

Igor Tavares Padilha

Estudo da Supercondutividade Exótica: Sistemas de Multibandas



INSTITUTO DE FÍSICA

Universidade Federal Fluminense

Orientador: Prof. Dr. Mucio Amado Continentino

Niterói - Rio de Janeiro

2010

Igor Tavares Padilha

Estudo da Supercondutividade Exótica: Sistemas de Multibandas

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para obtenção do título de **Doutor em Física**, sob orientação do professor Dr. Mucio Amado Continentino.

Niterói
Junho - 2010

Igor Tavares Padilha

A comissão examinadora, abaixo assinada, aprova a Tese de Doutorado

**Estudo da Supercondutividade Exótica: Sistemas de
Multibandas**

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense como
requisito parcial para obtenção do título de **Doutor em Física**

Comissão Examinadora:

Dr. Mucio Amado Continentino (Presidente/Orientador)

Dr. José Ricardo de Sousa (UFAM)

Dr. Heron Carlos de Godoy Caldas (UFSJ)

Dr. Evandro Vidor Lins de Melo (UFF)

Dr. Luis Esteban Oxman (UFF)

Niterói

07 - Junho - 2010

Dedicatória

à minha família e amigos.

Agradecimentos

- À Deus, por tudo.
- À minha esposa, Inês Padilha pelo amor e apoio incondicional em todos os momentos;
- Aos meus pais, José Hilton Padilha e Janine Chame Tavares, por terem me proporcionado tudo que é de importante, tanto minha vida quanto minha educação;
- Aos meus irmãos, Iury e Iuky Padilha, pela amizade e pelo companheirismo;
- Ao meu orientador, professor Dr. Mucio Amado Continentino, pelo grande incentivo, por todos os ensinamentos e pela satisfação de podermos trabalhar juntos;
- Ao professor Dr. José Ricardo de Sousa pela confiança e apoio desde o início da minha vida acadêmica;
- À todos os amigos, em especial aos amigos: Francisco Dinóla, Isabel Dinóla, Álvaro Alves, Luciana Hirsch, Eliel Eleutério, Alexander Caytuero, Daniel Reyes e Aline Ramires por terem me ajudado a tornar essa jornada mais agradável.
- À todos os professores e funcionários da UFF que tive a oportunidade de conhecer;
- À Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado do Amazonas - FAPEAM, pela bolsa concedida durante os anos de curso.

Resumo

Sistemas multibandas como compostos inter-metálicos e férmions pesados possuem elétrons originários de diferentes orbitais atômicos em sua superfície de Fermi. Como em geral esses elétrons possuem massas ou densidades diferentes, existe um *mismatch* natural entre os vetores de onda de Fermi associados a estes diferentes elétrons. Isto torna esses materiais potenciais candidatos a apresentarem fases supercondutoras exóticas como as fases sem gap e FFLO, mesmo na ausência de campo magnético externo. Os orbitais distintos coexistentes na superfície de Fermi são geralmente hibridizados e seu grau de mistura pode ser controlado via pressão externa. Neste trabalho, consideraremos o problema em que elétrons originários de diferentes bandas podem transmutar-se uns nos outros com apenas seu número total sendo conservado.

Utilizamos a aproximação de campo médio e acoplamento fraco para estudar a supercondutividade em sistemas metálicos de duas bandas com interações intra e inter-banda para uma temperatura finita. Alterando a hibridização entre as bandas, variamos o *mismatch* entre as superfícies de Fermi produzindo diferentes tipos de instabilidades.

Para o limite de temperatura nula em interações inter-banda, achamos uma transição de fase de primeira ordem supercondutor-normal e a caracterização de um modo mole para um vetor de onda específico k_c relacionado à hibridização responsável pela transição. Este fato nos propõe a possibilidade da existência de uma fase modulada induzida por hibridização entre os estados supercondutor e normal, que será também analisada neste trabalho. A presença de temperatura altera a ordem da transição que era inicialmente de primeira e passa a ser de segunda ordem.

No caso de atrações intra-banda, a transição de fase do estado supercondutor para o normal é contínua com a variação da hibridização sendo associada a um ponto crítico

quântico supercondutor, que não é mais caracterizado para temperatura finita.

Devido às observações obtidas no caso intra-banda investigamos a possibilidade de existência de uma fase inomogênea induzida por hibridização. No limite de temperatura nula conforme a hibridização varia observamos que o estado BCS torna-se instável com respeito ao estado supercondutor inomogêneo (FFLO), mostrando que este realmente está presente no sistema. Para temperatura finita, observamos que o sistema apresenta transições de fase de primeira ordem entre os estados BCS-FFLO e segunda entre os estados BCS-Normal e FFLO-Normal, caracterizando desta forma a existência de um ponto bicrítico.

Abstract

Multi-band systems such as inter-metallic and heavy fermion compounds have quase-particles arising from different orbitals at their Fermi surface. Since these quase-particles have different masses or densities, there is a natural mismatch of the Fermi wave vectors associated with different orbitals. This makes these materials potential candidates to observe exotic superconducting phases as Sarma or FFLO phases, even in the absence of an external magnetic field. The distinct orbitals coexisting at the Fermi surface are generally hybridized and their degree of mixing can be controlled by external pressure. In this work, we consider the problem of fermionic quase-particles that can transmute one into another with their total number conserved.

We use a mean field approximation in weak coupling regime to study superconductivity in two-band metallic systems with inter and intra-band interactions. Tuning the hybridization between the bands varies the mismatch of the Fermi wave vectors and produces different instabilities. For inter-band attractive interactions, we find a first-order normal-superconductor transition and a homogeneous metastable phase with gapless excitations, however it changes suddenly in presence of temperature since the order of the transition changes.

In the case of intra-band interactions, the transition from the superconductor to the normal state is continuous as hybridization increases and associated with a quantum critical point.

Besides, we investigate the existence of an FFLO type of phase in a two-band BCS superconductor controlled by hybridization. At zero temperature, as hybridization (pressure) increases we find that the BCS state becomes unstable with respect to an inhomogeneous superconducting state characterized by a single wave vector q . At non-zero

temperature, the system has a BCS - Normal and FFLO - Normal second order phase transition and a BCS - FFLO first order phase transition, with the existence of a bicritical point.

Sumário

| | |
|---|-----------|
| Dedicatória | iv |
| Agradecimentos | v |
| Resumo | vi |
| Abstract | viii |
| Sumário | x |
| Lista de figuras | xii |
| 1 Introdução | 1 |
| 2 Considerações Gerais e Motivação | 3 |
| 2.1 Fase de Sarma | 6 |
| 2.2 Fase de FFLO | 7 |
| 2.3 Fase de Gap Interno ou <i>Breached Pairing</i> | 9 |
| 2.4 Fase Mista Inomogênea | 11 |
| 3 Efeito da Hibridização em Supercondutores com Interações Inter e Intra-Banda | 12 |
| 3.1 Modelagem do Sistema | 13 |
| 3.2 Caso Inter-Banda | 21 |
| 3.2.1 Análise para Temperatura Nula | 24 |
| 3.2.2 Análise para Temperatura Finita | 28 |
| 3.3 Caso Intra-Banda | 31 |
| 3.3.1 Análise para Temperatura Nula | 34 |
| 3.3.2 Análise para Temperatura Finita | 39 |
| 3.3.3 Cálculo do Calor Específico do Sistema sobre a Trajetória Crítica | 43 |
| 3.4 Caso Geral | 49 |

| | |
|---|-----------|
| 4 Fase Supercondutora Inomogênea Induzida por Hibridização | 52 |
| 4.1 Análise para Temperatura Nula | 57 |
| 4.2 Análise para Temperatura Finita | 64 |
| 5 Conclusões e Perspectivas | 67 |
| A Método das Funções de Green | 70 |
| B Conceitos sobre Transições de Fase | 75 |
| B.1 Transição de Fase Térmica | 75 |
| B.2 Transição de Fase Quântica | 77 |
| C Cálculo das Funções de Correlação | 79 |
| D Cálculos da Fase Inomogênea | 82 |
| D.1 Cálculo das Parcelas da Correlação Geral | 82 |
| D.2 Cálculo das Integrais para Temperatura Nula | 84 |
| Referências Bibliográficas | 90 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Diagrama de fases $T_c \times P$ experimental para o composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ para diversos valores de dopagem e curvas obtidas teoricamente por Scheilla Ramos e colaboradores [11]. | 4 |
| 2.2 | Comportamento do gap normalizado em função da temperatura, mostrando que o sistema apresenta duas temperatura críticas quando $V_{sd} = 0$ [12]. | 5 |
| 2.3 | Diagrama de fases $T_c \times h$ obtido por Sarma [14], mostrando as linhas de transição de fase de segunda e primeira ordem, além do ponto tricrítico, sendo a parte inferior da linha I instável e não física. Onde Δ_2 é o parâmetro de ordem para temperatura finita. | 7 |
| 2.4 | Diagrama de fase $T_c \times h$ obtido por Takada e Izuyama [16], onde as transições do estado supercondutor para o normal são sempre de segunda ordem enquanto a transição da fase BCS para a FFLO é de primeira ordem. | 8 |
| 2.5 | Esquema proposto por Liu e Wilczek [7] de como ocorreria este tipo de estado | 10 |
| 3.1 | Dispersão parabólica das bandas do sistema. | 23 |
| 3.2 | Energia do estado fundamental do sistema para interações puramente inter-banda. Utilizamos um valor fixo da interação $g/\mu_a = 30$ e diferentes valores de hibridização. A transição de fase de primeira ordem, $T = 0$, ocorre em $V_2 = V_2/\mu_a$, onde as fases normal e supercondutora tornam-se degeneradas. Entretanto, até $V_3 = V_3/\mu_a$ a fase supercondutora existe como um estado metaestável, note que os valores dos parâmetros apresentados estão normalizados por μ_a | 25 |

| | | |
|------|--|----|
| 3.3 | Diagrama de fase $g^{-1} \times V$, normalizado por μ_a . A sequência de curvas mostra as diferentes regiões do diagrama de fase e os limites de metaestabilidade, onde as fases GS e SC+Normal estão descritas no texto. | 26 |
| 3.4 | Relação de dispersão para diferentes valores de hibridização normalizada por μ_a | 27 |
| 3.5 | Gráfico da função de gap $f(\Delta_{ab}, V) \times \Delta_{ab}$ para diferentes valores de V , ambos Δ_{ab} e V estão normalizados por μ_a | 28 |
| 3.6 | Gráfico $f(\Delta_{ab}, V) \times \Delta_{ab}$, para vários valores de T , com V fixo, onde $T = k_B T / \mu_a$, $V = V / \mu_a$ e $\Delta_{ab} = \Delta_{ab} / \mu_a$ | 29 |
| 3.7 | Gráfico 3D $f_{ab} = f(\Delta_{ab}, V, T) \times \Delta_{ab} \times T$, para o valor fixo $V = 0.10$, todos normalizados por μ_a | 30 |
| 3.8 | Gráfico $f(\Delta_{ab}, V) \times \Delta_{ab}$, para vários valores de V , com T fixo, todos normalizados por μ_a | 31 |
| 3.9 | Gráfico da razão $\Omega = \frac{\sum \langle b_{-k} a_k \rangle}{\sum \langle b_{-k} b_k \rangle} \times \frac{V}{V_c}$ para vários valores de temperatura normalizadas. Em destaque mostra o comportamento para valores em torno do zero da razão Ω | 33 |
| 3.10 | Gráfico $f_b(\Delta, V) \times \Delta$ para os valores de hibridização $V = 0.10, 0.12, 0.13, 0.15$ vindo de cima para baixo. Em destaque, energia do sistema para V fixo e variando a interação g_b . Apresenta como o mínimo de energia do sistema muda continuamente, caracterizando uma transição de segunda ordem, com os parâmetros normalizados por μ_a | 34 |
| 3.11 | Comportamento de V_c obtido numericamente para o caso intra-banda . . . | 35 |
| 3.12 | Comportamento de V_c para o caso intra-banda comparando todas as aproximações com o caso numérico. | 39 |
| 3.13 | Diagrama de fase $T_c \times V$ normalizado das temperaturas críticas supercondutoras como uma função da hibridização. A transição ao longo da linha crítica é contínua e V_c é um ponto crítico quântico supercondutor (PCQS). Em destaque, é mostrado o comportamento de T_c próximo ao PCQS, cujo expoente crítico $\frac{1}{2}$ nos mostra o resultado esperado de um tratamento tipo campo médio. | 40 |
| 3.14 | Relação de dispersão das bandas híbridas comparadas as inicialmente não hibridizadas, grandezas normalizadas por μ_a | 43 |

| | | |
|------|---|----|
| 3.15 | Curva do Calor específico versus a temperatura ao longo da trajetória crítica ($V = V_c, T$), onde T e V estão normalizados por μ_a | 47 |
| 3.16 | Coeficiente da dependência linear com a temperatura da contribuição eletrônica do calor específico na fase normal como uma função da hibridização. Mostramos valores notáveis da hibridização como: V_c hibridização crítica; V_{max} valor de hibridização para o qual T_c é máximo na figura 3.13; $V_0 = \sqrt{\mu}$ onde uma das bandas híbridas fica totalmente acima do nível de Fermi causando uma descontinuidade em γ . Todos os valores de hibridização estão normalizados por μ_a | 48 |
| 3.17 | Gráfico 3D de $f(\Delta_{ab}, \Delta) \times \Delta_{ab} \times \Delta$ para o valor fixo de hibridização $V = 0.15$. Relembrando que todos os parâmetros estão normalizados por μ_a . . . | 50 |
| 3.18 | Gráfico 3D de $f_b(\Delta_{ab}, \Delta) \times \Delta_{ab} \times \Delta$ para o valor fixo de hibridização $V = 0.15$. Todos os parâmetros estão normalizados por μ_a | 51 |
| 4.1 | Diagrama \widetilde{V}_1 (vermelho) e \widetilde{V}_2 (azul) como função do vetor de onda reduzido. | 62 |
| 4.2 | Representação esquemática do domínio de cada fase do sistema. | 64 |
| 4.3 | Diagrama $\frac{T}{\Delta_0} \times \frac{V}{\Delta_0}$ para um sistema assimétrico na presença de hibridização caracterizando o ponto bicrítico pelo par ordenado (0.510, 0.354). | 66 |

