

**UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS– CCT
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA – PPGF**

ELOIR ANTUNES DE OLIVEIRA JUNIOR

**ESTUDO DA FASE SUPERCONDUTORA EM MODELOS MICROSCÓPICOS DE
DUAS BANDAS**

JOINVILLE

2025

ELOIR ANTUNES DE OLIVEIRA JUNIOR

**ESTUDO DA FASE SUPERCONDUTORA EM MODELOS MICROSCÓPICOS DE
DUAS BANDAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Tecnológicas da Universidade do Estado de Santa Catarina, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Ben Hur Bernhard

**JOINVILLE
2025**

Oliveira Junior, Eloir Antunes de
Estudo da fase supercondutora em modelos
microscópicos de duas bandas / Eloir Antunes de Oliveira
Junior. - Joinville, 2025.
103 p. : il. ; 30 cm.

Orientador: Ben Hur Bernhard.

Dissertação (Mestrado) - Universidade do Estado
de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas,
Programa de Pós-Graduação em Física, Joinville, 2025.

1. Supercondutividade.
 2. Modelo de duas bandas.
 3. Hibridização.
 4. Simetria do parâmetro de ordem.
 5. Transformação de Bogoliubov-Valantin.
- I. Bernhard, Ben Hur . II. Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

ELOIR ANTUNES DE OLIVEIRA JUNIOR

ESTUDO DA FASE SUPERCONDUTORA EM MODELOS MICROSCÓPICOS DE DUAS BANDAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Tecnológicas da Universidade do Estado de Santa Catarina, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Ben Hur Bernhard

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Ben Hur Bernhard (Presidente/Orientador)
Universidade do Estado de Santa Catarina

Membros:

Prof. Dr. Daniel Vieira
Universidade do Estado de Santa Catarina

Prof. Dr. Christopher Thomas
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Joinville, 16 de Abril de 2025

Aos que me concederam ouvidos atentos em
meus surtos de euforia científica.

AGRADECIMENTOS

A dissertação de mestrado é, propositalmente ou não, fruto de um esforço conjunto de muitas pessoas. Abaixo, deixo meus agradecimentos a todos que colaboraram e participaram comigo nesta jornada.

- À minha família, por todo o suporte emocional. Às minhas irmãs, Michele, Maiara e Letícia, pela força que me deram ao longo de todo o processo e, em especial, aos meus pais, Valdenéia Ardino e Eloir Antunes de Oliveira, por criarem um lar de amor e segurança, onde pude crescer e me desenvolver plenamente. Se cheguei até aqui, foi por vocês; essa conquista também é de vocês!
- À minha esposa, Vanessa Heidemann: sabemos que cada conquista, minha ou sua, é uma conquista nossa e da família que queremos construir juntos.
- Ao meu orientador, Ben Hur Bernhard, pela parceria nesta empreitada no estudo da supercondutividade, que se revelou ainda mais desafiadora do que esperávamos. Ter alguém da sua competência como orientador foi crucial para o desenvolvimento deste trabalho.
- Aos meus professores das disciplinas da pós-graduação, Daniel Vieira, Julio Cesar Sagas e Edgard Pacheco Amorim, pelos conhecimentos compartilhados.
- Aos meus colegas Luana, Washington, Pedro, Joyce, Ana Luiza e Leonardo. O mestrado foi uma jornada árdua, e tê-los ao meu lado a tornou mais leve e enriquecedora.
- À UDESC. Ter uma universidade pública na minha cidade, com o curso que eu desejava, tornou real meu sonho de adolescente de me tornar cientista.
- À CAPES e à FAPESC, pelo apoio financeiro.

“ A method is more important than a discovery,
since the right method will lead to new and even
more important discoveries.”

(Lev Landau)

RESUMO

Neste trabalho, realizamos um estudo acerca das propriedades da fase supercondutora para o modelo de uma banda e o modelo de duas bandas hibridizadas $c - f$, onde a fase supercondutora surge a partir da inserção de um termo de pareamento eletrônico no espaço \mathbf{k} , com um parâmetro de acoplamento efetivo g . O processo de diagonalização dos hamiltonianos é realizado através de transformações do tipo Bogoliubov-Valatin, seguindo os procedimentos da teoria BCS convencional. Obtivemos, de forma autoconsistente, para ambos os casos, o gap Δ_0 em $T = 0$, e a temperatura crítica T_c para algumas simetrias do parâmetro de ordem: onda s , onda s estendida e onda d , em função da ocupação local. As simetrias estudadas estão presentes em supercondutores convencionais como o MgB_2 , cupratos como o YBCO e férmiões pesados como CeCoIn₅. Para o caso de uma banda, analisamos o comportamento do gap Δ_0 e da temperatura crítica T_c em função do parâmetro de acoplamento g , além do gap em função da temperatura T . Obtivemos ainda um diagrama $g \times n$, definindo qual simetria é mais favorável para cada combinação de parâmetros. No caso de duas bandas, consideramos os casos em que o pareamento pode ocorrer apenas em uma das bandas, e estudamos a influência da simetria, da posição relativa E_f entre as bandas e da hibridização V . Obtivemos os diagramas de fase $V \times n$ para ambos os casos, identificando qual simetria seria mais favorável. Por fim, elaboramos um diagrama de fases comparando o pareamento na banda f e o pareamento na banda c de condução, concluindo que o primeiro prevalece para valores intermediários de ocupação, numa faixa entre $n = 0,3$ e $n = 2,7$.

Palavras-chave: Supercondutividade. Modelo de duas bandas. Hibridização. Simetria do parâmetro de ordem. Transformação de Bogoliubov-Valantin.

ABSTRACT

In this work, we study the properties of the superconducting phase for the single-band model and the hybridized $c - f$ two-band model, where the superconducting phase arises from the introduction of an electronic pairing term in \mathbf{k} -space, with an effective coupling parameter g . The diagonalization of the Hamiltonians is performed through Bogoliubov-Valatin-type transformations, following the procedures of conventional BCS theory. We self-consistently obtain, for both cases, the gap Δ_0 at $T = 0$ and the critical temperature T_c for some order parameter symmetries: s -wave, extended s -wave, and d -wave, as a function of local occupancy. The studied symmetries are present in conventional superconductors such as MgB₂, cuprates such as YBCO, and heavy-fermion compounds such as CeCoIn₅. For the single-band case, we analyze the behavior of the gap Δ_0 and the critical temperature T_c as a function of the coupling parameter g , as well as the gap as a function of temperature T . Additionally, we obtain a $g \times n$ diagram defining which symmetry is more favorable for each combination of parameters. In the two-band case, we consider scenarios where pairing can occur only in one of the bands and study the influence of symmetry, the relative position E_f between the bands, and hybridization V . We obtain phase diagrams $V \times n$ for both cases, identifying which symmetry is more favorable. Finally, we construct a phase diagram comparing pairing in the f band and pairing in the c conduction band, concluding that the former prevails for intermediate occupancy values, within a range between $n = 0.3$ and $n = 2.7$.

Keywords: Superconductivity. Two-band model. Hybridization. Symmetry of the order parameter. Bogoliubov-Valantin transfomation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Resistividade em função da temperatura para o Hg. Figura extraída de (1)	16
Figura 2 – Resistividade normalizada em função da temperatura para compostos baseados em Pt e Au. Figura extraída de 2	17
Figura 3 – Comportamento de um supercondutor e um não-supercondutor	17
Figura 4 – Efeito Meissner-Ochsenfeld	18
Figura 5 – Resposta magnética de um supercondutor tipo I.	19
Figura 6 – Resposta magnética de um supercondutor tipo II.	20
Figura 7 – Efeito isotópico para o Hg. Figura extraída de (2)	22
Figura 8 – Resistividade em função da temperatura para o composto CeCu_2Si_2 . Figura extraída de (3)	24
Figura 9 – Resistividade em função da temperatura para o LaBaCuO. Figura extraída de (4).	24
Figura 10 – Descoberta de alguns supercondutores	26
Figura 11 – Visão clássica da vibração de rede e seu efeito no potencial	28
Figura 12 – Diagrama de Feynman de dois elétrons interagindo via troca de fônonos	28
Figura 13 – Variação do autovalor de energia $E_{\mathbf{k}}$ em relação ao vetor de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ para as simetrias de onda (a) s , (b) s estendida e (c) $d_{x^2-y^2}$	48
Figura 14 – $k_B T_c$ versus n para simetria de onda d , s estendida e p , para diversos valores do parâmetro de acoplamento normalizado W/D . Figura extraída de (5)	48
Figura 15 – $k_B T_c$ versus n para simetria de onda d , onda s estendida e onda p , para diversos valores da repulsão coulombiana normalizada U/D . Figura extraída de (5)	49
Figura 16 – Δ_c e Δ_f a $T = 0$ versus n para a simetria de onda s estendida, para diferentes valores do parâmetro de acoplamento J . Figura extraída de (6)	49
Figura 17 – Δ_c e Δ_f a $T = 0$ versus n para a simetria de onda d , para diferentes valores do parâmetro de acoplamento J . Figura extraída de (6)	50
Figura 18 – Δ_s e Δ_d a $T = 0$ versus n para a simetria de onda d e s estendida para diversos valores do parâmetro de hibridização V . Figura extraída de (7)	50
Figura 19 – Diagrama n versus V para simetria de onda d e s estendida. Figura extraída de (7)	51
Figura 20 – $k_B T_c$ versus n_T , para a simetria de onda d , para diversos valores da repulsão coulombiana U . Figura extraída de (8)	51
Figura 21 – $k_B T_c$ versus n_T , para a simetria de onda S , para diversos valores da repulsão coulombiana U . Figura extraída de (8)	52
Figura 22 – Densidade de estados tight-binding da rede quadrada na fase normal.	66

Figura 23 – Densidade de estados da rede quadrada em $T = 0$, para a simetria de onda s , considerando os parâmetros $g = 3$, $n = 1$ ($\mu = 0$), e o valor correspondente de $\Delta = 0.08$ encontrado autoconsistentemente.	67
Figura 24 – Densidade de estados da rede quadrada em $T = 0$ para a simetria de onda d , considerando os parâmetros $g = 3$, $n = 1$ ($\mu = 0$), e o valor correspondente de $\Delta = 0.14$ encontrado autoconsistentemente.	67
Figura 25 – $k_B T_c$ versus $1/\lambda$ no modelo do gás de elétrons.	69
Figura 26 – $\Delta/k_B T_c$ versus $k_B T/k_B T_c$ no modelo do gás de elétrons.	71
Figura 27 – Δ_0 versus $1/\lambda$ no modelo do gás de elétrons.	72
Figura 28 – $k_B T_c$ versus $1/\lambda$ para as simetrias de onda s , s estendida e d no modelo de gás de elétrons.	73
Figura 29 – Δ_0 versus $1/\lambda$ para as simetrias de onda s , s estendida e d no modelo de gás de elétrons.	73
Figura 30 – $\Delta/k_B T_c$ versus $k_B T/k_B T_c$ para as simetrias onda s e onda d no modelo de gás de elétrons.	74
Figura 31 – T_c em função de μ para as simetrias onda s , onda s estendida e onda d e $E_D = 2,0t$ no modelo tight-binding	75
Figura 32 – T_c versus n para as simetrias onda s , onda s estendida e onda d no modelo tight-binding.	75
Figura 33 – T_c versus n para (a) $g = 3$, (b) $g = 4$, (c) $g = 5$ e (d) $g = 6$. Para todos os casos $E_D = 2,0t$ no modelo tight-binding	76
Figura 34 – Diagrama g versus n de fases puras para o modelo de uma banda no modelo tight-binding.	77
Figura 35 – Densidade de estados do modelo de duas bandas na fase normal, $E_f = -1$, para (a) $V = 0.4$, (b) $V = 0.8$, (c) $V = 1.2$, (d) $V = 2.0$	79
Figura 36 – Densidade de estados do modelo de duas bandas na fase normal, $E_f = -4$, para (a) $V = 0.4$, (b) $V = 0.8$, (c) $V = 1.2$, (d) $V = 2.0$	79
Figura 37 – Δ_0 versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	80
Figura 38 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	81
Figura 39 – V versus n , $T = 0$, gap na banda c , $E_f = -1$	81
Figura 40 – Δ_0 versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	82
Figura 41 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	83
Figura 42 – V versus n , $T = 0$, gap na banda c , $E_f = -4$	83
Figura 43 – Δ_0 versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	84

Figura 44 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	85
Figura 45 – V versus n , $T = 0$, gap na banda f , $E_f = -1$	85
Figura 46 – Δ_0 versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	86
Figura 47 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	86
Figura 48 – V versus n , $T = 0$, gap na banda f , $E_f = -4$	87
Figura 49 – T_c versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V	88
Figura 50 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	89
Figura 51 – T_c versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V	90
Figura 52 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	90
Figura 53 – T_c versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V .	91
Figura 54 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	91
Figura 55 – T_c versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V .	92
Figura 56 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$	92
Figura 57 – V versus n , $T = T_c$, para (a) gap na banda c , $E_f = -1$, (b) gap na banda c , $E_f = -4$, (c) gap na banda f , $E_f = -1$, (d) gap na banda f , $E_f = -4$	93
Figura 58 – V versus n , $T = 0$, $E_f = -1$ para pareamento na banda c (em verde) e na banda f (em vermelho)	94
Figura 59 – V versus n , $T = 0$, $E_f = -4$ para pareamento na banda c (em verde) e na banda f (em vermelho).	95
Figura 60 – Geometria da rede quadrada.	102

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	UM BREVE APANHADO HISTÓRICO E CONCEITUAL DA SUPER-CONDUTIVIDADE	16
3	TEORIA BCS	27
3.1	INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON E O HAMILTONIANO BCS	27
3.2	APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO (HARTREE-FOCK) E DIAGONALIZAÇÃO DO HAMILTONIANO	30
3.3	EQUAÇÃO DO GAP	34
3.4	SOLUÇÕES ANALÍTICAS DA EQUAÇÃO DO GAP	37
3.4.1	Solução analítica de T_c	37
3.4.2	Solução analítica de Δ_0	38
3.4.3	Solução analítica de $\Delta(T)$ para ($T \ll T_c$)	39
3.4.4	Solução analítica de $\Delta(T)$ para ($T \approx T_c$)	41
3.5	MÉDIA DE OCUPAÇÃO LOCAL	43
3.6	ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL	44
4	SIMETRIA DO PARÂMETRO DE ORDEM SUPERCONDUTOR . . .	45
5	MODELO DE DUAS BANDAS HIBRIDIZADAS	53
5.1	MODELO DE DUAS BANDAS COM INTERAÇÃO TIPO BCS	57
5.1.1	Equação do gap para pareamento na banda de condução	60
5.1.2	Equação do gap para pareamento na banda f	62
6	RESULTADOS DO MODELO DE UMA BANDA	65
6.1	DENSIDADE DE ESTADOS NO MODELO TIGHT-BINDING	66
6.2	SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DO GAP	67
6.3	EQUAÇÃO DO GAP DEPENDENTE DE K	72
6.4	MÉDIA DE OCUPAÇÃO	74
7	RESULTADOS DO MODELO DE DUAS BANDAS	78
7.1	DENSIDADE DE ESTADOS DO MODELO DE DUAS BANDAS	78
7.2	SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE Δ_0 PARA PAREAMENTO NA BANDA DE CONDUÇÃO	80
7.3	SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE Δ_0 PARA PAREAMENTO NA BANDA F .	84
7.4	SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE T_c PARA PAREAMENTO NA BANDA DE CONDUÇÃO	88
7.5	SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE T_c PARA PAREAMENTO NA BANDA F .	91
7.6	ESTABILIDADE DO PAREAMENTO	94
8	CONCLUSÃO	96

REFERÊNCIAS	98
APÊNDICE A – CÁLCULO DA RELAÇÃO DE DISPERSÃO DA REDE QUADRADA NO MODELO TIGHT-BINDING	102

1 INTRODUÇÃO

A supercondutividade é um fenômeno que, desde a sua descoberta, tem despertado a curiosidade e o interesse de cientistas ao redor do mundo. Além da resistividade elétrica nula, outras propriedades, como o diamagnetismo perfeito e os vórtices supercondutores, destacam a complexidade da fase supercondutora.

Em uma grande variedade de materiais, a fase supercondutora já foi observada, desde metais simples como o mercúrio (Hg) e o chumbo (Pb), ligas intermetálicas binárias como nióbio-germânio (Nb_3Ge) e vanádio-silício (V_3Si), compostos de férmiros pesados como cério-cobre-silício ($CeCu_2Si_2$) e urânio-berílio (UBe_{13}), até cupratos como o LBCO ($La_{1-x}Ba_xCuO_4$) e o YBCO ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$). Diversas teorias, como a teoria fenomenológica de Ginzburg-Landau e a teoria BCS, e modelos como o modelo de Hubbard e o modelo de Eliashberg, foram desenvolvidos ou utilizados com o objetivo de descrever e explicar os mais diversos materiais supercondutores e suas propriedades. No entanto, ainda não existe uma teoria definitiva para a supercondutividade que consiga explicar o fenômeno em toda a sua complexidade.

O que é comum a todos os modelos que tentam descrever a supercondutividade é a presença de uma interação atrativa entre os elétrons, que gera um par ligado, denominado par de Cooper. A origem dessa interação é tema de debate para muitos materiais; porém, para os supercondutores convencionais, descritos pela teoria BCS, sabe-se que a interação tem origem na interação dos elétrons com a rede cristalina (interação elétron-fônons), enquanto em materiais nos quais a correlação eletrônica e as interações magnéticas desempenham papel fundamental, acredita-se que a interação tenha origem nas flutuações de spin (9).

Sob uma perspectiva teórica, a construção de um hamiltoniano que descreve um determinado tipo de material supercondutor deve incluir um termo de pareamento eletrônico para que haja a fase supercondutora em seu respectivo diagrama de fase. Neste trabalho, optamos por um pareamento do tipo BCS, que consiste em um pareamento no espaço recíproco com um parâmetro de acoplamento efetivo g , semelhante ao desenvolvido na teoria BCS original, mas que pode ser adaptado para descrever supercondutores não convencionais, uma vez que o parâmetro de acoplamento não apresenta os detalhes do mecanismo de pareamento. Assim, dado um modelo descrito por determinado hamiltoniano, é possível obter propriedades fundamentais que caracterizam a supercondutividade, como o gap supercondutor Δ , a temperatura de transição T_c e a ocupação da banda n , em função dos parâmetros do modelo.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão teórica e conceitual da supercondutividade, destacando as principais contribuições, com ênfase nas ideias de maior interesse para este trabalho. O capítulo é concluído com um destaque para as principais descobertas de materiais que apresentam a fase supercondutora, seus anos de descobrimento e suas temperaturas críticas.

O Capítulo 3 apresenta o desenvolvimento teórico da teoria BCS, desde uma descrição da interação elétron-fônons, passando pela solução em campo médio do hamiltoniano BCS através de uma transformação de Bogoliubov-Valatin, até a obtenção das equações de gap em função de

T , para $T = 0$ e $T = T_c$, para o caso de uma banda.

O Capítulo 4 apresenta uma discussão acerca da simetria do parâmetro de ordem supercondutor e sua origem eletrostática, além de suas consequências na formulação do hamiltoniano BCS e nas equações de gap.

O Capítulo 5 introduz o modelo de duas bandas hibridizadas $c - f$ e a passagem de sua forma espacial para o espaço recíproco, através de uma transformada de Fourier espacial. Também é introduzido o termo de pareamento do tipo BCS, o que nos permite obter as equações de gap para o pareamento na banda f e na banda de condução.

Nos Capítulos 6 e 7, são apresentados os resultados obtidos para o modelo de uma e duas bandas, respectivamente.

2 UM BREVE APANHADO HISTÓRICO E CONCEITUAL DA SUPERCONDUTIVIDADE

A supercondutividade é o fenômeno no qual a resistividade elétrica de um material cai abruptamente a zero após ser resfriado abaixo de uma temperatura crítica T_c . Esse fenômeno foi descoberto em 1911 por Heike Kamerlingh Onnes (1) em Leiden, Países Baixos, e só foi possível devido ao fato de Onnes, três anos antes, ter sido pioneiro na liquefação do hélio (He) (10), o que permitiu que ele trabalhasse com temperaturas da ordem de alguns kelvins, nas quais alguns metais com os quais ele trabalhava transicionam para a fase supercondutora. O primeiro material no qual Onnes observou a supercondutividade foi o mercúrio (Hg), cuja temperatura de transição é $T_c \simeq 4.2K$, onde a resistividade medida por ele foi menor que o seu limite de precisão ($\rho < 10^{-5}\Omega$) e, portanto, considerada zero. O resultado obtido por Onnes pode ser visto na Figura 1.

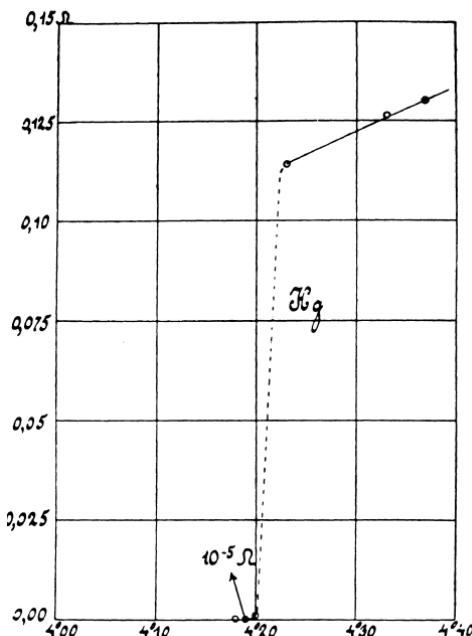


Figura 1 – Resistividade em função da temperatura para o Hg. Figura extraída de (1)

Antes do mercúrio, Onnes testou amostras de compostos baseados em platina (Pt) e ouro (Au) (11). Porém, em vez de encontrar uma temperatura de transição, ele encontrou uma resistividade de saturação das amostras, ou seja, um valor para o qual a resistividade tende assintoticamente à medida que a temperatura é reduzida. Este resultado é exibido na Figura 2.

Portanto, apesar de esses compostos serem condutores e de sua resistividade ser reduzida com o resfriamento das amostras ($\rho \sim 10^{-3}\Omega$), eles não transicionam para a fase supercondutora. Esses materiais estavam de acordo com as previsões clássicas, o que indicava que o mercúrio, com comportamento diferente, apresentava uma nova fase que não podia ser descrita com os modelos existentes. Um gráfico esquemático comparando o comportamento da resistividade de um supercondutor e de um não supercondutor ao serem resfriados é apresentado na Figura 3.

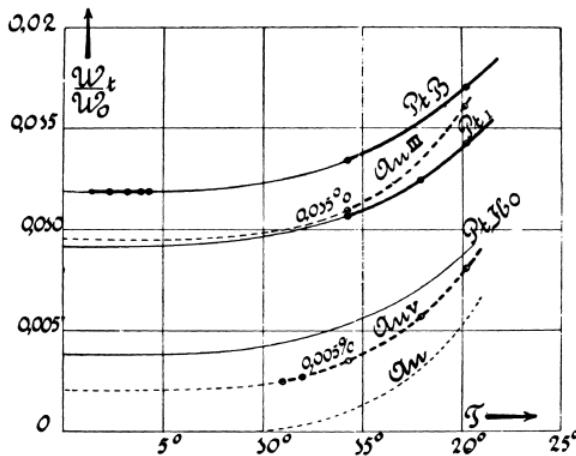


Figura 2 – Resistividade normalizada em função da temperatura para compostos baseados em Pt e Au. Figura extraída de 2

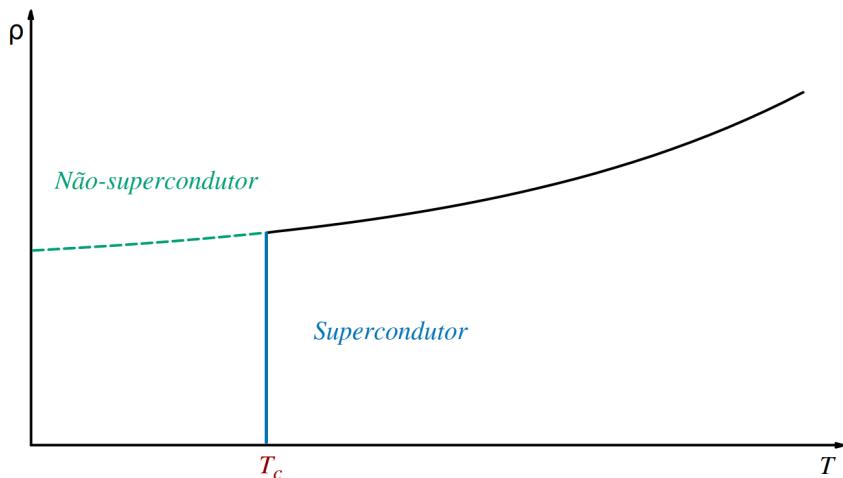


Figura 3 – Comportamento de um supercondutor e um não-supercondutor

Em 1933, em Berlim, Alemanha, Walther Meissner e Robert Ochsenfeld (12) realizaram o resfriamento de um material sabidamente supercondutor, porém sob a influência de um campo magnético. Foi observado que, ao ocorrer a transição supercondutora, o fluxo de campo magnético que antes atravessava o material era então espontaneamente expulso. Esse efeito é chamado de Efeito Meissner-Ochsenfeld, em homenagem aos cientistas que o descobriram, e estabelece que o material, ao realizar a transição supercondutora, se torna essencialmente um diamagneto perfeito. A Figura 4 apresenta um esquema ilustrativo de uma esfera de um material na fase normal (cinza escuro) e na fase supercondutora (cinza claro) na ausência e na presença de um campo magnético. Note que o campo magnético é completamente anulado dentro do material na fase supercondutora.

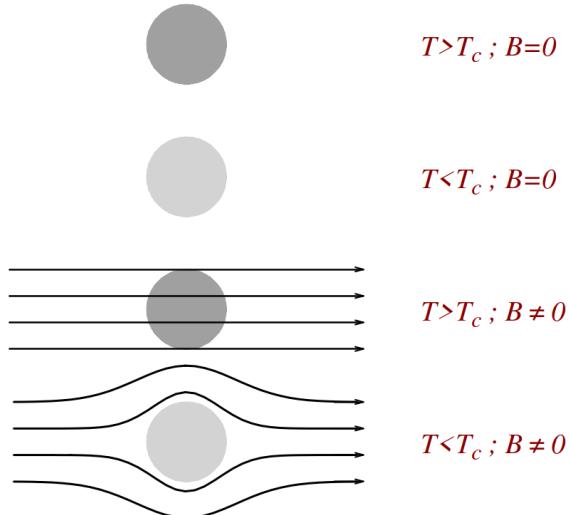


Figura 4 – Efeito Meissner-Ochsenfeld

Em 1934, os irmãos Fritz London e Heinz London (13), trabalhando em Oxford, Inglaterra, propuseram um modelo de dois fluidos para os elétrons do material na fase supercondutora. Esse modelo consiste em assumir que uma fração dos elétrons de condução se torna um superfluido enquanto os restantes se mantêm normais. A partir dessa hipótese, eles puderam derivar a chamada Equação de London.

$$\mathbf{j} = -\frac{n_s e^2}{m_e} \mathbf{A} \quad (1)$$

Na equação (1), temos:

- \mathbf{j} é a densidade de corrente elétrica;
- n_s é a densidade eletrônica dos elétrons "superfluidos";
- e é a carga do elétron;
- m_e é a massa efetiva dos elétrons;
- \mathbf{A} é o potencial vetor magnético;

O sinal de menos indica que a resposta magnética dos elétrons é diamagnética, ou seja, a equação de London consegue descrever a supercondutividade levando em conta o Efeito Meissner-Ochsenfeld a partir de uma abordagem fenomenológica. Uma previsão do modelo proposto pelos irmãos London é que o campo magnético pode penetrar um pequeno comprimento no material supercondutor. Esse comprimento é característico e recebe o nome de comprimento de penetração λ .

Uma modificação na equação de London foi proposta em 1950 por Alfred Brian Pippard (14) em Cambridge, Inglaterra, onde a densidade de corrente se torna variável espacialmente. Pippard introduziu dois novos comprimentos característicos: o comprimento de coerência,

denotado por ξ_0 , que posteriormente foi associado à coerência da função de onda supercondutora, e r_0 , uma estimativa do livre caminho médio eletrônico. A equação proposta por Pippard está exibida a seguir:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{n_s e^2}{m_e} \frac{3}{4\pi\xi_0} \int \frac{\mathbf{R}(\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}'))}{R^4} \exp\left(-\frac{R}{r_0}\right) d^3\mathbf{r}' \quad (2)$$

O supercondutor é, então, caracterizado por três escalas de comprimento diferentes, sendo elas o comprimento de penetração λ , o livre caminho médio na superfície de Fermi r_0 e o comprimento de coerência ξ_0 . Com essas escalas de comprimento, é possível caracterizar os supercondutores de duas formas:

1. Se $r_0 \gg \xi_0$ dizemos que o supercondutor está no "clean limit" e se $r_0 < \xi_0$ dizemos que está no "dirty limit".
2. A razão $\kappa = \lambda/\xi_0$ determina se o supercondutor é tipo I ou tipo II.

Esta primeira classificação nos diz o quanto suscetíveis a mudanças as propriedades do supercondutor estão em relação ao número de impurezas presentes. Ou seja, no "dirty limit", o supercondutor preserva suas propriedades mesmo com um número considerável de impurezas; no "clean limit", ocorre o inverso.

Já a segunda classificação indica a maneira com que o supercondutor responde ao campo magnético aplicado. Essencialmente, o supercondutor tipo I, quando submetido a um campo magnético fraco, terá a resposta diamagnética perfeita e preservará essa propriedade até que o campo atinja um valor crítico H_c . A partir do campo crítico, tanto o diamagnetismo quanto a supercondutividade são destruídos. Este comportamento está ilustrado na Figura 5.

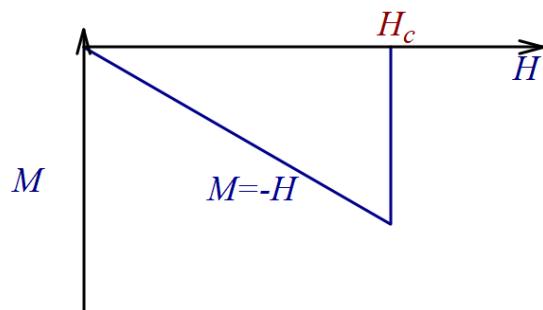


Figura 5 – Resposta magnética de um supercondutor tipo I.

Um supercondutor tipo II, submetido a um campo fraco, tem uma resposta semelhante à do tipo I. Porém, se aumentarmos o campo até um campo crítico H_{c1} , ele permitirá que o campo penetre no material um pouco, mas ainda preservando a supercondutividade. À medida

que aumentamos ainda mais o campo, ele penetrará mais, até que se atinja um segundo valor de campo crítico H_{c2} , onde a supercondutividade é, enfim, destruída. Este comportamento está ilustrado na Figura 6.

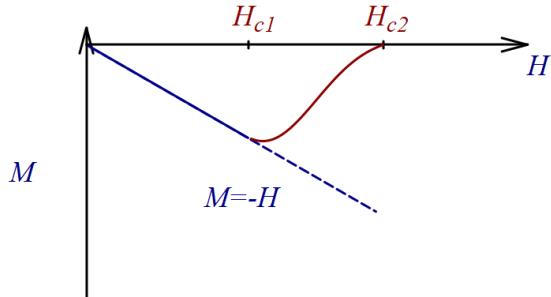


Figura 6 – Resposta magnética de um supercondutor tipo II.

