{-k-\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\ + \sigma H \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \end{aligned} \quad (4.12)$$

ou reescrito na forma

$$(\omega - E_d - \sigma H) \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg = \frac{1}{2\pi} + V \ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg + \frac{U}{N} \sum_{k''} \ll d_{k\sigma} d_{-k-\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \quad (4.13)$$

Vimos que, para determinarmos a função de Green $\ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg$, foram geradas novas funções, $\ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg$ e $\ll d_{k\sigma} d_{-k-\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg$. Usamos a aproximação de Hatree-Fock para desacoplar esta última Função de Green de tal forma a ter as funções de correlação do tipo $\langle d_{-k-\sigma} d_{k\sigma} \rangle$ e $\langle d_{k\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}^\dagger \rangle$, pois em sistemas supercondutores a energia dos pares ligados (gap) é uma variável do problema. Fazendo a aproximação,

$$\ll d_{k\sigma} d_{-k-\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \simeq \langle d_{-k-\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma} \rangle \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg - \langle d_{-k-\sigma} d_{k\sigma} \rangle \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg$$

substituindo esta aproximação na equação 3.6, obtemos

$$\begin{aligned}
\left(\omega - E_d - \sigma H - \frac{U}{N} \sum_k \langle d_{-k-\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma} \rangle \right) \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg &= \frac{1}{2\pi} + V \ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\
&- \frac{U}{N} \sum_k \langle d_{-k-\sigma} d_{k\sigma} \rangle \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Definindo

$$\Delta = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle d_{-k-\sigma}^\dagger d_{k\sigma}^\dagger \rangle \tag{4.15}$$

$$n_s = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{-k-\sigma}^\dagger c_{-k-\sigma} \rangle$$

$$n_{d\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k \langle d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \langle d_{-k-\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma} \rangle$$

Assumindo simetria translacional, isto é, $n_{d\sigma} = n_{d-\sigma} = n$, ficamos

$$(\omega - E_d - \sigma H - Un) \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg = \frac{1}{2\pi} + V \ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg - U\Delta \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg \tag{4.16}$$

Usando, novamente, a equação de movimento da FG, obtemos uma nova equação,

$$\begin{aligned}
\omega \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg &= -E_d \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg - \frac{U}{N} \sum_{k'} \ll d_{k\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}^\dagger d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\
&- V \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg + \sigma H \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg,
\end{aligned} \tag{4.17}$$

desacoplando $\ll d_{k\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}^\dagger d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg$:

$$\ll d_{k\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}^\dagger d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \simeq \langle d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma} \rangle \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg - \langle d_{k\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}^\dagger \rangle \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg$$

então

$$\begin{aligned}
\omega \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg &= -E_d \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma'}^\dagger \gg - \frac{U}{N} \sum_k \langle d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma} \rangle \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\
&+ \frac{U}{N} \sum_k \langle d_{k\sigma}^\dagger d_{-k-\sigma}^\dagger \rangle \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\
-V \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg &+ \sigma H \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.18)
\end{aligned}$$

ou reescrito na forma

$$(\omega + E_d - \sigma H + Un) \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg = U\Delta \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg - V \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg, \quad (4.19)$$

semelhantemente, calculamos $\ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg$:

$$(\omega - E_s - \sigma H) \ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg = V \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg, \quad (4.20)$$

e $\ll c_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg$ dado por

$$(\omega + E_s - \sigma H) \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg = -V \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg, \quad (4.21)$$

Na determinação das funções de Green, observamos que novas funções são geradas, mas, agora, temos quatro equações acopladas, isto é, um sistema linear de equações. A partir deste sistema, vamos resolvê-lo a fim de obtermos as funções de Green.

Chamaremos,

$$\begin{aligned}
x &= \ll d_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\
y &= \ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\
z &= \ll c_{k\sigma}; d_{k\sigma}^\dagger \gg \\
w &= \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg
\end{aligned}$$

Passando para forma matricial o sistema de equações

$$\begin{pmatrix}
(\omega - \sigma H - \tilde{E}_d) & U\Delta & -V & 0 \\
-U\Delta & (\omega - \sigma H + \tilde{E}_d) & 0 & V \\
-V & 0 & (\omega - \sigma H - \tilde{E}_s) & 0 \\
0 & V & 0 & (\omega - \sigma H + \tilde{E}_s)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x \\
y \\
z \\
w
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\frac{1}{2\pi} \\
0 \\
0 \\
0
\end{pmatrix} \quad (4.22)$$

onde $\tilde{E}_d = E_d + Un$ e $\tilde{E}_s = E_s - \sigma H$. Usaremos a regra de Cramer, para isto definimos a matriz principal:

$$\begin{pmatrix} (\omega - \sigma H - \tilde{E}_d) & U\Delta & -V & 0 \\ -U\Delta & (\omega - \sigma H + \tilde{E}_d) & 0 & V \\ -V & 0 & (\omega - \sigma H - \tilde{E}_s) & 0 \\ 0 & V & 0 & (\omega - \sigma H + \tilde{E}_s) \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

onde o determinante da matriz acima é dado por

$$\begin{aligned} D(\omega) = & w^4 - 4\sigma H w^3 + \left(-\tilde{E}_s^2 - U^2\Delta^2 + 6\sigma^2 H^2 - 2V^2 - \tilde{E}_d^2\right) w^2 \\ & + \left(2\tilde{E}_d^2\sigma H + 2U^2\Delta^2\sigma H + 4V^2\sigma H - 4\sigma^3 h^3 + 2\sigma H\tilde{E}_s^2\right) w \\ & + \tilde{E}_d^2\tilde{E}_s^2 - 2\sigma^2 H^2 V^2 - \tilde{E}_d^2\sigma^2 H^2 + U^2\Delta^2\tilde{E}_s^2 - 2\tilde{E}_d V^2\tilde{E}_s - U^2\Delta^2\sigma^2 H^2 + \sigma^4 H^4 - \sigma^2 h^2\tilde{E}_s^2 + V^4 \end{aligned} \quad (4.24)$$

Agora, precisamos obter o determinante da matriz:

$$\begin{pmatrix} (\omega - \sigma H - \tilde{E}_d) & 1/2\pi & -V & 0 \\ -U\Delta & 0 & 0 & V \\ -V & 0 & (\omega - \sigma H - \tilde{E}_s) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\omega - \sigma H + \tilde{E}_s) \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

cujo determinante vale:

$$Dy(\omega) = -\frac{U\Delta \left(-w + \sigma H + \tilde{E}_s\right) \left(w - \sigma H + \tilde{E}_s\right)}{2\pi} \quad (4.26)$$

Então, da regra de Cramer, $y = \frac{Dy(\omega)}{D(\omega)}$, obtendo assim

$$\ll d_{-k-\sigma}^\dagger; d_{k\sigma}^\dagger \gg = -\frac{U\Delta \left(-w + \sigma H + \tilde{E}_s\right) \left(w - \sigma H + \tilde{E}_s\right)}{2\pi D(\omega)} \quad (4.27)$$

4.3 Energias de excitação

Os pólos das funções de Green descrevem as energias de excitação do sistema, e são obtidos fazendo nulo o denominador da equação (4.27). Assim, calculadas as raízes do polinômio $D(\omega)$, reescrevemos as energias, de tal forma que possamos usar o teorema do salto futuramente.

$$2\pi D(\omega) = (\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4), \quad (4.28)$$

sendo

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \sigma H + \sqrt{A_k + 2\sqrt{B_k} + (4V^2 + 2\tilde{E}_d^2)}, \\ \omega_2 &= \sigma H + \sqrt{A_k - 2\sqrt{B_k} + (4V^2 + 2\tilde{E}_d^2)}, \\ \omega_3 &= \sigma H - \sqrt{A_k + 2\sqrt{B_k} + (4V^2 + 2\tilde{E}_d^2)} \end{aligned}$$

e

$$\omega_4 = \sigma H - \sqrt{A_k - 2\sqrt{B_k} + (4V^2 + 2\tilde{E}_d^2)}$$

sendo

$$A_k = 2U^2\Delta^2 + 2\tilde{E}_s^2$$

e

$$\begin{aligned} B_k &= -2U^2\Delta^2\tilde{E}_s^2 + 8V^2\tilde{E}_d\tilde{E}_s - 2\tilde{E}_d^2\tilde{E}_s^2 + 4\tilde{E}_s^2V^2 \\ &\quad + \tilde{E}_s^4 + 4U^2\Delta^2V^2 + 2U^2\Delta^2\tilde{E}_d^2 + \tilde{E}_d^4 + U^4\Delta^4 + 4V^2\tilde{E}_d^2 \end{aligned} \quad (4.29)$$

O objetivo é calcular os propagadores e obter as funções de correlação. É conveniente simplificar o denominador dos propagadores em forma de frações parciais. De forma geral, os propagadores têm a forma

$$\ll B; A \gg = \frac{\mathcal{F}_k(\omega)}{(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4)}, \quad (4.30)$$

onde $\mathcal{F}_k(\omega)$ é específico de cada propagador.