Capítulo 1

Introdução

A supercondutividade desde sua descoberta tem sido um objeto de estudo de grande interesse. Novos materiais supercondutores envolvendo diferentes mecanismos de emparelhamento fazem deste um dos temas de pesquisa mais estudados na área da física da matéria condensada.

O estudo da supercondutividade assimétrica, que são sistemas onde diferentes tipos de quase-partículas coexistem em uma mesma superfície de Fermi teve seu interesse como fonte de pesquisa aumentado nos últimos anos. Isto se dá em parte por sua relevância em diferentes áreas da física. Esta é encontrada em sistemas de átomos frios com fases superfluidas [1], em supercondutividades de cor nos núcleos de estrelas de nêutrons [2, 3] e em física da matéria condensada [4]. Além disso esta é intimamente ligada à supercondutividade inomogênea, como fases FFLO [5, 6], uma vez que esta se caracteriza como um possível estado fundamental para sistemas assimétricos. Em matéria condensada, como em materiais inter-metálicos, existem elétrons de diferentes orbitais localizados na superfície de Fermi. Se essas quase-partículas possuem diferentes massas efetivas, ou ocorrem em um número distinto por átomo existirá uma diferença natural em seus vetores de onda de Fermi.

Assim, em sistemas multibandas, mesmo na ausência de campo magnético externo, deve-se considerar a possibilidade da existência de supercondutividade inomogênea ou outros tipos exóticos de estados fundamentais como supercondutividade sem gap [7, 8] ou separação de fases [9].

Estas observações e comportamentos em sistemas multibandas seviram como pano de

fundo para a idéia do desenvolvimento deste trabalho, que está dividido da forma que segue.

No Capítulo 2 apresentamos uma idéia sucinta dos conceitos, sistemas, formalismos e observações experimentais que serviram de motivação para o desenvolvimento deste trabalho.

No Capítulo 3 consideramos um modelo de duas bandas e utilizamos o método das funções de Green a fim de descrever o efeito da hibridização em supercondutores multi-bandas com interações inter e intra-banda independente e simultaneamente, apresentando suas particularidades e propriedades.

No Capítulo 4 analisamos a possibilidade da existência de uma fase inhomogênea tipo-FFLO induzida por hibridização num sistema com interações inter-bandas, apresentando assim uma proposta para existência deste tipo de fenômeno.

No Capítulo 5 apresentamos as conclusões, algumas considerações e sugestões para pesquisas futuras obtidas através deste trabalho.

Nos Apêndices apresentamos de maneira sucinta o formalismo das funções de Green além de algumas considerações relevantes sobre transições de fases que utilizaremos neste trabalho. Em seguida, apresentamos o desenvolvimento de alguns cálculos específicos referente ao trabalho, que foram retiradas do seu corpo principal para não deixá-lo cansativo.

Capítulo 2

Considerações Gerais e Motivação

Na teoria BCS [10] da supercondutividade um sistema supercondutor é descrito por apenas uma banda de elétrons (banda s), conseqüentemente um único tipo de quase-partícula é considerado. Obtemos portanto, suas propriedades dentro das limitações e aproximações necessárias para realização dos cálculos. Nesta teoria todos os elétrons que estão no nível de Fermi contribuem igualmente para o emparelhamento supercondutor gerando um gap supercondutor constante, independente dos vetores de onda dos pares de Cooper. Porém, isso fica longe da realidade em materiais e ligas mais complexas.

Considerando metais de transição, por exemplo, estes possuem elétrons de condução no nível d , que contribuem consideravelmente para a resistividade no estado normal, estando relacionados da mesma forma com a supercondutividade nestes materiais. Considerando férmions pesados, seus elétrons se situa no nível f apresentando um comportamento instável (ambíguo entre itinerante e localizado) complicando ainda mais sua análise.

Como exemplo temos um dos resultados experimentais obtidos por Scheilla Ramos e colaboradores [11] mostrado na figura 2.1, que se referem a um sistema de férmions pesados que apresenta transição de fase quântica induzida por pressão externa. Estes resultados serviram de grande motivação experimental para o desenvolvimento teórico deste trabalho como a implementação de uma hibridização como parâmetro microscópico relacionado com a pressão externa aplicada ao sistema, um vez que essa é alterada conforme se varia a pressão externa e a capacidade desta de influenciar na supercondutividade. De maneira geral, em alguns átomos os orbitais dos subníveis atômicos s e p , por exemplo, se misturam, dando origem a orbitais híbridos espontaneamente. Portanto, a idéia de hibridização se

resume no processo de formação de orbitais eletrônicos híbridos.

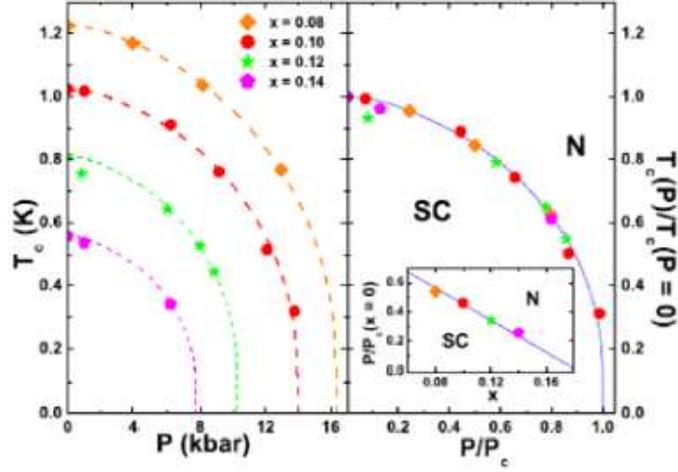


Figura 2.1: Diagrama de fases $T_c \times P$ experimental para o composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ para diversos valores de dopagem e curvas obtidas teoricamente por Scheilla Ramos e colaboradores [11].

Sistemas deste tipo não podem ser descritos por uma teoria BCS usual. Com a intenção de analisar sistemas supercondutores mais complexos e realistas foi proposto um modelo de multibandas a fim de tentar tratar esses casos.

O primeiro modelo de sistemas multibandas foi proposto por Suhl, Mathias e Walker [12] em 1959, que é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 H_{SMW} = & \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^s c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_k^d d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma}) - V_{ss} \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \\
 & - V_{dd} \sum_{kk'} d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} - V_{sd} \sum_k (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} + d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) \quad (2.1)
 \end{aligned}$$

Onde ϵ_k^s e ϵ_k^d são as relações de dispersão dos elétrons s e d e sendo V_{ss} , V_{dd} e V_{sd} as interações atrativas responsáveis pela supercondutividade nas bandas s , d e sd .

Estes autores propuseram o modelo em analogia à teoria BCS, porém sendo um Hamiltoniano de duas bandas que se cruzavam, no intuito de descrever elementos de transição que apresentavam uma resistividade diferenciada devido ao espalhamento entre elétrons itinerantes dos níveis $s - d$. Os processos de emissão e absorção de cada quantum de

energia poderia ser feito dentro de cada banda e entre elas, onde o fônon envolvido na interação deveria ter o número de onda igual à diferença em número de onda de dois elétrons, onde ambos devem estar localizados na mesma vizinhança do nível de Fermi, assim como na teoria BCS. Utilizando as mesmas aproximações da teoria BCS em conjunto com as transformações de Bogoliubov [13] mostrou-se:

- Para $V_{ss} = V_{dd} = 0$ (caso inter-banda), a temperatura crítica é a mesma do caso BCS, porém com densidades de estados $(\rho_s \rho_d)^{\frac{1}{2}}$.
- Para $V_{sd} = 0$ (caso intra-banda), o sistema apresenta duas temperaturas críticas. Uma associada a cada banda.
- Para $V_{sd}^2 \ll V_{ss} V_{dd}$, o sistema só apresenta uma temperatura crítica e essa é igual a maior das duas temperaturas críticas obtidas no caso anterior.

Os resultados obtidos por Suhl e colaboradores [12] estão resumidos no diagrama apresentado na figura 2.2.

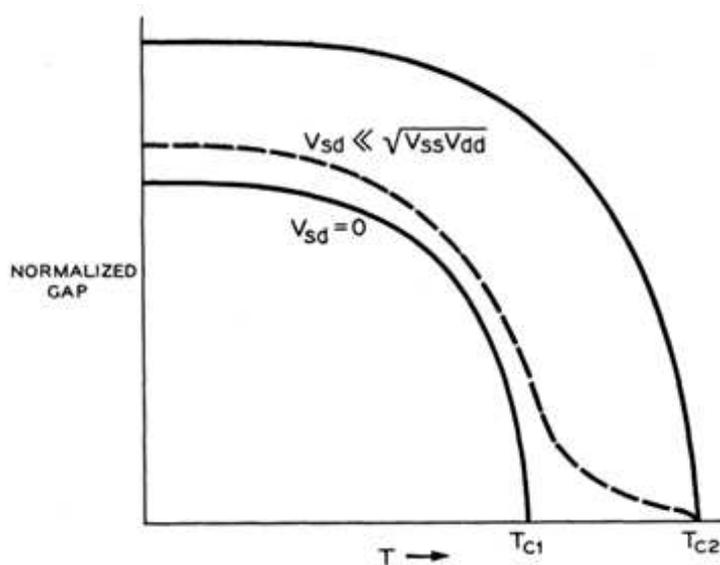


Figura 2.2: Comportamento do gap normalizado em função da temperatura, mostrando que o sistema apresenta duas temperatura crítica quando $V_{sd} = 0$ [12].

Dentre os resultados deste trabalho vemos que mesmo para supercondutores do tipo $s - d$ que não apresentam elétrons d participando diretamente da supercondutividade

($V_{dd} = 0$), os elétrons s se beneficiam da densidade de estados presentes na banda d . Além do fato de ao existir uma interação inter-banda, a temperatura crítica do sistema aumenta. Experimentalmente este resultado pode servir para explicação da estrutura fina nas medidas de absorção infravermelha de alguns supercondutores. Além de ser o primeiro trabalho a supor uma possível interação assimétrica que poderia gerar supercondutividade.

Porém, como é de esperar, esta não é a única interpretação e aplicação dada a esse problema. Outras interpretações e proposições de acoplamento foram associadas a esse caso gerando muita pesquisa e discussões nessa área. Algumas dessas interpretações, que serviram como principais motivações teóricas para este trabalho, serão sucintamente abordadas a seguir em ordem cronológica.

2.1 Fase de Sarma

O modelo proposto por Sarma [14] em 1963, estuda o efeito da ação de um campo magnético uniforme sobre os spins dos elétrons de condução de um supercondutor utilizando o formalismo da teoria BCS da supercondutividade, negligenciando o efeito orbital.

Desta maneira foi proposto o seguinte Hamiltoniano:

$$H_{Sarma} = \sum_k \epsilon_k (a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} + a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) + h \sum_k (a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) - \sum_{kk'} V_{kk'} a_{k'\uparrow}^\dagger a_{-k'\downarrow}^\dagger a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow} \quad (2.2)$$

onde ϵ_k é a relação de dispersão eletrônica, h é o campo magnético uniforme e V é a interação atrativa responsável pela supercondutividade.

