

INTRODUÇÃO AOS MODELOS E MÉTODOS TEÓRICOS PARA A DESCRIÇÃO DA SUPERCONDUTIVIDADE¹

Mateus Leandro Nesi², Ben Hur Bernhard³.

¹ Vinculado ao projeto “Descrição microscópica de materiais magnéticos”.

² Acadêmico do Curso de Licenciatura em Física – CCT – Bolsista PROBIC

³ Orientador, Departamento de Física – CCT – benhur.bernhard@udesc.br

A Supercondutividade é um estado caracterizado por uma resistividade elétrica nula, onde o material conduz sem haver dissipação de energia por efeito joule. Os materiais supercondutores também apresentam diamagnetismo perfeito, com a expulsão dos campos magnéticos do seu interior. As aplicações da supercondutividade estão presentes, por exemplo, em trens de levitação magnética, aceleradores de partículas e equipamentos de ressonância magnética.

A descrição da supercondutividade a partir de um modelo microscópico é fornecida pela teoria BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer). A teoria aplica-se aos supercondutores convencionais, e considera uma interação elétron-fônon como mecanismo para a criação dos pares de Cooper.

Para a descrição dos chamados materiais supercondutores de alta temperatura, como os cupratos LaBaCuO e YBaCuO, utilizam-se modelos microscópicos que são extensões do modelo de Hubbard. Um dos termos que compõem o modelo de Hubbard corresponde ao modelo *tight-binding*, que utilizamos como ponto de partida para o cálculo das bandas de energia de algumas redes cristalinas, como a rede quadrada, e as redes cúbicas simples e de corpo centrado. A obtenção das densidades de estados dessas redes e o traçado dos gráficos correspondentes envolveram a utilização de ferramentas matemáticas analíticas e computacionais, além dos softwares de processamento de texto e construção de gráficos.

Foi dada atenção especial à rede formada pelos planos de cobre e oxigênio dos cupratos supercondutores, que é o nosso objeto de estudo. Para análise dessa rede, utilizamos o hamiltoniano de Hubbard de 3 bandas, dado pela equação (1), escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação da segunda quantização.

$$(1) \quad \mathcal{H} = - \sum_{\substack{ij\sigma \\ \alpha\beta}} t_{ij\sigma}^{\alpha\beta} \left(c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} + c_{j\beta\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right) + \sum_{i\alpha} U_\alpha n_{i\alpha\downarrow} n_{i\alpha\uparrow}$$

Os índices i e j referem-se aos sítios da rede quadrada subjacente, e os índices α e β especificam o átomo que compõe a base da estrutura cristalina, composta por três átomos. Na notação usada, os parâmetros t incluem os *hoppings* envolvidos e também os níveis locais dos orbitais p e d . A utilização dos métodos de funções de *Green* permite extrair as duas funções de *Green* locais, uma relacionada ao cobre e outra ao oxigênio.

Pela equação (2), obtemos as curvas mostradas na Figura 1(a). Em vermelho, a banda p , e, em azul, a banda d , respectivamente, para o oxigênio e o cobre, que descrevem a densidade de estados ρ em função da energia ω . As curvas sólidas são as densidades de estados, enquanto que as tracejadas explicitam as integrais correspondentes, que devem satisfazer a condição de

normalização sobre todo o intervalo de energia. Na figura 1(b), temos as curvas dos números de ocupação em função do potencial químico μ dadas pela equação (3), para duas temperaturas distintas, sendo T' no limite de baixa temperatura, e T a uma temperatura finita T .

$$\rho_d^p(\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \text{Im}\{G_{dd}^{pp}(\omega + i\delta)\} \quad (2)$$

$$n_d^p = \int \rho_d^p(\omega) f(\omega) d\omega \quad (3)$$

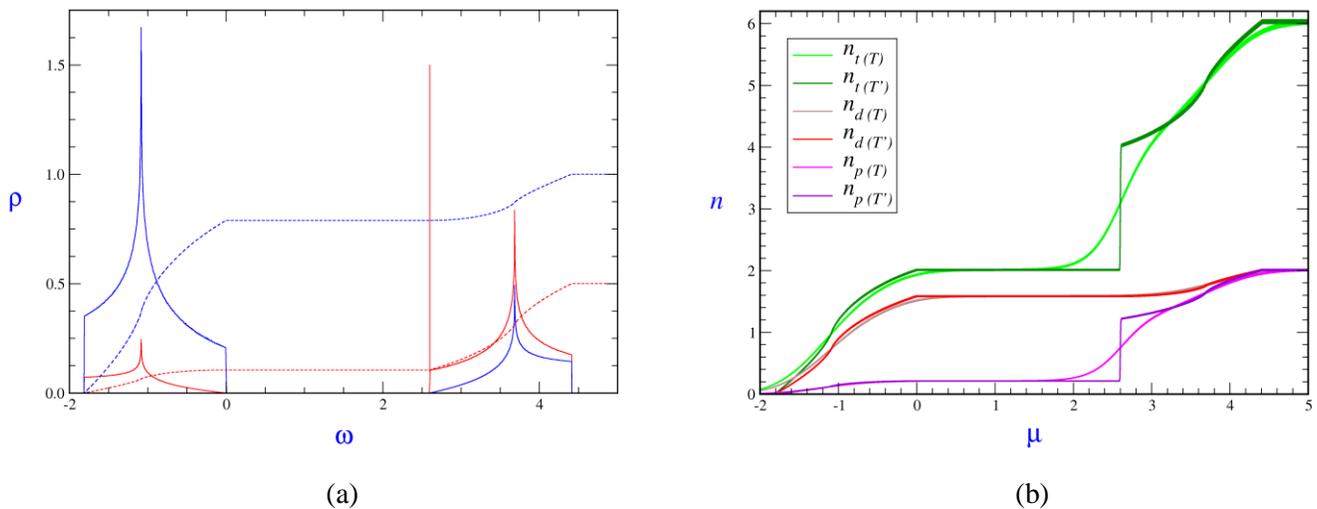


Figura 1. (a) Densidade de estados e (b) ocupação para planos de CuO₂.

Palavras-chave: Supercondutividade. Modelo de Hubbard. Densidade de estados.

Referências:

- HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. Proceedings of the Royal Society A 1963, p. 276. 1963.
HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. An improved solution. Proceedings of the Royal Society A 1964, p. 281. 1964.
REINER, J. J. The density of states of some simple excitations in solids. Journal of Physics and Chemistry of Solids. Vol. 30, p. 609. 1966.
HIRSCH, J. E. Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study. Physical Review B. Vol. 31, 7. p. 4403. 1985.
PESZ, K; MUNN, R. W. Densities of states and anisotropy in tight-binding models. Journal of Physics C: Solid State Physics. Vol. 19, p. 2499. 1985.
EMERY, V. J. Theory of High-T_c Superconductivity in Oxides. Physical Review Letters. Vol. 58, 26. p. 2794.
BERNHARD, B. H; IGLESIAS, J. R. Doping dependence of the electronic structure and magnetic order in high-T_c superconductors. Physical Review B. Vol. 50, 13. p. 9522. 1994.
ECONOMOU, E. N. Green's Functions in Quantum Physics. Third Edition. Germany: Springer, 2006.
MAHAN, G. D. Many-Particle Physics. Third Edition. New York: Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2000.
COLEMAN, P. Introduction to many body physics. United Kingdom: Cambridge University Press, 2015.
OLIVEIRA, I. S; JESUS, V. L. B. Introdução à Física do Estado Sólido. 1 ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.