Usando frações parciais e o teorema do salto (ver apêndice A), obtemos a função de correlação:

$$\begin{aligned}
\langle d_{-k-\sigma}^\dagger d_{k\sigma}^\dagger \rangle = & \frac{1}{2(\omega_1 - \omega_3)} \left[\frac{\mathcal{F}_k(\omega_1) f_{FD}(\omega_1)}{(\omega_1 - \omega_2)(\omega_1 - \omega_4)} - \frac{\mathcal{F}_k(\omega_3) f_{FD}(\omega_3)}{(\omega_3 - \omega_2)(\omega_3 - \omega_4)} \right] \\
& + \frac{1}{2(\omega_2 - \omega_4)} \left[\frac{\mathcal{F}_k(\omega_2) f_{FD}(\omega_2)}{(\omega_2 - \omega_1)(\omega_2 - \omega_3)} - \frac{\mathcal{F}_k(\omega_4) f_{FD}(\omega_4)}{(\omega_4 - \omega_1)(\omega_4 - \omega_3)} \right] \quad (4.31)
\end{aligned}$$

A fim de obter a equação de *gap*, a qual está relacionada com $\langle d_{-k-\sigma}^\dagger d_{k\sigma}^\dagger \rangle$, o propagador é

$$\mathcal{F}_k(\omega) = U\Delta \left(-w + \sigma H + \tilde{E}_s \right) \left(w - \sigma H + \tilde{E}_s \right),$$

e $f_{FD}(\omega) = \frac{1}{e^{(\frac{\omega}{T})} + 1}$ é a função de Fermi-Dirac e σ corresponde ao spin assumindo valores +1 e -1.

Com (B.5), especificando as funções $\mathcal{F}_k(\omega)$, calculamos a função de correlação e, em seguida, obtemos a equação do *gap* dado por

$$\frac{1}{U\rho} = \frac{1}{(\omega_1 - \omega_3)} \left[\frac{\left(-w_1 + H + \tilde{E}_s \right) \left(w_1 - H + \tilde{E}_s \right) f_{FD}(\omega_1)}{(\omega_1 - \omega_2)(\omega_1 - \omega_4)} \right] \quad (4.32)$$

$$- \frac{\left(-w_2 + H + \tilde{E}_s \right) \left(w_2 - H + \tilde{E}_s \right) f_{FD}(\omega_3)}{(\omega_3 - \omega_2)(\omega_3 - \omega_4)} \right] \quad (4.33)$$

$$+ \frac{1}{(\omega_2 - \omega_4)} \left[\frac{\left(-w_3 + H + \tilde{E}_s \right) \left(w_3 - H + \tilde{E}_s \right) f_{FD}(\omega_2)}{(\omega_2 - \omega_1)(\omega_2 - \omega_3)} \right] \quad (4.34)$$

$$- \frac{\left(-w_4 + H + \tilde{E}_s \right) \left(w_4 - H + \tilde{E}_s \right) f_{FD}(\omega_4)}{(\omega_4 - \omega_1)(\omega_4 - \omega_3)} \right] \quad (4.35)$$

onde $f_{FD}(\omega_{1,2,3,4}) = \frac{1}{e^{(\frac{\omega_{1,2,3,4}}{T})} + 1}$.

Diante da equação de *gap*, obtemos as propriedades do sistema, resolvendo-a numericamente. No que segue, será considerado que as bandas são homotéticas, ou seja, elas são relacionadas entre si na forma $E_d = \alpha E_s$, onde $\alpha = \frac{m}{m_d}$ é a razão entre as massas efetivas das quasi-partículas nas duas bandas. Como a massa efetiva das quasi-partículas relacionadas com a banda estreita é geralmente maior do que a massa da banda larga (ou de condução), tem-se que $\alpha < 1$. A energia de excitação de uma única partícula é escolhida

como sendo parabólica (tipo partícula livre), $E_s = \frac{k^2}{2m} - \mu$. As larguras das bandas, larga s e estreita d , são consideradas como W e D respectivamente, onde a relação entre elas é dada por $D = \alpha W$.

Com o campo magnético aplicado verificamos uma transição de primeira ordem, o campo magnético polariza o spin, devido ao efeito Zeeman [77]; isso é o contrário do resultado obtido por BCS, uma vez que lá aparecem vórtices e, conseqüentemente, uma transição de segunda ordem.

Na figura 4.2 mostramos o parâmetro de ordem Δ *versus* o campo magnético aplicado H para vários valores de T . Observamos que o parâmetro de ordem apresenta uma dependência com a temperatura e o campo magnético aplicado. Para $T = 0$, observamos uma transição de primeira ordem, uma vez que o parâmetro de ordem cai abruptamente para altos valores de campo magnético aplicado. Já para valores finitos de T , observamos uma transição de segunda ordem. Vimos também que, para valores maiores de T , em $H = 0$, há um decréscimo no parâmetro de ordem, isto é, a temperatura contribui para diminuição do estado superconductor, conforme já visto na teoria BCS.

Na figura 4.3, mostramos a dependência do parâmetro de ordem Δ em função da temperatura para vários valores da hibridização V e a campo magnético nulo. Conforme resultados já obtidos anteriormente [33], [51] e [52]. Verificamos que, quanto maior a hibridização V , menor é o parâmetro de ordem, e conseqüentemente a diminuição de T_c .

Na figura 4.4 mostramos a dependência do parâmetro de ordem em função da temperatura, para vários valores de V e a campo magnético $H = 0.1$. Verificou-se que a hibridização V atua no sentido de destruir a supercondutividade [33], [51]. Observamos que para $H = 0.1$, o T_c diminuiu, concordando que o campo tende a destruir a supercondutividade.

Já na figura 4.5 mostramos a dependência do parâmetro de ordem Δ em função da temperatura T para vários valores de V e a campo magnético $H = 0.2$. Observamos que para $H = 0.2$, o T_c é ainda menor do que para $H = 0.1$. Mostramos também que para um campo magnético maior, há uma redução do Δ em $T = 0$.

Já na figura 4.6 mostramos a dependência do parâmetro de ordem Δ em função da hibridização V para vários valores de H e $T = 0$. Mostramos que para $H = 0$ temos uma transição de segunda ordem, conforme previsto pela teoria BCS, e para valores de campo magnéticos não-nulos temos uma transição de primeira ordem, verificada pela construção

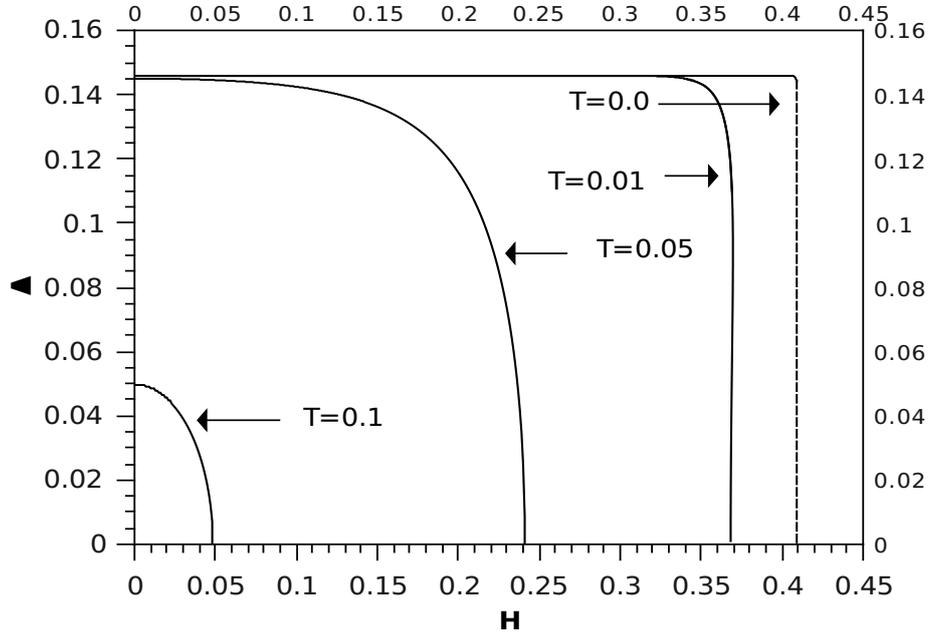


Figura 4.2: Parâmetro de ordem Δ versus campo magnético aplicado H para vários valores de T . Para $T = 0$ temos uma transição de primeira ordem, já para T diferente de zero, a transição é de segunda ordem.

de Maxwell. Vimos também que à medida que aumentamos o campo magnético H a hibridização crítica diminui.