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

Mostrou-se que à temperatura nula:

- Para $\Delta = 0$, encontra-se paramagnetismo de Pauli num metal normal.
- Para $\Delta > h$, encontra-se o estado fundamental BCS não polarizado.
- Para $\Delta < h$, encontra-se um caso onde as superfícies de Fermi deslocam-se gerando um mismatch entre elas.

onde $\Delta = V \sum_{k'} \langle a_{-k' \downarrow} a_{k' \uparrow} \rangle$.

Analisando para temperatura finita foi obtido o diagrama apresentado na figura 2.3, que descreve as linhas de transição de fase de segunda e primeira ordem, além do ponto tricrítico, sendo o campo magnético crítico $H_c = \frac{\Delta_2}{\sqrt{2}}$, que é exatamente o campo crítico obtido por Chandrasekhar e Clogston [15] para um supercondutor BCS.

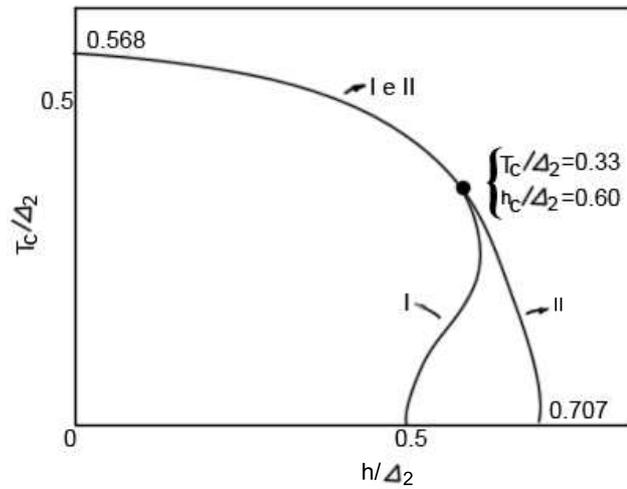


Figura 2.3: Diagrama de fases $T_c \times h$ obtido por Sarma [14], mostrando as linhas de transição de fase de segunda e primeira ordem, além do ponto tricrítico, sendo a parte inferior da linha I instável e não física. Onde Δ_2 é o parâmetro de ordem para temperatura finita.

Esta fase supercondutora se apresenta instável quando comparada a uma fase FFLO [5, 6], que será discutida na seção seguinte, com vetor característico $q = 0$, o que gera um diagrama de fases incompleto, pois após a linha de transição de fase de primeira ordem apresentado na figura 2.3, deve existir uma região supercondutora inhomogênea antes da região metálica normal como discutiremos posteriormente.

2.2 Fase de FFLO

A teoria BCS da supercondutividade descreve a possibilidade de emparelhamento entre partículas de momentos e spins iguais e opostos próximos a uma mesma superfície de Fermi. Porém, no caso de sistemas que apresentam ordem ferromagnética, a presença

de um campo magnético fraco causa um afastamento dos vetores de Fermi das bandas polarizadas na superfície de Fermi, causando assim uma instabilidade no emparelhamento Cooper, não ocorrendo mais para um acoplamento arbitrariamente fraco como no caso BCS.

Larkin e Ovchinnikov [5] em 1965 e independentemente Fulde e Ferrel [6] em 1964 mostraram que nestas circunstâncias é favorável uma translação relativa entre as superfícies de Fermi, causando um emparelhamento com momento total \mathbf{q} não nulo, definido por

$$\Delta_{\mathbf{q}} = - \sum_k V_k \langle a_{-k+\frac{\mathbf{q}}{2}} a_{k+\frac{\mathbf{q}}{2}} \rangle \quad (2.3)$$

A figura 2.4, obtida por Takada e Izuyama [16] em 1969, mostra o diagrama de fases previsto por Fulde e Ferrel, e por Larkin e Ovchinnikov (FFLO).

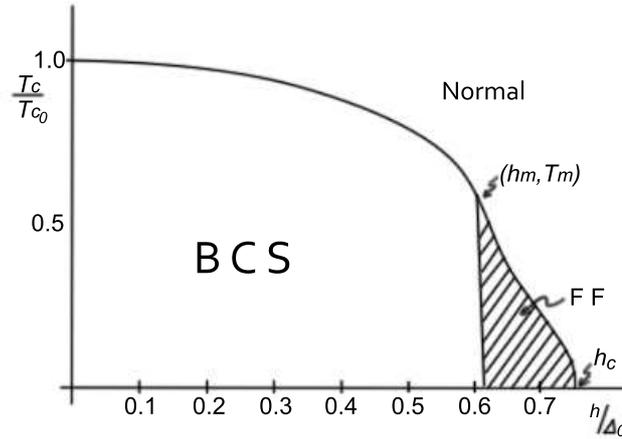


Figura 2.4: Diagrama de fase $T_c \times h$ obtido por Takada e Izuyama [16], onde as transições do estado supercondutor para o normal são sempre de segunda ordem enquanto a transição da fase BCS para a FFLO é de primeira ordem.

Nestas condições, as instabilidades previstas por FFLO são relevantes, apresentando uma região bem definida, apesar de pequena, no diagrama de fases do sistema com presença de transições de primeira e segunda ordem e um ponto tricrítico.

Estes trabalhos nos deram motivação para a realização da parte final deste trabalho, propondo a possibilidade da existência de uma fase inomogênea tipo FFLO, porém na ausência de campo magnético externo e sim com a presença da hibridização relacionada a

aplicação de pressão externa, como proposto no trabalho experimental de Scheilla Ramos e colaboradores [11], para o caso inter-banda do nosso modelo.

2.3 Fase de Gap Interno ou *Breached Pairing*

Devido aos avanços nos estudos de gases atômicos ultra-frios [1] revitalizou-se o interesse em algumas questões básicas em teoria quântica de muitos corpos. Uma destas questões seria como se procede o emparelhamento fermiônico entre espécies cujos vetores de Fermi não coincidem na superfície de Fermi.

Para acoplamento forte não há muitas dúvidas sobre o que poderia ocorrer. É de se esperar que nestas condições deva existir o emparelhamento da maior quantidade de quase-partículas possível, que em baixas temperaturas estas quase-partículas formariam um condensado de Bose-Einstein tendo a formação de um fluido normal residual com as partículas restantes. Ficando a pergunta, qual seria então o comportamento para acoplamento fraco que corresponderia a esse caso?

Tal comportamento foi proposto por Vincent Liu e Frank Wilczek [7] em 2003 como um novo estado da matéria, cujas interações de emparelhamento criariam um gap no interior da esfera de Fermi mantendo sua superfície sem gap.

O Hamiltoniano proposto é o seguinte

$$H_{Wilczek} = \sum_{p,\alpha} \epsilon_p^\alpha \psi_p^{\alpha\dagger} \psi_p^\alpha + g \sum_{pp'q} \psi_{Aq+p}^\dagger \psi_{Bq-p}^\dagger \psi_{Bq-p'} \psi_{Aq+p'} \quad (2.4)$$

onde $\epsilon_p^\alpha = \frac{p^2}{2m_\alpha} - \mu_\alpha$ e ψ_p^α é o operador de campo de aniquilação de férmions da banda α com momento \mathbf{p} .

Segundo Liu e Wilczek e como está apresentada na figura 2.5, existem duas espécies de férmions com diferentes estruturas de bandas, onde neste caso específico ambas são parabólicas e isotrópicas, mas com diferentes massas efetivas e diferentes tamanhos no espaço dos momentos. Como a esfera de Fermi maior é relativa a banda mais larga (massa efetiva maior) e a interação ocorre próxima a superfície de Fermi menor teremos superfluidez com gap na esfera menor e líquido de Fermi normal na esfera maior, isso se dá pelo fato do emparelhamento Cooper ter momento total nulo (BCS) de forma que não existem férmions de ambas as espécies em condições necessária para o emparelhamento ocorrer na esfera maior.

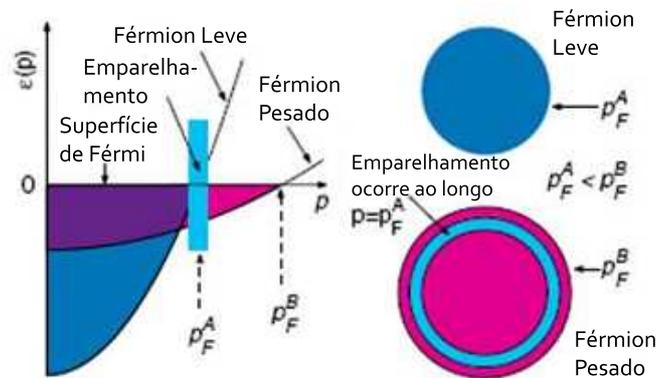


Figura 2.5: Esquema proposto por Liu e Wilczek [7] de como ocorreria este tipo de estado

Este define um sistema que contém ambos estados superfluido e líquido de Fermi normal simultaneamente e de maneira *homogênea*, com excitações com e sem gap, respectivamente. Para elétrons em sólidos, isso definiria um material simultaneamente supercondutor e metálico.

Esse tipo de estado poderia ocorrer em vários contextos da física, como segue:

- Sistemas de átomos ultrafrios
 - Ocorre simplesmente porque os átomos são de spins diferentes ou elementos diferentes.
- Sólidos
 - Pode ocorrer em populações de elétrons em duas bandas diferentes (suas densidades ou massas efetivas diferem).

- Cromodinâmica Quântica

Para diferentes espécies de quarks, que naturalmente tem massa e potenciais químicos diferentes.

Porém, posteriormente foi mostrado que isto não se tratava de um novo estado da matéria e sim da mesma fase proposta por Sarma [14] anos antes, apresentando desta forma as mesmas instabilidades, como ponto de máximo na energia livre e erros no diagrama de fases. Isto será descrito na próxima seção.

Este resultado serviu como motivação inicial para o desenvolvimento deste trabalho, pois traz um modelo simples que trata de sistemas multibandas com interações assimétricas e que nos permite propor alterações como a existência de hibridização entre as bandas, a fim de analisarmos sua estabilidade.

2.4 Fase Mista Inomogênea

Com o propósito de analisar os limites de validade das propostas feitas por Liu e Wilczek, na seção anterior, Bedaque, Caldas e Rupak [9], em 2003, mostraram que o estado fundamental de um gás assimétrico diluído formado de átomos fermiônicos frios constituído por duas espécies de partículas com diferentes densidades é formado por uma fase mista com duas componentes: uma normal e uma superfluida.

O Hamiltoniano proposto é basicamente o mesmo proposto por Liu e Wilczek, dado por

$$H_{Caldas} = H - \sum_{k,\alpha} \mu_\alpha m_\alpha = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) + g \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \quad (2.5)$$

onde a e b representam as duas espécies de partículas, cuja dispersão também é parabólica $\epsilon_k^\alpha = \frac{k^2}{2m_\alpha} - \mu_\alpha$, $\alpha = a, b$.

De maneira geral seus resultados mostraram que a fase BCS desaparece de forma descontínua (transição de 1ª ordem) à temperatura nula, conforme o *mismatch* entre os vetores de Fermi aumenta atingindo um valor crítico. Além de mostrar que a fase Breached Pairing é equivalente a fase de Sarma apresentando um máximo na energia livre.

Todos os resultados comentados anteriormente serviram como base principal, parâmetro e motivação para o desenvolvimento deste trabalho.

Capítulo 3

Efeito da Híbridização em Supercondutores com Interações Inter e Intra-Banda

Supercondutividade assimétrica, como já comentado, refere-se à sistemas cujo emparelhamento Cooper descrito pela teoria BCS não é o único observado, ocorrendo, por exemplo, em sistemas supercondutores onde os vetores de Fermi referentes às partículas interagentes situam-se em diferentes localizações da superfície de Fermi, devido a coexistência de diferentes quase-partículas em torno desta. Este fenômeno ocorre em sistemas cujo estado fundamental, por exemplo, é do tipo FFLO [6, 5], onde o *mismatch* entre as bandas, com diferentes orientações de spin, é produzida pela ação de um campo magnético externo. Isto também ocorre em sistemas de átomos frios, onde a separação é devido ao diferente número de férmions interagentes [1, 17]. Além disso este comportamento também pode aparecer no interior de estrelas de nêutrons devido ao emparelhamento de diferentes números de quarks up e down, podendo gerar uma supercondutividade de cor [3, 2]. Em sistemas metálicos multibandas, como compostos inter-metálicos e férmions-pesados, elétrons vindos de diferentes orbitais coexistem em torno de uma mesma superfície de Fermi [18, 19], uma vez que estes elétrons possuem diferentes massas efetivas ou ocorrem em diferentes números por átomo, existe uma separação natural dos vetores de onda de Fermi destas quase-partículas.