Foi apenas em 1957, em Moscou, União Soviética, que Alexei Alexeevich Abrikosov (15) explicou fisicamente o comportamento termodinâmico dos supercondutores tipo II na região entre H_{c1} e H_{c2} . Ele mostrou que o campo magnético consegue entrar no supercondutor na forma de vórtices. Cada vórtice consiste em uma região de supercorrente circulando em torno de um pequeno núcleo central que se tornou um metal normal. O campo, então, consegue penetrar no material através desses núcleos, e a supercorrente garante que esse fluxo esteja blindado do resto do material supercondutor.

Em 1950, em Moscou, União Soviética, Vitaly Ginzburg e Lev Landau (16) apresentaram uma teoria fenomenológica que mais adiante seria chamada de Teoria de Ginzburg-Landau, a qual consiste em escrever a energia livre do material supercondutor em temperaturas próximas a T_c em função de um parâmetro de ordem complexo ψ . Próximo a T_c , o parâmetro de ordem deve ser pequeno e a energia livre pode ser expandida em série de potências de $|\psi|$ (o parâmetro é complexo, porém a energia livre deve ser real). A expansão em série de potências da energia livre por unidade de volume assume a forma:

$$f_s(T) = f_n(T) + a(T)|\psi|^2 + \frac{1}{2}b(T)|\psi|^4 + \dots \quad (3)$$

Temos na expressão $a(T)$ e $b(T)$ são parâmetros fenomenológicos que, de maneira geral, dependem da temperatura, mas essa dependência é considerada sempre suave. A solução de estabilidade é aquela que minimiza a diferença entre a energia livre no estado supercondutor f_s e a do estado normal f_n . Essa teoria fenomenológica teve muito sucesso em descrever várias grandezas relacionadas à transição de fase supercondutora, inclusive em explicar os supercondutores tipo II.

Em 1959, em Moscou, União Soviética, Alexei Alexeevich Abrikosov e Lev Gor'kov (17) derivaram a teoria fenomenológica de Ginzburg-Landau a partir da Teoria Microscópica de Bardeen-Cooper-Schrieffer (que será comentada com mais detalhes adiante), corroborando os resultados obtidos por ela.

Em 1950, em Liverpool, Inglaterra, Hebert Fröhlich (18) formulou a interação elétron-fônon como uma analogia direta da interação via troca de fôtons do eletromagnetismo e mostrou que essa interação dá origem a uma baixa energia de atração efetiva dada por:

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^2 \frac{2\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 - (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2} \quad (4)$$

Na equação 4, temos:

- $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ ($\varepsilon_{\mathbf{k}'}$) é a energia do elétron com momento \mathbf{k} (\mathbf{k}') que emite (absorve) o fônon;
- $\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$ é a frequência do fônon;
- $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ está relacionado com a matriz de espalhamento elétron-fônon e é uma medida da intensidade da interação devido ao potencial;

Note que este potencial é atrativo para valores baixos de transferência de energia ($|\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}| \ll \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$).

Em 1950, em Nova Jersey, Estados Unidos, Bernard Serin (2) observou a redução da temperatura de transição supercondutora com a massa isotópica do mercúrio. Este efeito é chamado de efeito isotópico e é descrito pela equação 5:

$$T_c \propto M^{-\alpha} \quad (5)$$

Na equação 5, temos que:

- M é a massa do isótopo;
- α é o expoente isotópico;

Se o mecanismo for a interação elétron-fônon, como descrito por Fröhlich, teremos $\alpha = 0.5$, que é o mesmo valor encontrado para o mercúrio no experimento de Serin. Ficou evidente, então, que a interação elétron-fônon está diretamente ligada ao fenômeno da supercondutividade. A figura 7 apresenta o resultado obtido por Serin.

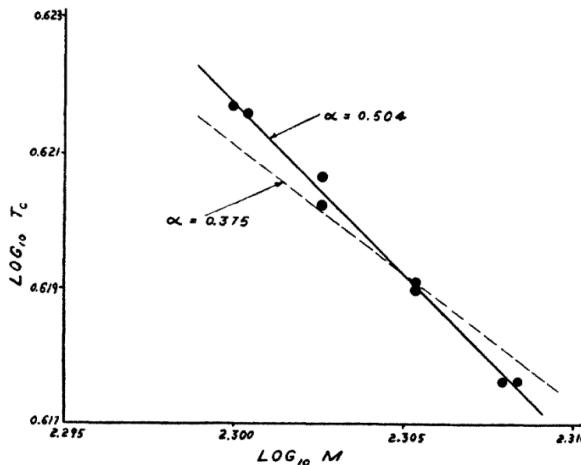


Figura 7 – Efeito isotópico para o Hg. Figura extraída de (2)

Em 1956, em Champaign, Estados Unidos, Leon Cooper (19) resolveu o problema que mais adiante seria chamado de instabilidade de Cooper. O problema consiste em dois elétrons se movendo sobre um mar de Fermi, ou seja, os elétrons se movem sobre uma superfície de Fermi cujos estados menos energéticos estão todos ocupados. Cooper descobriu que, neste caso, para uma força atrativa arbitrariamente pequena, os elétrons formam um estado ligado. Isso significa que a superfície de Fermi é instável para elétrons individuais, sendo o par ligado o novo estado fundamental. Este par ligado de elétrons recebe o nome de par de Cooper e, para a atração mediada por fônlons, sua energia é dada por:

$$E = -2\omega_D \exp\left(-\frac{2}{g_0 \rho(E_F)}\right) \quad (6)$$

Na equação 6, temos:

- ω_D é a frequência de Debye;
- g_0 é uma medida da intensidade de ligação do par;
- $\rho(E_F)$ é a densidade de estados na superfície de Fermi;

Em 1957, John Bardeen, Leon Cooper e John Robert Schrieffer (20)(21) apresentaram a primeira teoria microscópica da supercondutividade, que mais tarde ficou conhecida como a Teoria BCS (nome dado em referência aos sobrenomes dos três cientistas). A teoria se baseia em escrever uma função de onda coerente, macroscópica e coletiva para os pares de Cooper na fase supercondutora. A teoria prevê que, ao transicionar para a fase supercondutora, um gap se formará em torno do nível de Fermi, separando os níveis ocupados e desocupados, de forma que sua largura corresponde à energia necessária para excitar um par de Cooper em dois elétrons não ligados. Assim, apenas os elétrons próximos da superfície de Fermi formarão pares. A teoria ainda estabelece que o mecanismo responsável pela formação do par de Cooper é a

interação elétron-fônon, corroborando o efeito isotópico observado por Serin, e que os elétrons que formam o par de Cooper possuem spin e vetor de onda opostos, gerando uma configuração de spin e energia cinética nulas.

Originalmente, a teoria BCS foi desenvolvida para o chamado limite de acoplamento fraco (WCL), onde $\lambda = g_0\rho(E_F) \ll 1$. No entanto, em 1960, em Leningrado, União Soviética, Gerasim Matveevich Eliashberg (22) ampliou a teoria BCS para incluir casos no limite de acoplamento forte (SCL), corrigindo, assim, os valores do expoente isotópico de alguns materiais cujo acoplamento é fonônico, mas possuem $\alpha \neq 0.5$.

Em geral, o expoente isotópico é utilizado para indicar se o mecanismo de pareamento do material supercondutor é ou não fonônico. Materiais que são completamente explicados pela teoria BCS são chamados supercondutores convencionais, enquanto os demais são chamados supercondutores não convencionais. A Tabela 1 (23) apresenta alguns valores experimentais do expoente isotópico:

	$T_c(K)$	α	
Zn	0.9	0.45	WCL
Pb	7.2	0.49	WCL
Hg	4.2	0.49	WCL
Mo	0.9	0.33	WCL
Os	0.65	0.2	SCL
Ru	0.49	0.0	SCL
Zr	0.65	0.0	SCL
Nb_3Sn	23	0.08	Não convencional
MgB_2	39	0.35	WCL
$YBa_2Cu_3O_7$	90	0.0	Não convencional

Tabela 1 – Valores de T_c e α para alguns materiais. Tabela extraída de (23)

Vemos que supercondutores convencionais como zinco (Zn), chumbo (Pb) e o mercúrio (Hg) possuem valores de expoente isotópico muito próximos de 0.5 como previsto no limite de acoplamento fraco. Enquanto o molibdênio (Mo) e o diboreto de magnésio (MgB_2) possuem efeito reduzido. Materiais como ósmio (Os), rutênio (Ru) e o zircônio (Zr), descritos pelo limite de acoplamento forte, apresentam muito pouco ou nenhum efeito isotópico. Vemos ainda que supercondutores não convencionais podem não apresentar efeito isotópico, como no caso do $YBa_2Cu_3O_7$, como podem ter efeito isotópico, ainda que bastante reduzido, como é o caso do composto intermetálico de niobio-estanho (Nb_3Sn). Materiais não convencionais que apresentam efeito isotópico são ainda tema de debate e em geral são analisados caso a caso. As causas possíveis podem ser a presença de um mecanismo híbrido de pareamento (fonônico + não fonônico) ou alterações causadas pela forte correlação eletrônica presente nestes materiais.

Ao longo dos anos que se seguiram, muitas descobertas acerca da teoria da supercondutividade foram realizadas, porém ainda não há uma teoria definitiva que englobe o fenômeno tal como ele é observado nos mais diversos tipos de materiais. A seguir destacamos alguns supercondutores descobertos que ilustram a variedade de materiais que apresentam esta fase.

Em 1978, em Darmstadt, Alemanha, Frank Steglich (3) publicou a descoberta de supercondutividade no composto CeCu_2Si_2 , que foi o primeiro supercondutor "heavy-fermion" descoberto. Esses materiais são, em geral, intermetálicos e possuem uma terra rara em sua composição, e sua principal característica é o fato de seus elétrons possuirem uma massa efetiva muitas vezes maior do que a massa do elétron livre. A figura 8 mostra o resultado obtido por Steglich.

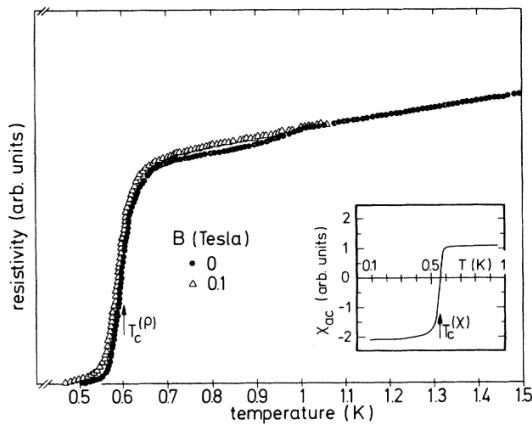


Figura 8 – Resistividade em função da temperatura para o composto CeCu_2Si_2 . Figura extraída de (3)

Em 1986, em Zurique, Suíça, Johannes Georg Bednorz e Karl Alexander Müller (4) publicaram a descoberta da supercondutividade no LaBaCuO , que, além de ser um material cerâmico (não condutor em seu estado normal), também possuía a maior temperatura crítica descoberta até o momento, cerca de 34K. A descoberta de Bednorz e Müller impulsionou o estudo de uma nova classe de supercondutores, os chamados cupratos, característicos pela presença dos elementos cobre e oxigênio em sua composição. A figura 9 mostra o resultado obtido por Bednorz e Müller.

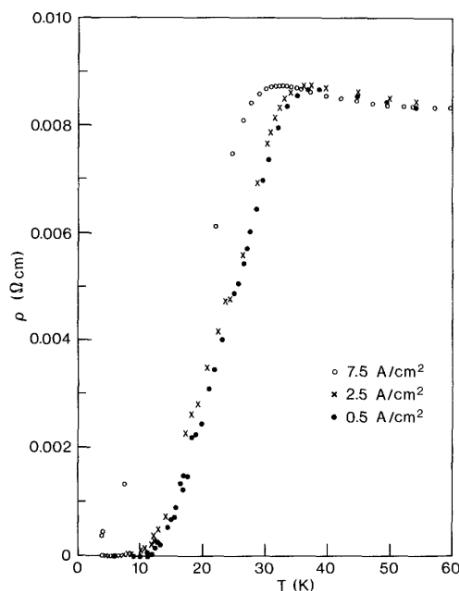


Figura 9 – Resistividade em função da temperatura para o LaBaCuO . Figura extraída de (4).

Outras classes de supercondutores que podemos citar, em ordem cronológica de descobrimento do primeiro integrante, estão listadas a seguir.

- Supercondutores baseados em fulereno (K_3C_{60} descoberto por Arthur Foster Hebard et al em 1991 , Nova Jersey, Estados Unidos) (24)
- Rutenato de Estrôncio (Sr_2RuO_4 descoberto por Yoshiteru Maeno et al em 1994 , Hiroshima, Japão) (25)
- Supercondutores baseados em alótropos do Carbono (Nanotubo de Carbono descoberto por Zikang Tang et al em 2001 , Tóquio, Japão) (26)
- Supercondutores baseados em ferro-pnictídeo ($LaOFeP$ descoberto por Yoichi Kamihara et al em 2006 ,Tóquio, Japão) (27)
- Supercondutores baseados em Níquel ($NdNiO$ descoberto em por Danfeng Li et al em 2019 , Stanford, Estados Unidos) (28)

Na figura 10 encontra-se um gráfico (elaborado pelo autor) que apresenta alguns supercondutores, suas temperaturas críticas e ano de descobrimento.

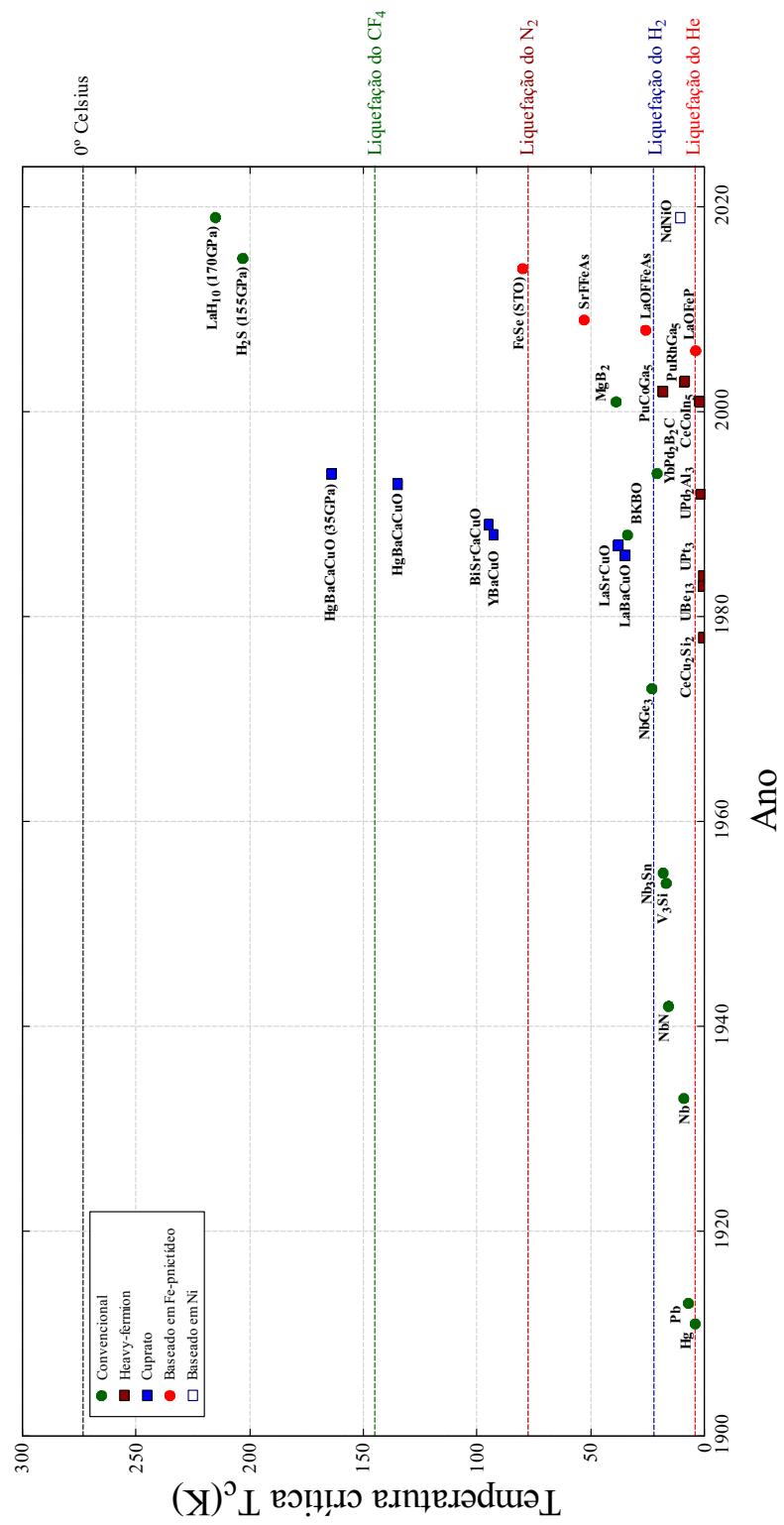


Figura 10 – Descoberta de alguns supercondutores

3 TEORIA BCS

Neste capítulo vamos introduzir alguns conceitos importantes da supercondutividade a partir da teoria desenvolvida por John Bardeen, Leon Cooper e John Robert Schrieffer em 1957 (20). A Teoria BCS descreve microscopicamente apenas os supercondutores convencionais, mas a partir de sua formulação é possível, com algumas considerações, obter modelos que conseguem descrever propriedades de supercondutores não convencionais.

A formulação apresentada neste capítulo considera uma interação atrativa entre elétrons, que pode, sob certas circunstâncias, superar a repulsão coulombiana, resultando em uma interação efetiva atrativa, ainda que, para fins de cálculo, a repulsão coulombiana não apareça explicitamente. Como consequência dessa consideração, o parâmetro de acoplamento presente nas equações será um parâmetro efetivo.

É possível introduzir manualmente um termo de repulsão coulombiana no modelo e, neste caso, o parâmetro de acoplamento deixaria de ser o efetivo para se tornar um parâmetro atrativo que compete com a repulsão eletrostática. No entanto, essa abordagem está além do escopo deste trabalho.

3.1 INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON E O HAMILTONIANO BCS

A interação elétron-fônon, responsável pela atração efetiva entre elétrons que dão origem à supercondutividade convencional, é essencialmente um fenômeno quântico. Ainda assim, é possível compreendê-la a partir de um raciocínio clássico que ilustra o funcionamento do mecanismo fonônico. Quando um elétron se move pelo material, ele interage com seus arredores de duas maneiras: primeiro, por meio da interação coulombiana, e segundo, devido ao princípio de exclusão de Pauli. Intuitivamente, a interação entre elétrons é sempre repulsiva em ambos os casos, já que cargas de mesmo sinal se repelem e, sendo o elétron um férnion, ele não pode ocupar o mesmo estado quântico que outro elétron. Para identificar a resultante atrativa da interação entre elétrons, é necessário considerar interações indiretas, mediadas por outros agentes. Nesse contexto, analisaremos a interação dos elétrons com os íons da rede cristalina e as condições em que essas interações podem superar as forças repulsivas entre os elétrons.

A partir da passagem do elétron, surge uma região de potencial positivo (neste caso, a referência é o elétron com carga negativa; logo, um potencial negativo atrai a carga negativa), na qual os íons positivos da rede tendem a se aproximar devido à interação coulombiana, criando uma região de potencial negativo na área adjacente a onde os íons se aproximaram. Um segundo elétron sente a modulação do potencial gerada, podendo ser aprisionado. Em suma, o primeiro elétron leva consigo a modulação do potencial eletrostático, e um segundo elétron pode sentir uma atração coulombiana pela região negativa desse potencial, de forma a ser "aprisionado". Como resultado desse processo, os elétrons podem formar um par ligado.

Esse efeito está ilustrado na figura 11, que apresenta uma rede unidimensional de íons idênticos, representados por círculos. As posições de equilíbrio estão representadas por circunfe-

rências. Δr é o deslocamento do íon da posição de equilíbrio, e φ é a modulação do potencial gerada pela interação elétron-fônon. É possível notar que, onde os íons estão mais próximos, encontra-se a região de potencial negativo na qual um elétron pode ser aprisionado.

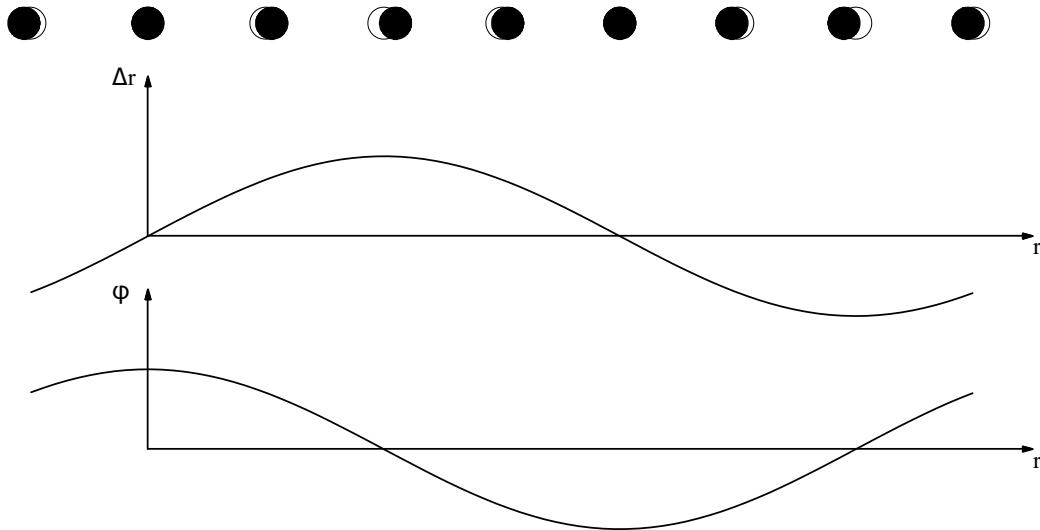


Figura 11 – Visão clássica da vibração de rede e seu efeito no potencial

Este simples exemplo, utilizando uma abordagem clássica, tem função apenas ilustrativa, pois capta a essência do mecanismo fonônico. Contudo, o correto é tratarmos a interação elétron-fônon por meio de uma abordagem quântica, utilizando um diagrama de Feynman, conforme apresentado na Figura 12.

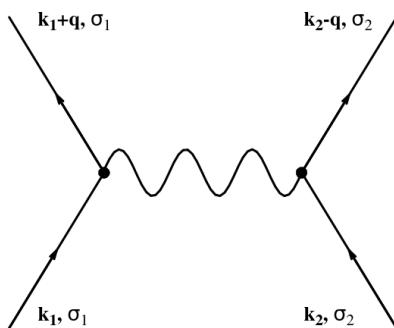


Figura 12 – Diagrama de Feynman de dois elétrons interagindo via troca de fônon

No diagrama temos um primeiro elétron (à esquerda), inicialmente com momento \mathbf{k}_1 e spin σ_1 e o segundo elétron (à direita) com momento \mathbf{k}_2 e spin σ_2 . O segundo elétron excita um fônon com momento \mathbf{q} , este processo reduz o momento do elétron para $\mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}$. Então o primeiro elétron absorve o fônon e neste processo seu momento passa a ser $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$. O resultado deste processo é uma transferência efetiva de momentos entre os elétrons mediada pelo fônon. Importante destacar que não importa qual elétron excitou ou absorveu o fônon, assim não

é preciso desenhar uma seta para o fônon no diagrama, apenas nos interessa a interação efetiva entre os elétrons.

O potencial de interação terá a forma semelhante à equação 4, encontrada por Frölich (18).

$$V_{\text{eff}} = g_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} \quad (7)$$

Nesta equação, o fônon de momento \mathbf{q} envolvido no processo possui frequência $\omega_{\mathbf{q}}$, e $g_{\mathbf{q}}$ está relacionado à matriz de espalhamento do elétron ao absorver ou excitar o fônon e é da ordem de grandeza de $\sqrt{m/M}$, sendo m a massa do elétron e M a massa do íon. Como $M \gg m$, os elétrons estarão apenas fracamente acoplados, o que justifica a não utilização de diagramas de ordem superior. Analisando a expressão, vemos que a interação será atrativa apenas para valores de $\omega \ll \omega_{\mathbf{q}}$, então substituiremos $\omega_{\mathbf{q}}$ pela maior frequência disponível para os fônons que é a frequencia de Debye ω_D , assim apenas fônons que geram interação atrativa serão considerados.

$$V_{\text{eff}} = g_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega^2 - \omega_D^2} \quad |\omega| < \omega_D \quad (8)$$

Como estamos interessados em elétrons que caiam em uma faixa $\pm k_B T$ em torno da energia de Fermi, e a supercondutividade ocorre no regime em que $\hbar\omega_D \gg k_B T$, então a interação que nos interessa toma a forma:

$$V_{\text{eff}} = -g_{\mathbf{q}} \quad |\omega| < \omega_D \quad (9)$$

onde consideramos que a dependência com a frequência pode ser desprezada. Esta interação contribuirá para o hamiltoniano na fase supercondutora com o termo:

$$H = - \sum g_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} c_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} \quad (10)$$

onde $c_{\mathbf{k}, \sigma}^{(\dagger)}$ é o operador que aniquila (cria) um elétron com vetor de onda \mathbf{k} e spin σ . A soma é feita para todos os valores de \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 , σ_1 , σ_2 e \mathbf{q} , com a restrição de que os elétrons envolvidos estejam dentro da faixa $\pm \hbar\omega_D$ em torno do nível de Fermi. Como a supercondutividade envolve a condensação dos pares de Cooper, o par ligado deve ter spin inteiro para que o princípio de exclusão de Pauli não seja um obstáculo. Logo, os termos relevantes do hamiltoniano são aqueles que nos retornam spin 0. Também consideraremos que o momento dos elétrons deve ser oposto, pois os elétrons nessa configuração formarão pares com energia cinética nula, garantindo a conservação do momento linear tanto no processo de formação do par quanto no condensado. Temos, então:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \quad -\mathbf{k} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q} \quad (11)$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}' = -\mathbf{k}_2 \quad (12)$$

Teremos a garantia de conservação de momento, onde o momento transferido pelo fônon é igual a diferença dos momentos dos elétrons antes e depois do espalhamento.

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (13)$$

Substituindo no hamiltoniano, encontramos:

$$H = - \sum_{\mathbf{kk}'} g_{\mathbf{kk}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (14)$$

O hamiltoniano BCS é então a soma deste termo com a energia cinética dos elétrons.

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{kk}'} g_{\mathbf{kk}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (15)$$

$\varepsilon_{\mathbf{k}}$ é a relação de dispersão dos elétrons de condução em relação ao potencial químico. A soma no segundo termo deve ser restrita a valores de \mathbf{k} e \mathbf{k}' dos elétrons cujas energias estejam dentro de uma faixa $\pm \hbar\omega_D$ em torno do nível de Fermi.

3.2 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO (HARTREE-FOCK) E DIAGONALIZAÇÃO DO HAMILTONIANO

Na seção anterior encontramos o hamiltoniano BCS e agora iremos obter algumas propriedades do supercondutor a partir da sua solução. O termo de interação encontrado na equação 14 possui um produto de quatro operadores, o que impede ele de ser resolvido exatamente, e por esta razão teremos de recorrer a um método aproximativo. Seguindo a abordagem original desenvolvida inicialmente na teoria BCS, utilizaremos uma aproximação Hartree-Fock. Esta aproximação consiste em uma aproximação de campo médio na qual reescrivemos o produto quatro operadores como uma soma contendo apenas termos com produtos de no máximo dois operadores. Esta aproximação pode ser vista com mais detalhes na referência (29). A aproximação que utilizaremos está escrita a seguir na equação 16:

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \approx \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (16)$$

Substituindo esta aproximação na equação 15 obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{BCS} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{kk}'} g_{\mathbf{kk}'} \left(\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \right) + \\ & + \sum_{\mathbf{kk}'} g_{\mathbf{kk}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

Outra consideração que faremos será:

$$g_{\mathbf{kk}'} = g \quad (18)$$

que consiste em desprezar a dependência do vetor de onda neste termo, ou seja, consideramos que o parâmetro de acoplamento tem o mesmo valor para todos os pares de Cooper, independendo do valor de \mathbf{k} e \mathbf{k}' . A priori pode parecer uma consideração injustificada, mas os supercondutores convencionais possuem uma propriedade chamada "isotropia do parâmetro de ordem", que é adicionada ao modelo através desta consideração. Mais adiante a consequência desta consideração será mais bem explorada. Nossa hamiltoniana BCS assume a forma:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (19)$$

Agora vamos definir o gap supercondutor e seu complexo conjugado. Eles são escritos na forma:

$$\Delta = g \sum_{\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad \Delta^* = g \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \quad (20)$$

Notando que os indices \mathbf{k} e \mathbf{k}' dos somatórios são mudos. Substituindo estas expressões no hamiltoniano da equação 19:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) + \frac{1}{g} |\Delta|^2 \quad (21)$$

Renomeando o termo constante que aparece no hamiltoniano

$$E_g = -\frac{1}{g} |\Delta|^2 \quad (22)$$

A expressão do hamiltoniano BCS em campo médio será então:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = H_{\text{BCS}} - E_g \quad (23)$$

Com

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) \quad (24)$$

O hamiltoniano BCS em campo médio como encontrado na equação 24 precisa ser diagonal para que possamos obter propriedades da fase supercondutora. Um hamiltoniano pode ser não diagonal devido a várias razões, mas no nosso caso é devido ao fato dele possuir termos que envolvem operadores para valores diferentes de spin e vetor de onda. Para contornar este problema, utilizaremos o método de diagonalização do hamiltoniano através de uma transformação de Bogoliubov-Valatin, metodo desenvolvido por Nikolay Nikolayevich Bogoliubov (30) e Jean Gaston Valatin (31). O método consiste em reescrever o hamiltoniano através de uma transformação unitária em termos de novos operadores para os quais ele é diagonal.