Na figura 4.7 mostramos a dependência do parâmetro de ordem Δ em função da temperatura T para vários valores de H . O aumento do campo magnético H faz com que o T_c diminua, havendo uma competição entre o campo magnético e a temperatura crítica.

Na figura 4.8 mostramos a dependência do parâmetro de ordem em função da hibridização V para vários valores de T . O aumento da temperatura diminui o gap superconductor. Observamos que quanto maior a temperatura, menor é a hibridização crítica.

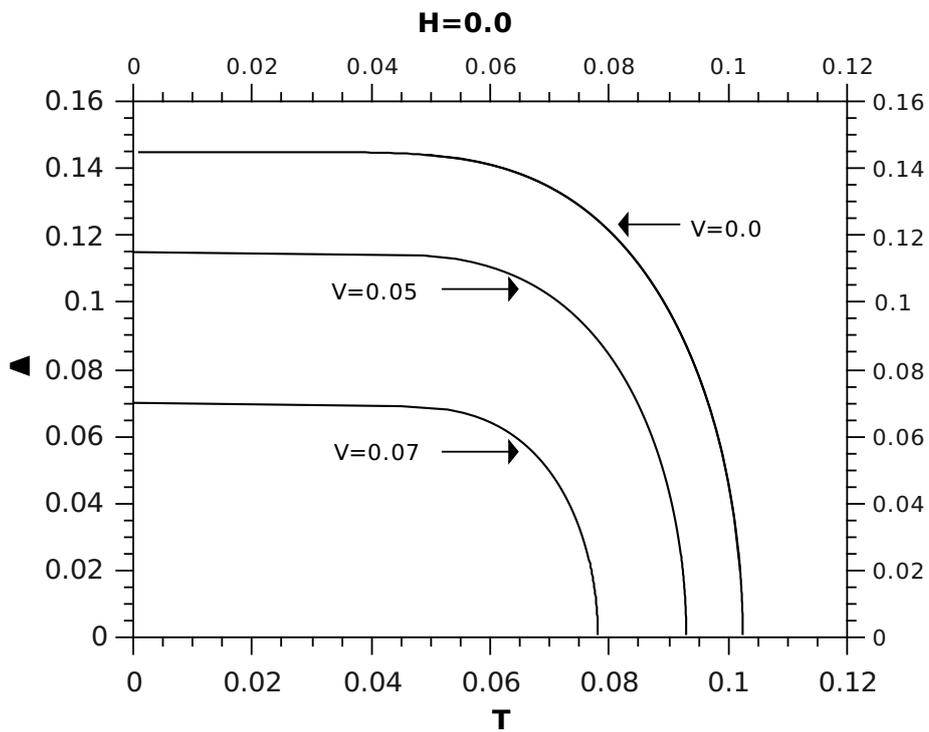


Figura 4.3: Parâmetro de ordem Δ versus temperatura T para vários valores de V e campo magnético nulo. Vimos também que a hibridização V contribui para a redução do parâmetro de ordem.

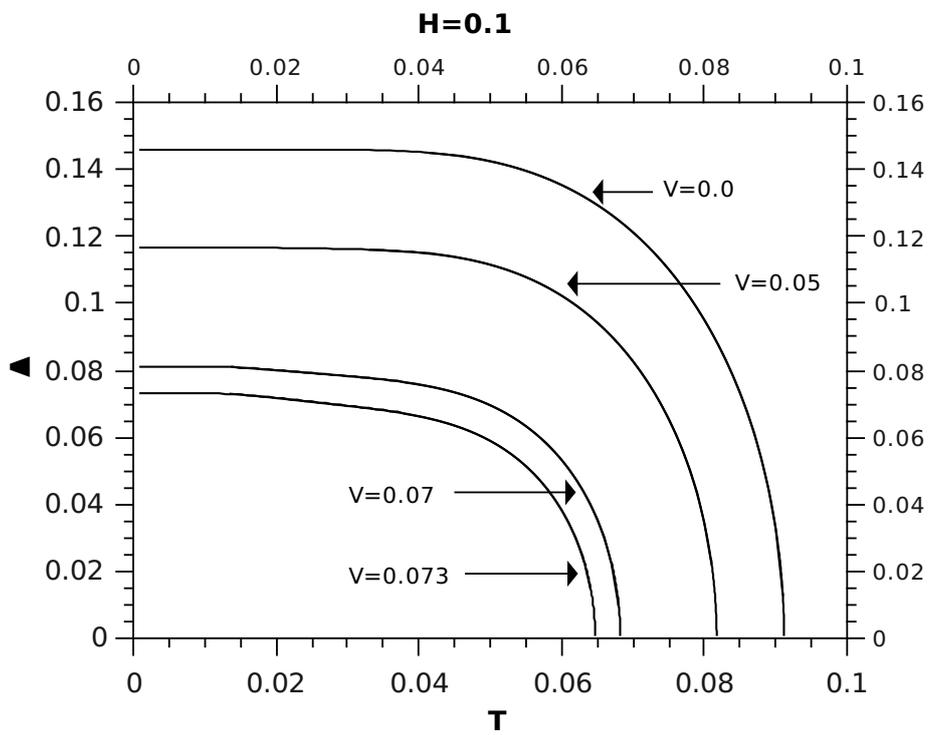


Figura 4.4: Dependência do parâmetro de ordem em função da temperatura para vários valores de V e a campo magnético $H = 0.1$.

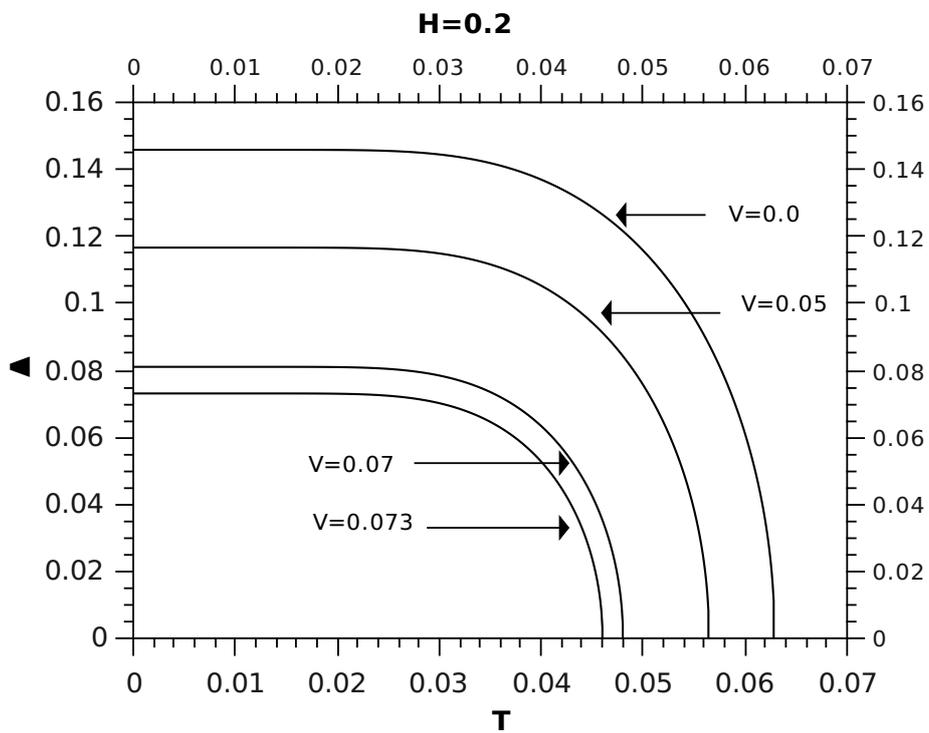


Figura 4.5: Dependência do parâmetro de ordem em função da temperatura, para vários valores de V e a campo magnético $H = 0.2$.