Em matéria condensada, sistemas supercondutores (SC) multibandas são suscetíveis

a pressão externa e em muitos casos esta os leva ao estado normal metálico através de um ponto crítico quântico supercondutor (SQCP). Existem poucos mecanismos que podem produzir esse tipo de transição de fase. O mais conhecido é através de impurezas magnéticas [20], porém este não parece ser o caso em sistemas que são levados ao estado normal por aplicação de pressão externa. Aqui, propomos um mecanismo alternativo que associa o aumento da hibridização a aplicação da pressão externa, pois para sistemas de matéria condensada, a pressão externa modifica o *overlap* das funções de onda devido a deformação da rede e conseqüentemente varia sua hibridização.

O problema da supercondutividade em sistemas com bandas que se cruzam foi tratado originalmente por Suhl, Matthias e Walker [12], como comentamos no capítulo anterior. Neste trabalho e em outros subsequentes [21], a relevância para as interações inter-bandas está associada ao *mismatch* entre os vetores de Fermi. No nosso caso, o *mismatch* dos vetores de Fermi depende da hibridização e pode ser controlada por pressão.

Neste capítulo desenvolveremos um modelo com a finalidade de descrever sistemas de duas bandas, com interações inter e intra-bandas com a possibilidade destas hibridizarem.

3.1 Modelagem do Sistema

O Hamiltoniano proposto para esse tipo de sistema é o seguinte:

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - g \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \\
& - g_b \sum_{kk'\sigma} b_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} b_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k (a_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma})
\end{aligned} \tag{3.1}$$

onde $\epsilon_k^a, \epsilon_k^b$ são as relações de dispersão, $a_{k\sigma}^\dagger$ e $b_{k\sigma}^\dagger$ são os operadores de criação fermiônicos das duas diferentes bandas do sistema. Temos também que g e g_b são as interações atrativas inter e intra-banda entre as quase-partículas, além do termo V ser a hibridização, responsável pela transmutação entre as quase-partículas. Neste trabalho toda análise é feita no limite da interação coulombiana (U) infinita tendo portanto a ocupação de um elétron por sítio.

A origem das interações atrativas não é discutida nesta tese, mas elas podem ter origem nos fônons, em flutuações de carga ou de spin.

A origem física do termo V é diferente para cada caso. Em sistemas de quarks, por exemplo, é a interação fraca que permite a transformação entre quarks up e down dando origem ao termo de mistura [2, 22, 23]. Para sistemas de átomos fermiônicos frios em uma rede ótica, com dois estados atômicos, o termo referente à hibridização é devido as transições Raman com frequências de Rabi características proporcionais a V [24]. Para sistemas metálicos, inter-metálicos e férmions pesados [26], a hibridização vem do *overlap* das funções de onda através do potencial cristalino, podendo ser controlada por pressão ou doping [27] permitindo explorar diagramas de fase utilizando estas quantidades como parâmetros externos. Note que, uma vez que a hibridização transforma uma quase-partícula em outra, apenas o número total de partículas é conservado.

Todo este trabalho foi realizado considerando o potencial químico do sistema constante, ou seja, o nível de Fermi mantém-se inalterado independentemente das interações.

Utilizando uma aproximação tipo campo médio podemos reescrever a equação (3.1) da seguinte forma

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - \Delta_{ab} \sum_{k\sigma} (a_{k\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma}^\dagger + b_{-k-\sigma} a_{k\sigma}) \\
& - \Delta \sum_{k\sigma} (b_{k\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma}^\dagger + b_{-k-\sigma} b_{k\sigma}) + \sum_{k\sigma} V_k (a_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}) - \frac{\Delta_{ab}^2}{g} - \frac{\Delta^2}{g_b}
\end{aligned} \tag{3.2}$$

onde

$$\Delta_{ab} = g \sum_{k\sigma} \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle \tag{3.3}$$

$$\Delta = g_b \sum_{k\sigma} \langle b_{-k-\sigma} b_{k\sigma} \rangle. \tag{3.4}$$

Para obtermos o espectro de excitações das quase-partículas do sistema dentro desta aproximação, utilizamos o método das equações de movimento que nos permite obter as funções de Green padrão e anômala [28]. Tipos excitônicos de correlações que apenas renormalizam a hibridização [29] foram desprezados. Com o propósito de obter os parâmetros de ordem Δ_{ab} e Δ , faz-se necessário o cálculo das funções de Green anômalas $\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle$ e $\langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle$ (o índice de spin foi suprimido por simplicidade), como mostrado mais detalhadamente no Apêndice A. Deste modo temos que

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im}[\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle] \tag{3.5}$$

e

$$\langle b_{-k} b_k \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im}[\langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle] \quad (3.6)$$

onde $f(\omega)$ é a função de Fermi e ω é a frequência conjugada a variável t que descreve a evolução temporal do sistema.

Como ponto de partida. Vamos escrever as equações de movimento no espaço das frequências para os propagadores $\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle$ e $\langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle$, ou seja,

Portanto, fazendo $\hbar = 1$, temos

$$\omega \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = \langle\langle [a_k, H], b_{-k} \rangle\rangle + \frac{1}{2\pi} \langle\{a_k, b_{-k}\}\rangle \quad (3.7)$$

e

$$\omega \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle = \langle\langle [b_k, H], b_{-k} \rangle\rangle + \frac{1}{2\pi} \langle\{b_k, b_{-k}\}\rangle. \quad (3.8)$$

Uma observação a ser feita é que a aproximação de campo médio que conduziu à equação (3.2) também poderia ser feita considerando o Hamiltoniano mais geral e desacoplando as funções de Green. Porém, uma intervenção tardia apresenta seus prós e contras. Algumas funções de Green geradas a partir das equações de movimento são de ordem superior, pois estas apresentam um número maior de operadores de criação e destruição que a função de Green original. Neste caso, a aproximação pode ser tomada para reduzi-las à ordem original das funções de Green reobtendo o resultado anterior ou sendo deixada para mais tarde, complicando um pouco mais o tratamento do problema. Porém, em contrapartida dando maior riqueza aos resultados.

Continuando com o desenvolvendo do formalismo, da equação (3.7) temos

$$\omega \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = \langle\langle [a_k, H], b_{-k} \rangle\rangle \quad (3.9)$$

pois $\langle\{a_k, b_{-k}\}\rangle = 0$, e desenvolvendo o lado direito da equação (3.9) temos

$$\begin{aligned} [a_k, H] &= \sum_k (\epsilon_k^a [a_k, a_k^\dagger a_k] + \epsilon_k^b [a_k, b_k^\dagger b_k]) \\ &- \Delta_{ab} \sum_k ([a_k, a_k^\dagger b_{-k}^\dagger] + [a_k, b_{-k} a_k]) - \Delta \sum_k ([a_k, b_k^\dagger b_{-k}^\dagger] + [a_k, b_{-k} b_k]) \\ &+ \sum_k V_k ([a_k, a_k^\dagger b_k] + [a_k, b_k^\dagger a_k]) - \frac{\Delta_{ab}^2}{g} [a_k, 1] - \frac{\Delta^2}{g_b} [a_k, 1] \end{aligned} \quad (3.10)$$

calculando os comutadores usando as regras de anti-comutação fermiônica, obtemos

$$(\omega - \epsilon_k^a) \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = -\Delta_{ab} \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle + V_k \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle. \quad (3.11)$$

Como podemos observar, para obtermos $\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle$ precisamos não só da função de Green $\langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle$, mas também do propagador $\langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle$.

De maneira análoga à feita anteriormente na equação (3.9), determinamos a equação de movimento para o propagador $\langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle$, que é dada por

$$(\omega + \epsilon_{-k}^b) \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} - \Delta_{ab} \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle - V_{-k} \langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle - \Delta \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle. \quad (3.12)$$

Vemos desta equação que um novo propagador é gerado, $\langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle$, e que também deverá ser calculado posteriormente.

Calculando a equação de movimento para o propagador $\langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle$, temos

$$(\omega - \epsilon_k^b) \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle = \Delta_{ab} \langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle + V_k \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle - \Delta \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle. \quad (3.13)$$

A equação de movimento para $\langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle$, é dada por

$$(\omega + \epsilon_{-k}^a) \langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle = \Delta_{ab} \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle - V_{-k} \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle \quad (3.14)$$

Finalmente, de posse das equações (3.11), (3.12), (3.13) e (3.14), conseguimos completar o sistema de equações que descreve o problema, como segue

$$\begin{cases} (\omega - \epsilon_k^a) \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = -\Delta_{ab} \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle + V_k \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle \\ (\omega + \epsilon_{-k}^b) \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle = -\Delta_{ab} \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle - V_{-k} \langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle - \Delta \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle + \frac{1}{2\pi} \\ (\omega - \epsilon_k^b) \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle = \Delta_{ab} \langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle + V_k \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle - \Delta \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle \\ (\omega + \epsilon_{-k}^a) \langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle = \Delta_{ab} \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle - V_{-k} \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle. \end{cases}$$

Chamando

$$\begin{aligned} x &\equiv \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle \\ y &\equiv \langle\langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle \\ z &\equiv \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle \\ u &\equiv \langle\langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle\rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

e considerando que o sistema possui uma simetria por inversão, podemos fazer $V_k = V_{-k}$ e $\epsilon_k^{a,b} = \epsilon_{-k}^{a,b}$, assim reescrevendo o sistema de equações acima na forma matricial, temos

$$\begin{pmatrix} (\omega - \epsilon_k^a) & \Delta_{ab} & -V_k & 0 \\ \Delta_{ab} & (\omega + \epsilon_k^b) & -\Delta & V_k \\ -V_k & -\Delta & (\omega - \epsilon_k^b) & -\Delta_{ab} \\ 0 & V_k & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^a) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2\pi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Com base nisso, o que nos interessa são os valores de x e z , portanto, pela regra de Cramer, podemos escrevê-los da seguinte forma

$$x = \frac{\det(D_x)}{\det(D)} \quad (3.16)$$

$$z = \frac{\det(D_z)}{\det(D)} \quad (3.17)$$

onde

$$D_x = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{ab} & -V_k & 0 \\ \frac{1}{2\pi} & (\omega + \epsilon_k^b) & -\Delta & V_k \\ 0 & -\Delta & (\omega - \epsilon_k^b) & -\Delta_{ab} \\ 0 & V_k & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^a) \end{pmatrix}$$

$$D_z = \begin{pmatrix} (\omega - \epsilon_k^a) & \Delta_{ab} & 0 & 0 \\ \Delta_{ab} & (\omega + \epsilon_k^b) & \frac{1}{2\pi} & V_k \\ -V_k & -\Delta & 0 & -\Delta_{ab} \\ 0 & V_k & 0 & (\omega - \epsilon_k^a) \end{pmatrix}$$

e

$$D = \begin{pmatrix} (\omega - \epsilon_k^a) & \Delta_{ab} & -V_k & 0 \\ \Delta_{ab} & (\omega + \epsilon_k^b) & -\Delta & V_k \\ -V_k & -\Delta & (\omega - \epsilon_k^b) & -\Delta_{ab} \\ 0 & V_k & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^a) \end{pmatrix}.$$

Resolvendo cada termo separadamente, e considerando a hibridização constante para todo vetor de onda k ($V_k = V$) e chamando $\delta = \frac{\Delta}{\Delta_{ab}}$, obtemos depois de algumas manipulações algébricas

$$\det(D_x) = \frac{\Delta_{ab}}{2\pi} [\Delta_{ab}^2 - V^2 - (\omega + \epsilon_k^b)(\omega + \epsilon_k^a) + \delta V(\omega + \epsilon_k^a)] \quad (3.18)$$

$$\det(D_z) = \frac{1}{2\pi} [\Delta(\omega^2 + \epsilon_k^{a2}) - 2V\Delta_{ab}\omega] \quad (3.19)$$

e

$$\det(D) = \omega^4 - [\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2} + \Delta^2 + 2(V^2 + \Delta_{ab}^2)]\omega^2 + 4\Delta_{ab}V\Delta\omega + [\epsilon_k^a\epsilon_k^b - (V^2 - \Delta_{ab}^2)]^2 + \Delta^2\epsilon_k^{a2}. \quad (3.20)$$

Os pólos das funções de Green são obtidos da condição $\det(D) = 0$, e fornecem as energias de excitação do sistema. Desta forma reescreveremos a equação (3.20) em termos de suas raízes.