Começaremos expandindo o hamiltoniano:

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} - \Delta^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \quad (25)$$

Vamos definir os espinores

$$\psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \quad \psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (26)$$

E a matriz

$$\mathbb{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta \\ -\Delta^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (27)$$

Assim podemos reescrever o hamiltoniano na forma de um produto matricial

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \mathbb{H}_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (28)$$

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta \\ -\Delta^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (29)$$

Encontramos os autovalores de energia resolvendo a equação:

$$\det(\mathbb{H}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} \mathbb{I}) = 0 \quad (30)$$

Onde:

- $E_{\mathbf{k}}$ é o autovalor de energia;
- \mathbb{I} é a matriz identidade;

Os autovalores de energia são:

$$E_{\mathbf{k}}^\pm = \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2} \quad (31)$$

Vamos introduzir agora a matriz de transformação unitária \mathbb{U} e sua adjunta \mathbb{U}^\dagger , ainda desconhecidas, mas que devem respeitar as propriedades:

$$\mathbb{U}^\dagger \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta \\ -\Delta^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \mathbb{U} = \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}}^+ & 0 \\ 0 & E_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$\mathbb{U} \mathbb{U}^\dagger = \mathbb{I} \quad (33)$$

As colunas da matriz unitária que diagonaliza a matriz \mathbb{H} são as coordenadas dos seus autovetores:

$$\xi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad \xi_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} -v_{\mathbf{k}}^* \\ u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \quad (34)$$

De forma que temos:

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \quad (35)$$

A matriz unitária adjunta assume a forma:

$$\mathbb{U}^\dagger = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (36)$$

Como a transformação é unitária, sabemos que $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. O hamiltoniano diagonalizado para novos operadores deve ter a forma:

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \mathbb{U} \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}}^+ & 0 \\ 0 & E_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \mathbb{U}^\dagger \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (37)$$

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & a_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}}^+ & 0 \\ 0 & E_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (38)$$

De onde é evidente que:

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & a_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \mathbb{U} \quad (39)$$

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbb{U}^\dagger \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (40)$$

A partir destas equações e das propriedades da matriz de transformação unitária, é possível encontrar:

$$a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger u_{\mathbf{k}} + c_{-\mathbf{k}\downarrow} v_{\mathbf{k}} \quad a_{-\mathbf{k}\downarrow} = -c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger v_{\mathbf{k}}^* + c_{-\mathbf{k}\downarrow} u_{\mathbf{k}}^* \quad (41)$$

$$a_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = -v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (42)$$

De maneira recíproca

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger u_{\mathbf{k}}^* - a_{-\mathbf{k}\downarrow} v_{\mathbf{k}} \quad c_{-\mathbf{k}\downarrow} = a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger v_{\mathbf{k}}^* + a_{-\mathbf{k}\downarrow} u_{\mathbf{k}} \quad (43)$$

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (44)$$

O que nos interessa agora é encontrar as coordenadas dos autovetores $\xi_{\mathbf{k}}^\dagger$ e $\xi_{\mathbf{k}}$. Para isso escreveremos as equações de autovetores:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^+ & -\Delta \\ -\Delta^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (45)$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^- & -\Delta \\ -\Delta^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -v_{\mathbf{k}}^* \\ u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (46)$$

Que nos retornam o sistema de equações:

$$\begin{cases} u_{\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^+) - v_{\mathbf{k}}\Delta = 0 \\ -u_{\mathbf{k}}\Delta^* - v_{\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^+) = 0 \\ -v_{\mathbf{k}}^*(\varepsilon_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^+) - u_{\mathbf{k}}^*\Delta = 0 \\ v_{\mathbf{k}}^*\Delta^* - u_{\mathbf{k}}^*(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^+) = 0 \\ |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \end{cases} \quad (47)$$

Onde adicionamos a condição de ortonormalidade como uma das equações para garantir que os resultados provenientes deste sistema estejam de acordo com a unitariedade da transformação, além de evitarmos a solução trivial. Obtemos, então:

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^+} \right) \quad (48)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^+} \right) \quad (49)$$

$$u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^* = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \quad (50)$$

Podemos por fim escrever o hamiltoniano em sua forma diagonal:

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & a_{\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}}^+ & 0 \\ 0 & E_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (51)$$

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + E_{\mathbf{k}}^- a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (52)$$

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^+ (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}) \quad (53)$$

3.3 EQUAÇÃO DO GAP

A grandeza mais imediata que podemos obter do hamiltoniano diagonalizado é o gap supercondutor. A teoria BCS prevê que quando o material transiciona para a fase supercondutora, um gap se abrirá em torno do nível de fermi, separando os níveis ocupados e desocupados. Este gap corresponde à energia necessária para desfazer o estado ligado do par de Cooper em dois elétrons individuais. Além disso, o gap também está intimamente relacionado ao nosso parâmetro

de ordem, tendo ambos valor nulo na fase normal e não nulo na fase supercondutora. Importante destacar que, por questão de simplicidade, nos referimos ao Δ como gap, mas essencialmente o gap de energia que se abre em torno do nível de Fermi tem valor 2Δ . No texto também podemos nos referir ao Δ como parâmetro de ordem, pois para fins de cálculo eles possuem as mesmas propriedades.

Vamos partir da equação 20 que definimos para o gap anteriormente:

$$\Delta = g \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \quad (54)$$

Para resolver esta equação, precisamos primeiro calcular o valor médio que aparece nela. Sabemos que:

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow} = a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger v_{\mathbf{k}}^* + a_{-\mathbf{k}\downarrow} u_{\mathbf{k}} \quad (55)$$

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (56)$$

Logo, teremos:

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} = v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (57)$$

Onde utilizaremos as propriedades de comutação dos operadores de quasipartículas

$$\{a_{\mathbf{k}\sigma}, a_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (58)$$

$$\{a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad (59)$$

$$\{a_{\mathbf{k}\sigma}, a_{\mathbf{k}'\sigma'}\} = 0 \quad (60)$$

Teremos:

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \left(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \quad (61)$$

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \left(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} - 1 \right) \quad (62)$$

$$\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \left(\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle - 1 \right) \quad (63)$$

Note que apareceram as médias dos operadores número do lado direito da equação.

$$\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \left(\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle + \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle - 1 \right) \quad (64)$$

As médias dos operadores número, nada mais são do que a distribuição de Fermi-Dirac:

$$\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1} \quad (65)$$

$$\langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1} \quad (66)$$

Além de que o produto $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*$ já foi definido da equação 50. Utilizando estes resultados, temos:

$$\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \left(\frac{2}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1} - 1 \right) \quad (67)$$

$$\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (68)$$

A partir deste resultado, podemos finalmente escrever a equação do gap supercondutor:

$$\Delta = g \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (69)$$

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (70)$$

Podemos ainda escrever a equação do gap para $T = 0$.

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_0|^2}} \quad (71)$$

E para $T = T_c$ ($\Delta = 0$)

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{2k_B T_c} \right) \quad (72)$$

Podemos reescrever essas equações de gap como integrais de energia, desde que a densidade de estados no em torno do nível de Fermi (E_F) seja aproximadamente constante.

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{E(\epsilon)} \tanh \left(\frac{E(\epsilon)}{2k_B T} \right) \quad (73)$$

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta_0|^2}} \quad (74)$$

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh \left(\frac{\epsilon}{2k_B T_c} \right) \quad (75)$$

Onde temos que:

- $\lambda = g\rho(E_F)$ é a constante adimensional de acoplamento;
- $E_D = \hbar\omega_D$ é a energia de Debye;

3.4 SOLUÇÕES ANALÍTICAS DA EQUAÇÃO DO GAP

Vamos obter algumas propriedades da fase supercondutora resolvendo analiticamente as equações de gap obtidas na seção anterior.

3.4.1 Solução analítica de T_c

Primeiro vamos resolver a equação 73 para a temperatura crítica T_c ($\Delta = 0$), teremos:

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T_c}\right) \quad (76)$$

Fazendo a substituição

$$z = \frac{\varepsilon}{2k_B T_c}$$

Teremos

$$1 = \lambda \int_0^Z \frac{dz}{z} \tanh(z) \quad (77)$$

Com

$$Z = \frac{E_D}{2k_B T_c}$$

Fazendo a integração por partes, teremos:

$$u = \tanh(z) \quad dv = \frac{dz}{z}$$

$$v = \ln(z) \quad du = \operatorname{sech}^2(z) dz$$

$$\int_a^b u dv = [uv]_a^b - \int_a^b v du$$

$$\int_0^Z \frac{dz}{z} \tanh(z) = [\tanh(z) \ln(z)]_0^Z - \int_0^Z \ln(z) \operatorname{sech}^2(z) dz$$

Como estamos no regime onde $\hbar\omega_D >> k_B T_c$, teremos:

$$\int_0^Z \frac{dz}{z} \tanh(z) = \ln(Z) - \int_0^\infty \ln(z) \operatorname{sech}^2(z) dz$$

Utilizando o resultado:

$$\int_0^\infty \ln(z) \operatorname{sech}^2(z) dz = -\ln\left(\frac{4e^\gamma}{\pi}\right)$$

Onde γ é a constante de Euler-Mascheroni. Retornando à equação 76, teremos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \ln\left(\frac{E_D}{2k_B T_c}\right) + \ln\left(\frac{4e^\gamma}{\pi}\right) \\ k_B T_c &= \left(\frac{2e^\gamma}{\pi}\right) E_D e^{-1/\lambda} \end{aligned} \quad (78)$$

$$k_B T_c \approx 1.13 E_D e^{-1/\lambda} \quad (79)$$

3.4.2 Solução analítica de Δ_0

A equação do gap para Δ_0 ($T = 0$) é escrita como:

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} \quad (80)$$

Fazendo a substituição:

$$\varepsilon = \Delta_0 \tan(\theta) \quad d\varepsilon = \Delta_0 \sec^2(\theta) d\theta \quad \theta' = \operatorname{arctg}\left(\frac{E_D}{\Delta_0}\right)$$

Teremos

$$\begin{aligned} 1 &= \lambda \int_0^{\theta'} \frac{\sec^2(\theta) d\theta}{\sqrt{1 + \tan^2(\theta)}} \\ 1 &= \lambda \int_0^{\theta'} \sec(\theta) d\theta \\ 1 &= \lambda \ln|\theta' + \sec(\theta')| \end{aligned}$$

Como estamos no limite de acoplamento fraco, então temos que λ é pequeno, assim $E_D/\Delta_0 \gg 1$, e poderemos reescrever a equação como:

$$1 = \lambda \operatorname{arcsenh}\left(\frac{E_D}{\Delta_0}\right) \approx \lambda \ln\left(\frac{2E_D}{\Delta_0}\right)$$

$$\Delta_0 = \frac{E_D}{\operatorname{senh}(1/\lambda)}$$

$\Delta_0 \approx 2E_D e^{-1/\lambda}$

(81)

Dividindo a equação 81 pela equação 79, chegamos no resultado:

$\frac{\Delta_0}{k_B T_c} = 1.76$

(82)

Que é um resultado bastante geral e concorda relativamente bem com muitos supercondutores convencionais, independendo do valor de λ .

3.4.3 Solução analítica de $\Delta(T)$ para $(T \ll T_c)$

Partimos da equação:

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \tanh\left(\frac{E(\varepsilon)}{2k_B T}\right)$$

Se $T \ll T_c$ podemos escrever:

$$\begin{aligned} \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} &\approx \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \tanh\left(\frac{E(\varepsilon)}{2k_B T}\right) \\ \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} &= \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \frac{\exp(\frac{E(\varepsilon)}{k_B T}) - 1}{\exp(\frac{E(\varepsilon)}{k_B T}) + 1} \\ \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} &= \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \left[1 - \frac{2}{\exp(\frac{E(\varepsilon)}{k_B T}) + 1} \right] \\ \int_0^{E_D} d\varepsilon \left[\frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} \right] &= \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \left[-\frac{2}{\exp(\frac{E(\varepsilon)}{k_B T}) + 1} \right] \\ \ln\left(\frac{2E_D}{\Delta_0}\right) - \ln\left(\frac{2E_D}{\Delta}\right) &= \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \left[-\frac{2}{\exp(\frac{E(\varepsilon)}{k_B T}) + 1} \right] \\ \ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) &= \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \left[\frac{2}{\exp(\frac{E(\varepsilon)}{k_B T}) + 1} \right] \end{aligned}$$

Começando pela integral:

$$I_1 = 2 \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}} \left[\frac{1}{\exp\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}}{k_B T}\right) + 1} \right]$$

Para $T \ll T_c$, teremos:

$$\exp\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}}{k_B T}\right) + 1 \approx \exp\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}}{k_B T}\right)$$

$$\Delta \approx \Delta_0$$

De forma que:

$$I_1 = 2 \int_0^{E_D} \frac{\exp\left(-\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta_0|^2}/k_B T\right)}{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta_0|^2}} d\epsilon$$

Utilizando a substituição

$$\epsilon = \Delta_0 \operatorname{senh}(\theta) \quad d\epsilon = \Delta_0 \cosh(\theta) d\theta$$

$$\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta_0|^2} = \Delta_0 \cosh(\theta)$$

E considerando $E_D \gg \Delta_0$, temos:

$$\begin{aligned} I_1 &= 2 \int_0^{\infty} \frac{\exp(-\Delta_0 \cosh(\theta)/k_B T)}{\Delta_0 \cosh(\theta)} \Delta_0 \cosh(\theta) d\theta \\ I_1 &= 2 \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\Delta_0 \cosh(\theta)}{k_B T}\right) d\theta \end{aligned}$$

Utilizando a aproximação:

$$\cosh(\theta) \approx 1 + \frac{\theta^2}{2}$$

Teremos:

$$\begin{aligned} I_1 &= 2 \int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{\Delta_0 (1 + \theta^2/2)}{k_B T}\right] d\theta \\ I_1 &= 2 \exp\left(-\frac{\Delta_0}{k_B T}\right) \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\Delta_0 \theta^2}{2k_B T}\right) d\theta \end{aligned}$$

A integral à direita é a integral gaussiana cujo resultado conhecido é:

$$\int_0^\infty \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Teremos:

$$I_1 = 2 \exp\left(-\frac{\Delta_0}{k_B T}\right) \sqrt{\frac{\pi k_B T}{2\Delta_0}}$$

$$I_1 = \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{\Delta_0}} \exp\left(-\frac{\Delta_0}{k_B T}\right)$$

Retornando á expressão inicial, teremos:

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) = \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{\Delta_0}} \exp\left(-\frac{\Delta_0}{k_B T}\right)$$

Como $\Delta \approx \Delta_0$, podemos escrever:

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) = -\ln\left(\frac{\Delta}{\Delta_0}\right)$$

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) = -\ln\left(1 + \frac{\Delta - \Delta_0}{\Delta_0}\right)$$

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) \approx 1 - \frac{\Delta}{\Delta_0}$$

Por fim, retornando a equação inicial, temos:

$$1 - \frac{\Delta}{\Delta_0} = \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{\Delta_0}} \exp\left(-\frac{\Delta_0}{k_B T}\right)$$

$$\boxed{\Delta(T) = \Delta_0 - (2\pi\Delta_0 k_B T)^{1/2} \exp\left(-\frac{\Delta_0}{k_B T}\right)}$$

(83)

3.4.4 Solução analítica de $\Delta(T)$ para ($T \approx T_c$)

Vamos partir da equação do gap

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{E(\varepsilon)} \tanh\left(\frac{E(\varepsilon)}{2k_B T}\right)$$

Para $T \approx T_c$ teremos $\Delta \approx 0$, então:

$$1 = \lambda \int_0^{E_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T_c}\right)$$

Na região onde estamos interessados, estas duas integrais devem ser próximas. Assim teremos:

$$\begin{aligned} \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_c}\right) &\approx \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{E(\epsilon)} \tanh\left(\frac{E(\epsilon)}{2k_B T}\right) \\ \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_c}\right) &= \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}}{2k_B T}\right) \end{aligned}$$

Usando a aproximação para Δ pequeno:

$$(\epsilon^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}} = \epsilon + \frac{\Delta^2}{2\epsilon}$$

$$(\epsilon^2 + \Delta^2)^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{\Delta^2}{2\epsilon^3}$$

Substituindo, teremos:

$$\begin{aligned} \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_c}\right) &= \int_0^{E_D} d\epsilon \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\Delta^2}{2\epsilon^3} \right) \tanh\left(\frac{\epsilon + \frac{\Delta^2}{2\epsilon}}{2k_B T}\right) \\ \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_c}\right) &= \int_0^{E_D} d\epsilon \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{\Delta^2}{2\epsilon^3} \right) \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T} + \frac{\Delta^2}{4\epsilon k_B T}\right) \\ \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_c}\right) &= \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T} + \frac{\Delta^2}{4\epsilon k_B T}\right) - \frac{\Delta^2}{2} \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon^3} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T} + \frac{\Delta^2}{4\epsilon k_B T}\right) \end{aligned}$$

Usando uma série de Taylor, chegamos a $\tanh(a+x) = \tanh(a) + \operatorname{sech}^2(a)x$, para x muito pequeno. Aplicando este resultado do lado direito, teremos:

$$\begin{aligned} &\int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \left[\tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T}\right) + \frac{\Delta^2}{4\epsilon k_B T} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\epsilon}{2k_B T}\right) \right] + \\ &- \frac{\Delta^2}{2} \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon^3} \left[\tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T}\right) + \frac{\Delta^2}{4\epsilon k_B T} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\epsilon}{2k_B T}\right) \right] \end{aligned}$$

Reorganizando e desprezando os termos de ordem maior que Δ^2 , temos:

$$\int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T}\right) + \frac{\Delta^2}{4k_B T} \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon^2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\epsilon}{2k_B T}\right) - \frac{\Delta^2}{2} \int_0^{E_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon^3} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T}\right)$$

Para E_D muito grande e utilizando o resultado a seguir (32) nos dois ultimos termos:

$$\int_0^\infty \left[\frac{\tanh(x)}{x^3} - \frac{\operatorname{sech}^2(x)}{x^2} \right] dx = \frac{7\zeta(3)}{\pi^2} \quad (84)$$

Onde ζ é a função zeta de Riemann. Teremos:

$$-\frac{\Delta^2}{8(k_B T)^2} \int_0^\infty \left[\frac{\tanh(x)}{x^3} - \frac{\operatorname{sech}^2(x)}{x^2} \right] dx = -\frac{\Delta^2}{(\pi k_B T)^2} \frac{7\zeta(3)}{8} \quad (85)$$

Substituindo na expressão original, teremos:

$$\int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T_c}\right) - \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T}\right) = -\frac{\Delta^2}{(\pi k_B T)^2} \frac{7\zeta(3)}{8}$$

O lado esquerdo é um número muito pequeno, pode ser escrito como:

$$\int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \left[\tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T_c}\right) - \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T}\right) \right] \approx \frac{T_c}{T} - \left(\frac{T_c}{T}\right)^2$$

Substituindo, teremos:

$$\begin{aligned} \left(\frac{T_c}{T}\right)^2 - \frac{T_c}{T} &= \frac{\Delta^2}{(\pi k_B T)^2} \frac{7\zeta(3)}{8} \\ (k_B T_c)^2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) &= \frac{\Delta^2}{\pi^2} \frac{7\zeta(3)}{8} \\ \Delta(T) &= \pi k_B T_c \left(\frac{8}{7\zeta(3)}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

$$\boxed{\Delta(T) = 3.06 k_B T_c \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

3.5 MÉDIA DE OCUPAÇÃO LOCAL

A média de ocupação pode ser obtida utilizando as expressões dos operadores antigos em termos dos operadores novos (diagonalizados) encontrados através da transformação de Bogoliubov-Valantin. Eles são:

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger u_{\mathbf{k}}^* - a_{-\mathbf{k}\downarrow} v_{\mathbf{k}} \quad c_{-\mathbf{k}\downarrow} = a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger v_{\mathbf{k}}^* + a_{-\mathbf{k}\downarrow} u_{\mathbf{k}}$$

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$$

Como não há resultado magnético, nenhuma das orientações de spin pode ter privilégio sobre a outra. Temos, então:

$$\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^c \rangle = \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^c \rangle \quad (86)$$

$$\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^c \rangle = |u_{\mathbf{k}}|^2 \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle + |v_{\mathbf{k}}|^2 \left(1 - \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle \right) \quad (87)$$

A média local será dada pela equação:

$$n = 1 - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (88)$$

3.6 ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL

Para obtermos a energia no estado fundamental ($T = 0$) temos que calcular a média do hamiltonio (33).

$$E = \langle \mathcal{H}_{\text{BCS}} \rangle = \langle \mathbf{H} \rangle - E_g \quad (89)$$

onde

$$\langle \mathbf{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^+ \left(\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle + \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle - 1 \right) \quad (90)$$

Relembrando que

$$E_g = - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = - \frac{\Delta^2}{g} \quad (91)$$

A energia de condensação é dada por:

$$E_c = E^{(s)} - E^{(n)} = \langle \mathbf{H}^{(s)} \rangle - \langle \mathbf{H}^{(n)} \rangle - E_g \quad (92)$$

Ou, alternativamente

$$E_c = K^{(s)} - K^{(n)} + E_g \quad (93)$$

Onde $\Delta K = K^{(s)} - K^{(n)}$ é a variação da energia cinética na fase supercondutora em relação a fase normal.

4 SIMETRIA DO PARÂMETRO DE ORDEM SUPERCONDUTOR

No inicio do capítulo anterior foi destacado como a interação entre elétrons que intuitivamente deve ser repulsiva, pode ser atrativa em uma região em torno do nível de Fermi quando consideramos uma interação mediada por fônon. Essa interação atrativa pode superar a repulsão coulombiana e dar origem a uma atração efetiva. Em nosso hamiltoniano esta interação atrativa foi representada pelo parâmetro de acoplamento $-g$, assim com um sinal de menos, e sem dependência do vetor de onda. Esta forma de escrever o parâmetro de acoplamento proveniente da interação elétron-fônon é característica dos supercondutores convencionais e torna o parâmetro de ordem simétrico no espaço recíproco, exibindo uma interação sempre atrativa, independente do valor de \mathbf{k} . O hamiltoniano BCS assumiu a forma:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - g \sum_{\mathbf{kk}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (94)$$

A superfluidez do ${}^3\text{He}$, descoberta por Douglas Dean Osheroff e seus colaboradores em 1973 (34) é um fenômeno que compartilha diversas propriedades com a supercondutividade (como a condensação de pares de férmons e a abertura de um gap de energia) e desde o fim da década de 1970 já era entendido possuindo uma simetria de parâmetro de ordem diferente (35)(36) (p-wave symmetry) dos supercondutores convencionais (s-wave symmetry). A simetria anisotrópica surge principalmente do fato da interação coulombiana não permitir que a interação seja atrativa de forma simétrica no espaço recíproco (37). Assim, quando o gap se abre em torno do nível de Fermi, aparecem nós (pontos onde o parâmetro de ordem muda de sinal). Essa característica geralmente ocorre em materiais com mecanismos de pareamento não fonônicos, consequentemente supercondutores não convencionais (38)(39). Note que a interação coulombiana ainda não aparece explicitamente no modelo, mesmo que a introdução da simetria tenha essa origem eletrostática. Desde a década de 1960 modelos teóricos que introduziam diferentes simetrias para o caso do ${}^3\text{He}$ já haviam sido propostos, como o de Philip Warren Anderson e Pierre Morel (40).

A partir da década de 1980, a descoberta de novos supercondutores com possíveis simetrias diversas (principalmente férmons pesados e cupratos) impulsionou a adaptação dos modelos para incluírem essa propriedade, como nos trabalhos de Piotr Micnas *et al.* (5) utilizando o modelo de Hubbard estendido e Claudine Lacroix *et al.* (41) utilizando o modelo da rede Kondo. No nosso caso, introduziremos as simetrias diretamente do modelo BCS através do hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{kk}'} g_{\mathbf{kk}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (95)$$

Note que na verdade damos um passo atrás, ganhando certa generalidade no modelo, de forma que ele também poderá descrever os supercondutores convencionais com parâmetro de ordem isotrópico.

A formulação em campo médio segue praticamente idêntica, vamos destacar aqui as principais diferenças.

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{kk}'} g_{\mathbf{kk}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \sum_{\mathbf{kk}'} g_{\mathbf{kk}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (96)$$

O gap e seu conjugado são definidos como:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{kk}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad \Delta_{\mathbf{k}}^* = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{kk}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \quad (97)$$

De forma que a parte que nos interessa do hamiltoniano assume a forma

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \quad (98)$$

Seguindo os mesmos passos para a diagonalização do hamiltoniano apresentados na seção anterior, chegamos na equação do gap:

$$\boxed{1 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_{\mathbf{kk}'}}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right)} \quad (99)$$

Com autovalores de energia dados por:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} \quad (100)$$

Agora introduziremos uma modulação do parâmetro de acoplamento. Escreveremos ela como o produto do parâmetro simétrico com uma função anisotrópica:

$$g_{\mathbf{kk}'} = g \eta_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}'} \quad \Delta_{\mathbf{k}} = \Delta \eta_{\mathbf{k}} \quad \Delta_{\mathbf{k}}^* = \Delta \eta_{\mathbf{k}'}$$

De forma que

$$g_{\mathbf{kk}'} = g \eta_{\mathbf{k}}^2 \quad |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 = \Delta^2 \eta_{\mathbf{k}}^2$$

Teremos então:

$$\boxed{\frac{1}{g} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right)} \quad (101)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2 \eta_{\mathbf{k}}^2} \quad (102)$$

Note que toda a dependência em \mathbf{k} é carregada por $\eta_{\mathbf{k}}$. A equação de gap encontrada agora pode gerar diferentes equações de acordo com o valor escolhido de $\eta_{\mathbf{k}}$. As médias de ocupação podem ser obtidas através da equação 103:

Simetria	$\eta_{\mathbf{k}}$
onda s	1
onda s estendida	$\cos(k_x) + \cos(k_y)$
onda p	$\sin(k_x)$ ou $\sin(k_y)$
onda p (quiral)	$\sin(k_x) + i\sin(k_y)$
onda d ($d_{x^2-y^2}$)	$\cos(k_x) - \cos(k_y)$

Tabela 2 – Simetrias 2D do parâmetro de ordem supercondutor. Os dados presentes na tabela foram extraídos de (42)

Material	Simetria	Tipo de Material
Al	onda s	Convencional
Pb	onda s	Convencional
Nb	onda s	Convencional
MgB ₂	onda s	Convencional
YBa ₂ Cu ₃ O _{7-δ}	onda d _{x²-y²}	Cuprato
Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O _{8+δ}	onda d _{x²-y²}	Cuprato
BaFe ₂ As ₂	onda s estendida	Ferro-pnictídeo
LaFeAsO _{1-x} F _x	onda s estendida	Ferro-pnictídeo
CeCu ₂ Si ₂	onda d _{x²-y²}	Férmion pesado
CeCoIn ₅	onda d _{x²-y²}	Férmion pesado

Tabela 3 – Alguns materiais e suas respectivas simetrias de parâmetro de ordem. Os dados presentes na tabela foram extraídos de (42) e (37)

$$n = 1 - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (103)$$

As formas mais comuns de modulação para o caso bidimensional estão listadas na tabela 2(42).

As simetrias nas quais estamos interessados neste trabalho são a simetria de onda *s*, simetria de onda *s* estendida e a simetria de onda $d_{x^2-y^2}$. Na Tabela 3 (42)(37), estão apresentados alguns materiais cujas simetrias estão entre as três de maior interesse.

É possível visualizar a dependência em \mathbf{k} das diferentes simetrias ao plotarmos os autovalores de energia em função das coordenadas do vetor de onda k_x e k_y , como visto nas figura 13, observam-se as regiões onde o gap muda de sinal (autovalor nulo) nas simetrias de onda *d* e *s* estendida, de forma que, caso a superfície de Fermi passe por essas regiões, estes estados não contribuirão para a formação dos pares de Cooper, sendo esta a região em que a interação coulombiana supera a interação atrativa. A simetria de onda *s*, por ser isotrópica, apresenta ausência de nós.

O estudo das propriedades dos supercondutores levando em consideração as diferentes simetrias de parâmetro de ordem segue sendo de importância notável desde a década de oitenta até os trabalhos mais recentes. Em 1988, Micnas *et al.* (5), utilizando o modelo de Hubbard para uma rede quadrada em um modelo de uma banda, obtiveram $k_B T_c$ versus n para as simetrias de

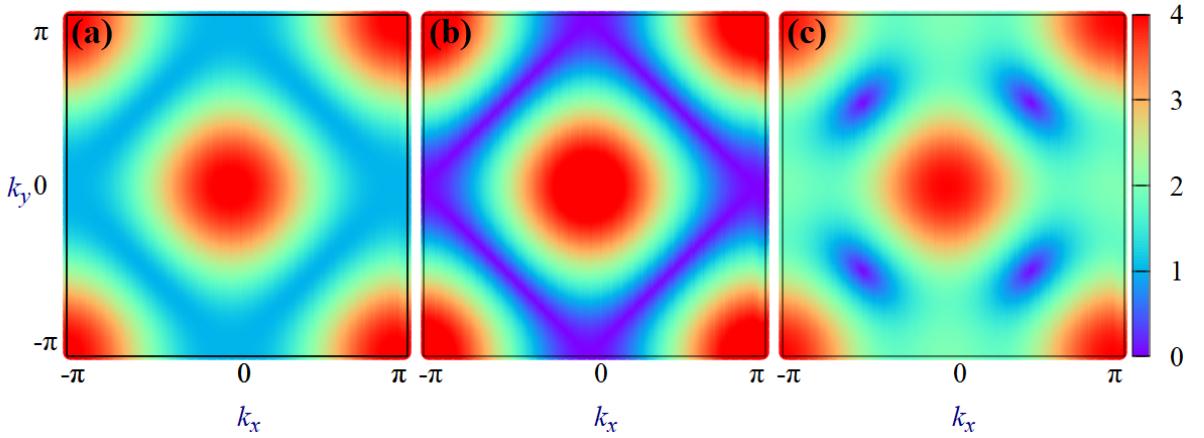


Figura 13 – Variação do autovalor de energia $E_{\mathbf{k}}$ em relação ao vetor de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ para as simetrias de onda **(a)** s , **(b)** s estendida e **(c)** $d_{x^2-y^2}$.

onda d,s estendida e p com diversos valores do parâmetro de acoplamento W/D , como visto na figura 14:

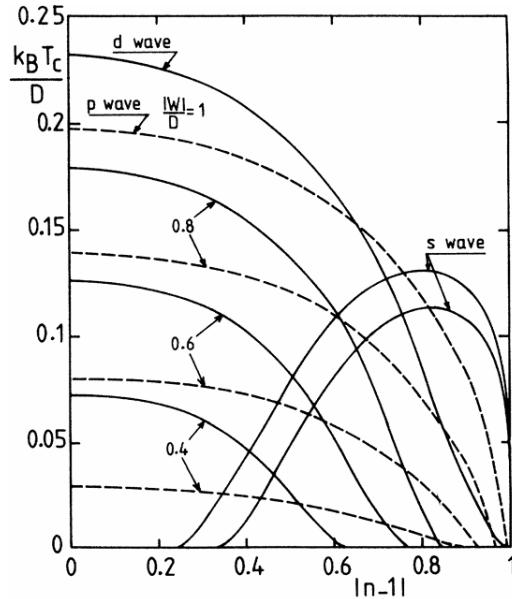


Figura 14 – $k_B T_c$ versus n para simetria de onda d , s estendida e p , para diversos valores do parâmetro de acoplamento normalizado W/D . Figura extraída de (5)

As energias estão normalizadas por D , equivalente a meia largura de banda. Interessante analisar como nossas simetrias de interesse, d e s estendida se relacionam. É possível notar como as simetrias d e s estendida possuem cada um a sua região de dominância característica, sendo a região em torno da banda semi preenchida dominada pela onda d , enquanto para valores baixos e altos da ocupação, a dominância é da onda s estendida. Micnas ainda estuda o efeito da repulsão coulombiana para as mesmas simetrias, além de uma fase Spin Density Wave, como visto na figura 15:

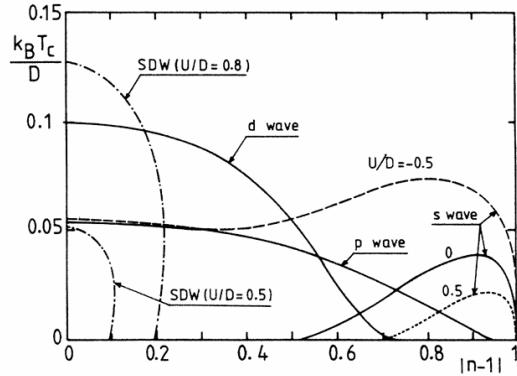


Figura 15 – $k_B T_c$ versus n para simetria de onda d , onda s estendida e onda p , para diversos valores da repulsão coulombiana normalizada U/D . Figura extraída de (5)

Note como o efeito do aumento da repulsão coulombiana é semelhante a uma diminuição do parâmetro de acoplamento e vice-versa. Em 2010, Sacramento *et al.* (6) realizaram um estudo da fase supercondutora no modelo de Hubbard estendido para o caso de duas bandas hibridizadas, para as simetrias de onda d e s estendida, para o caso onde o gap pode ocorrer unicamente em uma das bandas. Sacramento obteve o comportamento do gap a $T = 0$ em função da ocupação n para diversos valores da repulsão coulombiana U e para diversos valores da interação atrativa entre elétrons da banda f entre sítios vizinhos J , com o pareamento na banda de condução (Δ_c) e pareamento na banda f (Δ_f), como visto nas figuras 16 e 17:

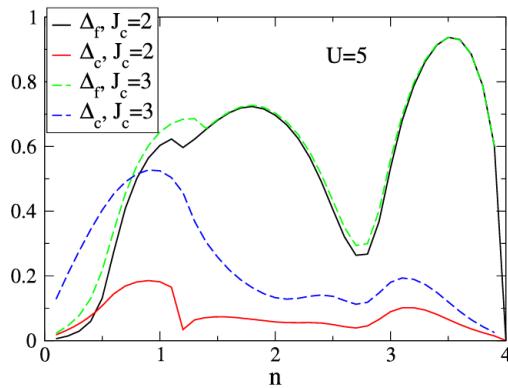


Figura 16 – Δ_c e Δ_f a $T = 0$ versus n para a simetria de onda s estendida, para diferentes valores do parâmetro de acoplamento J . Figura extraída de (6)

A primeira coisa que podemos destacar é o fato do gap ter valor mais alto para o pareamento na banda f em quase todos os valores de n , o que indica uma maior estabilidade da fase supercondutora para este tipo de pareamento. Além disso, o pareamento na banda de condução parece ser mais afetado pela variação do parâmetro de acoplamento.