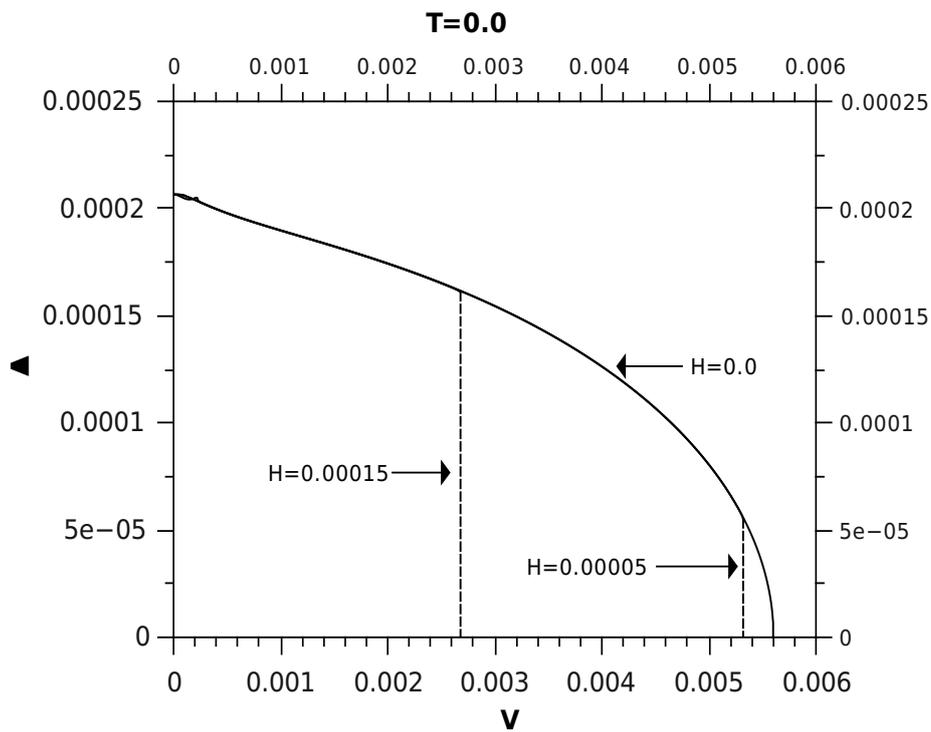


Figura 4.6: dependencia do parâmetro de ordem Δ em função da hibridização V para vários valores de H . Mostramos que para $H = 0$ temos uma transição de segunda ordem, conforme previsto pela teoria BCS. Para valores de campo magnéticos não-nulo temos uma transição de primeira ordem, verificada pela construção de Maxwell.

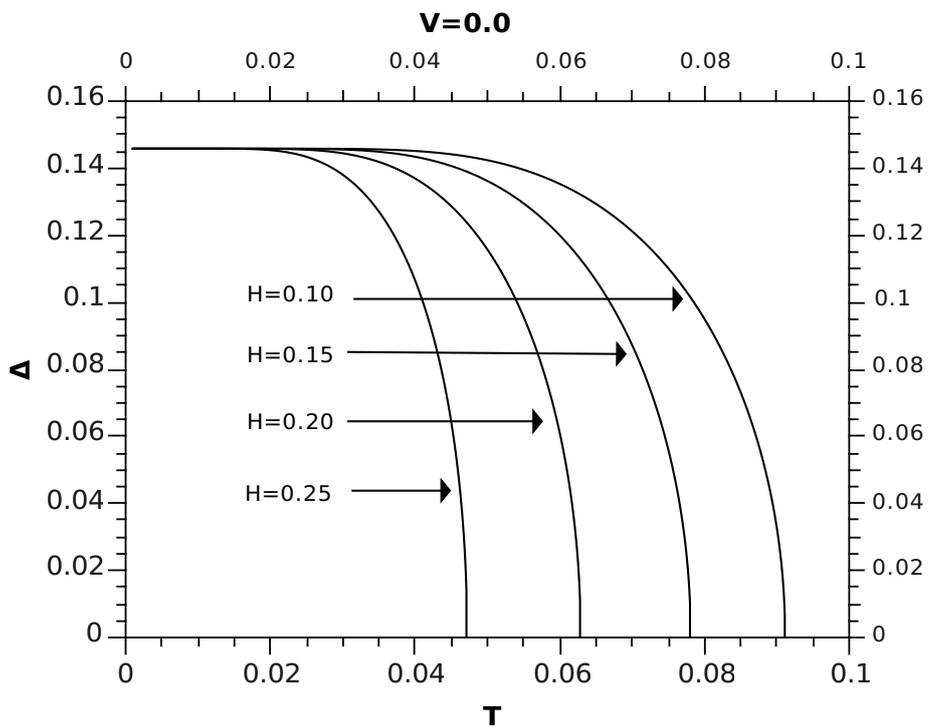


Figura 4.7: Dependência do parâmetro de ordem Δ em função da temperatura T para vários valores de H . O aumento do campo magnético H faz com que o T_c diminua, havendo uma competição entre o campo magnético e a temperatura crítica.

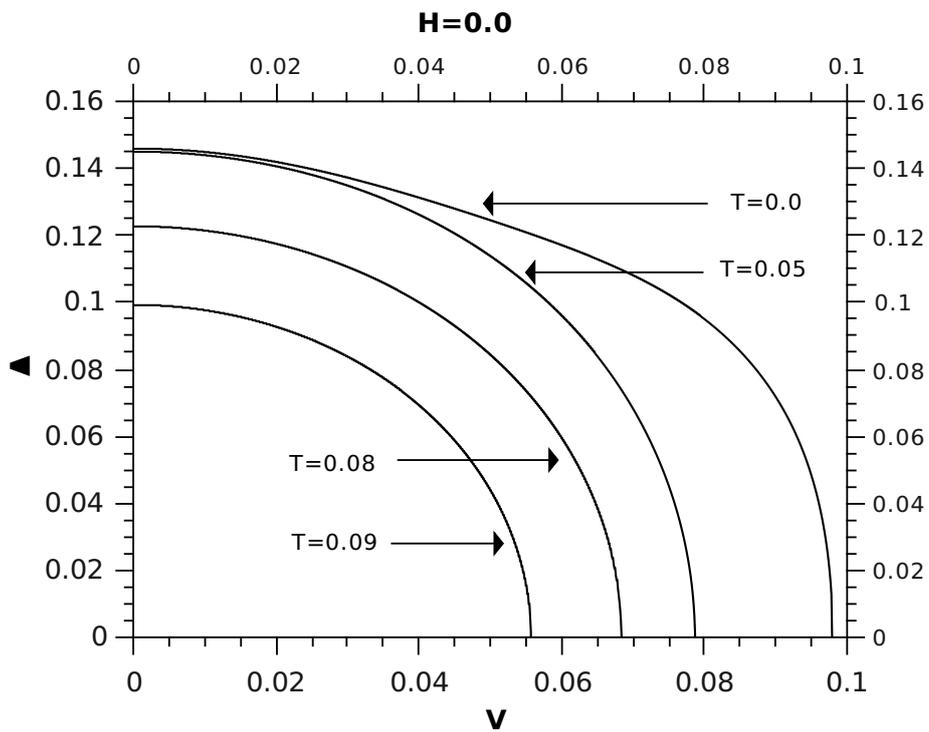


Figura 4.8: Parâmetro de ordem Δ versus hibridização V a campo nulo e vários valores de temperatura T . Do gráfico verificamos que a hibridização crítica V_c diminui com o aumento da temperatura.

Propriedades Termodinâmicas no modelo de Multibandas a campo nulo

Neste capítulo estudaremos as propriedades termodinâmicas de um supercondutor em função da hibridização V . Na termodinâmica aqui estudada, verificamos as causas e os efeitos da temperatura nas propriedades do supercondutor, tais como energia livre, entropia e calor específico a campo magnético nulo. Estas grandezas nos dão informações sobre as transições de fase supercondutora.

O calor específico é uma grandeza física intensiva que define a variação térmica do material ao receber determinada quantidade de calor. Quanto menor o calor específico de uma substância, mais facilmente ela pode sofrer variações em sua temperatura. O calor específico é a propriedade de equilíbrio que melhor evidencia a existência de um fenômeno de transição de fase eletrônica em T_c e, por esta razão, é muito utilizado para estudar as propriedades termodinâmicas dos sistemas supercondutores[50]. Sabemos que uma transição de fase descontínua é acompanhada de um salto descontínuo da entropia, que é proporcional ao calor latente.

A energia livre supercondutora é dada por [24]

$$f = -2 \int_{-\omega_D}^{\omega_D} T \left[\ln \left(2 \cosh \left(\frac{\omega_1}{2T} \right) \right) + \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\omega_2}{2T} \right) \right) \right] + \Delta^2 \quad (5.1)$$

onde ω_D para um supercondutor típico é da ordem 0.025. Portanto, temos:

$$f = -2 \int_{-0.025}^{0.025} T \left[\ln \left(2 \cosh \left(\frac{\omega_1}{2T} \right) \right) + \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\omega_2}{2T} \right) \right) \right] + \Delta^2.$$

A entropia é obtida diretamente por derivação da energia livre

$$s = -\frac{df}{dT}$$

enquanto o calor específico

$$c = T \frac{ds}{dT}$$

Nas figuras 5.1 e 5.2, apresentamos a energia livre em função da temperatura para $V = 0$ e $V = 0.005$.