Por questões de simetria, pois esperamos que as auto-energias do sistema não dependam do sinal da função, desprezaremos o termo linear em ω , o que nos reduz a uma equação biquadrática, cuja solução é a seguinte

$$\omega_{1,2,3,4} = \pm \sqrt{A_k \pm \sqrt{B_k}} \quad (3.21)$$

onde

$$A_k = \frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} + (V^2 + \Delta_{ab}^2) + \frac{\Delta^2}{2} \quad (3.22)$$

e

$$B_k = \left(\frac{\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}}{2} \right)^2 + V^2(\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)^2 + \Delta_{ab}^2(\epsilon_k^a - \epsilon_k^b)^2 + 4V^2\Delta_{ab}^2 + \frac{\Delta^4}{4} - \frac{\Delta^2}{2}(\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}) + \Delta^2(V^2 + \Delta_{ab}^2). \quad (3.23)$$

É interessante notar, que as energias de excitação do sistema só se anulam, quando

$$[\epsilon_k^a \epsilon_k^b - (V^2 - \Delta_{ab}^2)]^2 + \Delta^2 \epsilon_k^{a2} = 0. \quad (3.24)$$

Isto só acontece ajustando o parâmetro de hibridização para $V = \Delta_{ab}$, podendo ocorrer neste caso excitações sem gap para $k = k_F^a$ com $\epsilon_{k_F^a}^a = 0$. Sem este ajuste, não existe modos sem gap. Porém, efeitos diferentes podem ocorrer caso alguma das interações inter ou intra-banda não exista, isso veremos com mais detalhes nas seções seguintes.

Portanto, podemos escrever $\det(D)$ da seguinte forma,

$$\det(D) = (\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4) \quad (3.25)$$

sendo

$$\omega_1 = \sqrt{A_k + \sqrt{B_k}} = -\omega_3 \quad (3.26)$$

$$\omega_2 = \sqrt{A_k - \sqrt{B_k}} = -\omega_4. \quad (3.27)$$

Podemos ainda reescrever a equação (3.25) na forma

$$\det(D) = (\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - \omega_2^2) \quad (3.28)$$

o que nos permite reescrever $\det(D)$ de uma forma mais conveniente para a aplicação do Teorema do Salto (mais detalhes no Apêndice A), que faremos posteriormente, ou seja

$$\frac{1}{\det(D)} = \frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_1)} - \frac{1}{(\omega + \omega_1)} \right) + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_2)} - \frac{1}{(\omega - \omega_2)} \right) \right] \quad (3.29)$$

Desenvolvendo a equação (3.18)

$$\det(D_x) = -\frac{\Delta_{ab}}{2\pi} \left[\omega^2 + (\epsilon_k^a - \epsilon_k^b - \delta V)\omega - (\epsilon_k^a \epsilon_k^b - V^2 + \Delta_{ab}^2 + \delta V \epsilon_k^a) \right] \quad (3.30)$$

relembrando que $\delta = \frac{\Delta}{\Delta_{ab}}$ e simplificando em termos de suas raízes, ficaremos

$$\det(D_x) = -\frac{\Delta_{ab}}{2\pi} (\omega - x_1)(\omega - x_2) \quad (3.31)$$

sendo

$$x_{1,2} = -L_k \pm J_k \quad (3.32)$$

e

$$\begin{cases} J_k^2 = E_k^2 + \frac{\delta V}{4} \left[\delta V + 4 \frac{\epsilon_k^a + \epsilon_k^b}{2} \right] \\ L_k = \frac{\epsilon_k^a - \epsilon_k^b}{2} - \frac{\delta V}{2} \\ E_k^2 = \left(\frac{\epsilon_k^a + \epsilon_k^b}{2} \right)^2 + (\Delta_{ab}^2 - V^2). \end{cases}$$

Substituindo a equação (3.32) na equação (3.31), obtemos

$$\det(D_x) = -\frac{\Delta_{ab}}{2\pi} (\omega + L_k - J_k)(\omega + L_k + J_k) = -\Delta_{ab} [(\omega + L_k)^2 - J_k^2]. \quad (3.33)$$

Portanto, substituindo as equações (3.29) e (3.33) na equação (3.16), teremos

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = & \frac{\Delta_{ab} [(\omega + L_k)^2 - J_k^2]}{2\pi(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_1)} - \frac{1}{(\omega - \omega_1)} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_2)} - \frac{1}{(\omega + \omega_2)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

De maneira análoga, substituindo as equações (3.19) e (3.33) na equação (3.17), teremos

$$\begin{aligned} \langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle = & \frac{[2V\Delta_{ab}\omega - \Delta(\omega^2 + \epsilon_k^{a2})]}{2\pi(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_1)} - \frac{1}{(\omega - \omega_1)} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_2)} - \frac{1}{(\omega + \omega_2)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Obtemos, então, as funções de Green que descrevem as propriedades do sistema tais como o parâmetro de ordem, as energias de excitação e as propriedades termodinâmicas.

Substituindo as equações (3.34) em (3.5) e (3.35) em (3.6), chegamos aos valores das correlações (cálculos no Apêndice C), como segue

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \frac{\Delta_{ab}}{2\pi(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1^2 - \gamma_k^2}{2\omega_1} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) - \left(\frac{\omega_2^2 - \gamma_k^2}{2\omega_2} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) \right] \quad (3.36)$$

sendo

$$\gamma_k^2 = J_k^2 - L_k^2 \quad (3.37)$$

e

$$\langle b_{-k} b_k \rangle = \frac{\Delta}{2\pi(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_1} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) - \left(\frac{\omega_2^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_2} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) \right] \quad (3.38)$$

com $\beta = \frac{1}{T}$.

Desta forma, substituindo as equações (3.36) e (3.38) em (3.3) e (3.4), transformando os somatórios em integrais, e utilizando as mesmas considerações da Teoria BCS, como acoplamento fraco e número de partículas (N e N_b) constante próximo ao nível de Fermi, conseguimos obter as equações seguintes, que nada mais são do que as equações de Gap do sistema.

- Gap Assimétrico ou inter-banda

$$f(\Delta_{ab}, \Delta) = \frac{1}{gN} = \int \frac{d^3k}{4\pi\sqrt{B_k}} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1^2 - \gamma_k^2}{2\omega_1} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) - \left(\frac{\omega_2^2 - \gamma_k^2}{2\omega_2} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) \right]. \quad (3.39)$$

- Gap Simétrico ou intra-banda

$$f_b(\Delta_{ab}, \Delta) = \frac{1}{g_b N_b} = \int \frac{d^3k}{4\pi\sqrt{B_k}} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_1} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) - \left(\frac{\omega_2^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_2} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) \right]. \quad (3.40)$$

As equações (3.39) e (3.40) são totalmente gerais para qualquer sistema supercondutor de duas bandas com interações inter e intra-banda e hibridização, na aproximação de campo médio e no limite de acoplamento fraco.

Nas seções seguintes, trataremos dos casos particulares do sistema onde existem apenas interações inter-banda ou intra-banda e por fim apresentaremos alguns resultados para o caso geral com ambas as interações.

3.2 Caso Inter-Banda

Com intuito de analisarmos o que cada tipo de interação acarreta ao sistema iremos particularizar para o caso apenas com interações inter-banda (supercondutividade assimétrica), ou seja, $g_b = 0$ ($\Delta = 0$), que de certa forma é o mais interessante para o nosso trabalho, pois é a partir desta que as propriedades exóticas do sistema se manifestam.

Na seção seguinte veremos o caso puramente intra-banda. Neste caso o Hamiltoniano, na aproximação de campo médio, é dado por

$$H' = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - \Delta_{ab} \sum_{k\sigma} (a_{k\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma}^\dagger + b_{-k-\sigma} a_{k\sigma}) - \frac{\Delta_{ab}^2}{g} + \sum_{k\sigma} V_k (a_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}) \quad (3.41)$$

onde as definições são as mesmas do início deste capítulo. Descartaremos o índice de spin, pois este não se altera nos espalhamentos gerados por interações inter-banda, não exercendo papel importante neste caso.

Quando $V = 0$ este modelo se reduz ao problema estudado por Liu e Wilczek[7] que apresentamos no capítulo anterior. Neste caso existe um valor crítico Δ_{ab}^c para o parâmetro de ordem $\Delta_{ab} = g \sum_{k\sigma} \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle$, ou alternativamente para a interação atrativa g_c , a fim de sustentar a supercondutividade BCS. A instabilidade da fase BCS para $\Delta_{ab} < \Delta_{ab}^c$ é associada a um modo “mole”, transição estrutural do sistema, num vetor de onda k_c ($k_F^a < k_c < k_F^b$), o que sugere uma transição para um estado FFLO [6, 5] com vetor de onda característico $k = k_c$.

Utilizando o mesmo formalismo mostrado na seção anterior, obtemos que as funções de Green que descrevem o sistema são dados por

$$\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = \frac{\Delta_{ab} [(\omega + \epsilon_k^-)^2 - E_k^2]}{2\pi(\omega_1'^2 - \omega_2'^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1'} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_1')} - \frac{1}{(\omega - \omega_1')} \right) + \frac{1}{2\omega_2'} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_2')} - \frac{1}{(\omega + \omega_2')} \right) \right] \quad (3.42)$$

sendo

$$\begin{cases} E_k^2 = \epsilon_k^{+2} + (\Delta_{ab}^2 - V^2) \\ \epsilon_k^\pm = \frac{\epsilon_k^a \pm \epsilon_k^b}{2} \end{cases} .$$

As auto-energias podem ser escritas na forma

$$\omega_1' = \sqrt{A_k' + \sqrt{B_k'}} = -\omega_3' \quad (3.43)$$

$$\omega_2' = \sqrt{A_k' - \sqrt{B_k'}} = -\omega_4' \quad (3.44)$$

com

$$A_k' = \frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} + (V^2 + \Delta_{ab}^2) \quad (3.45)$$

e

$$B_k' = \left(\frac{\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}}{2} \right)^2 + V^2(\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)^2 + \Delta_{ab}^2(\epsilon_k^a - \epsilon_k^b)^2 + 4V^2\Delta_{ab}^2 \quad (3.46)$$

onde foi colocado o índice linha (') para não haver confusão com os valores calculados anteriormente.

Independente de não existirem interações intra-banda explicitamente no sistema, a hibridização juntamente com a interação g podem gerar uma atração na rede entre as quase-partículas b . Isso pode ser visto na seguinte função de Green

$$\langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle = \frac{2V\Delta_{ab}\omega}{2\pi(\omega_1'^2 - \omega_2'^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1'} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_1')} - \frac{1}{(\omega - \omega_1')} \right) + \frac{1}{2\omega_2'} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_2')} - \frac{1}{(\omega + \omega_2')} \right) \right]. \quad (3.47)$$

Utilizando o teorema do salto para o cálculo de $\langle b_{-k} b_k \rangle$ obtemos que esta é identicamente nula [4]. Como pode ser constatado no desenvolvimento a seguir

$$\langle b_{-k} b_k \rangle = \frac{2V\Delta_{ab}}{2\pi(\omega_1'^2 - \omega_2'^2)} \int \omega d\omega f(\omega) \left[\frac{1}{2\omega_1'} (\delta(\omega + \omega_1') - \delta(\omega - \omega_1')) + \frac{1}{2\omega_2'} (\delta(\omega - \omega_2') - \delta(\omega + \omega_2')) \right] \quad (3.48)$$

o que dá

$$\langle b_{-k} b_k \rangle = \frac{2V\Delta_{ab}}{2\pi(\omega_1'^2 - \omega_2'^2)} \left\{ \frac{1}{2\omega_1'} [-\omega_1' (f(-\omega_1') + f(\omega_1'))] + \frac{1}{2\omega_2'} [\omega_2' (f(-\omega_2') + f(\omega_2'))] \right\} \quad (3.49)$$

como $f(\omega) + f(-\omega) = 1$, temos que

$$\langle b_{-k} b_k \rangle = \frac{2V\Delta_{ab}}{2\pi(\omega_1'^2 - \omega_2'^2)} \left\{ \frac{1}{2\omega_1'} (-\omega_1') + \frac{1}{2\omega_2'} (\omega_2') \right\} = 0 \quad (3.50)$$

tal fato não ocorreria se a hibridização apresentasse uma dependência qualquer com ω .

Até o momento nossos resultados são gerais, dentro das aproximações feitas e válidos para qualquer tipo de relação de dispersão das partículas fermiônicas que compõem o sistema. A partir daqui, e para todo o trabalho, tomaremos o caso particular de bandas parabólicas $\epsilon_k^j = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_j} - \mu_j$, onde $j = a, b$ [7]. Tomando $\frac{\hbar^2}{2m_a \mu_a} = 1$ e normalizando as dispersões originais por μ_a estas podem ser reescritas como $\epsilon_k^a = k^2 - 1$ e $\epsilon_k^b = \alpha k^2 - \mu$, com $\alpha = \frac{m_a}{m_b} < 1$, conforme está ilustrada na figura 3.1.