Em 2016, Reyes *et al.* (7) utilizando o modelo de Hubbard estendido para um modelo de duas bandas hibridizadas para uma rede quadrada, estudaram as propriedades da fase supercondutora variando o parâmetro de hibridização V . É considerado apenas o pareamento na banda f ,

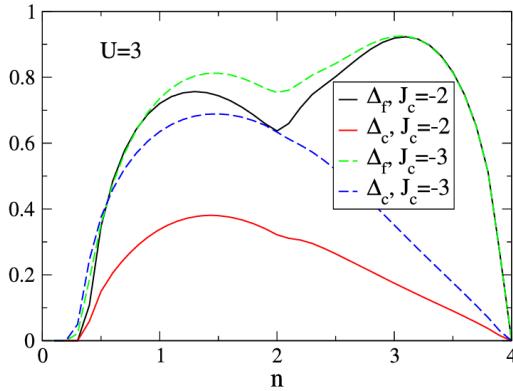


Figura 17 – Δ_c e Δ_f a $T = 0$ versus n para a simetria de onda d , para diferentes valores do parâmetro de acoplamento J . Figura extraída de (6)

pois havia ficado estabelecido que este pareamento é o mais favorável para seus materiais de interesse. Reyes obteve o gap supercondutor a $T = 0$ para simetria de onda d e s estendida em função da ocupação n_{tot} como pode ser visto na figura 18

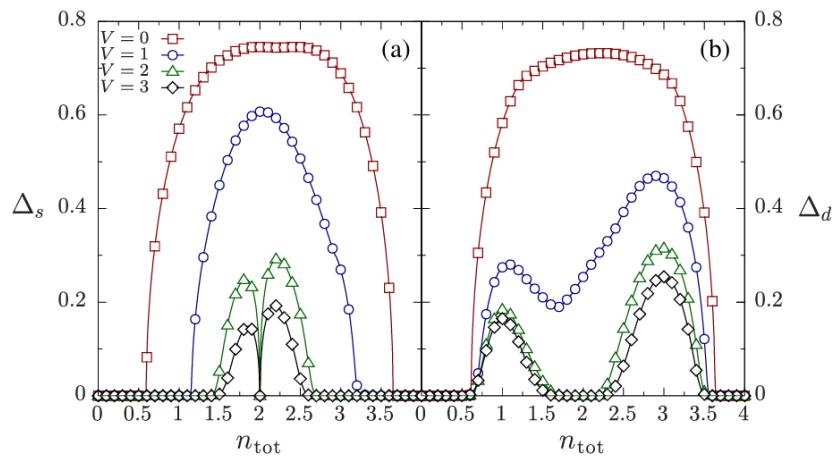


Figura 18 – Δ_s e Δ_d a $T = 0$ versus n para a simetria de onda d e s estendida para diversos valores do parâmetro de hibridização V . Figura extraída de (7)

O comportamento dos gaps demonstra como a supercondutividade é desfavorecida pela hibridização e em certos valores de ocupação ela pode até ser suprimida. Cada simetria é afetada de uma forma, mas é possível notar que a hibridização em ambas as simetrias, desfavorece mais intensamente para valores intermediários de ocupação e em valores altos e baixos de ocupação. Ainda é obtido um diagrama de fases puras n versus V para cada simetria, utilizando o gap como parâmetro de ordem, como podemos ver na figura 19.

É possível notar que a região em torno da banda semi preenchida é, para valores altos de V , desfavorável para ambas as simetrias. Porém a largura desta região é muito mais acentuada para a simetria de onda s .

A utilização do modelo de Hubbard para descrever a supercondutividade é justificada pela presença explícita da interação coulombiana através do parâmetro de controle U . A competição da interação atrativa e da interação coulombiana não é trivial nestes casos, pois o pareamento

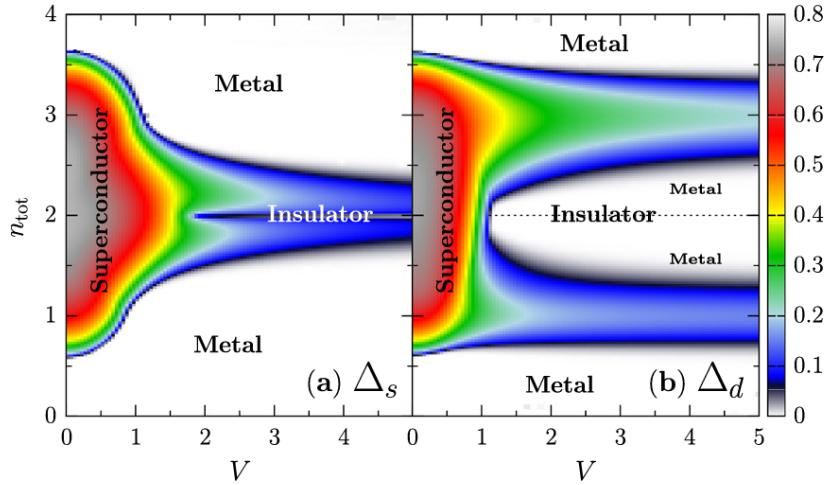


Figura 19 – Diagrama n versus V para simetria de onda d e s estendida. Figura extraída de (7)

ocorre no espaço real, diferente do modelo BCS onde o pareamento ocorre no espaço recíproco.

As duas interações no modelo de Hubbard estendido são descritos por termos próprios, separando a interação entre elétrons que ocupam o mesmo sítio (repulsiva) e entre elétrons de sítios vizinhos (atrativa). Em geral, o estudo das simetrias de parâmetro de ordem é feita em modelos que incluem a interação colombiana explicitamente, porém mesmo nestes casos, a modulação no espaço recíproco é introduzida através de um *ansatz*. Na literatura há uma carência de trabalhos que incluem a simetria em modelos com pareamento no espaço recíproco (tipo BCS), onde os elétrons pareados não necessariamente estão próximos e o parâmetro de acoplamento utilizado é efetivo.

Como exemplo da utilização de modelos com interação tipo BCS, podemos citar o trabalho de Sampaio *et al.* em 2024 (8), onde foi utilizado o modelo de Hubbard de uma banda, com interação atrativa tipo BCS. Eles obtiveram a temperatura crítica em função da ocupação eletrônica para as simetrias s e d como visto nas figuras 20 e 21.

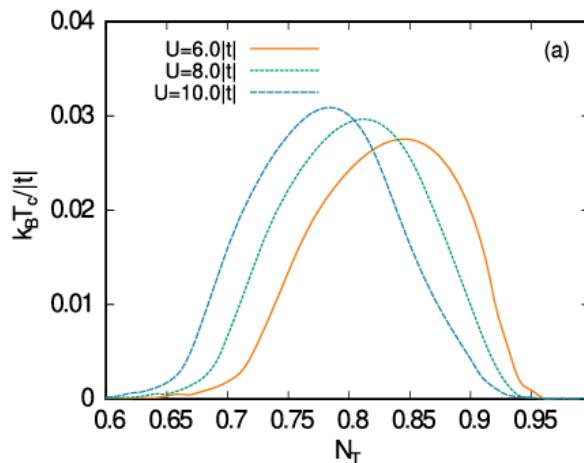


Figura 20 – $k_B T_c$ versus n_T , para a simetria de onda d , para diversos valores da repulsão coulombiana U . Figura extraída de (8)

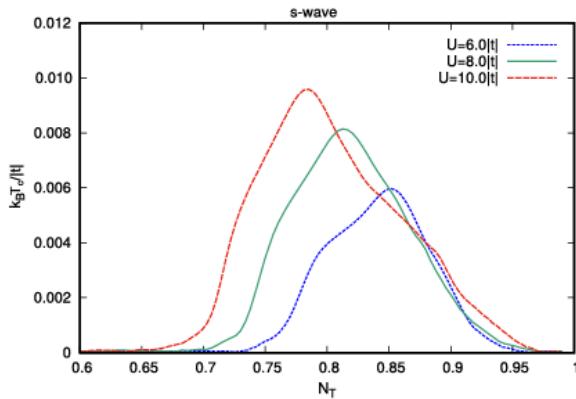


Figura 21 – $k_B T_c$ versus n_T , para a simetria de onda S , para diversos valores da repulsão coulombiana U . Figura extraída de (8)

Vemos que a repulsão coulombiana, além de reduzir os valores de temperatura crítica, também desloca a curva para a direita, alterando a região de estabilidade da fase supercondutora para valores maiores de ocupação.

5 MODELO DE DUAS BANDAS HIBRIDIZADAS

Modelos de duas bandas são utilizados para descrever materiais supercondutores desde o inicio da teoria BCS. A primeira proposta de um modelo de duas bandas que incorporasse a teoria BCS foi feita por Harry Suhl, Bernd Matthias e Lois Walker em 1959 (43), apenas dois anos após a publicação da teoria BCS, e ficou conhecido como modelo SMW. Diversos modelos de duas bandas após isso foram propostos como alternativas para descrever a grande variedade de materiais nos quais foi detectada a fase supercondutora, como o modelo de Hubbard estendido com pareamento local (44); pareamento entre vizinhos (5); modelo da rede Kondo (41), entre outros. Nosso modelo consiste em um modelo de duas bandas hibridizadas, porém adicionaremos a possibilidade de pareamento tipo BCS em cada uma das bandas, semelhante ao que ocorre no modelo SMW, com a diferença que desconsideraremos a possibilidade de haver dois gaps simultâneos.

Começaremos descrevendo o hamiltoniano do modelo de duas bandas hibridizadas na fase normal, e na próxima seção adicionaremos a interação tipo BCS. Nosso hamiltoniano, por agora, será:

$$H = \sum_{i\sigma} E_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{ff} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} - \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{cc} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \quad (104)$$

Podemos escrever este hamiltoniano como:

$$H = H_f + H_{ft} + H_c + H_V \quad (105)$$

Onde temos:

- H_f é a energia cinética local dos elétrons na banda f;
- H_{ft} é a energia cinética dos elétrons na banda f;
- H_c é a energia cinética dos elétrons na banda de condução;
- H_V é a hibridização das bandas;
- t_{ij}^{cc} é o hoping de energia da banda de condução;
- t_{ij}^{ff} é o hoping de energia da banda f;
- V é uma medida da intensidade da hibridização das bandas;

Queremos expressar este hamiltoniano em termos do vetor de onda, com o objetivo de introduzir uma interação do tipo BCS. Para isso, utilizaremos uma transformada de Fourier dos operadores. Definimos:

$$f_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (106)$$

$$f_{i\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (107)$$

Substituindo em H_f , temos:

$$H_f = E_f \sum_{i\sigma} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \right) \quad (108)$$

$$H_f = E_f \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (109)$$

$$H_f = E_f \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \quad (110)$$

Seguindo para o segundo termo, definimos:

$$f_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \quad (111)$$

$$f_{i\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (112)$$

Assim:

$$H_{ft} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{ff} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right) \quad (113)$$

$$H_{ft} = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{q}\sigma} \sum_{ij} t_{ij}^{ff} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (114)$$

$$H_{ft} = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{q}\sigma} \sum_{ij} t_{ij}^{ff} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \left(\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}}{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}} \right) \quad (115)$$

$$H_{ft} = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{q}\sigma} \sum_{ij} t_{ij}^{ff} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \quad (116)$$

Temos que a relação de dispersão é dada por:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{ff} = \sum_i t_{ij}^{ff} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \quad (117)$$

Além de que o termo:

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} = \delta(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \quad (118)$$

pois consiste no produto de duas transformadas de Fourier de contantes. Substituindo temos:

$$H_{ft} = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{ff} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \quad (119)$$

Seguindo para o próximo termo, temos:

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \quad (120)$$

$$c_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (121)$$

Assim:

$$H_c = - \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{cc} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right) \quad (122)$$

$$H_c = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{kq}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\sigma} \sum_{ij} t_{ij}^{cc} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (123)$$

$$H_c = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{kq}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\sigma} \sum_{ij} t_{ij}^{cc} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \left(\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}}{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}} \right) \quad (124)$$

$$H_c = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{kq}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\sigma} \sum_{ij} t_{ij}^c e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \quad (125)$$

Temos que a relação de dispersão é dada por:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^c = \sum_i t_{ij}^{cc} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \quad (126)$$

Novamente teremos:

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} = \delta(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \quad (127)$$

Logo

$$H_c = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (128)$$

Continuando para o último termo, teremos:

$$f_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (129)$$

$$f_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (130)$$

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (131)$$

$$c_{i\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (132)$$

Substituindo temos

$$H_V = -V \sum_{i\sigma} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \right) \quad (133)$$

$$H_V = -V \frac{1}{N} \sum_{i\sigma} \left(\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} f_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} + \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \right) \quad (134)$$

$$H_V = -V \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}\sigma} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} + f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \right) \quad (135)$$

$$H_V = -V \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \right) \quad (136)$$

Nosso hamiltoniano fica:

$$H = E_f \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{ff} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - V \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \right) \quad (137)$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - V \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \right) \quad (138)$$

Com $\varepsilon_{\mathbf{k}}^f = E_f - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{ff}$. Nosso caso de interesse é o de bandas homotéticas $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{ff} = \alpha \varepsilon_{\mathbf{k}}^c$

Podemos utilizar o método da diagonalização do hamiltoniano para obter alguns propriedades da fase normal. Vamos reescrever o hamiltoniano matricialmente.

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} & f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c & -V \\ -V & \varepsilon_{\mathbf{k}}^f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ f_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} \quad (139)$$

Resolvendo a equação

$$\det(\mathbb{H}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} \mathbb{I}) = 0 \quad (140)$$

Encontramos os autovalores de energia do hamiltoniano

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}}^c + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f \pm \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}}^c - \varepsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 + 4V^2} \right) \quad (141)$$

5.1 MODELO DE DUAS BANDAS COM INTERAÇÃO TIPO BCS

Agora vamos introduzir uma interação tipo BCS no hamiltoniano de duas bandas. O termo introduzido possui dois parâmetros de acoplamentos que podem atuar em cada uma das bandas, gerando quatro possíveis pareamentos. Estudaremos os casos onde ocorre apenas um pareamento. Em campo médio nosso hamiltoniano será:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} - V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}) \\ & - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}}^{cc*} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^{cc} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^{ff*} f_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^{ff} f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \\ & - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}}^{cf*} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^{cf} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^{fc*} f_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^{fc} f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \end{aligned} \quad (142)$$

No qual temos:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{cc} = \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{cc} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (143)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{ff} = \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ff} \langle f_{-\mathbf{k}'\downarrow} f_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (144)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{cf} = \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{cf} \langle f_{-\mathbf{k}'\downarrow} f_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (145)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{fc} = \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{fc} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (146)$$

Além de $\varepsilon_{\mathbf{k}}^f + \mu = E_f + \alpha(\varepsilon_{\mathbf{k}}^c + \mu)$ (bandas homotéticas) com as energias $\varepsilon_{\mathbf{k}}^f$ e $\varepsilon_{\mathbf{k}}^c$ medidas em relação ao potencial químico, e o parâmetro E_f (< 0) representa a posição relativa da banda f em relação à banda de c .

Seguindo os passos da diagonalização do hamiltoniano, escrevemos ele na forma matricial:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} & f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & f_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ f_{\mathbf{k}\uparrow} \\ f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (147)$$

Com

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c & -\Delta_{\mathbf{k}}^c & -V & 0 \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^{c*} & -\varepsilon_{\mathbf{k}}^c & 0 & V \\ -V & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}}^f & -\Delta_{\mathbf{k}}^f \\ 0 & V & -\Delta_{\mathbf{k}}^{f*} & -\varepsilon_{\mathbf{k}}^f \end{pmatrix} \quad (148)$$

Sendo

$$\Delta_{\mathbf{k}}^c = \Delta_{\mathbf{k}}^{cc} + \Delta_{\mathbf{k}}^{cf} \quad (149)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^f = \Delta_{\mathbf{k}}^{ff} + \Delta_{\mathbf{k}}^{fc} \quad (150)$$

A transformação unitária que diagonaliza o hamiltoniano será tal que:

$$\mathcal{H}'_{\mathbf{k}} = \mathbb{U}_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \mathbb{U}_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{\mathbf{k}}^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{\mathbf{k}}^{(3)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{\mathbf{k}}^{(4)} \end{pmatrix} \quad (151)$$

ou seja

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} & f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & f_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ f_{\mathbf{k}\uparrow} \\ f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & a_{-\mathbf{k}\downarrow} & b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & b_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \mathcal{H}'_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}\uparrow} \\ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (152)$$

Os autovalores $E_{\mathbf{k}}^{(n)}$ do hamiltoniano $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ são dados pelas raízes de um polinômio de quarto grau, que consiste numa equação biquadrática, com $E_{\mathbf{k}}^{(2)} = -E_{\mathbf{k}}^{(1)}$ e $E_{\mathbf{k}}^{(4)} = -E_{\mathbf{k}}^{(3)}$.

Vamos considerar o caso particular sem interação cruzada ($g_{\mathbf{kk}'}^{cf} = g_{\mathbf{kk}'}^{fc} = 0$), e quando o pareamento ocorre, exclusivamente, em uma das bandas, ($\Delta_{\mathbf{k}}^c \Delta_{\mathbf{k}}^f = 0$). Nesse caso, obtemos:

$$(E_{\mathbf{k}}^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c2})(E_{\mathbf{k}}^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{f2}) - |\Delta_{\mathbf{k}}^c|^2(E_{\mathbf{k}}^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{f2}) - |\Delta_{\mathbf{k}}^f|^2(E_{\mathbf{k}}^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c2}) - 2V^2(E_{\mathbf{k}}^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f \varepsilon_{\mathbf{k}}^c) + V^4 = 0 \quad (153)$$

ou

$$\sum_{n=0}^4 P_n E_{\mathbf{k}}^{(n)} = 0 \quad (154)$$

onde

$$P_4 = 1 \quad (155)$$

$$P_3 = P_1 = 0 \quad (156)$$

$$P_2 = -(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c2} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^{f2} + |\Delta_{\mathbf{k}}^c|^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}^f|^2 + 2V^2) \quad (157)$$

$$P_0 = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c2} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{f2} + |\Delta_{\mathbf{k}}^c|^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}^{f2} + |\Delta_{\mathbf{k}}^f|^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c2} + V^4 - 2V^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}^c \varepsilon_{\mathbf{k}}^f \quad (158)$$

Sendo, então:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\frac{-P_2 \pm \sqrt{P_2^2 - 4P_0}}{2}} \quad (159)$$

O hamiltoniano diagonalizado fica:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^{(1)} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} - 1) + E_{\mathbf{k}}^{(3)} (b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\uparrow} + b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger b_{-\mathbf{k}\downarrow} - 1) \quad (160)$$

Os autovetores correspondentes de $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ são:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(n)} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}c}^{(n)} \\ v_{\mathbf{k}c}^{(n)} \\ u_{\mathbf{k}f}^{(n)} \\ v_{\mathbf{k}f}^{(n)} \end{pmatrix} \quad (161)$$

Cujas componentes devem satisfazer

$$\begin{aligned} (\epsilon_{\mathbf{k}}^c - E_{\mathbf{k}}^{(n)}) u_{\mathbf{k}c}^{(n)} - \Delta_{\mathbf{k}}^c v_{\mathbf{k}c}^{(n)} - V u_{\mathbf{k}f}^{(n)} &= 0 \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^{c*} u_{\mathbf{k}c}^{(n)} - (\epsilon_{\mathbf{k}}^c + E_{\mathbf{k}}^{(n)}) v_{\mathbf{k}c}^{(n)} + V v_{\mathbf{k}f}^{(n)} &= 0 \\ -V u_{\mathbf{k}c}^{(n)} + (\epsilon_{\mathbf{k}}^f - E_{\mathbf{k}}^{(n)}) u_{\mathbf{k}f}^{(n)} - \Delta_{\mathbf{k}}^f v_{\mathbf{k}f}^{(n)} &= 0 \\ V v_{\mathbf{k}c}^{(n)} - \Delta_{\mathbf{k}}^{f*} u_{\mathbf{k}f}^{(n)} - (\epsilon_{\mathbf{k}}^f + E_{\mathbf{k}}^{(n)}) v_{\mathbf{k}f}^{(n)} &= 0 \end{aligned} \quad (162)$$

Além da condição de normalização

$$|u_{\mathbf{k}c}^{(n)}|^2 + |v_{\mathbf{k}c}^{(n)}|^2 + |u_{\mathbf{k}f}^{(n)}|^2 + |v_{\mathbf{k}f}^{(n)}|^2 = 1 \quad (163)$$

A matriz unitária, considerando a relação entre $\psi_{\mathbf{k}}^{(1)}$ e $\psi_{\mathbf{k}}^{(2)}$, e entre $\psi_{\mathbf{k}}^{(3)}$ e $\psi_{\mathbf{k}}^{(4)}$

$$\mathbb{U}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}c}^{(1)} & v_{\mathbf{k}c}^{(1)} & u_{\mathbf{k}f}^{(1)} & v_{\mathbf{k}f}^{(1)} \\ -v_{\mathbf{k}c}^{(1)*} & u_{\mathbf{k}c}^{(1)*} & -v_{\mathbf{k}f}^{(1)*} & u_{\mathbf{k}f}^{(1)*} \\ u_{\mathbf{k}c}^{(3)} & v_{\mathbf{k}c}^{(3)} & u_{\mathbf{k}f}^{(3)} & v_{\mathbf{k}f}^{(3)} \\ -v_{\mathbf{k}c}^{(3)*} & u_{\mathbf{k}c}^{(3)*} & -v_{\mathbf{k}f}^{(3)*} & u_{\mathbf{k}f}^{(3)*} \end{pmatrix} \quad \mathbb{U}_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}c}^{(1)*} & -v_{\mathbf{k}c}^{(1)} & u_{\mathbf{k}c}^{(3)*} & -v_{\mathbf{k}c}^{(3)} \\ v_{\mathbf{k}c}^{(1)*} & u_{\mathbf{k}c}^{(1)} & v_{\mathbf{k}c}^{(3)*} & u_{\mathbf{k}c}^{(3)} \\ u_{\mathbf{k}f}^{(1)*} & -v_{\mathbf{k}f}^{(1)} & u_{\mathbf{k}f}^{(3)*} & -v_{\mathbf{k}f}^{(3)} \\ v_{\mathbf{k}f}^{(1)*} & u_{\mathbf{k}f}^{(1)} & v_{\mathbf{k}f}^{(3)*} & u_{\mathbf{k}f}^{(3)} \end{pmatrix} \quad (164)$$

A transformada de Bogoliubov-Valantin generalizada será:

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ f_{\mathbf{k}\uparrow} \\ f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbb{U}_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}\uparrow} \\ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ f_{\mathbf{k}\uparrow} \\ f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbb{U}_{\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}\uparrow} \\ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (165)$$

O que nos permite calcular os valores médios:

$$\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^c \rangle = |u_{\mathbf{k}c}^{(1)}|^2 \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle + |v_{\mathbf{k}c}^{(1)}|^2 \left(1 - \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle \right) + |u_{\mathbf{k}c}^{(3)}|^2 \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^b \rangle + |v_{\mathbf{k}c}^{(3)}|^2 \left(1 - \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^b \rangle \right) \quad (166)$$

$$\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^f \rangle = |u_{\mathbf{k}f}^{(1)}|^2 \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle + |v_{\mathbf{k}f}^{(1)}|^2 \left(1 - \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle \right) + |u_{\mathbf{k}f}^{(3)}|^2 \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^b \rangle + |v_{\mathbf{k}f}^{(3)}|^2 \left(1 - \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^b \rangle \right) \quad (167)$$

$$\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = v_{\mathbf{k}c}^{(1)*} u_{\mathbf{k}c}^{(1)*} \left(\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle + \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle - 1 \right) + v_{\mathbf{k}c}^{(3)*} u_{\mathbf{k}c}^{(3)*} \left(\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^b \rangle + \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^b \rangle - 1 \right) \quad (168)$$

$$\langle f_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = v_{\mathbf{k}f}^{(1)*} u_{\mathbf{k}f}^{(1)*} \left(\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle + \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle - 1 \right) + v_{\mathbf{k}f}^{(3)*} u_{\mathbf{k}f}^{(3)*} \left(\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^b \rangle + \langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^b \rangle - 1 \right) \quad (169)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = v_{\mathbf{k}c}^{(1)*} v_{\mathbf{k}c}^{(3)} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^a \rangle) + u_{\mathbf{k}c}^{(1)*} u_{\mathbf{k}c}^{(3)} \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^a \rangle + v_{\mathbf{k}f}^{(1)*} v_{\mathbf{k}f}^{(3)} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^b \rangle) + u_{\mathbf{k}f}^{(1)*} u_{\mathbf{k}f}^{(3)} \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^b \rangle \quad (170)$$

$$\langle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = v_{\mathbf{k}c}^{(1)} v_{\mathbf{k}c}^{(3)*} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^a \rangle) + u_{\mathbf{k}c}^{(1)} u_{\mathbf{k}c}^{(3)*} \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^a \rangle + v_{\mathbf{k}f}^{(1)} v_{\mathbf{k}f}^{(3)*} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^b \rangle) + u_{\mathbf{k}f}^{(1)} u_{\mathbf{k}f}^{(3)*} \langle n_{\mathbf{k}\sigma}^b \rangle \quad (171)$$

Sendo

$$\langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a \rangle = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^a \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}^{(1)}} + 1} \quad (172)$$

$$\langle n_{-\mathbf{k}\downarrow}^b \rangle = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^b \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}^{(3)}} + 1} \quad (173)$$

De maneira equivalente:

$$\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = -v_{\mathbf{k}c}^{(1)} u_{\mathbf{k}c}^{(1)*} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{(1)}}{2k_B T} \right) - v_{\mathbf{k}c}^{(3)} u_{\mathbf{k}c}^{(3)*} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{(1)}}{2k_B T} \right) \quad (174)$$

$$\langle f_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = -u_{\mathbf{k}f}^{(1)} v_{\mathbf{k}f}^{(1)*} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{(3)}}{2k_B T} \right) - u_{\mathbf{k}f}^{(3)} v_{\mathbf{k}f}^{(3)*} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{(3)}}{2k_B T} \right) \quad (175)$$

5.1.1 Equação do gap para pareamento na banda de condução

O caso particular do gap na banda de condução consiste em considerarmos $\Delta_{\mathbf{k}}^f = 0$. Podemos resolver o sistema de equações 162 para obter:

$$v_{\mathbf{k}c}^{(n)} = -u_{\mathbf{k}c}^{(n)} \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f) \Delta_{\mathbf{k}}^{c*}}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2} \quad (176)$$

$$v_{\mathbf{k}f}^{(n)} = v_{\mathbf{kc}}^{(n)} \frac{V}{E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f} \quad (177)$$

$$u_{\mathbf{k}f}^{(n)} = -u_{\mathbf{kc}}^{(n)} \frac{V}{E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f} \quad (178)$$

$$|u_{\mathbf{kc}}^{(n)}|^2 = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 [(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2]^2}{D_{\mathbf{k}}^{(n)}} \quad (179)$$

Onde

$$D_{\mathbf{k}}^{(n)} = [(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 + V^2][(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2]^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}^c|^2 (E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 [(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 + V^2] \quad (180)$$

Assim, para $\Delta_{\mathbf{k}}^f = 0$

$$v_{\mathbf{kc}}^{(n)} u_{\mathbf{kc}}^{(n)*} = |u_{\mathbf{kc}}^{(n)}|^2 \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f) \Delta_{\mathbf{k}}^{c*}}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V} \quad (181)$$

$$v_{\mathbf{kc}}^{(n)} u_{\mathbf{kc}}^{(n)*} = -A_{\mathbf{k}}^{(n)} \Delta_{\mathbf{k}}^{c*} \quad (182)$$

$$A_{\mathbf{k}}^{(n)} = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 [(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2]}{D_{\mathbf{k}}^{(n)}} \quad (183)$$

A equação do gap fica:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^c = \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{kk}'}^{cc} \left[A_{\mathbf{k}'}^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T} \right) + A_{\mathbf{k}'}^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T} \right) \right] \Delta_{\mathbf{k}}^{c*} \quad (184)$$

Utilizando o *anzats* $g_{\mathbf{kk}'}^{cc} = g_c \eta_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}'}$ e $\Delta_{\mathbf{k}}^c = \Delta_c \eta_{\mathbf{k}}$, obtemos

$$\Delta_{\mathbf{k}}^c \eta_{\mathbf{k}} = g_c \eta_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}'} \left[A_{\mathbf{k}'}^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T} \right) + A_{\mathbf{k}'}^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T} \right) \right] \Delta_{\mathbf{k}}^{c*} \eta_{\mathbf{k}'} \quad (185)$$

Que fornece a equação autoconsistente para o gap Δ_c real.