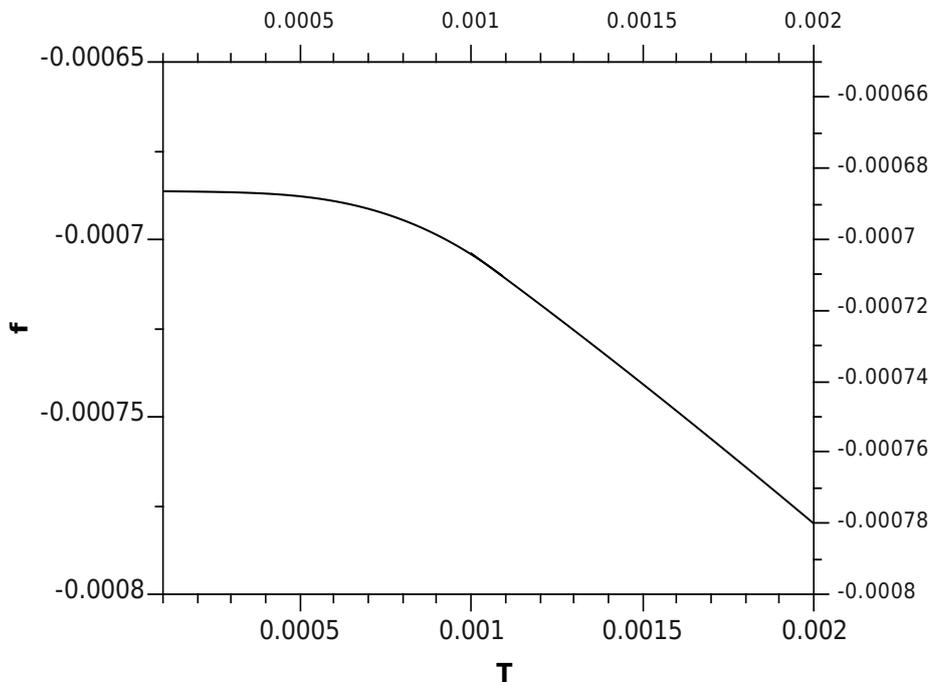


Figura 5.1: Energia livre f versus temperatura T para hibridização $V = 0$ sem campo magnético aplicado.

Já nas figuras 5.3 e 5.4 apresentamos a entropia em função da temperatura do estado supercondutor.

Nas figuras 5.5 e 5.6, mostramos o calor específico em função da temperatura para hibridização V nula e para $V = 0.005$. Resultados experimentais para o calor específico

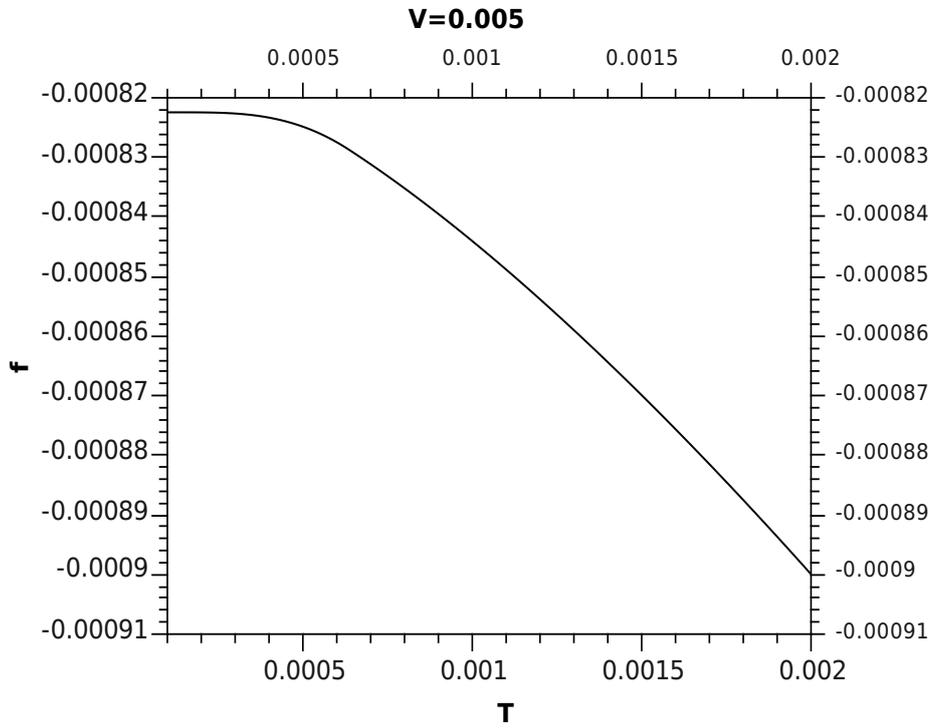


Figura 5.2: Energia livre f versus temperatura T para hibridização $V=0.005$.

mostram um "salto" na transição do estado normal para o supercondutor. A temperatura onde ocorre o salto é a temperatura crítica do supercondutor.

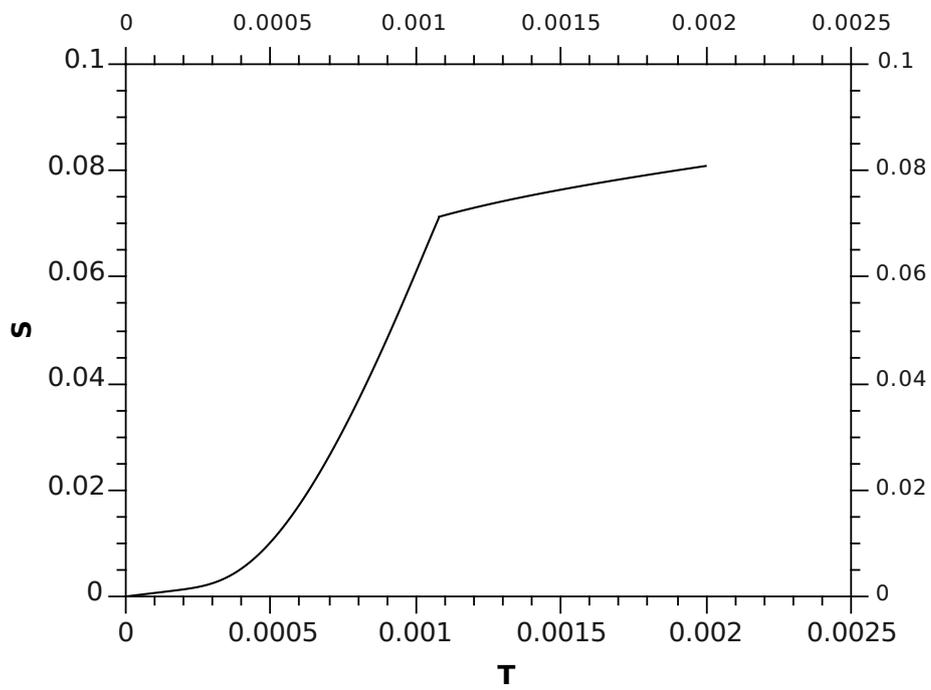


Figura 5.3: Entropia s versus temperatura para hibridização V nula.

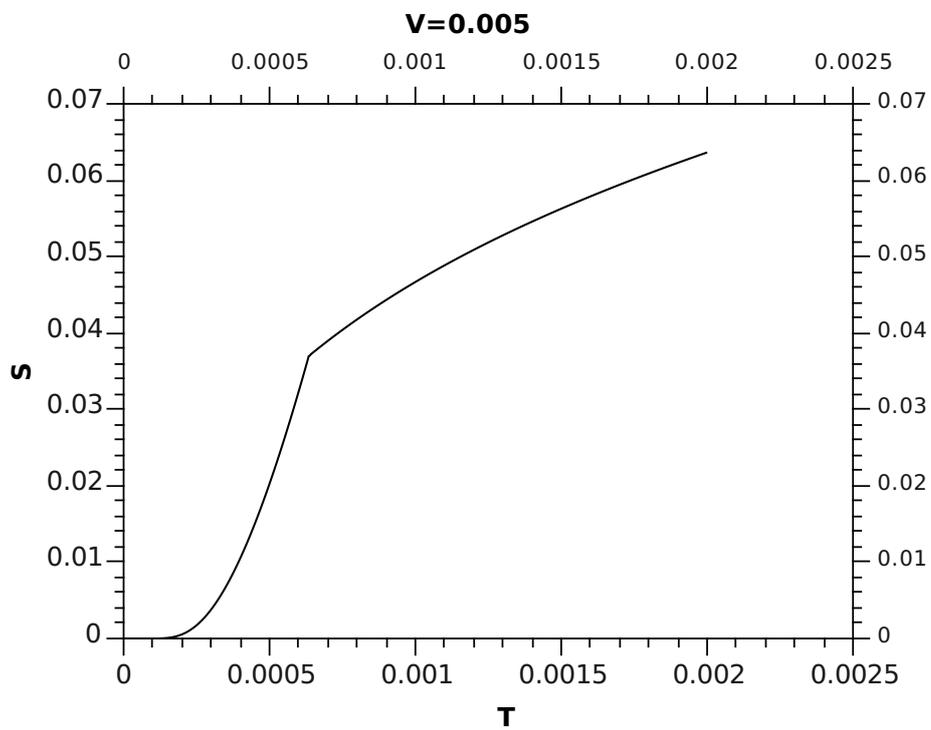


Figura 5.4: Entropia s versus temperatura para hibridização $V = 0.005$. Temos também a diminuição da temperatura crítica com o aumento da hibridização V .