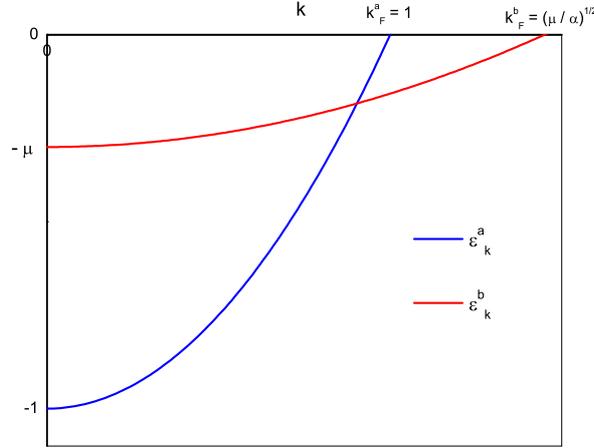


Figura 3.1: Dispersão parabólica das bandas do sistema.

Voltando as relações de dispersão das quase-partículas observamos que, diferentemente do caso $V = 0$, não existem valores negativos das energias [7] para qualquer $\Delta_{ab} \neq 0$. No entanto, a relação de dispersão pode se anular em um ou dois vetores de Fermi específicos [30], onde excitações sem gap aparecem. Estes vetores de onda são determinados por

$$\epsilon_k^a \epsilon_k^b - (V^2 - \Delta_{ab}^2) = 0 \quad (3.51)$$

para $\Delta_{ab} \leq \Delta_{ab}^c(V)$, sendo

$$\Delta_{ab}^c(V) = \sqrt{\Delta_{ab}^{c2}(V=0) + V^2} \quad (3.52)$$

com $\Delta_{ab}^c(V=0) = \frac{\sqrt{\alpha}}{2}|k_F^a - k_F^b|$. Para $\Delta_{ab} > \Delta_{ab}^c(V)$ a relação de dispersão é tipo BCS, com um gap finito constante para as excitações. Mais adiante, ainda nesta seção, retornaremos a tratar deste assunto porém com enfoque sobre o efeito da hibridização, que no nosso caso é o parâmetro externo ao qual temos controle.

Utilizando o teorema do salto obtemos da equação (3.42) a função de correlação

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \frac{\Delta_{ab}}{2\pi(\omega_1'^2 - \omega_2'^2)} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1'^2 - \Upsilon_k^2}{2\omega_1'} \right) \tanh\left(\frac{\beta\omega_1'}{2}\right) - \left(\frac{\omega_2'^2 - \Upsilon_k^2}{2\omega_2'} \right) \tanh\left(\frac{\beta\omega_2'}{2}\right) \right] \quad (3.53)$$

sendo $\beta = \frac{1}{T}$ e

$$\Upsilon_k^2 = E_k^2 - \epsilon_k^{-2} = \epsilon_k^a \epsilon_k^a + \Delta_{ab}^2 - V^2. \quad (3.54)$$

Substituindo a equação (3.53) em (3.3), e fazendo as mesmas considerações do caso geral, além de mudar a variável de integração para a energia, obtemos

$$\frac{1}{g\rho} = \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{4\pi\sqrt{B(\epsilon)}} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1'^2(\epsilon) - \Upsilon^2(\epsilon)}{2\omega_1'(\epsilon)} \right) \tanh\left(\frac{\beta\omega_1'(\epsilon)}{2}\right) - \left(\frac{\omega_2'^2(\epsilon) - \Upsilon^2(\epsilon)}{2\omega_2'(\epsilon)} \right) \tanh\left(\frac{\beta\omega_2'(\epsilon)}{2}\right) \right] \quad (3.55)$$

onde ρ é a densidade de partículas no nível de Fermi, ω_D é a energia de Debye (cutoff), $\epsilon_k^a = \epsilon$ e $\epsilon_k^b = \alpha + (\alpha\epsilon - \mu)$, pois neste caso supomos que o emparelhamento ocorre na superfície de Fermi em torno do vetor de Fermi da partícula mais leve a , assim como Wilczek [7] propõe em seu trabalho, lembrando que ambas as dispersões estão normalizadas por μ_a . O lado direito da equação (3.55) nos dá a função de gap $f(\Delta_{ab}, V)$ do sistema.

3.2.1 Análise para Temperatura Nula

Primeiro analizaremos o caso inter-banda a temperatura nula [31], obtendo informações sobre possíveis transições quânticas presentes no sistema. Assim, a equação (3.55), pode ser reescrita à temperatura nula de uma forma muito mais simples, como segue

$$\frac{1}{g\rho} = \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{4\pi\sqrt{B(\epsilon)}} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1'^2(\epsilon) - \Upsilon^2(\epsilon)}{2\omega_1'(\epsilon)} \right) - \left(\frac{\omega_2'^2(\epsilon) - \Upsilon^2(\epsilon)}{2\omega_2'(\epsilon)} \right) \right] \quad (3.56)$$

ou ainda, utilizando o fato de que $\Upsilon^2 = \omega_1'\omega_2'$ ficaremos

$$\frac{1}{g\rho} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{\omega_1'(\epsilon) + \omega_2'(\epsilon)} \quad (3.57)$$

A energia média do estado fundamental do sistema é dada por

$$E(\Delta_{ab}, V) = \sum_k \left[\omega'_1(\Delta_{ab}, V, k) + \omega'_2(\Delta_{ab}, V, k) \right] - \frac{\Delta_{ab}^2}{g} \quad (3.58)$$

Assumindo que todos os estados com energias negativas estão preenchidos, tomamos para os cálculos numéricos $\alpha = \frac{m_a}{m_b} = 1/7$ e $\mu = \frac{\mu_b}{\mu_a} \approx 0.30$, dados experimentais como em Caldas [9] para átomos frios, resultando num $k_F^a = 1$ e $k_F^b = 1.45$. Estes números também são apropriados para descrever metais de transição (MT) para os quais os valores típicos das larguras de banda ($\mu_{a,b}$) são alguns elétron-volts, com g e V ambos da ordem de $10^{-1}eV$ ou $10^{-2}eV$. A razão entre as massas α pode variar da ordem de 10^{-1} para MT até 10^{-3} para férmions pesados (FP)[32]. Porém as propriedades gerais da solução independem dos valores particulares dos parâmetros, desta maneira obtemos as propriedades termodinâmicas.

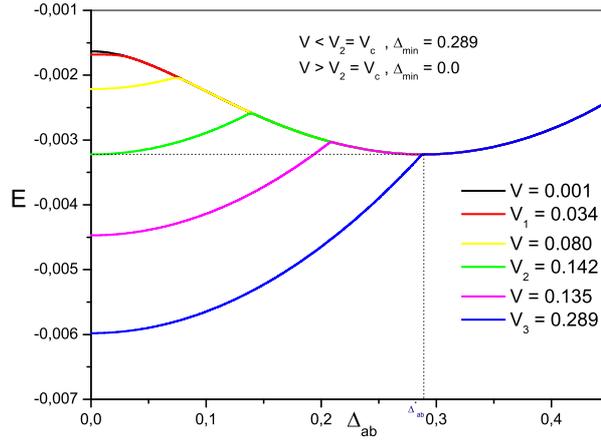


Figura 3.2: Energia do estado fundamental do sistema para interações puramente interbanda. Utilizamos um valor fixo da interação $g/\mu_a = 30$ e diferentes valores de hibridização. A transição de fase de primeira ordem, $T = 0$, ocorre em $V_2 = V_2/\mu_a$, onde as fases normal e supercondutora tornam-se degeneradas. Entretanto, até $V_3 = V_3/\mu_a$ a fase supercondutora existe como um estado metaestável, note que os valores dos parâmetros apresentados estão normalizados por μ_a .

Daqui em diante utilizaremos as notações simplificadas V_i , Δ_i , g , T para descrever as grandezas V_i/μ_a , Δ_i/μ_a , g/μ_a e $k_B T/\mu_a$, respectivamente.

Na figura 3.2 mostramos a energia do estado fundamental em função do parâmetro de ordem para diversos valores da hibridização. Estas curvas nos permitem identificar três valores característicos da hibridização. Inicialmente, $V = V_1$ assinala o aparecimento de um mínimo na origem que coexiste com o mínimo absoluto associado ao estado supercondutor. A maneira em que a hibridização aumenta, ocorre uma transição de fase de primeira ordem em $V = V_2 = V_c$ ($V_c/\mu_a = 0.142$ para os parâmetros utilizados), para o qual as energias do estado normal e supercondutor são iguais. Aumentando mais a hibridização, o estado supercondutor permanece como um estado metaestável até $V = V_3$ onde ele deixa de ser um mínimo da energia [33]. Os valores V_1 , V_c e V_3 para um dado valor de acoplamento constituem um diagrama de fases mostrado na figura 3.3.

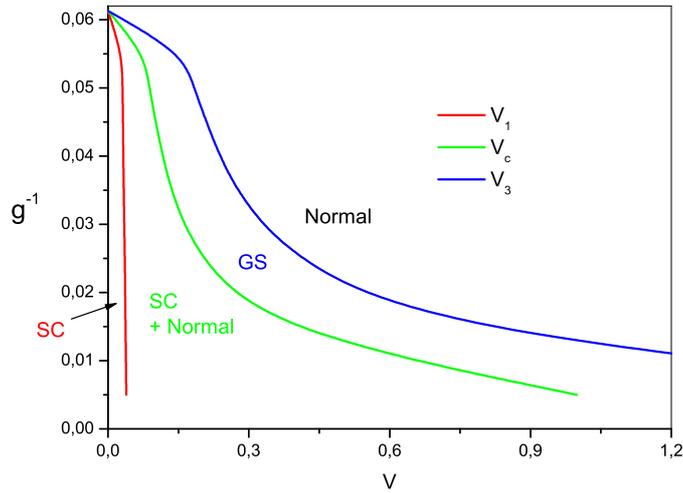


Figura 3.3: Diagrama de fase $g^{-1} \times V$, normalizado por μ_a . A sequência de curvas mostra as diferentes regiões do diagrama de fase e os limites de metaestabilidade, onde as fases GS e SC+Normal estão descritas no texto.

Vemos claramente na figura 3.3 as zonas onde o sistema apresenta seus diversos comportamentos. Como foi explicado anteriormente, para valores $V > V_3$ o sistema está no estado normal (N) de condutividade. Para $V_c < V < V_3$ temos uma fase normal, porém com um mínimo supercondutor metaestável, o que corresponde a fase sem gap (GS) [4]. Em $V = V_c$ temos uma transição de fase quântica de 1ª ordem no sistema, para $V_1 < V < V_c$ o comportamento se inverte, pois temos uma fase supercondutora

coexistindo com uma fase normal metaestável (SC + Normal). Finalmente, para $V < V_1$ o estado é supercondutor puro (SC) [33].

Baseado nas informações acima podemos apresentar a relação de dispersão do sistema, com base nos valores característicos (V_1, V_c, V_3) da hibridização.

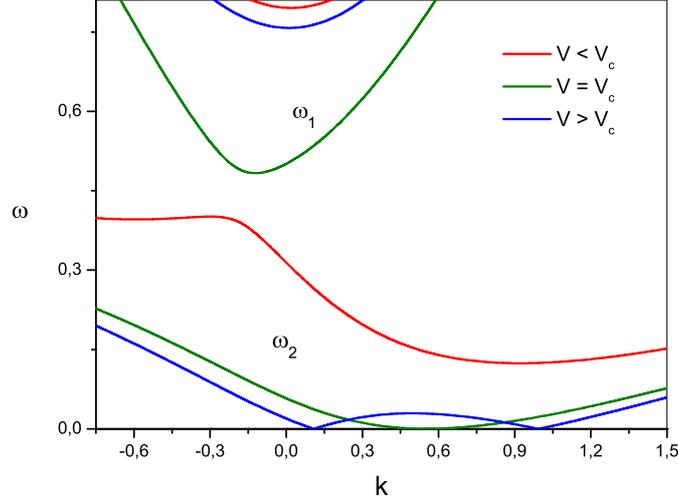


Figura 3.4: Relação de dispersão para diferentes valores de hibridização normalizada por μ_a .

Na figura 3.4 mostramos como se comporta a relação de dispersão do sistema. Para valores de hibridização menores que V_c o sistema apresenta uma dispersão característica de um supercondutor. Assim que a hibridização aumenta e eventualmente esta atinge o valor crítico V_c aparece um modo mole no sistema (valor nulo para a relação de dispersão, caracterizando um modo sem gap, GS). Aumentando ainda mais a hibridização o modo sem gap se desdobra em dois até atingindo o valor de V_3 , a partir daí o sistema é inteiramente normal.