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}}^2 \left[A_{\mathbf{k}'}^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T} \right) + A_{\mathbf{k}'}^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T} \right) \right] \quad (186)$$

No limite $T = 0$, a tangente hiperbólica tende a 1, de forma que a equação do gap a temperatura nula assume a forma:

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}}^2 \left[A_{\mathbf{k}'}^{(1)} + A_{\mathbf{k}'}^{(3)} \right] \quad (187)$$

Na temperatura crítica, teremos $T = T_c$ e $\Delta_c = 0$, logo

$$|u_{\mathbf{k}c}^{(n)}|^2 = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 + V^2} \quad (188)$$

$$v_{\mathbf{k}c}^{(n)} u_{\mathbf{k}c}^{(n)*} = |u_{\mathbf{k}c}^{(n)}|^2 \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f) \Delta_{\mathbf{k}}^{c*}}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V} \quad (189)$$

$$v_{\mathbf{k}c}^{(n)} u_{\mathbf{k}c}^{(n)*} = -\mathbb{A}_{\mathbf{k}}^{(n)} \Delta_{\mathbf{k}}^{c*} \quad (190)$$

$$\mathbb{A}_{\mathbf{k}}^{(n)} = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 (E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)}{[(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V][(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^f)^2 + V^2]} \quad (191)$$

A equação autoconsistente de T_c fica:

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}}^2 \left[\mathbb{A}_{\mathbf{k}'}^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T_c} \right) + \mathbb{A}_{\mathbf{k}'}^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T_c} \right) \right] \quad (192)$$

5.1.2 Equação do gap para pareamento na banda f

O caso particular do gap na banda f consiste em considerarmos $\Delta_{\mathbf{k}}^c = 0$. Podemos resolver o sistema de equações 162 para obter:

$$v_{\mathbf{k}f}^{(n)} = -u_{\mathbf{k}f}^{(n)} \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) \Delta_{\mathbf{k}}^{f*}}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2} \quad (193)$$

$$v_{\mathbf{k}c}^{(n)} = v_{\mathbf{k}f}^{(n)} \frac{V}{E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c} \quad (194)$$

$$u_{\mathbf{k}c}^{(n)} = -u_{\mathbf{k}f}^{(n)} \frac{V}{E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^c} \quad (195)$$

$$|u_{\mathbf{k}f}^{(n)}|^2 = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^c)^2 [(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2]^2}{D_{\mathbf{k}}'^{(n)}} \quad (196)$$

Onde

$$D_{\mathbf{k}}'^{(n)} = [(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^c)^2 + V^2][(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2]^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}^f|^2 (E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}}^c)^2 [(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c)^2 + V^2] \quad (197)$$

Assim para $\Delta_{\mathbf{k}}^c = 0$

$$v_{\mathbf{k}f}^{(n)} u_{\mathbf{k}f}^{(n)*} = |u_{\mathbf{k}f}^{(n)}|^2 \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) \Delta_{\mathbf{k}}^{f*}}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2} \quad (198)$$

$$v_{\mathbf{k}f}^{(n)} u_{\mathbf{k}f}^{(n)*} = -A_{\mathbf{k}}'^{(n)} \Delta_{\mathbf{k}}^{f*} \quad (199)$$

$$A_{\mathbf{k}}'^{(n)} = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^c)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^c)^2[(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2]}{D_{\mathbf{k}}'^{(n)}} \quad (200)$$

A equação do gap fica:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^f = \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^f \left[A_{\mathbf{k}'}'^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T} \right) + A_{\mathbf{k}'}'^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T} \right) \right] \Delta_{\mathbf{k}}^{f*} \quad (201)$$

Utilizando o *anzats* $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ff} = g_f \eta_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}'}$ e $\Delta_{\mathbf{k}}^f = \Delta_f \eta_{\mathbf{k}}$, obtemos

$$\Delta_{\mathbf{k}}^f \eta_{\mathbf{k}} = g_f \eta_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}'} \left[A_{\mathbf{k}'}'^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T} \right) + A_{\mathbf{k}'}'^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T} \right) \right] \Delta_{\mathbf{k}}^{f*} \eta_{\mathbf{k}'} \quad (202)$$

Que fornece a equação autoconsistente para o gap Δ_f real.

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}}^2 \left[A_{\mathbf{k}'}'^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T} \right) + A_{\mathbf{k}'}'^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T} \right) \right] \quad (203)$$

No limite $T = 0$, a tangente hiperbólica tende a 1, de forma que a equação do gap a temperatura nula assume a forma:

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}}^2 \left[A_{\mathbf{k}'}'^{(1)} + A_{\mathbf{k}'}'^{(3)} \right] \quad (204)$$

Na temperatura crítica, teremos $T = T_c$ e $\Delta_c = 0$, logo

$$|u_{\mathbf{k}f}^{(n)}|^2 = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^c)^2}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^c)^2 + V^2} \quad (205)$$

$$v_{\mathbf{k}f}^{(n)} u_{\mathbf{k}f}^{(n)*} = |u_{\mathbf{k}f}^{(n)}|^2 \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^c) \Delta_{\mathbf{k}}^{f*}}{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^c) - V^2} \quad (206)$$

$$v_{\mathbf{k}f}^{(n)} u_{\mathbf{k}f}^{(n)*} = -\mathbb{A}_{\mathbf{k}}'^{(n)} \Delta_{\mathbf{k}}^{f*} \quad (207)$$

$$\mathbb{A}_{\mathbf{k}}'^{(n)} = \frac{(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^c)^2 (E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^c)}{[(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f)(E_{\mathbf{k}}^{(n)} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^c) - V][(E_{\mathbf{k}}^{(n)} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^c)^2 + V^2]} \quad (208)$$

A equação autoconsistente de T_c fica:

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}'} \eta_{\mathbf{k}}^2 \left[\mathbb{A}_{\mathbf{k}'}'^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(1)}}{2k_B T_c} \right) + \mathbb{A}_{\mathbf{k}'}'^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}^{(3)}}{2k_B T_c} \right) \right] \quad (209)$$

A concentração eletrônica para ambos os casos é dada por:

$$\boxed{n = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left((\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^c \rangle + \langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^f \rangle) \right)} \quad (210)$$

Com $\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^c \rangle$ e $\langle n_{\mathbf{k}\uparrow}^f \rangle$ dados pelas equações 166 e 167.

A energia interna corresponde ao valor médio do hamiltoniano original.

$$E = \langle \mathcal{H}_{BCS} \rangle = \langle H \rangle - E_g \quad (211)$$

Onde

$$\langle H \rangle = - \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^{(1)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{(1)}}{2k_B T} \right) - \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^{(3)} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{(3)}}{2k_B T} \right) \quad (212)$$

$$E_g = - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}}^{c*} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \Delta_{\mathbf{k}}^{f*} \langle f_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \right) = \frac{\Delta^2}{g} \quad (213)$$

A energia de condensação é dada por

$$E_c = E^{(s)} - E^{(n)} = \langle H^{(s)} \rangle - \langle H^{(n)} \rangle - E_g \quad (214)$$

Ou, alternativamente

$$E_c = K^{(s)} - K^{(n)} + E_g \quad (215)$$

Onde $\Delta K = K^{(s)} - K^{(n)}$ é a variação da energia cinética em relação à fase normal.

6 RESULTADOS DO MODELO DE UMA BANDA

Neste capítulo, obteremos alguns resultados para o modelo de uma banda, a partir dos cálculos desenvolvidos nos capítulos 3 e 4. Começaremos observando a densidade de estados para o modelo de uma banda, comparando a fase normal com a supercondutora nas simetrias de onda s e d . Em seguida, analisaremos os resultados para a simetria s como feito na teoria BCS original, onde obtivemos o gap em função do parâmetro de acoplamento e da temperatura, comparando as expressões obtidas analiticamente com as soluções numéricas.

Seguiremos, então, para uma análise da influência da simetria do parâmetro de ordem, obtendo os mesmos resultados anteriores para as simetrias s estendida e d , além da dependência da temperatura crítica com a ocupação da banda. Finalizamos o capítulo observando a influência do parâmetro de acoplamento na temperatura crítica e obtendo um diagrama g versus n , indicando em quais condições cada uma das simetrias é mais favorável.

Utilizamos o modelo do gás de elétrons para o caso da simetria s no começo do capítulo, a fim de sermos fiéis à teoria BCS original. A partir da análise comparativa das simetrias, adotamos o modelo tight-binding, que nos fornece uma densidade de estados mais sofisticada. A ausência da simetria s estendida em algumas figuras se deve ao fato de o gap ser nulo para essa simetria no caso da banda semi-preenchida, onde ocorre nossa análise. Esse fato fica evidenciado nas figuras 31 T_c versus n , onde vemos que a temperatura crítica vai a zero para a simetria de onda s estendida. No modelo do gás de elétrons em 2 dimensões, a densidade de estados é constante, e podemos considerar uma largura de banda W definida pela primeira zona de Brillouin. Já no modelo tight-binding, utilizamos o hopping t como unidade de energia, e a largura de banda é $W = 8t$.

Os nossos cálculos permitem fixar uma energia de corte arbitrária E_D , análoga à energia de Debye, sem especificar a origem do mecanismo de pareamento. No caso de um mecanismo de pareamento de origem fonônica, essa é uma maneira de restringir a região de energia onde há fônons disponíveis, definindo uma largura em torno do nível de Fermi. Em alguns materiais supercondutores de interesse, como os cupratos e os férmiões pesados, tal mecanismo teria origem nas flutuações magnéticas (45)(46)(47), e não haveria uma frequência de corte, de modo que todos os elétrons da banda participariam do processo. Nos resultados mostrados, a seguir, para o modelo tight-binding, não utilizamos uma frequência de corte.

No caso do gás de elétrons, como de praxe, podemos transformar as somas em \mathbf{k} em integrais sobre a densidade de estados. Quando a densidade de estados não varia muito em torno do nível de Fermi, podemos introduzir o parâmetro λ , que é o produto da interação g pelo valor da densidade de estados no nível de Fermi. Esse procedimento deixa de ser apropriado para o hamiltoniano tight-binding, onde a densidade de estados varia bastante ao longo da banda.

Em princípio, o estudo das simetrias de onda s estendida e onda d só faria sentido para o modelo tight-binding na rede quadrada. Entretanto, o gás de elétrons pode ser usado como uma aproximação para o sistema eletrônico, permitindo, inclusive, uma análise comparativa das

simetrias em termos do parâmetro λ , e com diferentes frequências de corte.

6.1 DENSIDADE DE ESTADOS NO MODELO TIGHT-BINDING

A obtenção da densidade de estados no modelo tight-binding consiste em contabilizar quantos estados (k_x, k_y) possuem uma determinada faixa infinitesimal de energia. Como já obtido anteriormente, a dependência em \mathbf{k} do autovalor de energia é dada pela equação:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \quad (216)$$

com $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t[\cos(k_x) + \cos(k_y)]$. Diferentemente do que ocorre na fase normal, a densidade de estados, na fase supercondutora, é dependente da temperatura T através do parâmetro do gap $\Delta(T)$. A densidade de estados na fase normal está mostrada na figura 22. Podemos notar que, diferente do caso do gás de elétrons, a densidade de estados está longe de ser constante. A largura de banda, neste caso é $8t$, e vemos que há uma divergência de Van Hove em $\omega = 0$. Para $T = 0$, consideramos que a ocupação é $n = 1$, e, nesse caso, o nível de Fermi encontra-se no centro da banda, ou seja, $\mu = 0$:

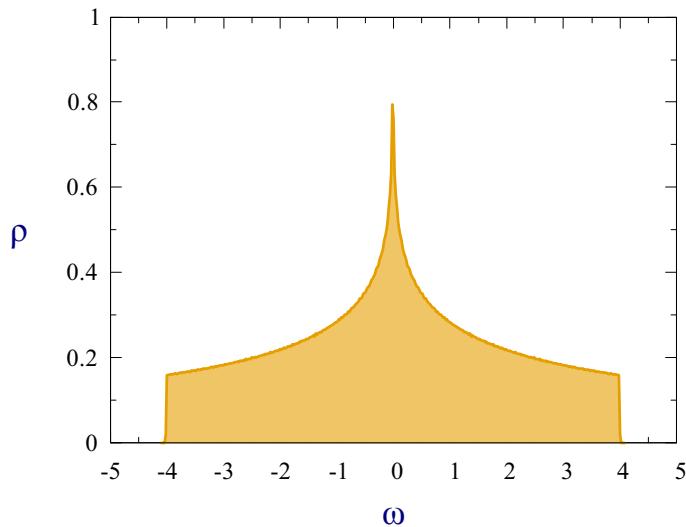


Figura 22 – Densidade de estados tight-binding da rede quadrada na fase normal.

A densidade de estados da rede quadrada, em $T = 0$, na fase supercondutora com simetria de onda s , é mostrada na figura 23 onde é possível observar o gap aberto no centro da banda, além da presença de divergências nas bordas do gap.

A seguir, na figura 24, vemos o caso da simetria de onda d . A abertura do gap neste caso adquire uma forma bem específica, onde nenhum valor de energia é totalmente proibido. A maneira como o gap se abre é dependente da simetria, pois para cada simetria o gap possui uma dependência em \mathbf{k} diferente.

Para a simetria de onda s estendida, precisamos utilizar outro valor de ocupação, pois para $n = 1$ não haverá gap neste caso.

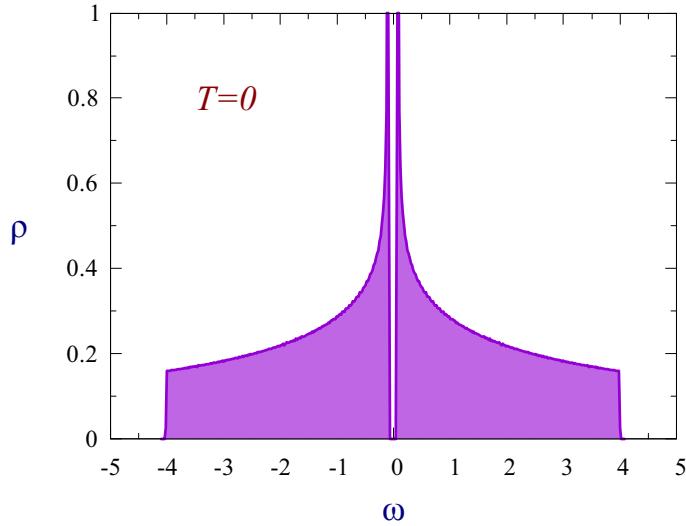


Figura 23 – Densidade de estados da rede quadrada em $T = 0$, para a simetria de onda s , considerando os parâmetros $g = 3$, $n = 1$ ($\mu = 0$), e o valor correspondente de $\Delta = 0.08$ encontrado autoconsistentemente.

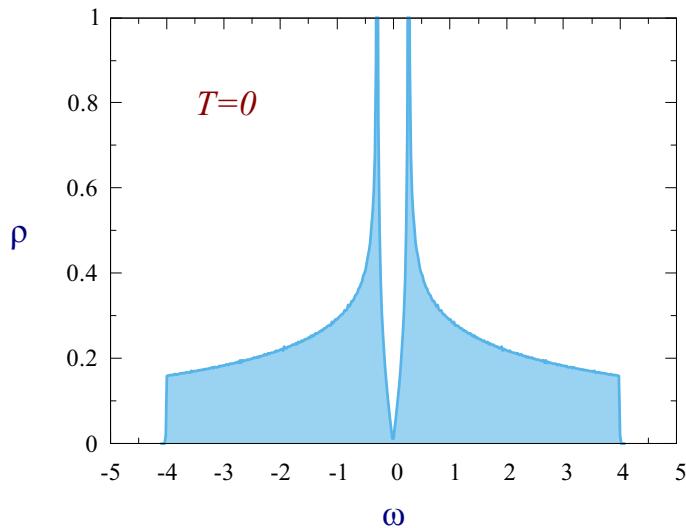


Figura 24 – Densidade de estados da rede quadrada em $T = 0$ para a simetria de onda d , considerando os parâmetros $g = 3$, $n = 1$ ($\mu = 0$), e o valor correspondente de $\Delta = 0.14$ encontrado autoconsistentemente.

6.2 SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DO GAP

Alguns resultados obtidos analiticamente podem ser resgatados e até expandidos com a solução numérica de algumas das equações de gap obtidas. A solução numérica das equações de gap consiste na solução autoconsistente através da realização das somas sobre o vetor de onda \mathbf{k} . Começando pela equação:

$$1 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{g}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2k_B T_c}\right) \quad (217)$$

Que é a equação do gap para o caso $T = T_c$ ($\Delta = 0$). Utilizando a relação de dispersão para

o gás de elétrons bidimensional (Apêndice A), modelo utilizado no desenvolvimento original da teoria BCS:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - \mu \quad (218)$$

Note que neste caso em particular, a densidade de estados é constante, e consequentemente será constante no nível de Fermi. Podemos fixar a densidade de estados, normalizando por uma largura de banda W (que também será nossa unidade de energia), de forma que teremos $\lambda \propto g$. Podemos então resolver a equação autoconsistentemente e encontrar $k_B T_c$ vs $1/\lambda$.

Na figura 25 está plotado o resultado numérico obtido, além do resultado analítico calculado $k_B T_c = 1.13 E_D e^{-1/\lambda}$. Foi utilizado o sistema de unidades atómicas $m = k_B = \hbar = 1$.

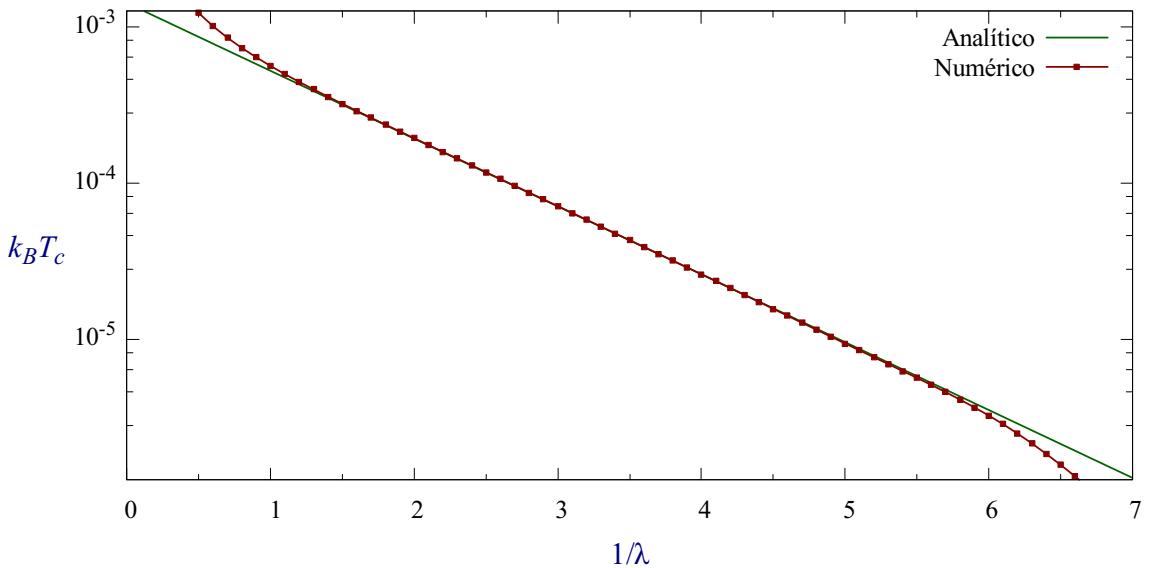


Figura 25 – $k_B T_c$ versus $1/\lambda$ no modelo do gás de elétrons.

É possível notar a concordância dos resultados para valores intermediários de $1/\lambda$ entre 1 e 6, já para os demais valores os resultados divergem. A divergência para valores menores que 1 se deve a aproximação utilizada na solução das integrais analíticas, enquanto a divergência para valores maiores que 6 se deve à divergências numéricas devido ao valor pequeno do termo $k_B T_c$. É razoável esperar que quanto maior o parâmetro de acoplamento, maior a temperatura em que o material transacionará para a fase supercondutora. Apesar do modelo não exibir explicitamente a densidade de estados, é razoável esperar que a dependência de T_c seja semelhante a de g , uma vez que eles são proporcionais. O modelo é sensível à escolha de E_D , porém a escolha de um valor específico para este parâmetro para fins qualitativos não é tão relevante quanto a condição $E_D \ll E_F$. A relevância da energia de Debye é esperada em modelos onde a densidade de estados varia mais rapidamente em torno do nível de Fermi, pois uma pequena variação em E_D poderia acarretar numa adição ou subtração considerável de estados eletrônicos que contribuem para a formação dos pares de Cooper.

Podemos resolver, de maneira muito semelhante, a equação do gap em função da temperatura, dada pela expressão:

$$1 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{g}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (219)$$

E comparar com as expressões analíticas:

$$\Delta(T) = \Delta_0 - (2\pi\Delta_0 k_B T)^{1/2} \exp \left(-\frac{\Delta_0}{k_B T} \right) \quad \text{para } T \ll T_c \quad (220)$$

$$\Delta(T) = 3.06k_B T_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{para } T \approx T_c \quad (221)$$

O plot da solução numérica juntamente das soluções analíticas pode ser visto na figura 26.

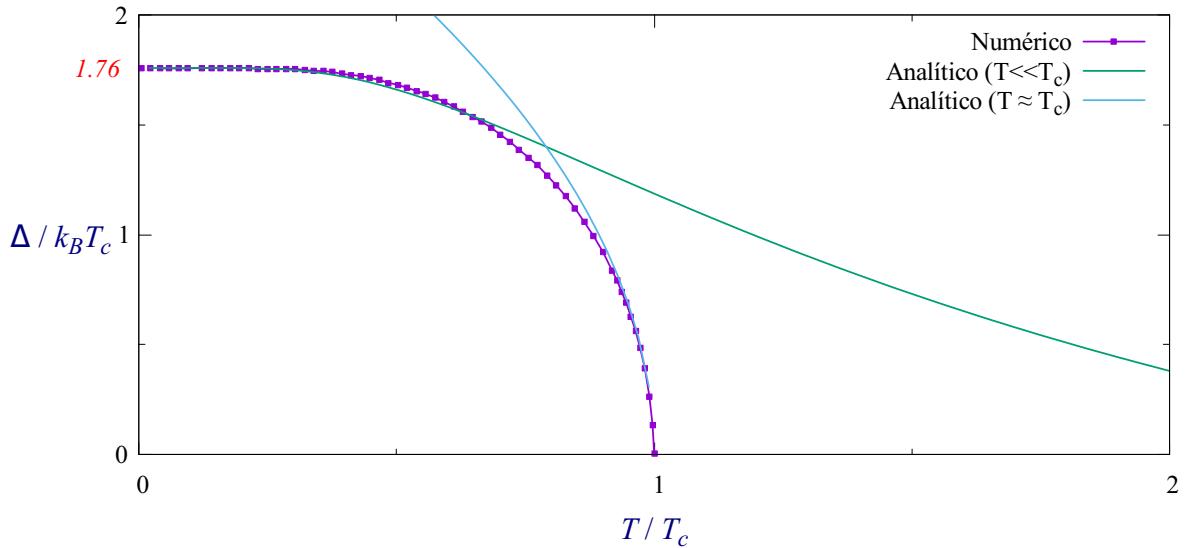


Figura 26 – $\Delta/k_B T_c$ versus $k_B T/k_B T_c$ no modelo do gás de elétrons.

O gráfico encontrado numericamente é típico de um parâmetro de ordem de uma transição de fase. Na figura é possível identificar o limite de viabilidade de utilização das expressões analíticas, havendo uma região intermediária que somente a o resultado numérico é capaz de descrever corretamente. O valor de $\Delta_0 = 1.76k_B T_c$ encontrado numericamente concorda com o encontrado analiticamente, valor este que é característico dos supercondutores convencionais.

Por fim podemos resolver a equação para Δ_0 dada por:

$$1 = g \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_0|^2}} \quad (222)$$

É esperado que o comportamento de Δ_0 em função de $1/\lambda$ seja semelhante ao de $k_B T_c$, uma vez que a razão entre eles é um valor constante. O resultado numérico pode ser visto na figura 27 juntamente no resultado analítico $\Delta_0 = 2E_D e^{-1/\lambda}$.

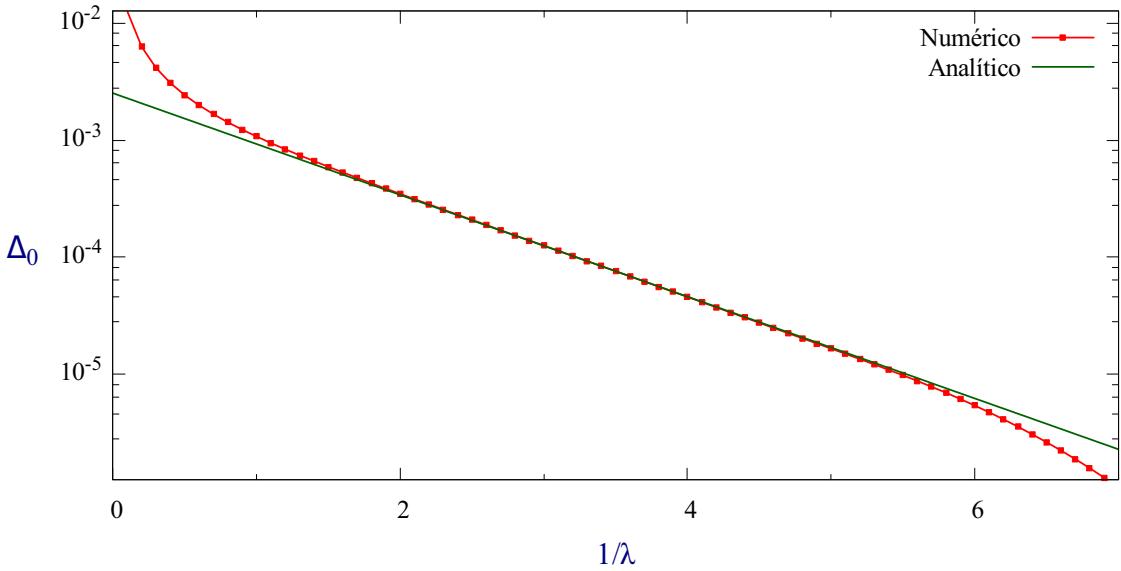


Figura 27 – Δ_0 versus $1/\lambda$ no modelo do gás de elétrons.

Note que não só o comportamento é semelhante a $k_B T_c$, como para valores pequenos e grandes a divergência do resultado numérico e analítico também é semelhante.

6.3 EQUAÇÃO DO GAP DEPENDENTE DE K

Podemos resolver numericamente a equação do gap para as diferentes simetrias e comparar os resultados, ainda para o caso do modelo de gás de elétrons. Começando com a equação do gap para $T = T_c$:

$$\frac{1}{g} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta_{\mathbf{k}}^2}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2k_B T_c} \right) \quad (223)$$

Vemos que para os diferentes valores de $1/\lambda$, as três simetrias terão uma região exponencial que na figura 29 é a região reta da curva. Como não há cruzamento entre as curvas, dado um valor para o parâmetro adimensional de acoplamento, uma simetria estará sempre acima da outra seguindo a ordem onda s estendida < onda s < onda d . A ocupação utilizada é a banda semi preenchida ($n = 1$).

Podemos comparar o gap à temperatura nula, e para isso utilizamos a equação:

$$\frac{1}{g} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta_{\mathbf{k}}^2}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \eta_{\mathbf{k}}^2 \Delta_0^2}} \quad (224)$$

O comportamento para as simetrias d e s são muito parecidos para Δ_0 e $k_B T_c$, permitindo que na região exponencial tenhamos um valor para $\Delta_0/k_B T_c$ que varie muito pouco com $1/\lambda$, enquanto para a simetria s -estendida isso não ocorre. Importante destacar que ao compararmos as simetrias, não estamos definindo qual simetria deve ser mais estável para um material específico. O fato é que materiais com simetrias diferentes podem ter temperaturas críticas diferentes para o

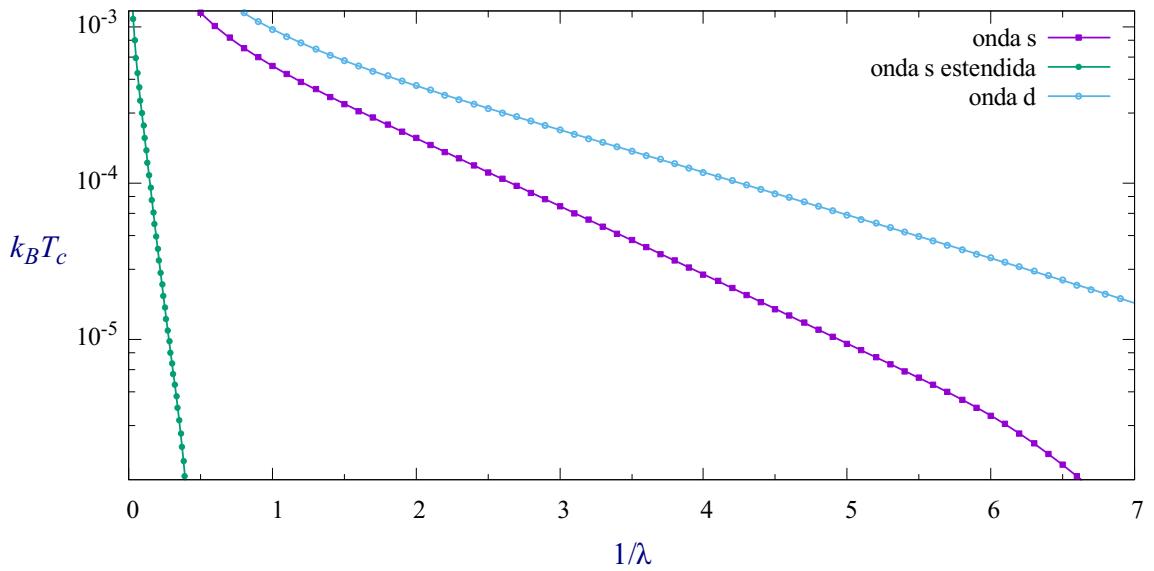


Figura 28 – $k_B T_c$ versus $1/\lambda$ para as simetrias de onda s , s estendida e d no modelo de gás de elétrons.

