

ESTUDO DE MODELOS E MÉTODOS TEÓRICOS PARA A DESCRIÇÃO DA SUPERCONDUTIVIDADE ¹

Leonardo Otávio Schilipake ², Ben Hur Bernhard ³

¹ Vinculado ao projeto “Descrição teórica de materiais magnéticos”

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

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

O modelo c-f descreve um sistema eletrônico de 2 bandas hibridizadas não interagentes, sendo expresso pelo hamiltoniano abaixo, em termos dos operadores fermiônicos:

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

Esse hamiltoniano pode ser diagonalizado por uma transformação de Fourier, suplementada por uma transformação unitária, num método similar ao utilizado no tratamento da supercondutividade na teoria BCS [1,2]. Assim, temos

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger & f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -V \\ -V & E_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ f_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}}^- b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma}$$

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

onde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ é a relação de dispersão dos elétrons de condução. Nos cálculos, consideramos o modelo das ligações fortes numa rede quadrada, onde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$.

Os novos operadores fermiônicos estão relacionados com os operadores originais pela transformação:

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} = \mathbb{R}_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ f_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} \quad \mathbb{R}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}$$

cujos elementos de matriz $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ podem ser obtidos a partir da equação de autovalores do hamiltoniano. A transformação inversa permite calcular os valores médios envolvendo os operadores c e f .

Dando continuidade às etapas anteriores do plano de trabalho [3], avançamos no estudo do modelo de 2 bandas hibridizadas *c-f*, onde calculamos, separadamente, as densidades de estados para elétrons localizados *f* e elétrons de condução *c*. Pela integração dessas densidades de estados parciais, obtemos, numericamente, os números médios de elétrons n^f e n^c , descrevendo como os elétrons distribuem-se entre os 2 orbitais envolvidos em função da concentração eletrônica total $n=n^f+n^c$. Esse cálculo envolve a determinação autoconsistente do potencial químico μ . Os resultados estão ilustrados nas Figuras 2 e 3. O método de diagonalização acima consiste numa transformação matricial análoga à transformação de Bogoliubov-Valatin, utilizada na teoria BCS da supercondutividade [1,2].

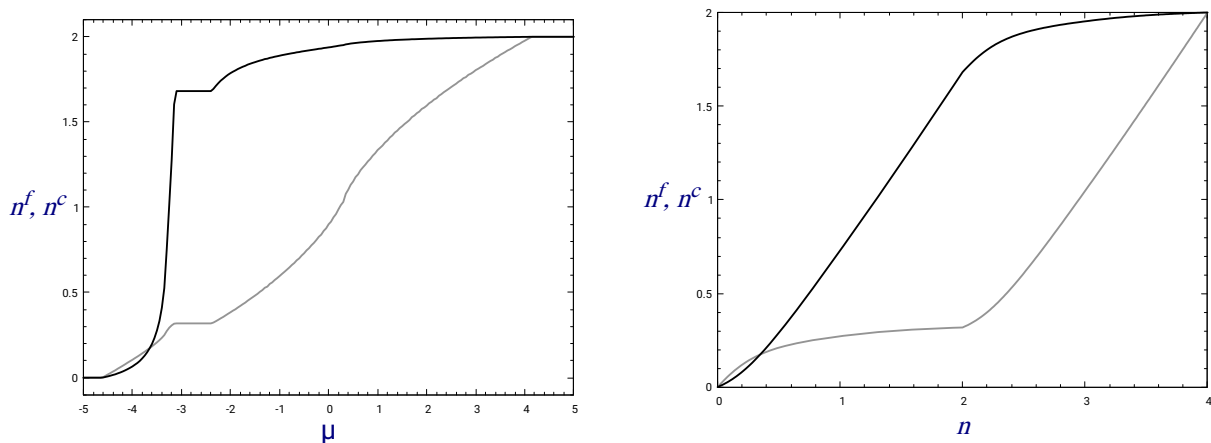


Figura 1. Distribuição dos elétrons *c* e *f* em função (a) do potencial químico e (b) da concentração eletrônica total n , para $V=t$, e $E_f=-3t$.

O platô observado no painel (a) da Fig. 1 em torno de $\mu=-3$ corresponde ao gap de hibridização, que aparece nas densidades de estados em torno do nível de Fermi, para certos valores dos parâmetros E_f e V . Estudamos também como a largura do gap varia em função desses parâmetros e da temperatura.

Algumas extensões importantes do modelo *c-f* incluem o modelo de Anderson periódico e o modelo da rede de Kondo. As mesmas técnicas utilizadas neste trabalho podem ser aplicadas no estudo desses modelos microscópicos utilizados na descrição de materiais magnéticos.

Referências:

- [1] J. F. Annett, *Superconductivity, Superfluids and Condensates*, Oxford University Press (2004).
- [2] P. Coleman, *Introduction to Many-Body Physics*, Cambridge University Press (2015).
- [3] E. A. de Oliveira e B. H. Bernhard, *Introdução aos modelos e métodos para a descrição da supercondutividade*, 32ª SIC UDESC.

Palavras-chave: Modelo de 2 bandas; densidades de estados; gap de hibridização.