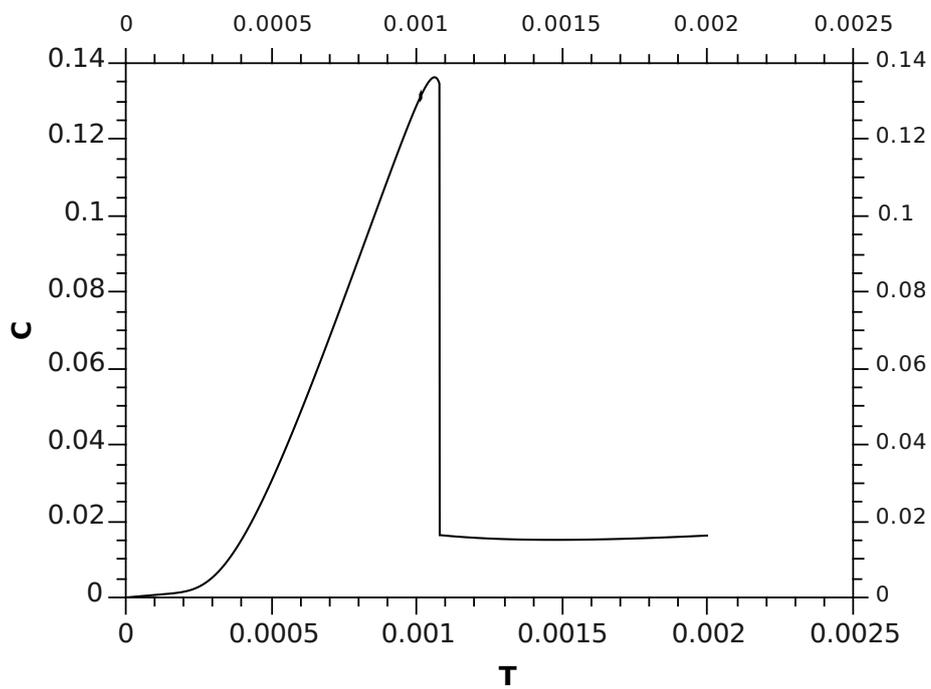


Figura 5.5: Calor específico c versus temperatura para hibridização $V = 0$. Verificamos a descontinuidade em $T = 0.0011$, indicando uma transição de fase.

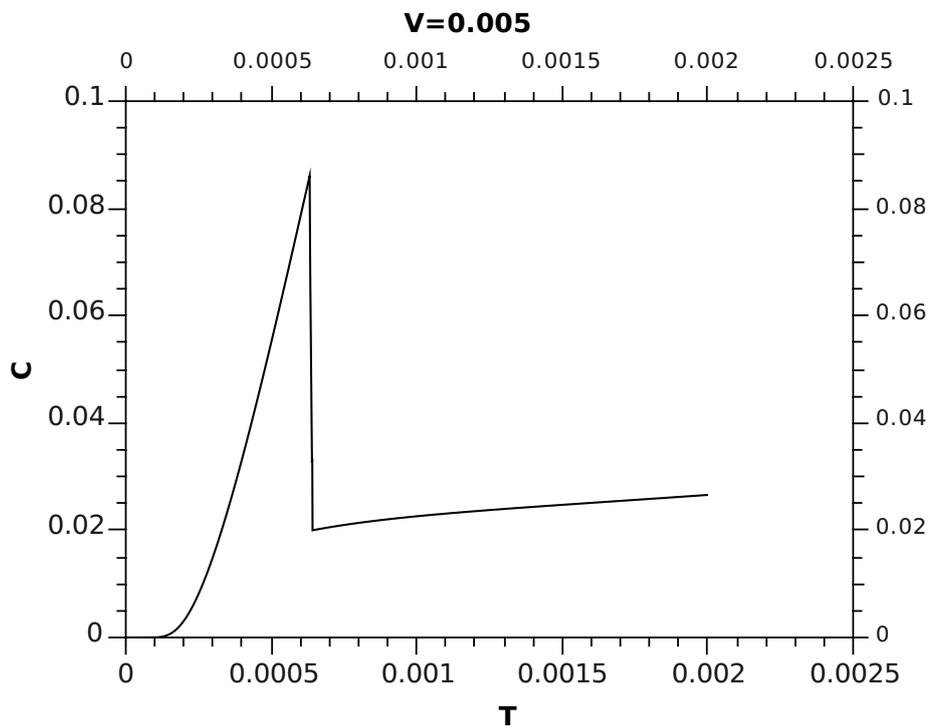


Figura 5.6: Calor específico c versus temperatura para hibridização $V = 0.005$. Verificamos a descontinuidade em $T = 0.0006$, indicando uma transição de fase. Observamos que a temperatura crítica do supercondutor diminui com o aumento da hibridização.

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho analisamos um sistema supercondutor descrito por um modelo multi-bandas, contendo interações atrativas, um termo que gera a hibridização entre as bandas e um campo magnético externo aplicado. As interações atrativas podem ser da forma intra e interbanda, propiciando a formação de pares que podem se emparelhar com simetria tipo onda s ou d . Obtivemos pelo método das funções de Green as excitações do sistema e as funções de *gap* associadas aos diferentes parâmetros de ordem. Os dois primeiros capítulos foram de revisão. Os principais resultados obtidos em cada capítulo são descritos a seguir

No capítulo 3, consideramos o estado fundamental de um sistema supercondutor descrito por um modelo de duas bandas e interação interbanda com massas efetivas diferentes e sem campo magnético aplicado. As bandas são acopladas por uma hibridização efetiva (V). Com isso, adotamos a aproximação de campo médio para obter os parâmetros de ordem supercondutor interbanda (Δ_{ab}). As energias de excitação exibiram a forma típica da abertura do *gap* no limite BCS, associada aos pares ligados, sendo observadas as energias de ligação do par. Observamos descontinuidades em Δ_{ab} para $V > 0$, concluindo que temos uma transição de primeira ordem. A partir da construção de Maxwell da teoria de Landau, expandimos a energia livre do sistema e encontramos um ponto tricrítico no sistema interbanda, verificado no diagrama de fase T versus V .

Em resumo, nós introduzimos um modelo de duas bandas com hibridização para descrever o comportamento da supercondutividade, restringindo a nossa análise para o cenário de interbanda. O método de campo médio convencional fornece uma equação BCS

habitual. Observamos que o efeito de hibridização no estado fundamental SC ($T = 0$) é quebrar o par de Cooper e a força tem de ser muito maior do que a necessária em temperaturas finitas. Para $T > 0$, mesmo quando o sistema mostra uma transição de primeira ordem, Δ_{ab} permanece inalterado. Para observar pequenas alterações no gap a hibridização deve ser de uma ordem muito maior do que a observada no TCP. Também realizamos uma análise espectral de excitação de dados numéricos precisos, derivada de soluções da equação de gap.

Observa-se uma característica interessante no diagrama de fases do sistema ao analisar a relação entre \tilde{T}_c e \tilde{V}_c definindo o parâmetro $r \equiv k_B T_c / V_c$. Observamos que no TCP é encontrado quando $r \simeq 1$ para vários valores da interação atrativa.

No capítulo 4, estudamos somente o caso intrabanda com campo magnético aplicado e hibridização. Verificamos que tanto a hibridização, quanto o campo magnético aplicado contribuem para a supressão da supercondutividade. Observamos que o campo magnético devido ao efeito Zeeman, induz uma transição de primeira ordem e age em detrimento da supercondutividade. Como observado na interação interbanda a hibridização também suprime a supercondutividade.