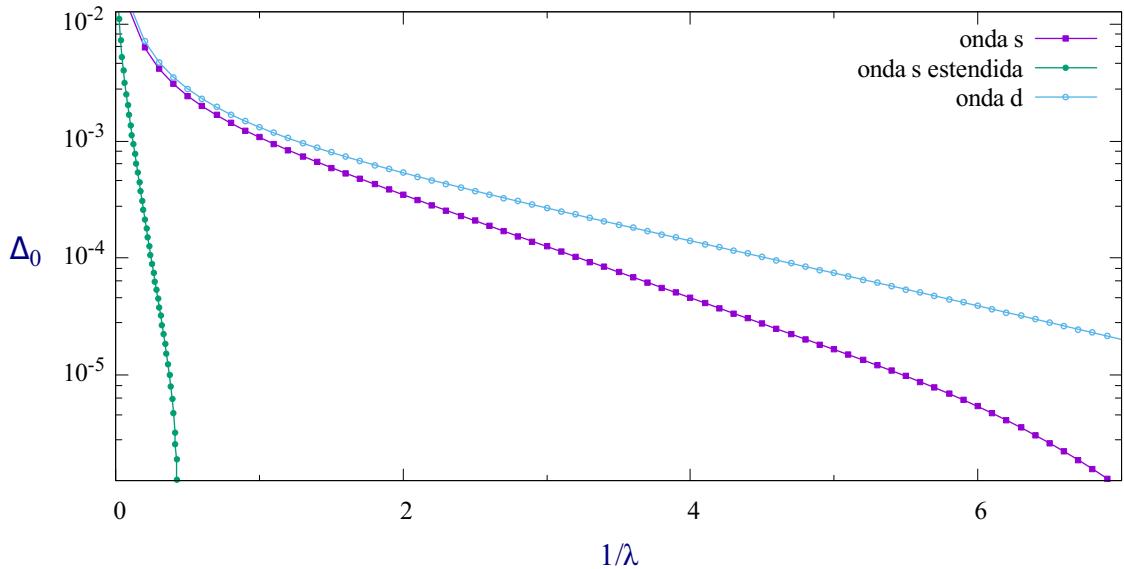


Figura 29 – Δ_0 versus $1/\lambda$ para as simetrias de onda s , s estendida e d no modelo de gás de elétrons.

mesmo valor de $1/\lambda$ de acordo com este modelo. Vamos agora obter o gráfico comparativo entre as simetrias (presente na figura 30) para $\Delta(T)$, resolvendo a equação:

$$\frac{1}{g} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (225)$$

Note inicialmente a ausência da simetria de onda s estendida. Isso se deve à dependência que diferentes as simetrias possuem em relação a média de ocupação da banda, de forma que elas são suprimidas para alguns valores de potencial químico. Neste caso, para $\mu = 0$ (nível de

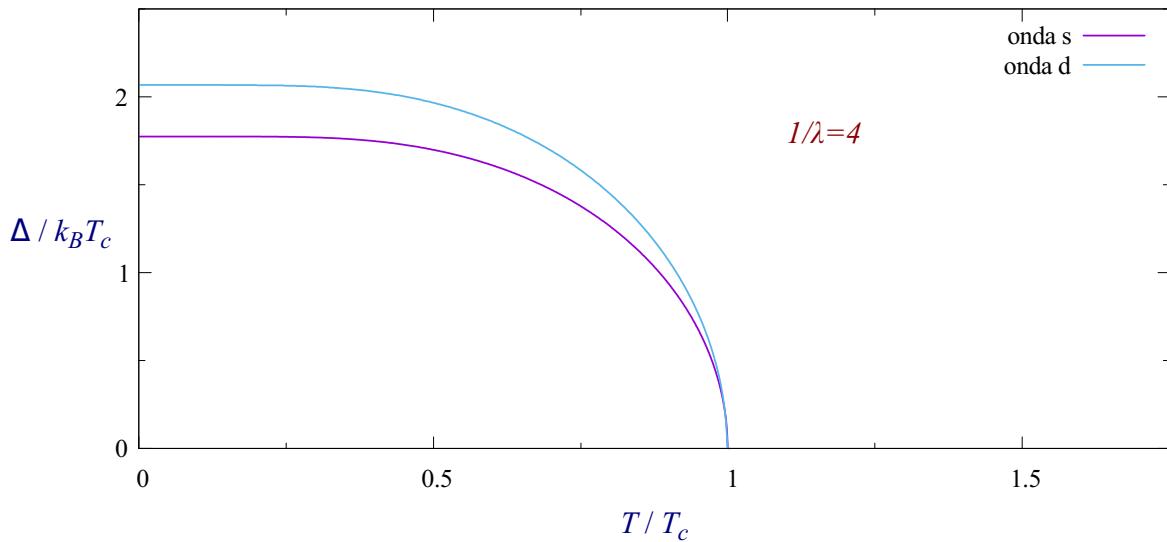


Figura 30 – $\Delta / k_B T_c$ versus $k_B T / k_B T_c$ para as simetrias onda *s* e onda *d* no modelo de gás de elétrons.

Fermi no centro da banda) a formação do gap para a simetria de onda *s* estendida é desfavorável, pois neste caso a superfície de Fermi está localizada na região onde a repulsão coulombiana domina as interações eletrônicas. Uma análise mais completa do gap para as diferentes simetrias inclui a dependência com a ocupação e será feita na próxima seção.

Podemos notar também a diferença no valor de $\Delta_0 / k_B T_c$ que é 2.14 para a simetria de onda *d* e 1.76 para a simetria de onda *s*, valores característicos para cada simetria.

6.4 MÉDIA DE OCUPAÇÃO

Como agora estudaremos a média de ocupação, o modelo de gás de elétrons deixa de ser interessante por possuir uma densidade de estados constante, resultando numa dependência monotônica com a ocupação local. Por esta razão utilizaremos a relação de dispersão do modelo tight-binding para a rede quadrada (deduzida no Apêndice A), sob a forma:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t[\cos(k_y a) + \cos(k_x a)] - \mu \quad (226)$$

Neste caso nossa unidade de energia será o hopping t que é oito vezes menor que a largura de banda. O resultado mais imediato que podemos obter é a dependência de T_c com o potencial químico, que pode ser obtida através da resolução direta da equação:

$$\frac{1}{g} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta_{\mathbf{k}}^2}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2k_B T_c}\right) \quad (227)$$

Note que as curvas são simétricas em relação ao centro da banda de forma que se plotarmos metade dela já teremos toda a informação física correspondente.

A média de ocupação é dada pela equação a seguir apresentada no capítulo 4.

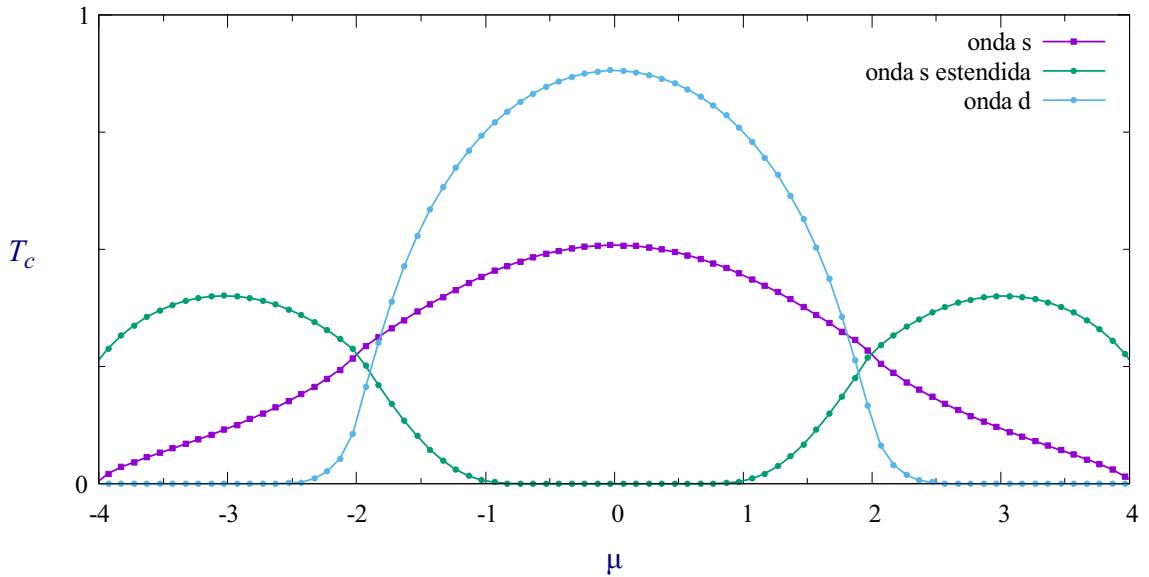


Figura 31 – T_c em função de μ para as simetrias onda s , onda s estendida e onda d e $E_D = 2,0t$ no modelo tight-binding

$$n = 1 - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (228)$$

Podemos resolver esta equação para o potencial químico μ e inseri-lo na equação para T_c , obtendo assim o gráfico T_c versus n :

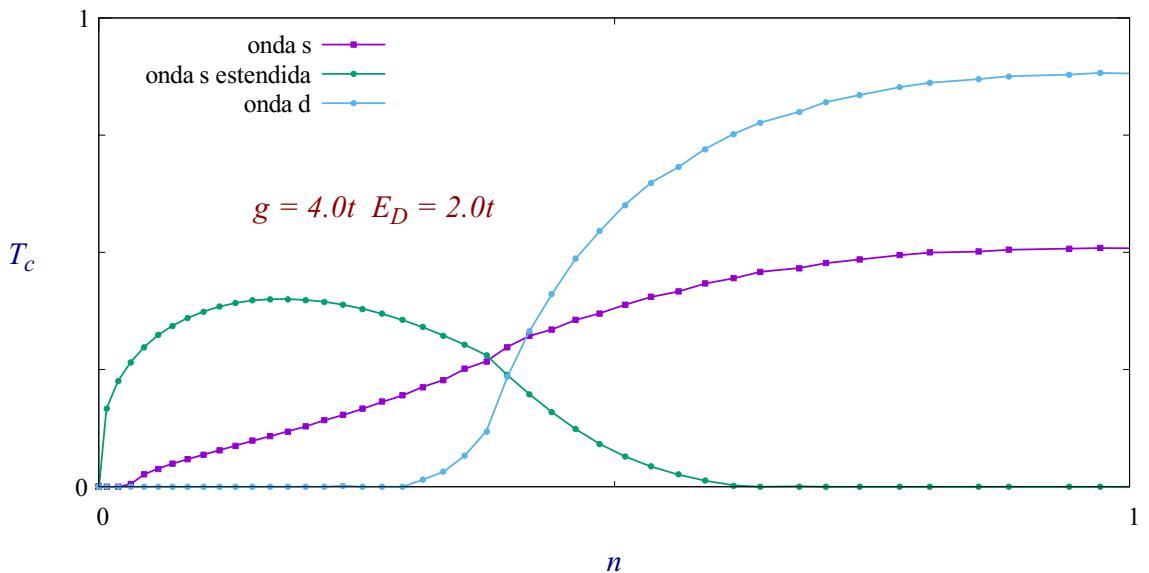


Figura 32 – T_c versus n para as simetrias onda s , onda s estendida e onda d no modelo tight-binding.

É possível notar como a simetria s estendida é suprimida para a região em torno da banda semi preenchida como dito na seção anterior. Interessante destacar como há uma região de dominância de cada uma das simetrias limitadas pelos cruzamentos das curvas. Para baixas

ocupações a simetria de onda *s* estendida domina, seguindo de uma pequena região de dominância da simetria *s*, e por fim na região em torno da banda semipreenchida é dominada pela simetria *d*. Podemos estudar a variação desta dependência de T_c com a ocupação em função do parâmetro de acoplamento g e ver como cada simetria é afetada pelo seu valor. Podemos ver o resultado na figura 33

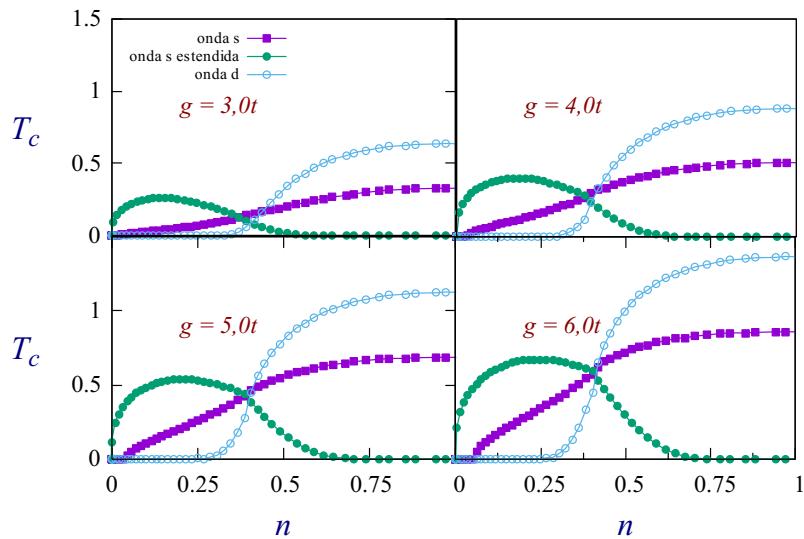


Figura 33 – T_c versus n para (a) $g = 3$, (b) $g = 4$, (c) $g = 5$ e (d) $g = 6$. Para todos os casos $E_D = 2,0t$ no modelo tight-binding

Como esperado, a temperatura crítica de uma maneira geral aumenta com o aumento do parâmetro de acoplamento, mantendo a forma das curvas. Todas as simetrias têm suas regiões de supressão reduzidas. A medida que g aumenta, os cruzamentos entre as curvas se aproximam, reduzindo a região na qual a simetria de onda *s* tem maior T_c . É possível construir um diagrama de fases puras g versus n a partir do mapeamento do cruzamento entre as curvas, como visto na figura 34.

No diagrama é possível ver a região em que cada simetria possui maior T_c , além de ser possível observar como o aumento de g desfavorece a simetria *s* em relação às demais simetrias.

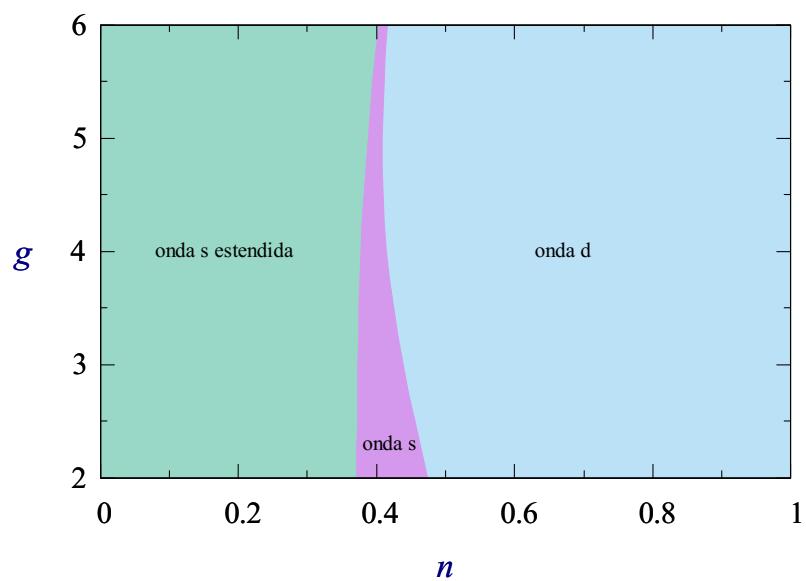


Figura 34 – Diagrama g versus n de fases puras para o modelo de uma banda no modelo tight-binding.

7 RESULTADOS DO MODELO DE DUAS BANDAS

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos a partir do modelo de duas bandas com interação do tipo BCS, desenvolvido no Capítulo 5. Consideramos que o gap, em nosso modelo, pode estar presente apenas em uma das bandas por vez e, portanto, analisaremos esses dois cenários. Consideramos, também, dois cenários para a posição relativa entre as bandas c e f : quando há overlap total ($E_f = -1$) e quando a banda f está na borda da banda de condução ($E_f = -4$), além da influência da simetria do parâmetro de ordem de nosso interesse: onda s , onda s estendida e onda d .

Assim, foram obtidas as densidades de estados em $T = 0$ e $T = T_c$. Também foram determinados o gap em $T = 0$ e a temperatura crítica, ambos em função da ocupação da banda para diversos valores da hibridização (V), além de uma análise das ocupações individuais das bandas c e f em função da ocupação total.

Por fim, foram obtidos os diagramas de fases puras V versus n para todos os cenários analisados, buscando identificar as fases mais favoráveis, usando como critério o gap a temperatura nula. Todos os resultados foram obtidos para $g = 3$, respeitando o limite de acoplamento fraco.

7.1 DENSIDADE DE ESTADOS DO MODELO DE DUAS BANDAS

Utilizando as expressões para os autovalores de energia, é possível calcular numericamente as densidades de estados. Para o caso em que $T = T_c$, a densidade de estados da fase supercondutora se iguala à densidade de estados na fase normal, de forma que, a partir da equação 141 e utilizando a relação de dispersão do modelo tight-binding, considerando $\alpha = 0.2$ (banda f estreita), podemos calcular a densidade de estados para dois casos da posição relativa entre as bandas: $E_f = -1$ (bandas com overlap) e $E_f = -4$ (banda f na borda da banda de condução), como visto nas figuras 35 e 36.

Em todas as figuras, é possível notar a presença do gap de hibridização, que aumenta com o valor de V . O processo de diagonalização reescreve o hamiltoniano em termos de operadores de quasipartículas; logo, o gap de hibridização separa justamente os estados de quasipartículas diferentes. A presença de picos na densidade de estados nas bordas do gap de hibridização também pode ser observada em todas as curvas. A densidade de estados é característica, possuindo uma região estreita e alta, correspondente à contribuição da banda f , e uma região larga e baixa, correspondente à contribuição da banda de condução. Essas contribuições são mais distintas no caso $E_f = -1$, onde a posição relativa entre as bandas sem hibridização é maior.

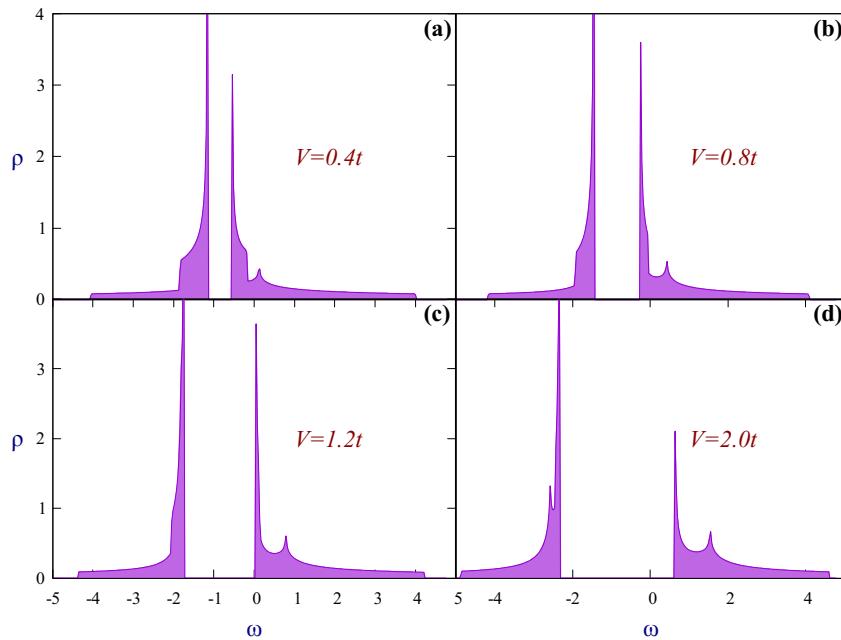


Figura 35 – Densidade de estados do modelo de duas bandas na fase normal, $E_f = -1$, para (a) $V = 0.4$, (b) $V = 0.8$, (c) $V = 1.2$, (d) $V = 2.0$

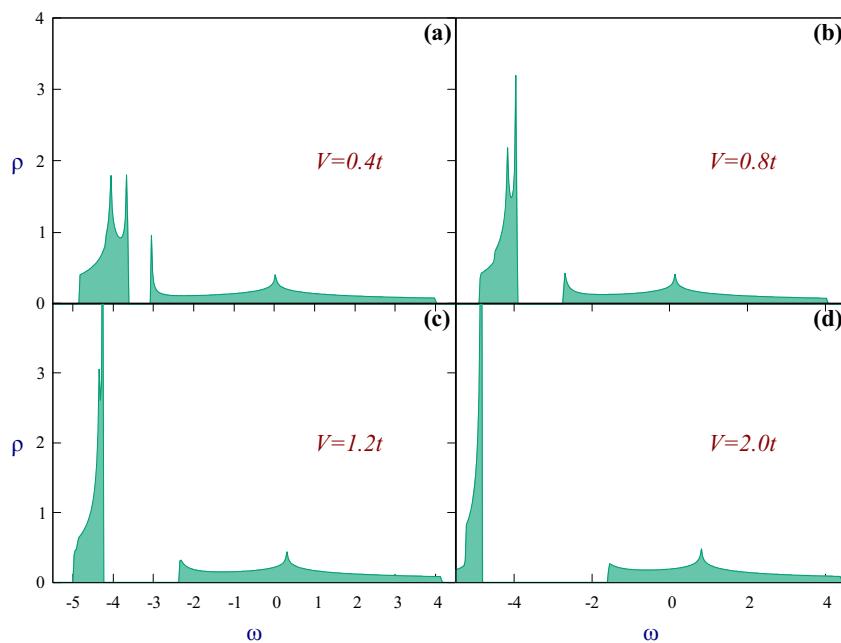


Figura 36 – Densidade de estados do modelo de duas bandas na fase normal, $E_f = -4$, para (a) $V = 0.4$, (b) $V = 0.8$, (c) $V = 1.2$, (d) $V = 2.0$

7.2 SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE Δ_0 PARA PAREAMENTO NA BANDA DE CONDUÇÃO

A obtenção do gap à temperatura nula ocorre através da solução autoconsistente da equação 187. Como estamos no limite de acoplamento fraco ($g = 3.0t$), é esperado que o comportamento de Δ_0 seja muito parecido com o de T_c , com a exceção do valor absoluto, que deve ser maior. A figura 37 mostra o gráfico de Δ_0 versus n para o caso onde $E_f = -1$.

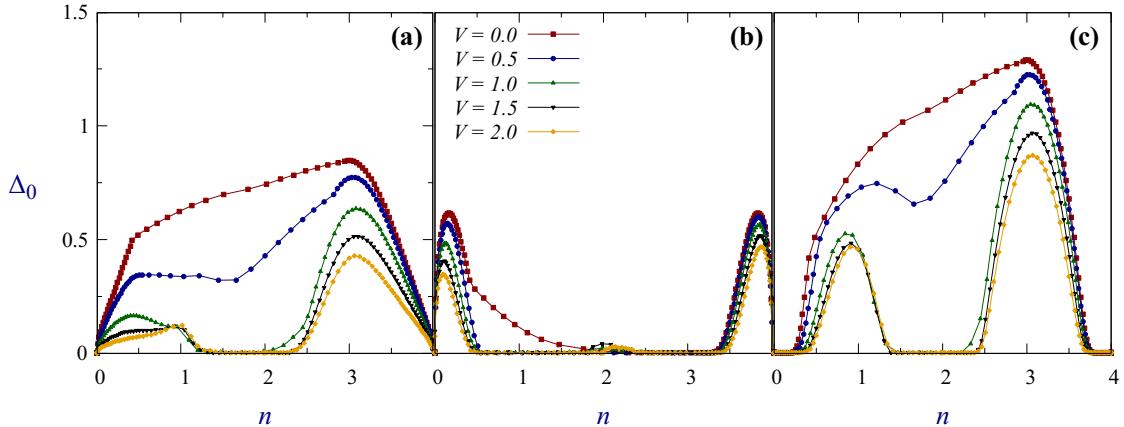


Figura 37 – Δ_0 versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$

Vemos que, para a simetria s , em $V = 0$, a região de estabilidade da fase supercondutora se estende praticamente para todos os valores de n . À medida que a hibridização aumenta, o gap é reduzido globalmente, porém de forma mais intensa na região intermediária de ocupação. A partir de um determinado valor de V , surge uma região onde a supercondutividade é suprimida, separando duas regiões de estabilidade.

Para a simetria s estendida, em $V = 0$, é possível observar duas regiões de estabilidade nos dois extremos dos valores de ocupação, separadas por uma região onde a supercondutividade é instável. Ao aumentarmos V , a região instável aumenta, além de o gap ser reduzido globalmente. No centro da região onde a supercondutividade foi suprimida, é possível observar uma pequena região estável, com um gap bastante reduzido.

A simetria de onda d apresenta a forma de um domo em $V = 0$, sendo instável para valores muito baixos e muito altos da ocupação total. À medida que a hibridização aumenta, o gap é reduzido globalmente, porém de maneira mais acentuada na região central, de forma que, a partir de um valor de V , a região é suprimida, separando o domo em duas regiões de estabilidade. O comportamento do preenchimento das bandas c e f em relação à ocupação total está presente na figura 38.

Vemos que os elétrons do tipo c representam uma parcela considerável para valores baixos da ocupação total, de forma que a supercondutividade com pareamento na banda c é favorecida, apresentando regiões extensas de estabilidade. À medida que a ocupação aumenta, os elétrons do tipo f se tornam maioria pouco depois de $n = 1$, no ponto em que as curvas n_c e

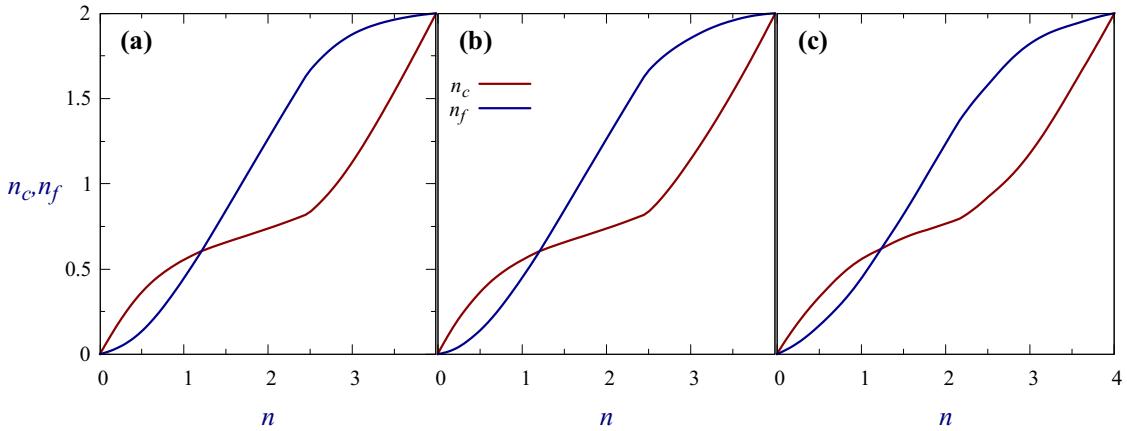


Figura 38 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$

n_f se cruzam.

Podemos ainda construir o diagrama V versus n a $T = 0$ e identificar a fase mais favorável através de uma comparação direta dos valores de Δ_0 para cada uma das simetrias. As regiões do diagrama que apresentarem $\Delta_0 = 0$ podem ser identificadas como a fase normal (fase não supercondutora). O diagrama para $E_f = -1$ está apresentado na figura 39.

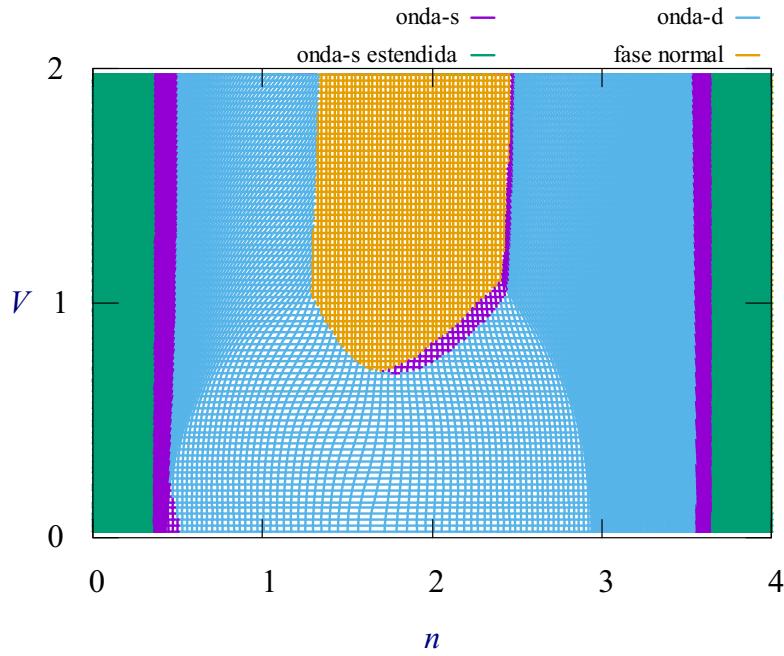


Figura 39 – V versus n , $T = 0$, gap na banda c , $E_f = -1$

Para de $V < 0.7$, haverá fase supercondutora para pelo menos uma das simetrias para todos os valores da ocupação. Para $V > 0.7$, na região em torno de $n = 2$, há uma região onde a fase normal é a mais favorável, separando duas regiões onde as supercondutividade aparece. Vemos que a dominância da simetria de onda s estendida ocorre para valores muito altos ou muito

baixos de ocupação, enquanto a simetria d é favorável para os valores intermediários. A simetria de onda s é dominante apenas em pequenas faixas para baixos e altos valores de ocupação, servindo como uma interface entre as simetrias s estendida e d e para valores intermediários de ocupação como uma interface entre a simetria d e a fase normal.

O gap à temperatura nula, para o caso onde $E_f = -4$ é apresentado na figura 40.

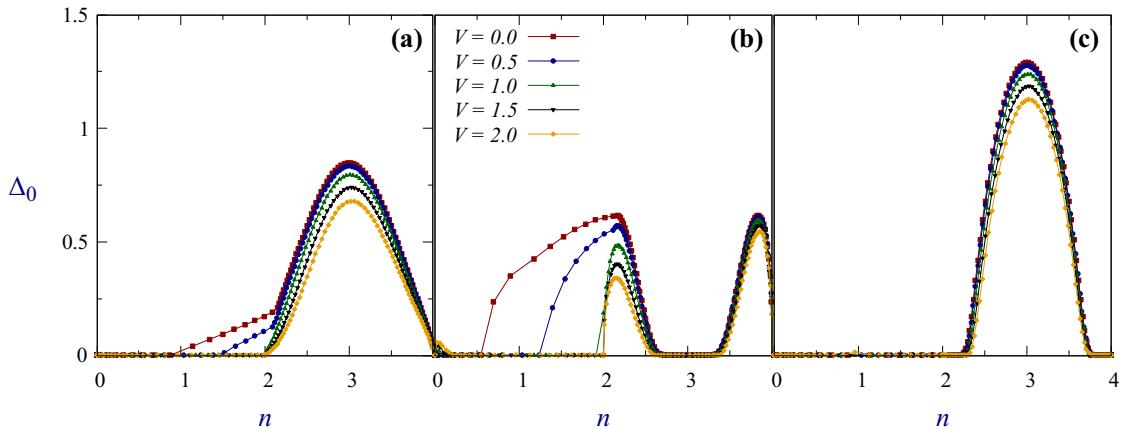


Figura 40 – Δ_0 versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda **(a)** s , **(b)** s estendida e **(c)** d , $V = 1.5$

Para a simetria s , em $V = 0$, a figura apresenta um domo contendo os valores de ocupação estáveis maiores que 3. À medida que a hibridização aumenta, além de uma redução global no valor do gap, a região de estabilidade é restringida para valores de $n > 2$. Para a simetria s estendida, em $V = 0$, a figura apresenta a forma de dois domos, separados por uma região de instabilidade. À medida que V aumenta, a região estável é reduzida para valores baixos de n . A partir de um dado valor de V , a região estável ocorre apenas para $n > 2$. Para a simetria d , a forma da curva é a de um domo bem estreito, contendo aproximadamente os valores de ocupação entre 2.25 e 3.75. O efeito do aumento de V se limita à diminuição global do valor do gap. O fato das regiões estáveis estarem principalmente em $n > 2$ pode ser entendido a partir da ocupação das bandas em relação à ocupação total, como podemos ver na figura 41.

É possível observar que a ocupação da banda f ocorre preferencialmente para valores baixos da ocupação total, enquanto a banda de condução é preenchida principalmente a partir de $n = 2$. Uma vez que o pareamento, neste caso, ocorre na banda c , a região mais favorável tende a ficar em valores de n onde haja mais elétrons disponíveis para o pareamento. O diagrama V versus n para $E_f = -4$ pode ser visualizado na figura 42.