Como vemos na figura 3.5 a supercondutividade assimétrica à temperatura nula depende de um valor mínimo de interação g_c característico para ser observada, mesmo para $V = 0$, diferentemente do caso BCS usual simétrico cujo emparelhamento ocorre para uma interação arbitrariamente pequena. É fácil ver também na figura 3.5 que, a hibridização age em detrimento da supercondutividade, de tal forma que para pequenos valores de V , a aproximação de acoplamento fraco é ainda justificada. Para $V \neq 0$, a função $f(\Delta_{ab}, V)$

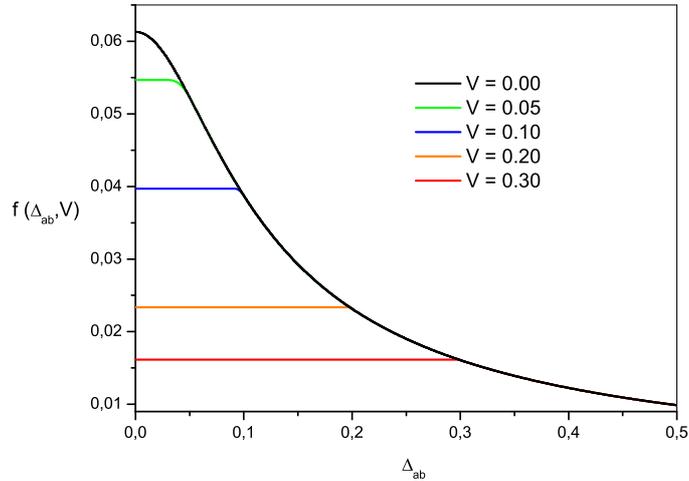


Figura 3.5: Gráfico da função de gap $f(\Delta_{ab}, V) \times \Delta_{ab}$ para diferentes valores de V , ambos Δ_{ab} e V estão normalizados por μ_a .

é constante até $\Delta_{ab} = \Delta_{ab}^* = V$, o que nos sugere o início de um mínimo supercondutor antecedendo uma transição de fase de primeira ordem, o que está de acordo com o observado na figura 3.2.

Além disso, como poderá ser constatado ao fazermos a comparação entre os gráficos das funções de gap dos casos inter e intra-banda o valor da interação necessária para que o emparelhamento supercondutor inter-banda ocorra é de duas ordens de grandeza maior que para o emparelhamento intra-banda, mostrando uma maior facilidade para este tipo de emparelhamento.

3.2.2 Análise para Temperatura Finita

Analisaremos agora o caso inter-banda com temperatura finita, ou seja, o tratamento será feito diretamente a partir da equação (3.55).

Neste caso, podemos ver nas figuras 3.6 e 3.7 que a transição de fase que inicialmente era descontínua, de primeira ordem, torna-se contínua, de segunda ordem, conforme a temperatura aumenta [34], mostrando que a influência térmica destrói qualquer tipo de característica quântica uma vez existente na transição de fase do sistema.

A figura 3.6 mostra a função de gap inter-banda como uma função do parâmetro de

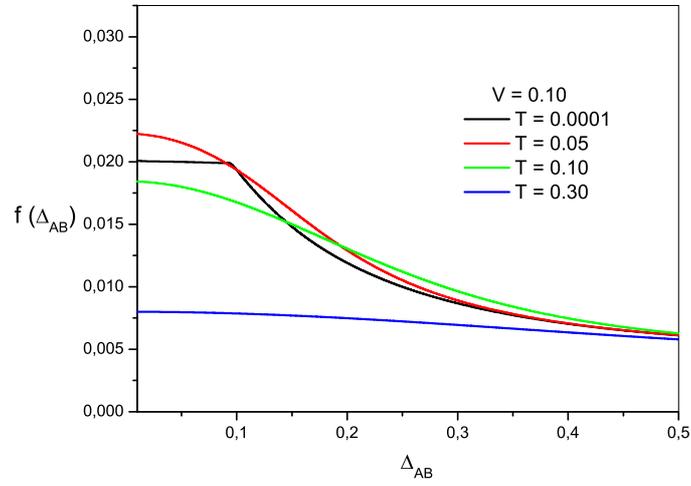


Figura 3.6: Gráfico $f(\Delta_{ab}, V) \times \Delta_{ab}$, para vários valores de T , com V fixo, onde $T = k_B T / \mu_a$, $V = V / \mu_a$ e $\Delta_{ab} = \Delta_{ab} / \mu_a$.

ordem Δ_{ab} para vários valores de temperatura e para um valor fixo da hibridização. Note que próximo a região onde a transição de fase muda de primeira para segunda ordem, existe um comportamento reentrante, que pode ser visto mais claramente na figura 3.7.

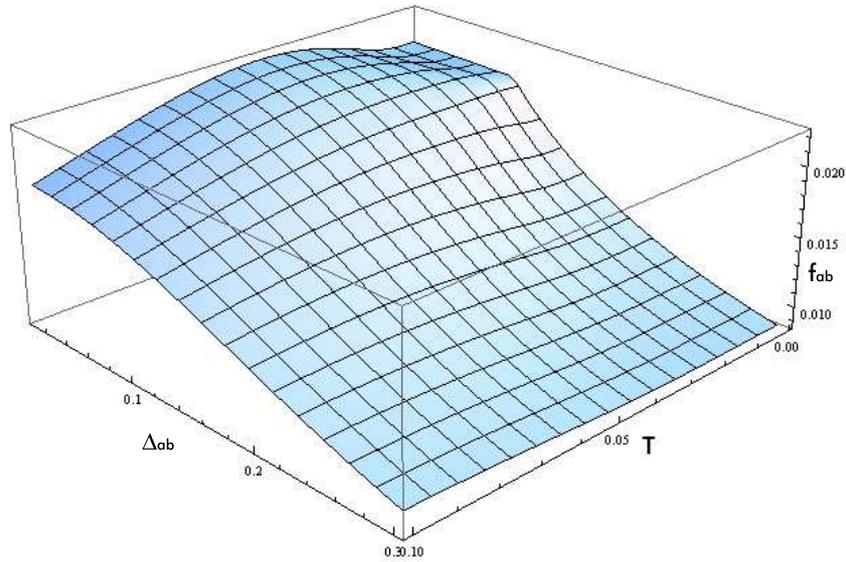


Figura 3.7: Gráfico 3D $f_{ab} = f(\Delta_{ab}, V, T) \times \Delta_{ab} \times T$, para o valor fixo $V = 0.10$, todos normalizados por μ_a .

Por questão de completeza, apresentamos na figura 3.8 o comportamento da função de gap do sistema para vários valores de hibridização e um valor fixo, não nulo, de temperatura. O que nos mostra o comportamento esperado, a hibridização agindo em detrimento da supercondutividade.

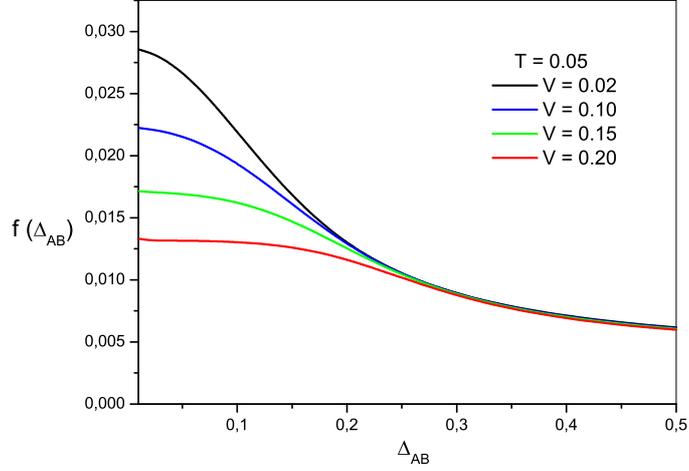


Figura 3.8: Gráfico $f(\Delta_{ab}, V) \times \Delta_{ab}$, para vários valores de V , com T fixo, todos normalizados por μ_a .

3.3 Caso Intra-Banda

Estudaremos agora, o caso apenas com interações intra-banda (supercondutividade simétrica usual), logo, $g = 0$ ($\Delta_{ab} = 0$). Este é o caso mais relevante para compostos inter-metálicos, férmions pesados e materiais de alta temperatura crítica (High- T_c) [28].

O Hamiltoniano do sistema para esse caso é o seguinte,

$$\begin{aligned}
 H'' = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - \Delta \sum_{k\sigma} (b_{k\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma}^\dagger + b_{-k-\sigma} b_{k\sigma}) - \frac{\Delta^2}{g_b} \\
 + \sum_{k\sigma} V_k (a_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}) \quad (3.59)
 \end{aligned}$$

onde Δ está definido na equação (3.4).

Utilizando o método das funções de Green, conseguimos obter de maneira análoga ao procedimento feito nas seções anteriores as funções de correlação relevantes para o estudo do sistema. Desta maneira, após algumas manipulações algébricas, obtemos

$$\langle b_{-k}a_k \rangle = \frac{V\Delta}{2\pi(\omega_1''^2 - \omega_2''^2)} \int (\omega + \epsilon_k^a) d\omega f(\omega) \left[\frac{1}{2\omega_1''} (\delta(\omega + \omega_1'') - \delta(\omega - \omega_1'')) + \frac{1}{2\omega_2''} (\delta(\omega - \omega_2'') - \delta(\omega + \omega_2'')) \right] \quad (3.60)$$

o que dá

$$\langle b_{-k}a_k \rangle = \frac{V\Delta}{2\pi(\omega_1''^2 - \omega_2''^2)} \left\{ \frac{1}{2\omega_1''} \left[-\omega_1'' (f(-\omega_1'') + f(\omega_1'')) + \epsilon_k^a (f(-\omega_1'') - f(\omega_1'')) \right] + \frac{1}{2\omega_2''} \left[\omega_2'' (f(\omega_2'') + f(-\omega_2'')) + \epsilon_k^a (f(\omega_2'') - f(-\omega_2'')) \right] \right\} \quad (3.61)$$

como $f(\omega) + f(-\omega) = 1$ e $f(-\omega) - f(\omega) = \tanh(\frac{\beta\omega}{2})$, temos que

$$\langle b_{-k}a_k \rangle = \frac{V\Delta\epsilon_k^a}{2\pi(\omega_1''^2 - \omega_2''^2)} \left\{ \frac{1}{\omega_1''} \tanh\left(\frac{\beta\omega_1''}{2}\right) - \frac{1}{\omega_2''} \tanh\left(\frac{\beta\omega_2''}{2}\right) \right\} \quad (3.62)$$

diferente do caso inter-banda, cuja correlação extra $\langle b_{-k}b_k \rangle$ sempre se anulava para hibridização constante. No caso intra-banda a correlação $\langle b_{-k}a_k \rangle$ existe e está totalmente relacionada com a presença da hibridização, se esta for nula a correlação $\langle b_{-k}a_k \rangle$ também será.

Da mesma forma obtemos para a função de correlação $\langle b_{-k}b_k \rangle$,

$$\langle b_{-k}b_k \rangle = \frac{\Delta}{2\pi(\omega_1''^2 - \omega_2''^2)} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1''^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_1''} \right) \tanh\left(\frac{\beta\omega_1''}{2}\right) - \left(\frac{\omega_2''^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_2''} \right) \tanh\left(\frac{\beta\omega_2''}{2}\right) \right] \quad (3.63)$$

com $\beta = \frac{1}{T}$ e

$$\omega_1'' = \sqrt{A_k'' + \sqrt{B_k''}} = -\omega_3'' \quad (3.64)$$

$$\omega_2'' = \sqrt{A_k'' - \sqrt{B_k''}} = -\omega_4'' \quad (3.65)$$

onde

$$A_k'' = \frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} + V^2 + \frac{\Delta^2}{2} \quad (3.66)$$

e

$$B_k'' = \left(\frac{\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}}{2} \right)^2 + V^2(\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)^2 + \frac{\Delta^4}{4} - \frac{\Delta^2}{2}(\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}) + \Delta^2 V^2. \quad (3.67)$$

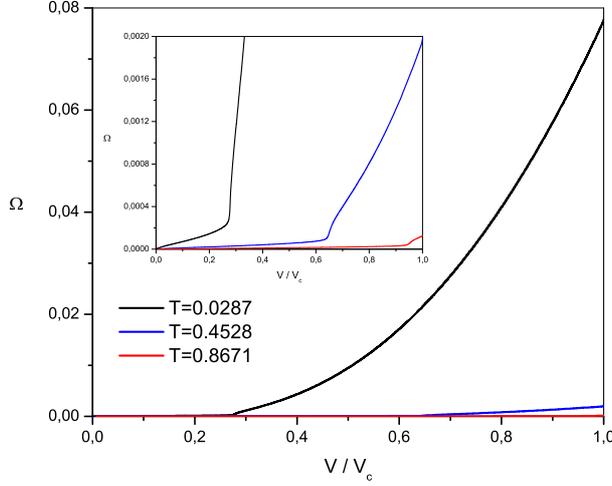


Figura 3.9: Gráfico da razão $\Omega = \frac{\sum \langle b_{-k} a_k \rangle}{\sum \langle b_{-k} b_k \rangle} \times \frac{V}{V_c}$ para vários valores de temperatura normalizadas. Em destaque mostra o comportamento para valores em torno de zero da razão Ω .