No capítulo 5, estudamos as propriedades termodinâmicas do supercondutor sem a presença do campo magnético. Verificamos a descontinuidade do calor específico e o salto no calor específico, mostrando que a transição é de segunda ordem e que o aumento da hibridização diminui a temperatura crítica supercondutora.

Temos como **perspectivas futuras** estudar um modelo supercondutor com dois gaps simultaneamente, afim de entender o mecanismo de pares no MgB_2 , por exemplo; considerar as interações de segundos vizinhos na formação de pares e estudar também o modelo $t - J$.

Apêndice **A**

Método das Funções de Green

Neste apêndice será visto de forma simples o formalismo do método das funções de Green, amplamente adotado na física do estado sólido. Tal formalismo é comumente adotado para estudar a supercondutividade, o magnetismo localizado e itinerante.

Quando é de interesse obter a média de uma variável física qualquer representada por uma variável \mathcal{X} , a definição é dada por

$$\langle \mathcal{X} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} (\mathcal{X} e^{-\beta \mathcal{H}}), \quad (\text{A.1})$$

sendo $\mathcal{Z} = \text{tr}(e^{-\beta \mathcal{H}})$ a função de partição canônica, $\beta = 1/k_B T$ e \mathcal{H} o Hamiltoniano do sistema. Agora, considerando que $A(t)$ e $B(t')$ sejam dois operadores na representação de Heisenberg dados por

$$\begin{aligned} A(t) &= \exp(i\mathcal{H}t)A(0)\exp(-i\mathcal{H}t) \\ B(t') &= \exp(i\mathcal{H}t')B(0)\exp(-i\mathcal{H}t'), \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

veremos como se calcula a média do produto entre os dois operadores, na forma $\langle BA \rangle$. Para isso, adotamos as funções de Green retardada (+) e avançada (-) definidas por [76]

$$G_{AB}^{(\pm)}(t, t') = \ll A(t), B(t') \gg_{(\pm)} = \mp i\theta[\pm(t - t')] \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.3})$$

sendo

$$[A(t), B(t')]_{\eta} = A(t)B(t') - \eta B(t')A(t) \quad (\text{A.4})$$

com $\eta = 1$ para bósons, $\eta = -1$ para férmions e a função degrau de Heaviside $\theta(t)$ definida como

$$\theta(t) = \begin{cases} 1, & \text{se } t > 0; \\ 0, & \text{se } t < 0. \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

As funções de Green em (A.3) satisfazem a equação de movimento:

$$i \frac{d}{dt} \ll A(t), B(t') \gg_{(\pm)} = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle + \ll [A(t), \mathcal{H}]; B(t') \gg. \quad (\text{A.6})$$

Através da transformação de Fourier, podemos relacionar $\ll A(t), B(t') \gg$ com a função de Green no espaço das frequências $\ll A, B \gg_{\omega}$

$$\ll A(t), B(t') \gg = \int_{-\infty}^{\infty} \ll A, B \gg_{\omega} \exp(-i\omega(t - t')) d\omega, \quad (\text{A.7})$$

e com isso conseguimos obter através da equação (A.6) que

$$\omega \ll A, B \gg_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{\eta} \rangle + \ll [A, \mathcal{H}], B \gg_{\omega}. \quad (\text{A.8})$$

Em todo o trabalho, como tratamos de correlações entre elétrons, adotamos $\eta = -1$.

Agora, iremos obter as funções de correlação entre os operadores A e B . Na referência [76], é visto que a média $\langle B(t')A(t) \rangle$ pode ser calculada da forma

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.9})$$

onde $I_{AB}(\omega)$ é uma função relacionada com a forma espectral das funções de Green

$$G_{AB}^{(\pm)}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega') \frac{(e^{\beta\omega'} - \eta)}{\omega - \omega' \pm i\varepsilon} d\omega', \quad (\text{A.10})$$

com $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura. As funções $G_{AB}^{(\pm)}(\omega)$ são analíticas nos semi-planos superior e inferior. Assim, podemos considerar uma nova função integral convergente para todo ω (exceto sobre o eixo real). Assim, calculando o “salto” sobre o eixo real, obtemos

$$G_{AB}(\omega + i\varepsilon) - G_{AB}(\omega - i\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega') (e^{\beta\omega'} - \eta) \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - \omega' - i\varepsilon} \right] d\omega', \quad (\text{A.11})$$

e utilizando a relação

$$\frac{1}{\omega - \omega' \pm i\varepsilon} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega - \omega'}\right) \mp i\pi\delta(\omega - \omega'), \quad (\text{A.12})$$

simplificamos a equação (A.11) para

$$G_{AB}(\omega + i\varepsilon) - G_{AB}(\omega - i\varepsilon) = -2\pi i(e^{\beta\omega} - \eta)I_{AB}(\omega). \quad (\text{A.13})$$

Com isso conseguimos isolar a função espectral $I_{AB}(\omega)$

$$I_{AB}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \left[G_{AB}(\omega + i\varepsilon) - G_{AB}(\omega - i\varepsilon) \right] \frac{1}{e^{\beta\omega} - \eta}, \quad (\text{A.14})$$

que substituindo na equação (A.9) para $t = t' = 0$ e $\eta = -1$, obtemos

$$\langle B(0)A(0) \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[G_{AB}(\omega + i\varepsilon) - G_{AB}(\omega - i\varepsilon) \right] f_{FD}(\omega) d\omega, \quad (\text{A.15})$$

sendo

$$f_{FD}(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (\text{A.16})$$

a função distribuição de Fermi-Dirac. Assim, obtivemos os principais resultados desse apêndice, que são as equações (A.8) e (A.15), sendo a última conhecida como o Teorema do Salto, e é fundamental para esse trabalho.

Contagem dos estados no espaço recíproco

A substituição de somas em vetores do espaço recíproco por integrais é um procedimento comum na teoria de sólidos. Isto é feito levando-se em conta a densidade de valores permitidos para o vetor de onda \mathbf{k} no espaço recíproco. Sabemos que as condições de contorno periódicas, as quais refletem a simetria da rede cristalina, asseguram que existem exatamente N valores permitidos de \mathbf{k} em cada uma das zonas de Brillouin, onde N é o número de células unitárias do cristal. Assim, cada valor de \mathbf{k} ocupa um volume dado por [6]

$$\Delta\mathbf{k} = \frac{\text{volumedaprimeirazonadeBrillouin}}{N}. \quad (\text{B.1})$$

O volume da primeira zona é igual ao volume de qualquer zona e vale $8\pi^3/v$, onde v é o volume da célula unitária primitiva da rede cristalina do espaço real. Como $v = \frac{V}{N}$, onde V é o volume total do cristal, obtemos

$$\Delta\mathbf{k} = \frac{8\pi^3}{V}. \quad (\text{B.2})$$

O resultado acima nos permite transformar uma soma em vetores do espaço recíproco numa integral com o auxílio da igualdade

$$\sum_k F(\mathbf{k}) = \frac{V}{8\pi^3} \sum_k F(\mathbf{k}) \Delta\mathbf{k}, \quad (\text{B.3})$$

pois no limite em que $\Delta\mathbf{k}$ tende a zero, ou seja, quando o volume V se torna infinitamente grande face ao volume da célula unitária, podemos escrever

$$\sum_k F(\mathbf{k}) = \frac{V}{8\pi^3} \int F(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (\text{B.4})$$

onde a integral é avaliada no volume de uma zona de Brillouin. É comum que se escreva a transformação B.10 para um volume unitário do cristal. Neste caso, basta fazer $V = 1$ na equação acima.

Se o sistema for isotrópico, a integral no espaço \mathbf{k} pode ser escrita como

$$\int d\mathbf{k}_k F(\mathbf{k}) = 4\pi \int F(\mathbf{k}) k^2 dk. \quad (\text{B.5})$$

Lembrando que a densidade de estados é definida como o número de estados eletrônicos por unidade de volume, por unidade de energia e por direção de spin, escrevemos

$$N(\epsilon) = \frac{1}{V} \frac{dn}{d\epsilon}, \quad (\text{B.6})$$

onde n representa o número de estados por direção de spin.