Para baixos valores de V e baixos valores de ocupação, vemos que a fase normal é a dominante, o que já ficou evidenciado pela baixa concentração de elétrons do tipo c , nos quais ocorre o pareamento. À medida que V aumenta, a fase supercondutora fica limitada a valores de ocupação $n > 2$. Nesta região, as simetrias ocupam faixas verticais, simétricas em relação a $n = 3$. O comportamento da simetria s estendida é interessante para valores baixos de hibridização, onde ela ocupa uma parcela da região para $n < 2$, e para V muito alto, onde ocupa uma estreita

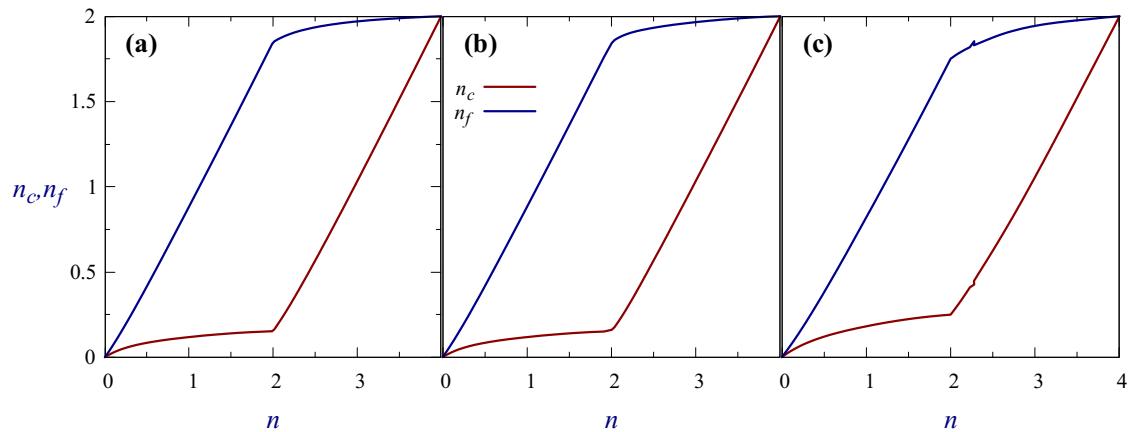


Figura 41 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda **(a)** s , **(b)** s estendida e **(c)** d , $V = 1.5$

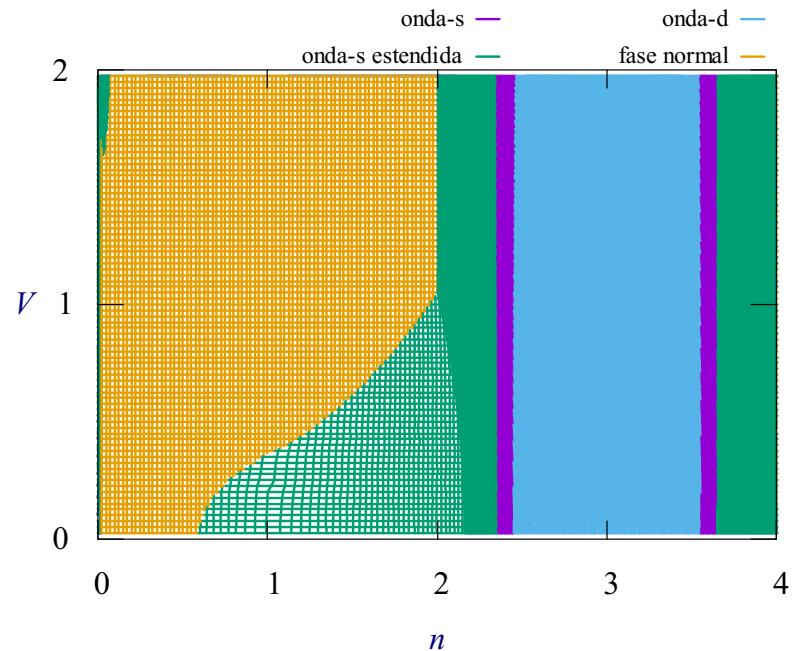


Figura 42 – V versus n , $T = 0$, gap na banda c , $Ef = -4$

região para ocupações muito baixas.

7.3 SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE Δ_0 PARA PAREAMENTO NA BANDA F

A obtenção do gap a $T = 0$ para o caso onde o pareamento ocorre na banda f é obtida através da solução autoconsistente da equação 187. O resultado para $E_f = -1$ é exibido na figura 43.

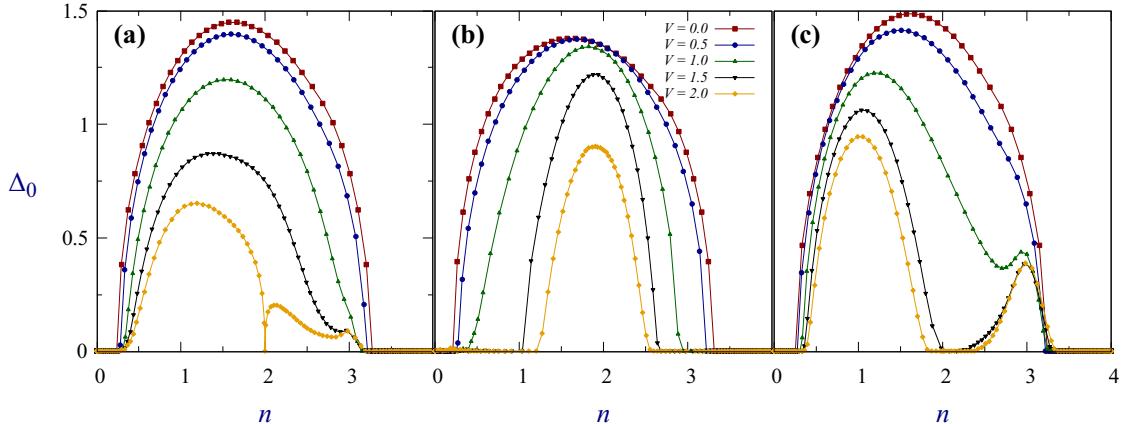


Figura 43 – Δ_0 versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$

É possível observar que, para $V = 0$, as três simetrias apresentam formas muito semelhantes. Ambas têm a forma de um domo contendo valores de ocupação $0.25 < n < 3.25$. A diferença entre elas ocorre no comportamento para dois valores de V .

A simetria s tem os valores globais do gap reduzidos à medida que aumentamos o valor de V , e é possível observar que, apenas para $n = 2$, a supercondutividade é suprimida em $V = 2$.

À medida que V aumenta, a simetria s estendida tem não só os valores globais do gap reduzidos, como também uma diminuição da região de estabilidade, através de um estreitamento do domo, sem mudar a sua forma característica.

A simetria d , com o aumento de V , tem sua região de estabilidade reduzida para valores intermediários de ocupação, de forma que, a partir da curva para $V = 1.5$, o domo é dividido em dois, separados pela região onde a supercondutividade foi suprimida. O resultado da ocupação das bandas em relação à ocupação total se encontra na figura 44.

Vemos que, para baixos valores de ocupação, a banda de condução é preferencialmente preenchida, de forma que a supercondutividade não é estável, uma vez que, neste caso, o pareamento ocorre na banda f . Pouco depois de $n = 0.25$, a ocupação da banda f aumenta consideravelmente, permitindo a fase supercondutora. Pouco antes de $n = 1$, os elétrons do tipo f se tornam maioria até as bandas estarem completamente preenchidas.

Podemos ver a comparação das simetrias no diagrama V versus n exibido na figura 45.

A para todos os valores de V , a fase normal é a favorável para baixos e altos valores de ocupação, deixando a fase supercondutora limitada a uma faixa de valores intermediários de n . A relação entre as simetrias na região onde há supercondutividade é complicada, porém é

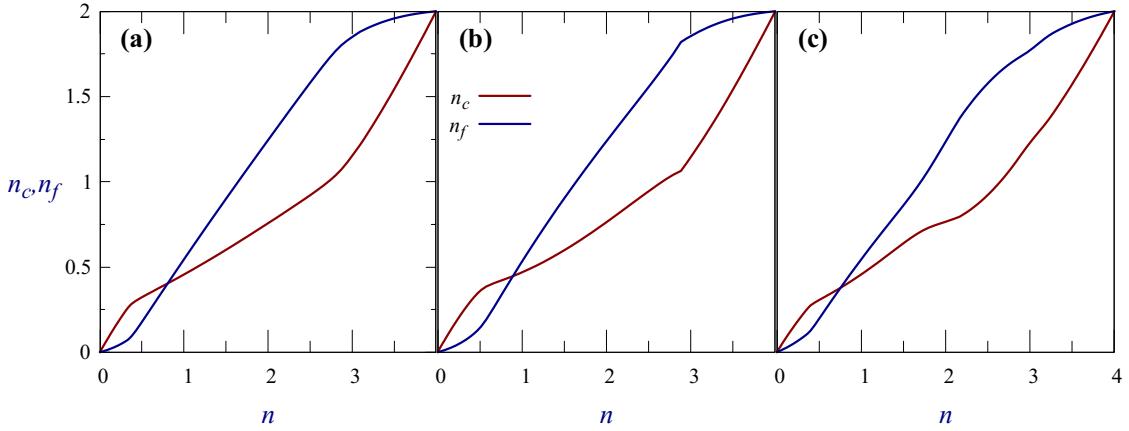


Figura 44 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$

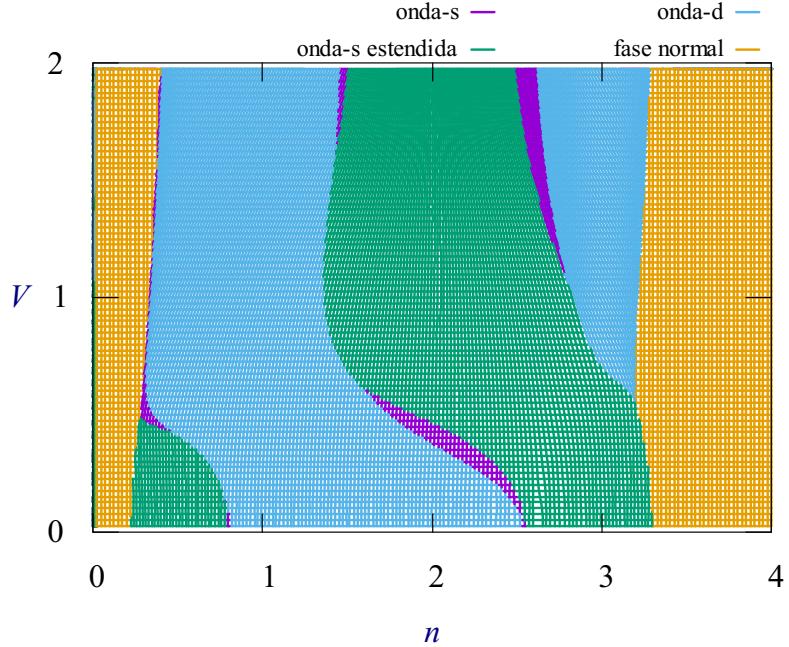


Figura 45 – V versus n , $T = 0$, gap na banda f , $E_f = -1$

possível observar a dominância das simetrias s estendida e d . Para valores baixos de V , a simetria s estendida aparece nas bordas, próximo à região de fase normal, e a simetria d aparece na região intermediária, enquanto para altos valores de V o cenário se inverte. A simetria de onda s aparece apenas em pequenas faixas estreitas por todo o diagrama, principalmente como interface entre as outras simetrias. Para $E_f = -4$, temos o resultado apresentado na figura 46.

O comportamento do gap é muito semelhante ao do caso anterior, porém podemos ver que a supercondutividade é estável desde valores muito baixos de ocupação. O efeito da hibridização é uma redução global do valor do gap e um estreitamento do domo para todas as simetrias. Para a simetria s estendida, vemos que, para $V = 2$, a hibridização suprime a supercondutividade apenas

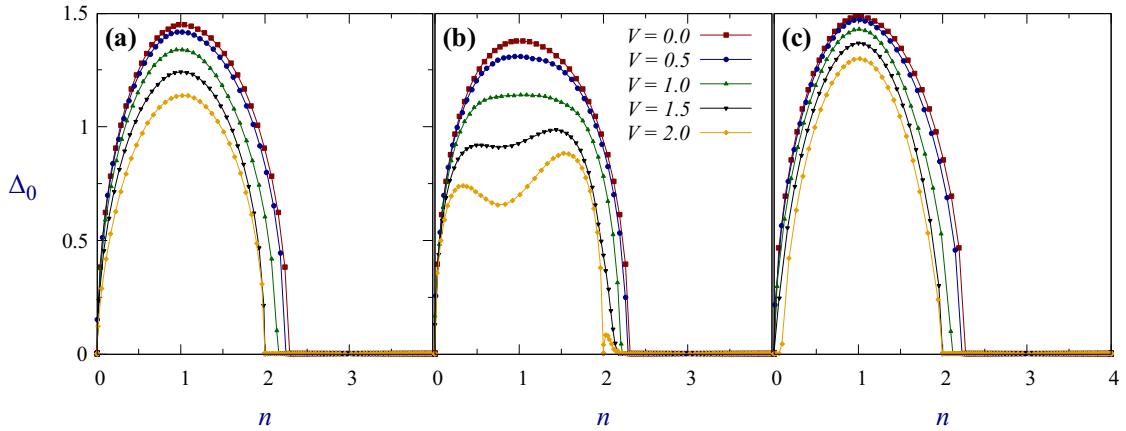


Figura 46 – Δ_0 versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$

para $n = 2$, de maneira muito semelhante ao que ocorreu para a simetria s do caso anterior. A figura 47 apresenta o resultado para a ocupação das bandas.

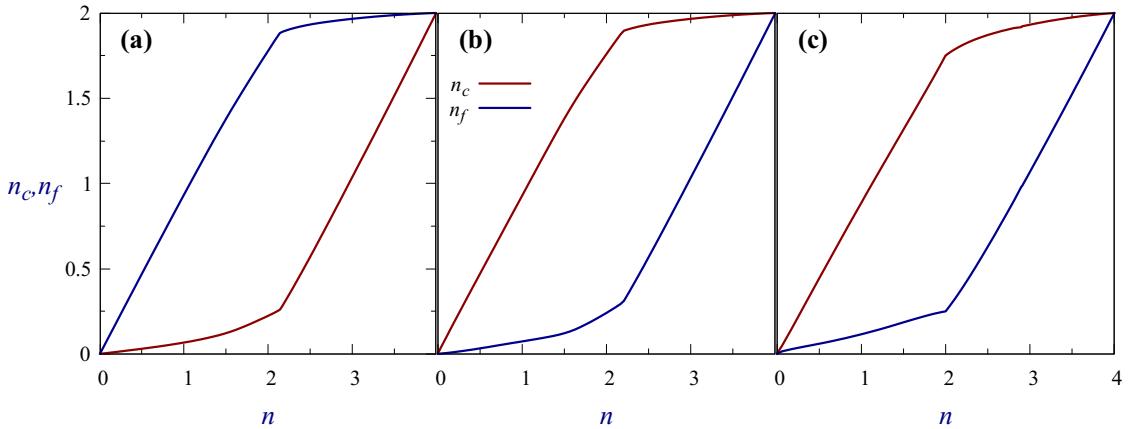


Figura 47 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$

Vemos que, desde ocupações mais baixas, os elétrons f preenchem rapidamente a banda, permitindo a supercondutividade nesta região. A banda de condução só é consideravelmente preenchida a partir de $n = 2$. O diagrama V versus n é apresentado na figura 48.

Podemos observar que neste caso a fase normal e a supecondutora ocupam, cada uma, praticamente metade do diagrama, com a supercondutividade ocupando a primeira metade para valores menores de n . Na região onde a fase supercondutora é favorável, as bordas são dominadas pela dimetria s estendida, e a região central pela simetria d , enquanto a simetria s aparece em faixas estreitas na interface entre as simetrias s estendida e d .

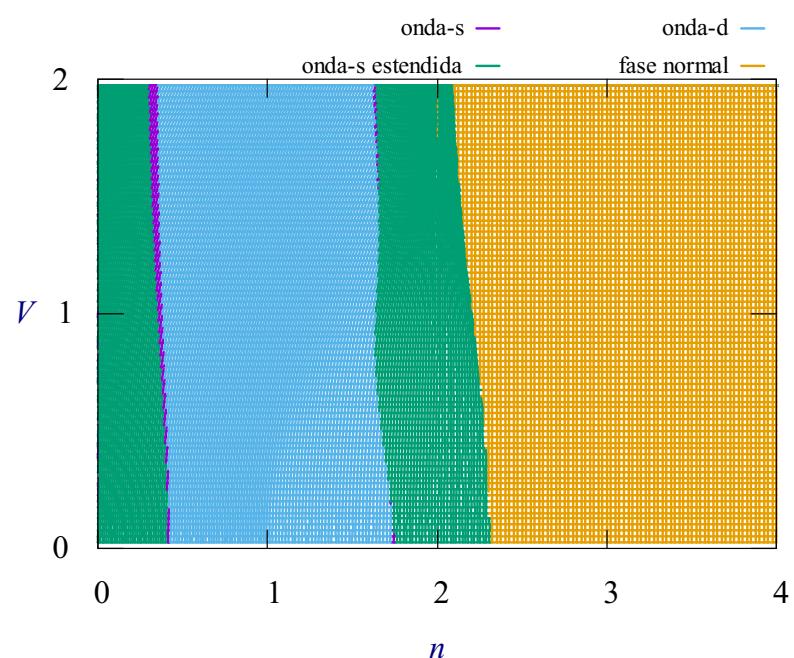


Figura 48 – V versus $n, T = 0$, gap na banda f , $E_f = -4$

7.4 SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE T_c PARA PAREAMENTO NA BANDA DE CONDUÇÃO

A obtenção da temperatura crítica em função da ocupação total é realizada através da solução autoconsistente da equação 192, e da equação 210, a fim de obter a ocupação total n , ambas para o mesmo valor de potencial químico μ . Analisaremos o comportamento da temperatura crítica para os mesmos casos e parâmetros que a análise feita para o Δ_0 na seção anterior. Há uma expectativa de que o comportamento das curvas seja muito semelhante ao do Δ_0 , uma vez que estamos no limite de acoplamento fraco. Começamos analisando o caso onde $E_f = -1$, no qual o overlap das bandas é total; o resultado está presente na figura 49.

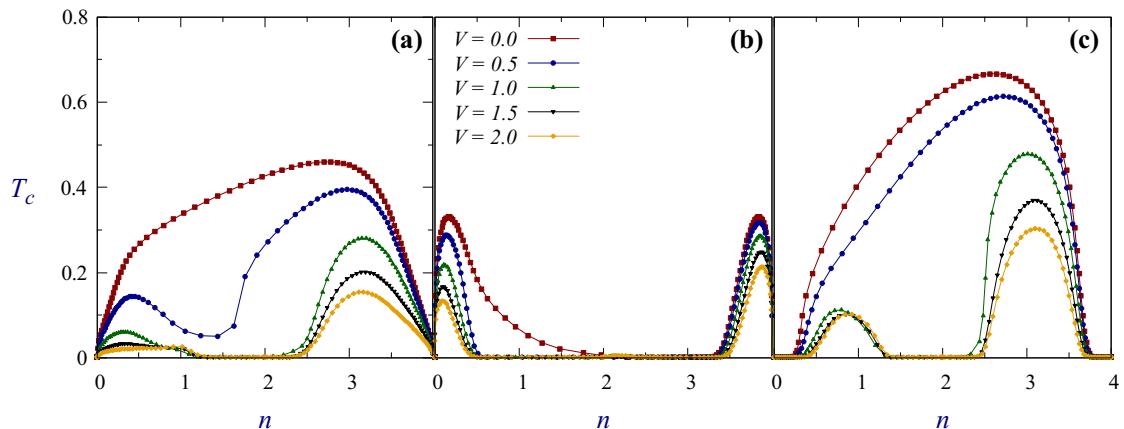


Figura 49 – T_c versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V

A forma da curva para a simetria s é a de um domo contendo todos os valores de ocupação. Para a simetria s estendida, a forma da curva é a de dois domos, cada um na borda da ocupação, separados por uma grande região onde a supercondutividade foi suprimida. Para a simetria d , a forma é de um domo, tal como a simetria s , porém ela não contém todos os valores de n , estando limitada a valores intermediários da ocupação. O efeito do aumento da hibridização em todas as simetrias é uma diminuição global da temperatura crítica, havendo valores de hibridização que suprimem a supercondutividade, principalmente para valores intermediários de ocupação. Quando isso ocorre para as simetrias s e d , elas assumem uma forma semelhante à simetria s estendida, com dois domos separados pela região onde a supercondutividade foi suprimida.

Para as simetrias s e d , a ocupação ótima ocorre sempre para $n > 2$, deslocando-se para a direita à medida que V aumenta. Para a simetria s estendida, em $V = 0$, a ocupação ótima ocorre para dois valores de n , um para ocupação muito baixa e outro para ocupação muito alta, mas, à medida que V aumenta, a ocupação ótima para n maior prevalece. Podemos entender a dinâmica de ocupação das bandas observando como a ocupação de cada uma das bandas ocorre à medida que a ocupação total varia, como exibido na figura 50.

A forma da ocupação individual das bandas é muito semelhante para as três simetrias, indicando que ela é mais influenciada pela posição relativa das bandas do que pela simetria em

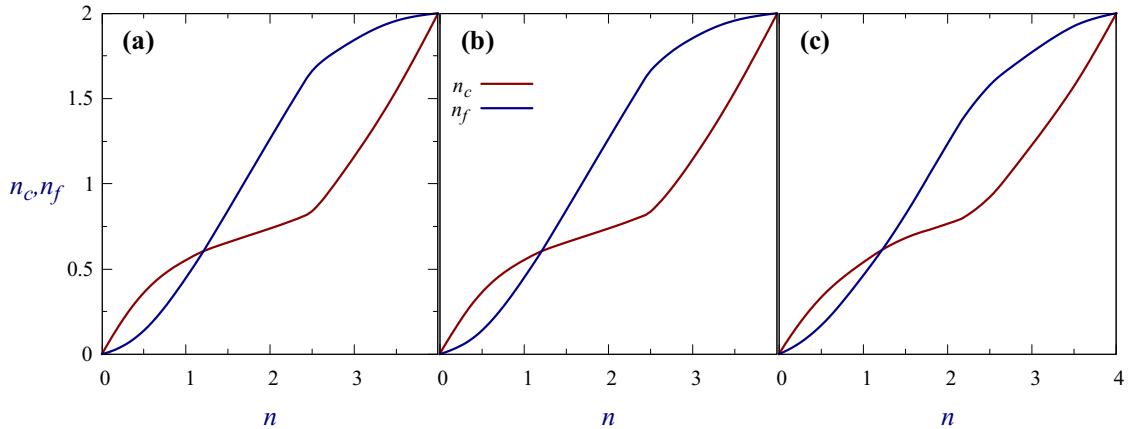


Figura 50 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -1$, para simetria de onda **(a)** s , **(b)** s estendida e **(c)** d , $V = 1.5$

si. A ocupação da banda c começa mais rapidamente, fazendo com que uma parcela maior dos elétrons seja do tipo c , favorecendo a fase supercondutora, já que o gap ocorre nesta banda. Este fato se altera pouco depois de $n = 1$, onde os elétrons tipo f se tornam maioria até a ocupação total ser completada.

A figura 51 mostra o caso onde $E_f = -4$. Para a simetria s , onde antes o domo continha praticamente todos os valores de ocupação, agora ocupa principalmente valores $n > 2$. A hibridização, neste caso, também reduz a temperatura crítica globalmente, porém ela suprime os valores baixos de ocupação, estreitando o domo e não dividindo-o em dois, como no caso anterior. A simetria s estendida apresenta a forma de dois domos, dos quais a hibridização suprime principalmente as ocupações abaixo de $n = 2$. Interessante notar que, a partir de $V = 1.5$, a região suprimida para aumentar com a hibridização, restando apenas como efeito a redução global da temperatura crítica. A simetria d apresenta a forma de um domo bastante estreito, na região $2.25 < n < 3.5$. A hibridização não altera a região estável, restando apenas a redução global da temperatura crítica.

Observando a ocupação das bandas na figura 52, vemos que a ocupação da banda f ocorre muito mais rapidamente do que a da banda c , o que se deve à posição relativa das bandas. A ocupação da banda f ser mais acentuada para o caso onde o gap se encontra na banda de condução culmina num desfavorecimento da fase supercondutora para baixos valores da ocupação total, como foi observado na figura 51.

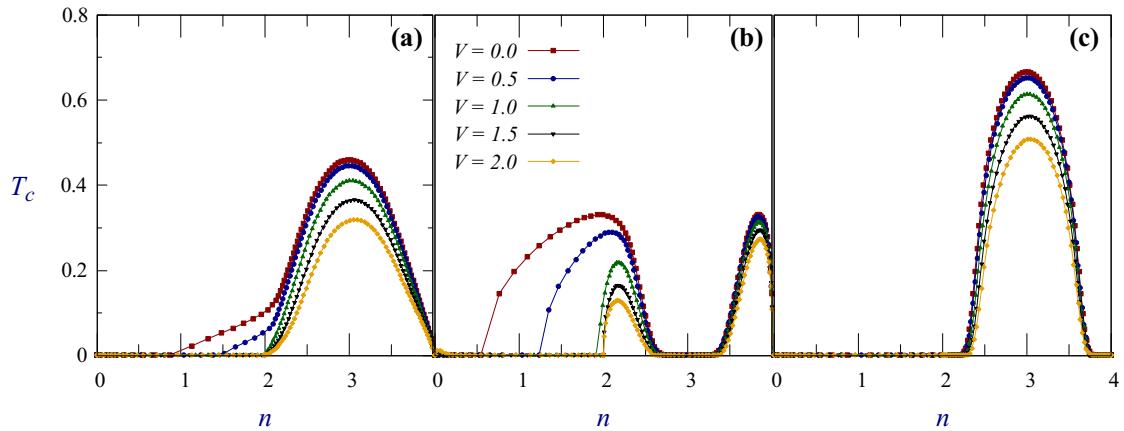


Figura 51 – T_c versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V

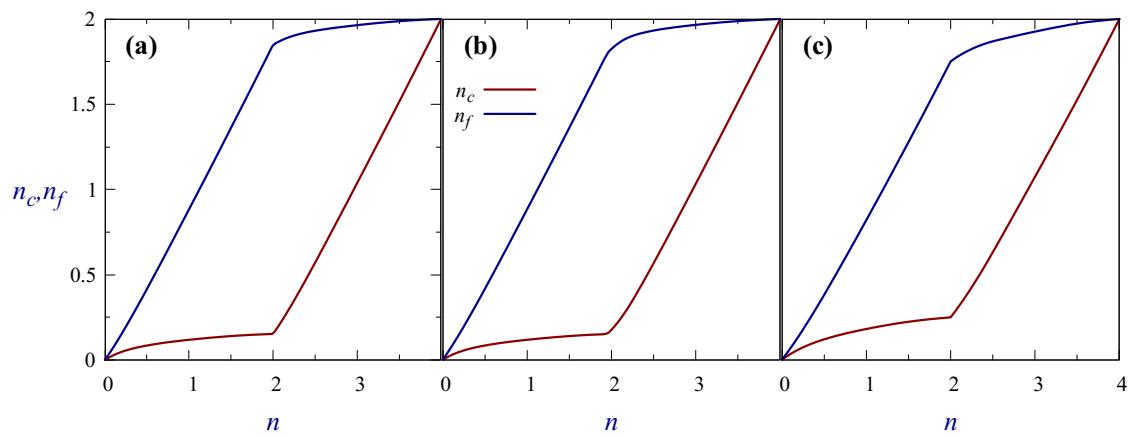


Figura 52 – n_c e n_f versus n , gap na banda de condução, $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$

7.5 SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE T_c PARA PAREAMENTO NA BANDA F

Agora vamos analisar o caso onde o pareamento ocorre na banda f , porém a equação a ser resolvida autoconsistentemente é a equação 209. Começando com o caso onde $E_f = -1$, que pode ser observado na figura 53.

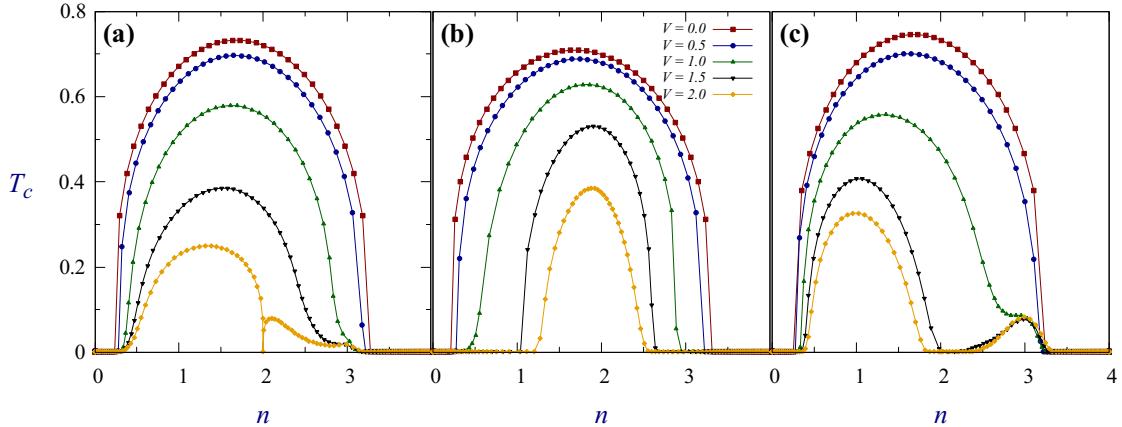


Figura 53 – T_c versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V .

Ambas as simetrias, para $V = 0$, apresentam a forma de um domo que contém aproximadamente as ocupações $0.5 < n < 3.25$. A principal diferença está em como cada simetria é alterada com o aumento da hibridização. A simetria s tem globalmente as temperaturas críticas reduzidas; o interessante é que a supressão da supercondutividade só ocorre para exatamente $n = 2$. Para a simetria s estendida, além da diminuição global da temperatura crítica, as bordas do domo são estreitadas com o aumento da hibridização. Porém, a forma característica é mantida. A simetria de onda d tem comportamento muito semelhante à simetria s , porém, ao aumentar a hibridização, uma região extensa no centro do domo é suprimida. Quando olhamos a ocupação das bandas na figura 54, vemos que a ocupação ocorre mais rapidamente na banda f .

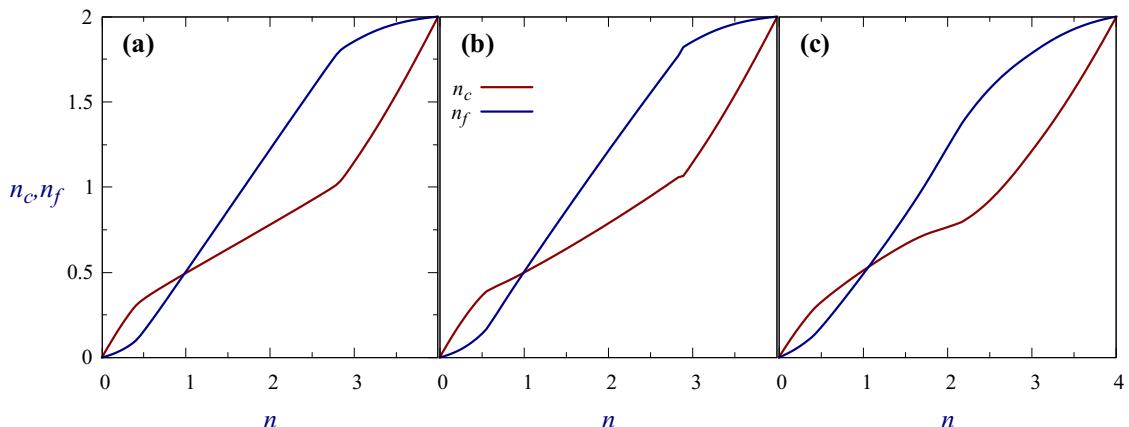


Figura 54 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -1$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$.