O número de vetores de onda (estados orbitais) contidos no interior de uma esfera de raio k é dado por

$$n(k) = \frac{V}{8\pi^3} \frac{4\pi k^3}{3}, \quad (\text{B.7})$$

onde usamos o resultado B.2 para expressar a densidade de pontos no espaço recíproco. Então, podemos reescrever a definição B.6 como

$$N(\epsilon) = \frac{1}{V} \frac{dn}{dk} \frac{dk}{d\epsilon} \quad (\text{B.8})$$

e, usando a equação B.6, obtemos

$$N(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{2\pi^2} k^2 dk. \quad (\text{B.9})$$

Este resultado, que é válido para sistema isotrópico, permite que a integral em vetores de onda da equação B.10 seja transformada numa integral em energia, ou seja

$$\sum_k F(\mathbf{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int F(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = \int F(\epsilon) N(\epsilon) d\epsilon, \quad (\text{B.10})$$

onde usamos o resultado B.5 na transformação intermediária e consideramos o volume unitário [6].

Referências Bibliográficas

- [1] H. K. Onnes, *Commun. Phys. Lab.* **12**, 120 (1911).
- [2] Y. Guo, J.M.Langlois e W.A.Goddard, *Science* **299**, 896 (1988).
- [3] T.R. Dinger et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2687 (1987); T.K.Worthington, W.J.Gallager e T.R. Dinger, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1160 (1987)
- [4] K. Fossheim e A. K. Sudbo. *Superconductivity: Physics and Applications*. John Wiley, (2004).
- [5] P.J.Ford, *The rise the superconductors*. CRC Press, New York, (2005).
- [6] P.N. Pureur. *Supercondutividade e Materiais Supercondutores*. Porto Alegre (2004).
- [7] R.B. Griffiths, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 715 (1970).
- [8] S. M. Ramos, *Diagrama de fases e ponto crítico quântico no $CeCoIn_{5-x}Sn_x$: efeitos de pressão e concentração*, Tese de doutorado não publicada, Universidade Federal Fluminense - UFF (2007).
- [9] Mucio A. Continentino. *Quantum Scaling in Many-Body Systems*. World Scientific (2001).
- [10] N.W. Ashcroft. *Solid State Physics*. Brooks/cole, (1996).
- [11] K. Charles. *Introdução à Física do estado sólido*, LTC, Rio de Janeiro, (2006).

- [12] I.S. Oliveira e L.B. Vitor de Jesus. Introdução à Física do estado sólido, Editora Livraria da Física, 1 ed., (2005).
- [13] M. Tinkham. Introduction to superconductivity, second edition, New York, (1996).
- [14] Y. J. Uemura *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **62** (1991) 2317; Y. J. Uemura *et al.*, *Nature* **352** (1991) 605.
- [15] J. G. Bednorz e K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [16] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [17] H. Suhl, B. T. Matthias e L. R. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
- [18] Machida *et al.*, *Phys. Rev. B* **65**, 233304 (2002).
- [19] M. Adriana, M. Daghofer, A. Nicholson e E. Dagotto. Interband pairing in multiorbital systems. *Phys. Rev. B* **80**, 104507 (2009).
- [20] W.V.Liu e F.Wilczek. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047002 (2003).
- [21] H. Caldas. *Phys. Rev. A* **69**, 063602 (2004).
- [22] Nagamatsu J. *et al.* Superconductivity at 39 K in magnesium diboride. *Nature* **410**, p. 63-64, (2001).
- [23] G. Sarma. *J. Phys. Chem. Solids.* **24**, 1029 (1963).
- [24] Igor Tavares Padilha. *Estudo da Supercondutividade Exótica: Sistemas de Multibandas UFF*, Rio de Janeiro (2010).
- [25] B.S. Cherasekar, *Appl Phys. Lett.* **1**, 7 (1962). A.M.Clogston, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 266 (1962).
- [26] A.I. Larkin e Y.N. Ovchinnikov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47**, 1136362 (1964).
- [27] P. Fulde e R.A. Ferrell, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964).
- [28] S. Yonezawa, T. Kajikawa e Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 077003 (2013).

- [29] J. Kondo, *Prog. Theo. Phys.* **29** (1963) 1; G. M. Japiassu, M. A. Continentino, e A. Troper, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 2986.
- [30] M. A. Continentino e I. T. Padilha, *J. of Phys. Cond. Matter* **20**, 095216 (2008).
- [31] S. V. Tyablikov, *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (New York:Plenum Press, 1967) p.221; ver tamém D. N. Zubarev, *Sov. Phys. Usp.* **3** (1960) 320.
- [32] I. T. Padilha e M. A. Continentino, *J. of Phys. Cond. Matter* **21**, 095603 (2009).
- [33] M. A. Continentino e I. T. Padilha, *J. Phys. Cond. Matter* **20** (2008) 095216.
- [34] L. G. Sarasua e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **65**, 184503 (2002).
- [35] E. S. Caixeiro e A. Troper, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 014502.
- [36] V. Z. Kresin, G. Deutscher e S. A. Wolf, *J. Supercond.* **1** (1988) 327.
- [37] K. Maki, *Phys. Rev. Lett.* **148**, 362 (1966).
- [38] A. Bianchi *et al*, *Phys. Rev Lett.* **89**, 13 (2002).
- [39] K. Maki e T. Tsuneto, *Prog. Theor. Phys.* **31**, 945 (1964).
- [40] J. C. Xavier e E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 146403 (2008).
- [41] G. M. Japiassu, M. A. Continentino, e A. Troper, *J. Appl. Phys.* **73** (1993) 6648; *ibid*, *J. Magn. Magn. Mater.* **104** (1992) 1945.
- [42] E. Maxwell, *Phys. Rev.* **78**, 477 (1950).
- [43] J. Merino e R. H. McKenzie, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 237002 (2001).
- [44] T. Moriya, *Proc. Jpn. Acad. B* **82**, 1 (2006).
- [45] S. Robaszkiewicz, R. Micnas e J. Ranninger, *Phys. Rev. B* **36**, 180 (1987).
- [46] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [47] J. Zielinski e P. Zawadzki, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **72**, 261 (1988).
- [48] A. Hackl e M. Vojta, *New Journal of Physics* **11**, 055064 (2009).

- [49] K. Horigane, N. Takeshita, C. Lee, H. Hiraka e K. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 063705 (2009).
- [50] M. Gomes e Angsula Ghosh, *Eur. Phys. J.B.* **66**, 461-466 (2008).
- [51] F. Dinóla Neto, M. A. Continentino e C. Lacroix, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 075701 (2010).
- [52] M. Gomes da Silva, F. Dinóla Neto, I.T. Padilha, J. Ricardo de Sousa e M. A. Continentino. *Physics Letters A* **378** 1396-1401 (2014).
- [53] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd ed., Wiley, New York (1998).
- [54] H. Shimahara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 541 (1997).
- [55] B. B. Goodman, *Rep. Prog. Phys.*, **29** 445 (1966).
- [56] Salinas, Silvio R. A. Introdução à Física Estatística, São Paulo, (2005).
- [57] L.W. Gruenberg e L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 996 (1966).
- [58] J. Müller *et al*, *Phys. Rev. B.* **65**, 140509 (2002).
- [59] J. Wosnitza *et al*, *Synth. Met.* **133-134**, 201 (2003).
- [60] H. Elsinger *et al*, *Phys. Rev Lett.* **84**, 84 (2000).
- [61] H. Burkhardt e D. Rainer, *Ann. Phys. (Leipzig)* **506**, 181 (1994).
- [62] S. E. Barrett, J. A. Martindale, D. J. Durand, C. H. Pennington, C. P. Slichter, T. A. Friedmann, J. P. Rice e D. M. Ginsberg, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 108 (1991).
- [63] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company (1994).
- [64] J. R. Engelbrecht e M. Randeria, C. A. R. Sá de Melo, *Phys. Rev. B* **55**, 15153 (1997).
- [65] M. Marini, F. Pistolesi e G. C. Strinati, *Eur. Phys. J. B* **1**, 151 (1998).
- [66] M. Iskin e C. A. R. Sá de Melo, *Phys. Rev. B* **74**, 144517 (2006).

- [67] W. V. Liu e F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047002 (2003).
- [68] P. Coleman e N. Andrei, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 4057 (1989).
- [69] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [70] J. R. Schrieffer e P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [71] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
- [72] M. Franz, C. Kallin, e A. J. Berlinsky *Phys. Rev. B* **54**, 6897 (1996).
- [73] P. Fulde e R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964); A. I. Larkin e Yu N. Ovchinnikov, *Sov. Phys. JETP* **20**, 762 (1965).
- [74] G. M. Japiassu, M. A. Continentino e A. Troper, *Phys. Rev. B* **45**, 2986 (1992).
- [75] H. Suhl, B. T. Matthias, e L. R. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **3** (1959) 552.
- [76] D. N. Zubarev, *Usp. Fiz. Nauk* **71**, 320 (1960).
- [77] S. Yonezawa, T. Kajikawa e Y. Maeno. *Physical Review Letters* **110**, 077003 (2013).