Pouco depois de $n = 1$, ocorre o cruzamento das curvas e a ocupação ocorre mais rapidamente para a banda c . Como o pareamento, neste caso, ocorre na banda f , ela é principalmente favorecida para baixos valores de ocupação. A presença de vértices, como na figura 54 (b) próximo a $n = 3$, está associada a uma mudança brusca em T_c , que neste caso ocorre em $V = 1.5$, uma vez que a ocupação não ocorre para temperatura constante.

Para o caso onde $E_f = -4$, apresentado na figura 55, vemos que novamente não só a forma das curvas é muito semelhante para as três simetrias, apresentando a forma de um domo, como seu comportamento com a variação de V . A região estável começa em ocupações muito baixas e se estende até aproximadamente $n = 2$. O efeito da hibridização segue sendo uma diminuição global da temperatura crítica e da região estável próxima a $n = 2$. O comportamento diferente está na simetria s estendida para $V = 2$, onde a supercondutividade é suprimida exatamente em $n = 2$ e uma pequena região estável se mantém imediatamente após $n = 2$.

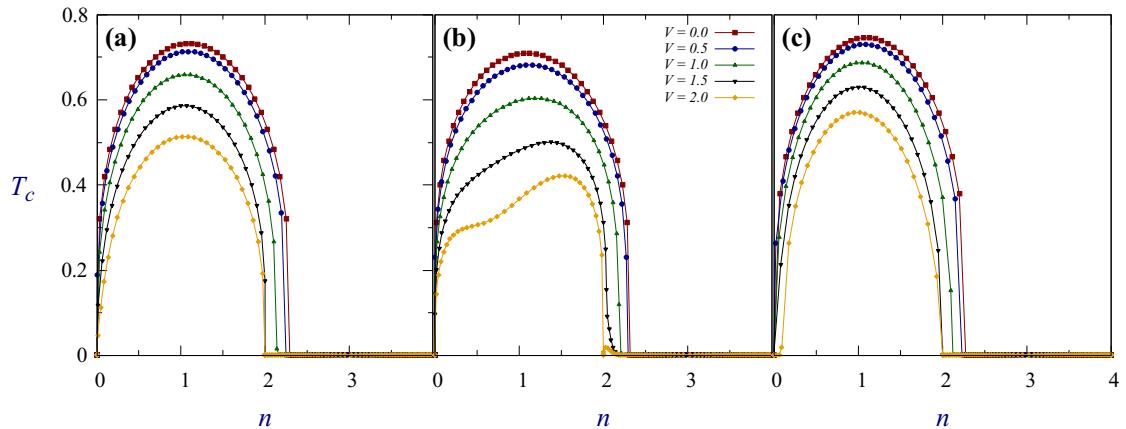


Figura 55 – T_c versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , para diversos valores de V .

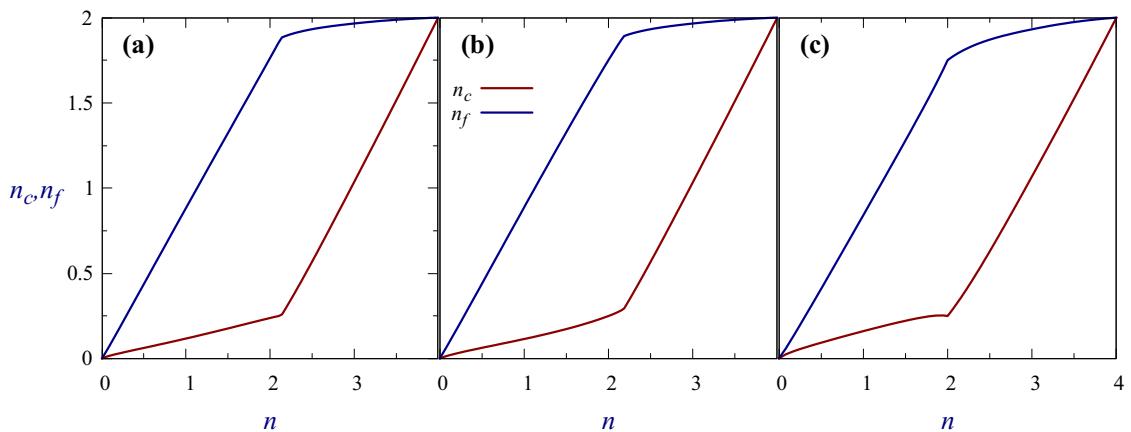


Figura 56 – n_c e n_f versus n , gap na banda f , $E_f = -4$, para simetria de onda (a) s , (b) s estendida e (c) d , $V = 1.5$.

A ocupação das bandas, apresentada na figura 56, mostra como a banda f é rapidamente ocupada, favorecendo fortemente a supercondutividade com pareamento na banda f . A partir

de $n = 2$, a banda c começa a ser ocupada mais rapidamente, mas os elétrons f seguem sendo maioria até a ocupação completa das duas bandas.

Como o comportamento de T_c é semelhante ao de Δ_0 , podemos observar se um diagrama V versus n , utilizando T_c como parâmetro também apresenta comportamento semelhante. O diagrama V versus n para todas as condições analisadas pode ser visto na figura 57.

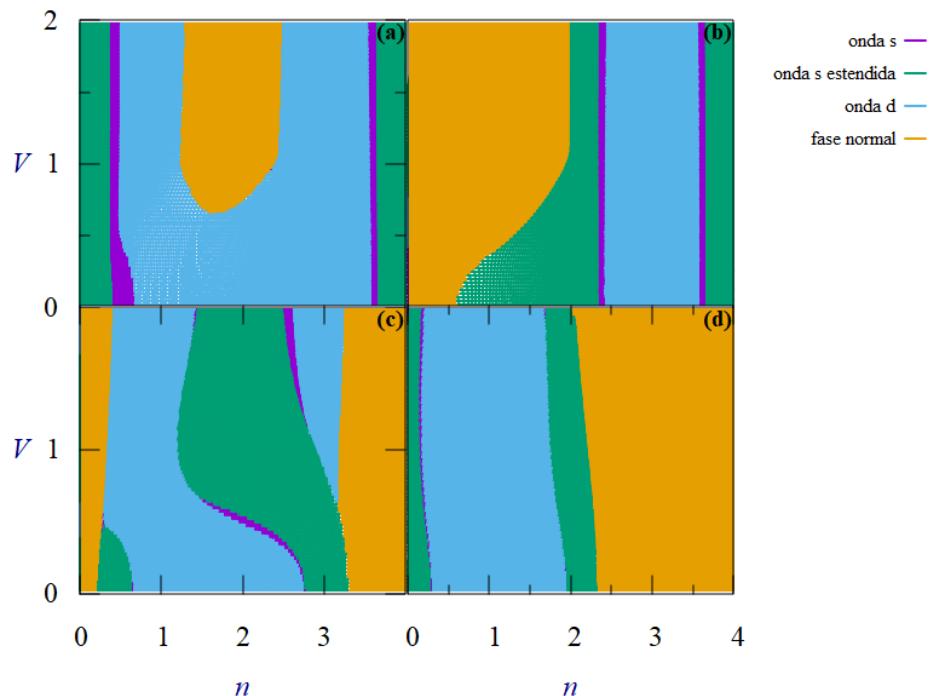


Figura 57 – V versus n , $T = T_c$, para (a) gap na banda c , $E_f = -1$, (b) gap na banda c , $E_f = -4$, (c) gap na banda f , $E_f = -1$, (d) gap na banda f , $E_f = -4$

Podemos ver que os diagramas são muito parecidos com os obtidos utilizando o gap a $T = 0$ como parâmetro.

7.6 ESTABILIDADE DO PAREAMENTO

Podemos comparar a estabilidade dos pareamentos na banda c e da banda f a $T = 0$, para cada posição relativa entre as bandas. Utilizando o gap como parâmetro obtemos o diagrama V por n apresentado na figura 58.

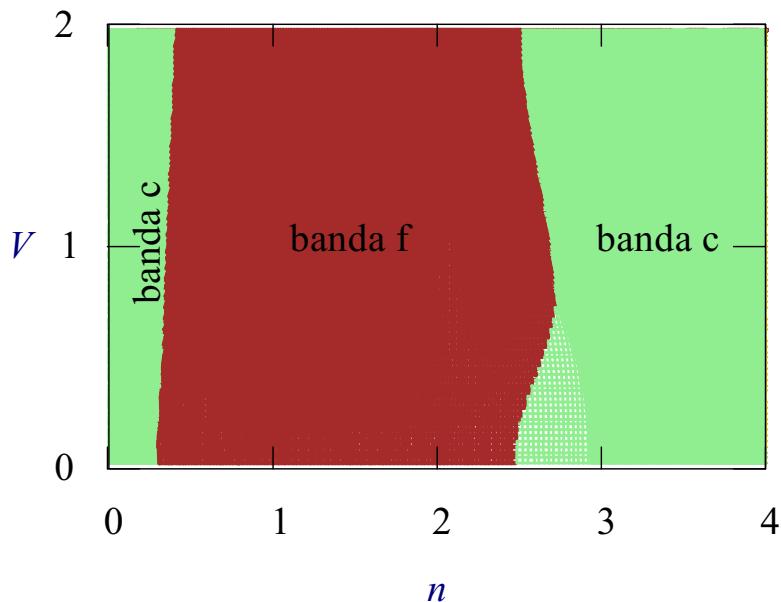


Figura 58 – V versus n , $T = 0$, $E_f = -1$ para pareamento na banda c (em verde) e na banda f (em vermelho)

Primeiro fato que podemos notar é a ausência da fase normal. A fase supercondutora ocupa todo o diagrama, tanto para pareamento na banda f quanto pareamento na banda c . A estabilidade relativa do pareamento na banda f é favorável para a região intermediária de ocupação, estando limitada aproximadamente na região entre $0.25 < n < 2.5$, e para demais ocupações sendo favorável o pareamento na banda c . Vemos, então que na banda semi preenchida, o gap é favorável na banda f .

Para o caso de $E_f = -4$, o diagrama se encontra na figura 59.

Vemos que a fase normal não aparece no diagrama. O diagrama é dividido em dois, quase na metade, de forma que para valores menores da ocupação o pareamento mais estável é o que ocorre na banda f e para valores maiores de ocupação, o pareamento mais favorável é o na banda c . Novamente, na banda semipreenchida o pareamento mais favorável é na banda f , porém para altos valores da hibridização, a fronteira entre as regiões de estabilidade ocorre exatamente em $n = 2$.

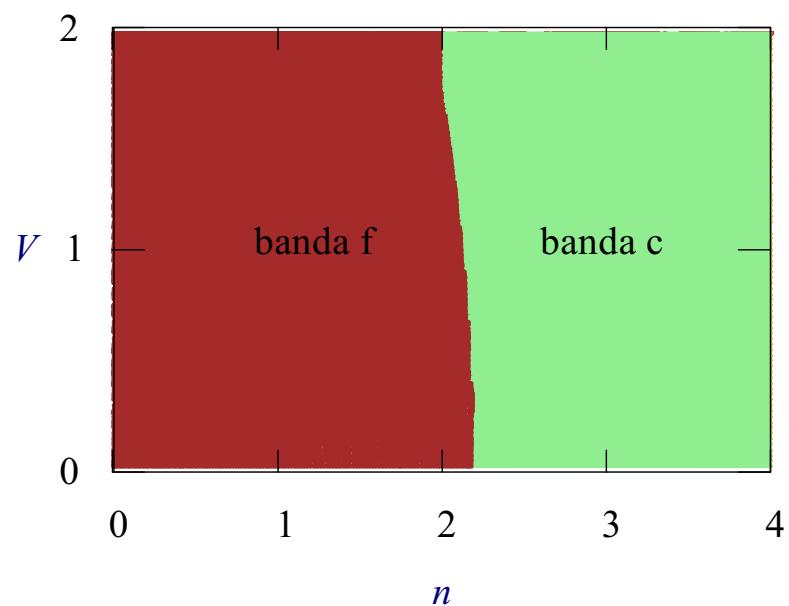


Figura 59 – V versus n , $T = 0$, $E_f = -4$ para pareamento na banda c (em verde) e na banda f (em vermelho).

8 CONCLUSÃO

Neste trabalho, foi realizado um estudo acerca da supercondutividade e suas propriedades fundamentais, como o gap Δ e a temperatura crítica T_c . Para obter estas propriedades, utilizamos o método de diagonalização do hamiltoniano através de transformações do tipo Bogoliubov-Valatin. O método permite obter os valores médios relevantes, como, por exemplo, os produtos de operadores $\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ presentes nas equações do gap. A solução destas equações se dá através de um cálculo numérico autoconsistente de Δ e T_c . Os modelos que estudamos foram os modelos tipo BCS de uma e duas bandas, onde a fase supercondutora é descrita por um termo de interação eletrônica atrativa no espaço recíproco, sem a necessidade de formular hipóteses adicionais acerca do mecanismo específico de pareamento.

Para o modelo de uma banda, obtivemos as propriedades do sistema para três simetrias de parâmetro de ordem diferentes: onda s , onda s estendida e onda d . Observamos que o gap a temperatura nula tem comportamento exponencial para valores do parâmetro de acoplamento dentro do limite de acoplamento fraco, resultando em um valor quase constante da razão $\Delta/k_B T_c$, sendo 1.76 para a simetria s e 2.14 para a simetria d . O comportamento de T_c em função da ocupação eletrônica é simétrico em torno de $n = 1$, apresentando uma região onde cada simetria tem valor maior. Para valores grandes e pequenos da ocupação, a onda s estendida apresenta maior T_c , enquanto, para valores intermediários, a onda d domina. Comparando os valores de T_c , obtivemos um diagrama $g \times n$. A simetria s aparece apenas numa região estreita em torno da interface entre as ondas d e s estendida.

No modelo de duas bandas, foi escolhido um hamiltoniano $c - f$ que inclui um termo de hibridização, além de um termo de pareamento para cada uma das bandas. A resolução das equações de gap nos permitiu calcular o gap a $T = 0$ e a temperatura crítica em função da ocupação total e diversos valores de hibridização V , para o caso do pareamento exclusivo na banda c ou exclusivo na banda f . Nos resultados, consideramos a banda f mais estreita, com diferentes valores para a sua posição E_f em relação ao centro da banda c de condução. Em particular, escolhemos os valores $E_f = -4$ (nível f próximo da borda inferior da banda de condução) e $E_f = -1$ (nível f próximo do centro da banda de condução). Para enriquecer nossas análises, para cada caso, obtivemos a ocupação individual de cada banda em função da ocupação total, para analisar a influência do número de elétrons disponíveis para o pareamento na fase supercondutora. Encontramos que o pareamento na banda f é mais favorável que o pareamento na banda de condução, notadamente no caso $E_f = -1$. Em geral, o efeito da hibridização é prejudicial para a supercondutividade, principalmente para regiões intermediárias onde a supercondutividade é estável.

A ocupação das bandas ocorre de maneira similar para as bandas c e f no caso $E_f = -1$, enquanto que, no caso $E_f = -4$, a ocupação da banda f é bastante predominante, principalmente para valores baixos da ocupação total. O efeito da ocupação é determinante para limitar as regiões onde a fase supercondutora é estável, ou seja, ela é favorável em regiões onde a ocupação

é maior na banda em que ocorre o pareamento.

Os diagramas de fase $V \times n$ obtidos a partir da comparação entre os valores de T_c nas diferentes fases são bastante similares aos diagramas $V \times n$ obtidos com base nos valores do gap Δ a $T = 0$. Isso está de acordo com o comportamento esperado da variação do gap, que deve diminuir monotonicamente com a temperatura, caindo a zero na temperatura crítica. As simetrias s estendida e d representam a maior parte da região onde a supercondutividade é estável nos diagramas em todos os casos, sendo que a simetria s pode emergir apenas em regiões estreitas em torno das interfaces entre a onda d e a onda s estendida. Pelo cálculo do valor médio do hamiltoniano, podemos verificar também que as fases estáveis com o maior valor do gap Δ correspondem às fases com menor energia interna a $T = 0$. Os diagramas (na banda d ou na banda f) incluem regiões de fase normal. Entretanto, quando consideramos ambas as possibilidades, não sobra nenhuma região onde a fase normal seria estável.

Alguns aspectos não foram considerados no nosso estudo, ficando como sugestões para trabalhos futuros. O mais importante será a inclusão dos efeitos da correlação eletrônica, o que possibilitará a conexão com os modelos microscópicos usualmente utilizados na descrição dos materiais supercondutores. Por exemplo, o modelo de Hubbard, o modelo de Anderson periódico e o modelo da rede Kondo constituem modelos mais realistas para a descrição de materiais de interesse como os férmiões pesados e os cupratos supercondutores. Esses modelos incluem fases magnéticas que competem com as fases supercondutoras. Os nossos resultados podem ser úteis na solução desses modelos microscópicos no âmbito de diferentes métodos que utilizam o limite descorrelacionado na forma de um hamiltoniano efetivo, como, por exemplo, o método do campo médio fermiônico para o modelo da rede de Kondo (48)(49)(50).

Outras sugestões de trabalhos complementares:

- Obtenção das figuras Δ versus V , Para valores de ocupação fixos, a fim de observar possíveis transições entre a fase supercondutora e a fase normal, identificando os valores críticos V_c correspondentes. Verificar também se a fase normal é condutora ou isolante.
- Análise da evolução do diagrama de fases para V fixo, em função da posição relativa entre as bandas, dada pelo parâmetro E_f .
- Análise do impacto de uma energia de corte E_D e do valor da interação g nos resultados obtidos.
- A inclusão do pareamento cruzado entre as bandas, permitindo a formação de um par de Cooper com um elétron da banda c e um elétron da banda f , comparando a estabilidade com os pareamentos na banda c e na banda f .

REFERÊNCIAS

- 1 ONNES, H. K. Further experiments with liquid helium. c. on the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures etc. iv. the resistance of pure mercury at helium temperatures. In: *KNAW, Proceedings*. [S.l.: s.n.], 1911. v. 13, p. 1910–1911. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 16.
- 2 REYNOLDS, C. et al. Superconductivity of isotopes of mercury. *Physical Review*, APS, v. 78, n. 4, p. 487, 1950. Citado 3 vezes nas páginas 9, 21 e 22.
- 3 FRANZ, W. et al. Transport properties of $LaCu_2Si_2$ and $CeCu_2Si_2$ between 1.5 k and 300k. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Springer, v. 31, p. 7–17, 1978. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 24.
- 4 BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible high T_c superconductivity in the $BaLaCuO$ system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Springer, v. 64, n. 2, p. 189–193, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 24.
- 5 MICNAS, R. et al. Superconductivity in a narrow-band system with intersite electron pairing in two dimensions: A mean-field study. *Physical Review B*, APS, v. 37, n. 16, p. 9410, 1988. Citado 6 vezes nas páginas 9, 45, 47, 48, 49 e 53.
- 6 SACRAMENTO, P.; APARÍCIO, J.; NUNES, G. Superconductivity in the anderson lattice: a finite-u slave boson description. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 22, n. 6, p. 065702, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 9, 49 e 50.
- 7 REYES, D. et al. s-and d-wave superconductivity in a two-band model. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 373, p. 257–272, 2016. Citado 4 vezes nas páginas 9, 49, 50 e 51.
- 8 SAMPAIO, L. et al. The interplay between a pseudogap and superconductivity in a two-dimensional Hubbard model. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 517, p. 129656, 2024. Citado 3 vezes nas páginas 9, 51 e 52.
- 9 ANDERSON, P. W. et al. Resonating–valence-bond theory of phase transitions and superconductivity in la 2 cuo 4-based compounds. *Physical Review Letters*, APS, v. 58, n. 26, p. 2790, 1987. Citado na página 14.
- 10 ONNES, H. K. The condensation of helium. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 77, n. 2007, p. 559–559, 1908. Citado na página 16.
- 11 ONNES, H. K. Further experiments with liquid helium. g. on the electrical resistance of pure metals, etc. vi. on the sudden change in the rate at which the resistance of mercury disappears. In: *Through Measurement to Knowledge: The Selected Papers of Heike Kamerlingh Onnes 1853–1926*. [S.l.]: Springer, 1910. p. 267–272. Citado na página 16.
- 12 MEISSNER, W.; OCHSENFELD, R. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, Springer-Verlag Berlin/Heidelberg, v. 21, n. 44, p. 787–788, 1933. Citado na página 17.
- 13 LONDON, F.; LONDON, H. The electromagnetic equations of the supraconductor. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 149, n. 866, p. 71–88, 1935. Citado na página 18.

- 14 PIPPARD, A. Field variation of the superconducting penetration depth. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 203, n. 1073, p. 210–223, 1950. Citado na página 18.
- 15 ABRIKOSOV, A. A. The magnetic properties of superconducting alloys. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Elsevier, v. 2, n. 3, p. 199–208, 1957. Citado na página 20.
- 16 GINZBURG, V.; LANDAU, L. On the theory of superconductivity. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, JEPT, v. 20, p. 1064, 1957. Citado na página 20.
- 17 ABRIKOSOV, A.; GORKOV, L. On the theory of superconducting alloys, i. the electrodynamics of alloys at absolute zero. *Sov. Phys. JETP*, v. 8, n. 6, p. 1090–1098, 1959. Citado na página 21.
- 18 FRÖHLICH, H. Theory of the superconducting state in the ground state at the absolute zero of temperature. *Physical Review*, APS, v. 79, n. 5, p. 845, 1950. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 29.
- 19 COOPER, L. N. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Physical Review*, APS, v. 104, n. 4, p. 1189, 1956. Citado na página 22.
- 20 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Physical Review*, APS, v. 108, n. 5, p. 1175, 1957. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 27.
- 21 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Microscopic theory of superconductivity. *Physical Review*, APS, v. 106, n. 1, p. 162, 1957. Citado na página 22.
- 22 ELIASHBERG, G. Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor. *Sov. Phys. JETP*, v. 11, n. 3, p. 696–702, 1960. Citado na página 23.
- 23 ANNITT, J. F. *Superconductivity, superfluids and condensates*. [S.l.]: Oxford University Press, 2004. v. 5. Citado na página 23.
- 24 HEBARD, A. et al. Deposition and characterization of fullerene films. *Applied physics letters*, American Institute of Physics, v. 59, n. 17, p. 2109–2111, 1991. Citado na página 25.
- 25 MAENO, Y. et al. Superconductivity in a layered perovskite without copper. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 372, n. 6506, p. 532–534, 1994. Citado na página 25.
- 26 TANG, Z. et al. Superconductivity in 4 angstrom single-walled carbon nanotubes. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 292, n. 5526, p. 2462–2465, 2001. Citado na página 25.
- 27 KAMIHARA, Y. et al. Electromagnetic properties and electronic structure of the iron-based layered superconductor lafepo. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 77, n. 21, p. 214515, 2008. Citado na página 25.
- 28 LI, D. et al. Superconductivity in an infinite-layer nickelate. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 572, n. 7771, p. 624–627, 2019. Citado na página 25.
- 29 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. *Quantum theory of many-particle systems*. [S.l.]: Courier Corporation, 2012. Citado na página 30.

- 30 BOGOLIUBOV, N. N. A new method in the theory of superconductivity. *Soviet Physics JETP*, v. 7, p. 41–46, 1958. Originally published in Russian in *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki (JETP)*. Citado na página 31.
- 31 VALATIN, J. G. Comments on the theory of superconductivity. *Il Nuovo Cimento*, v. 7, n. 6, p. 843–857, 1958. Citado na página 31.
- 32 ZWILLINGER, D.; JEFFREY, A. *Table of integrals, series, and products*. [S.l.]: Elsevier, 2007. Citado na página 43.
- 33 TINKHAM, M. *Introduction to superconductivity*. [S.l.]: Courier Corporation, 2004. Citado na página 44.
- 34 OSHEROFF, D.; RICHARDSON, R.; LEE, D. Evidence for a new phase of solid He^3 . *Physical Review Letters*, APS, v. 28, n. 14, p. 885, 1972. Citado na página 45.
- 35 LEGGETT, A. J. A theoretical description of the new phases of liquid He^3 . *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 47, n. 2, p. 331, 1975. Citado na página 45.
- 36 BRINKMAN, W. et al. Anisotropy in the b phase of he 3. *Physical Review Letters*, APS, v. 33, n. 11, p. 624, 1974. Citado na página 45.
- 37 COLEMAN, P. *Introduction to many-body physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 47.
- 38 TSUEI, C. C.; KIRTLEY, J. R. Unconventional superconductivity. *Reviews of Modern Physics*, v. 72, p. 969–1016, 2000. Citado na página 45.
- 39 OTT, H. R.; FISK, Z. Superconductivity in heavy fermion compounds. In: JR., K. A. G.; EYRING, L. (Ed.). *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*. Elsevier, 1987. v. 10, p. 85–225. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0168-1273\(08\)60008-2](https://doi.org/10.1016/S0168-1273(08)60008-2)>. Citado na página 45.
- 40 ANDERSON, P. W.; MOREL, P. Generalized bardeen-cooper-schrieffer states and the proposed low-temperature phase of liquid He^3 . *Physical Review*, APS, v. 123, n. 6, p. 1911, 1961. Citado na página 45.
- 41 BASTIDE, C.; LACROIX, C. d-wave superconductivity in the strong-coupling kondo lattice model. *Europhysics Letters*, IOP Publishing, v. 4, n. 8, p. 935, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 53.
- 42 XIANG, T.; WU, C. *D-wave Superconductivity*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2022. Citado na página 47.
- 43 SUHL, H.; MATTHIAS, B.; WALKER, L. Bardeen-cooper-schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands. *Physical Review Letters*, APS, v. 3, n. 12, p. 552, 1959. Citado na página 53.
- 44 ALEXANDROV, A.; RANNINGER, J. Theory of bipolarons and bipolaronic bands. *Physical Review B*, APS, v. 23, n. 4, p. 1796, 1981. Citado na página 53.
- 45 MIYAKE, K.; SCHMITT-RINK, S.; VARMA, C. Spin-fluctuation-mediated even-parity pairing in heavy-fermion superconductors. *Physical Review B*, APS, v. 34, n. 9, p. 6554, 1986. Citado na página 65.

- 46 CYROT, M. A possible origin for heavy fermion superconductivity. *Solid state communications*, Elsevier, v. 60, n. 3, p. 253–256, 1986. Citado na página 65.
- 47 SCALAPINO, D.; JR, E. L.; HIRSCH, J. D-wave pairing near a spin-density-wave instability. *Physical Review B*, APS, v. 34, n. 11, p. 8190, 1986. Citado na página 65.
- 48 BERNHARD, B.; COQBLIN, B.; LACROIX, C. Frustration in the Kondo lattice model: Local versus extended singlet phases. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 83, n. 21, p. 214427, 2011. Citado na página 97.
- 49 BERNHARD, B.; LACROIX, C. Coexistence of magnetic order and Kondo effect in the Kondo-Heisenberg model. *Physical Review B*, APS, v. 92, n. 9, p. 094401, 2015. Citado na página 97.
- 50 BERNHARD, B. Metamagnetism and tricritical behavior in the Kondo lattice model. *Physical Review B*, APS, v. 106, n. 5, p. 054436, 2022. Citado na página 97.

APÊNDICE A – CÁLCULO DA RELAÇÃO DE DISPERSÃO DA REDE QUADRADA NO MODELO TIGHT-BINDING

A relação de dispersão é uma expressão que relaciona os estados possíveis com os valores de energia acessíveis. No modelo Tight-binding é definida como a transformada de Fourier do hoping de energia para uma determinada geometria de rede e relaciona os valores possíveis do vetor de onda \mathbf{k} e a energia $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = - \sum_i t_{ij} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \quad (229)$$

Aqui vamos expor um exemplo específico para ilustrar o procedimento, mas que pode ser aplicado a qualquer geometria. Utilizaremos a rede quadrada, ela pode ser vista abaixo na figura 60

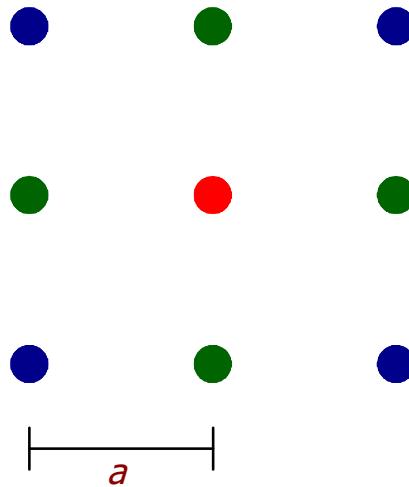


Figura 60 – Geometria da rede quadrada.

A rede cristalina é essencialmente infinita para todos os lados, mas a figura mostra nove átomos que servirão de ilustração. Vamos escolher o átomo central como o átomo j cuja posição será \mathbf{r}_j , e os demais serão os átomos i com posições \mathbf{r}_i . Na figura 60, temos o átomo central em vermelho, os primeiros vizinhos em verde e os segundos vizinhos em azul.

Escolhendo a origem do sistema de coordenadas no átomo central, a posição dos átomos primeiros vizinhos será:

- $\mathbf{r}_1 = (0, a)$
- $\mathbf{r}_2 = (0, -a)$
- $\mathbf{r}_3 = (a, 0)$
- $\mathbf{r}_4 = (-a, 0)$

E para os segundos vizinhos será:

- $\mathbf{r}_5 = (\sqrt{2}a, \sqrt{2}a)$
- $\mathbf{r}_6 = (\sqrt{2}a, -\sqrt{2}a)$
- $\mathbf{r}_7 = (-\sqrt{2}a, \sqrt{2}a)$
- $\mathbf{r}_8 = (-\sqrt{2}a, -\sqrt{2}a)$

O valor do hoping de energia em geral é um para os primeiros vizinhos e outro para segundos vizinhos, aqui por simplicidade vamos considerar apenas os primeiros, ou seja $t_{ij} = t' = 0$ e $t_{ij} = t$. A relação de dispersão será:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t[\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_4)] \quad (230)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t[\exp(-ik_y a) + \exp(ik_y a) + \exp(-ik_x a) + \exp(ik_x a)] \quad (231)$$

Utilizando a formula de Euler

$$e^{i\phi} = \cos(\phi) + i\sin(\phi) \quad (232)$$

Temos

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t[\cos(k_y a) - i\sin(k_y a) + \cos(k_y a) + i\sin(k_y a) + \cos(k_x a) - i\sin(k_x a) + \cos(k_x a) + i\sin(k_x a)] \quad (233)$$

$$\boxed{\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t[\cos(k_y a) + \cos(k_x a)]} \quad (234)$$

Através da mesma abordagem é possível calcular a relação de dispersão considerando segundos vizinhos com hoping diferente de zero.

$$\boxed{\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t[\cos(k_y a) + \cos(k_x a)] - 4t'\cos(k_y a)\cos(k_x a)} \quad (235)$$

É possível notar a diferença da forma da relação de dispersão no modelo tight-binding com a famosa relação de dispersão para o modelo do gás de elétrons

$$\boxed{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{se} = \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2)} \quad (236)$$