Na figura 3.9 temos $\Omega = \frac{\sum \langle b_{-k} a_k \rangle}{\sum \langle b_{-k} b_k \rangle} \times \frac{V}{V_c}$, de forma que podemos ver que a influência da correlação assimétrica é mínima comparada à simétrica, mesmo para valores de hibridização próximos de V_c .

Aqui, como no caso geral, as relações de dispersão nunca se anulam na fase supercondutora, uma vez que a condição

$$\left[\epsilon_k^a \epsilon_k^b - V^2 \right]^2 + \Delta^2 \epsilon_k^a{}^2 = 0 \quad (3.68)$$

não apresenta soluções não-triviais. Portanto, não existe neste caso nenhum modo mole no sistema, diferentemente do caso inter-banda.

Substituindo a equação (3.63) na equação (3.4), fazendo as manipulações necessárias, obtemos a equação de gap do sistema,

$$\frac{1}{g_b \rho_b} = \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{4\pi \sqrt{B(\epsilon)}} \cdot \left[\left(\frac{\alpha^2 \omega_1''^2(\epsilon) - (\epsilon + \mu - \alpha)^2}{2\alpha^2 \omega_1''(\epsilon)} \right) \tanh \left(\frac{\beta \omega_1''(\epsilon)}{2} \right) - \left(\frac{\alpha^2 \omega_2''^2(\epsilon) - (\epsilon + \mu - \alpha)^2}{2\alpha^2 \omega_2''(\epsilon)} \right) \tanh \left(\frac{\beta \omega_2''(\epsilon)}{2} \right) \right] \quad (3.69)$$

onde $\epsilon_k^a = \frac{\epsilon + \mu - \alpha}{\alpha}$ e $\epsilon_k^b = \epsilon$, tomado desta forma pois como a interação ocorre na banda b é de se esperar que o emparelhamento ocorra em torno do vetor de Fermi desta banda,

normalizado por μ_a . O lado direito da equação acima define a função de gap $f_b(\Delta, V)$ do sistema.

3.3.1 Análise para Temperatura Nula

No limite de temperatura nula temos que a equação (3.69) pode ser reescrita como

$$\frac{1}{g_b \rho_b} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{\omega_1''(\epsilon) + \omega_2''(\epsilon)} \left[1 + \frac{(\epsilon + \mu - \alpha)^2}{\alpha^2 \sqrt{Z(\epsilon)}} \right] \quad (3.70)$$

onde

$$Z(\epsilon) = [\epsilon_k^a \epsilon_k^b - V^2]^2 + \Delta^2 \epsilon_k^{a2} \quad (3.71)$$

com $\epsilon_k^a = \frac{\epsilon + \mu - \alpha}{\alpha}$ e $\epsilon_k^b = \epsilon$.

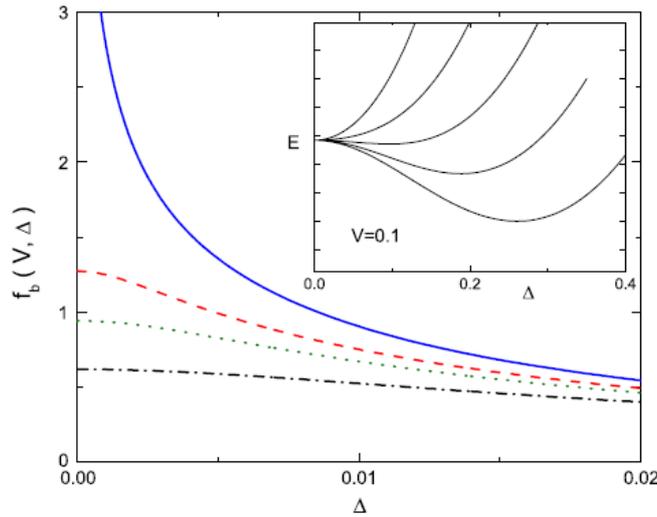


Figura 3.10: Gráfico $f_b(\Delta, V) \times \Delta$ para os valores de hibridização $V = 0.10, 0.12, 0.13, 0.15$ vindo de cima para baixo. Em destaque, energia do sistema para V fixo e variando a interação g_b . Apresenta como o mínimo de energia do sistema muda continuamente, caracterizando uma transição de segunda ordem, com os parâmetros normalizados por μ_a .

Podemos ver na figura 3.10 que, diferentemente do caso inter-banda, o mínimo da energia do estado fundamental varia continuamente de $\Delta = 0$ à um valor finito assim que o sistema entra na fase supercondutora [4]. Não existem fases metaestáveis neste caso. Podemos ver, também, que a equação de gap necessita de um valor específico da interação

g_b , que depende de V_c , para a transição de fase ocorrer. Essa transição ocorre assim que o parâmetro de ordem Δ se anula continuamente. Este é um tipo de transição de fase de segunda ordem caracterizado pelo valor da hibridização que depende da intensidade da interação atrativa $V_c(g_b)$ e é associada a um ponto crítico quântico supercondutor (SQCP). Este SQCP pode ser alcançado experimentalmente aplicando pressão ao sistema com intuito de variar o overlap dos orbitais atômicos e conseqüentemente a hibridização, assim como, por exemplo, no estudo de materiais tipo férmions-pesados [32]. Outro ponto importante a ser frisado é que, a supercondutividade devido a interação intra-banda ocorre com muito mais facilidade do que a inter-banda. Podemos observar claramente nas funções de gap que a transição do estado normal para o supercondutor no caso intra-banda, ocorre para valores de interação muito menores do que para o caso inter-banda (ver figuras 3.5 e 3.10). Isto nos mostra que a caracterização de uma supercondutividade inter-banda é bastante complicada. Com a intenção de se observar este fenômeno, deve-se de alguma forma inibir o caso simétrico.

Determinando Analiticamente V_c

Diretamente da equação (3.70), obtemos numericamente o comportamento de V_c , como podemos ver na figura 3.11

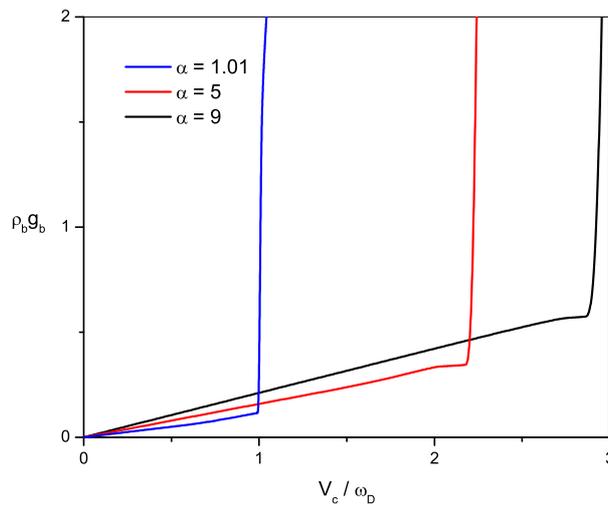


Figura 3.11: Comportamento de V_c obtido numericamente para o caso intra-banda

Queremos então determinar, pelo menos de maneira aproximada, uma expressão analítica para V_c neste caso. Sendo as relações de dispersão do sistema dadas pelas equações (3.64, 3.65) e a equação de gap dada pela equação (3.70), podemos tentar obter um valor analítico para V_c , utilizando-se do fato de que quando $V \rightarrow V_c \Rightarrow \Delta \rightarrow 0$, assim podemos reescrever algumas equações da seguinte forma

$$\frac{1}{g_b \rho_b} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{\omega_1'' + \omega_2''} \left[1 + \frac{\epsilon_k^{a2}}{\sqrt{Z}} \right] \quad (3.72)$$

onde $\omega_{1,2}'' = \sqrt{A_k'' \pm \sqrt{B_k''}}$, com

$$A_k'' = \frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} + V_c^2 \quad (3.73)$$

$$B_k'' = \left(\frac{\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}}{2} \right)^2 + V_c^2 (\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)^2 \quad (3.74)$$

e

$$Z = [\epsilon_k^a \epsilon_k^b - V_c^2]^2 \quad (3.75)$$

Para a determinação do valor crítico da hibridização, consideraremos o caso particular de bandas homotéticas, ou seja, podemos escrever $\epsilon_k^a = \sigma \epsilon_k^b$ e $\epsilon_k^b = \epsilon_k = \epsilon$. Lembrando que a equação (3.72) já está escrita em termos da energia, o termo ϵ_k^{a2} é um abuso de notação. Assim

$$\sigma = \frac{1}{\alpha} = \frac{m_b}{m_a} > 1 \quad (3.76)$$

desta forma ficamos com

$$A_k'' = V_c^2 \left[1 + \frac{(1 + \sigma^2) \epsilon_k^2}{2V_c^2} \right] \quad (3.77)$$

$$\sqrt{B_k''} = (1 + \sigma) \epsilon_k V_c \sqrt{\left[1 + \frac{(\sigma - 1)^2 \epsilon_k^2}{4V_c^2} \right]} \quad (3.78)$$

- **Aproximação em primeira ordem de $(\frac{\epsilon_k}{V_c})$**

Considerando uma aproximação em primeira ordem de $(\frac{\epsilon_k}{V_c})$, ou seja $O\left[\left(\frac{\epsilon_k}{V_c}\right)^2\right] \rightarrow 0$, pois V_c é grande o suficiente, comparado à energia da banda, para desordenar o sistema além de próximo a superfície de Fermi $\epsilon_k = \epsilon \approx 0$. Podemos reescrever as relações de dispersão da seguinte forma

$$\omega_{1,2}'' = \sqrt{A_k'' \pm \sqrt{B_k''}} \simeq V_c \left[1 \pm \frac{(1 + \sigma) \epsilon_k}{V_c} \right] \quad (3.79)$$

assim

$$\omega_1'' + \omega_2'' = 2V_c \quad (3.80)$$

e

$$Z = V_c^4 \quad (3.81)$$

portanto a equação (3.72) fica

$$\frac{1}{g_b \rho_b} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{2V_c} \left[1 + \underbrace{\frac{\sigma^2 \epsilon_k^2}{V_c^2}}_{\rightarrow 0} \right] = \frac{1}{4\pi} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{2V_c} \quad (3.82)$$

obtendo assim o ponto crítico quântico por

$$V_c = \frac{\omega_D g_b \rho_b}{4\pi} \quad (3.83)$$

o que nos dá um crescimento linear de $(\frac{V_c}{\omega_D})$ com relação à $g_b \rho_b$.

• **Aproximação em segunda ordem de $(\frac{\epsilon_k}{V_c})$**

Tentando agora, para uma ordem superior ao caso anterior, ou seja $O\left[\left(\frac{\epsilon_k}{V_c}\right)^3\right] \rightarrow 0$, a solução muda totalmente como podemos ver a seguir.

Das equações (3.77, 3.72), obtemos após algumas manipulações algébricas

$$\omega_{1,2}'' \simeq V_c \left[1 + \frac{(1 + \sigma^2) \epsilon_k^2}{2V_c^2} \pm \frac{(1 + \sigma) \epsilon_k}{V_c} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.84)$$

expandido até segunda ordem $(1 + x)^{\frac{1}{2}}$, para x pequeno temos

$$(1 + x)^{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \dots \quad (3.85)$$

sendo

$$x = \frac{(1 + \sigma^2) \epsilon_k^2}{2V_c^2} \pm \frac{(1 + \sigma) \epsilon_k}{V_c} \quad (3.86)$$

assim sendo

$$\omega_{1,2}'' \simeq V_c \left[1 + \frac{(1 - \sigma)^2 \epsilon_k^2}{8V_c^2} \pm \frac{(1 + \sigma) \epsilon_k}{V_c} \right] \quad (3.87)$$

resultando

$$\omega_1'' + \omega_2'' = 2V_c \left[1 + \frac{(1 - \sigma)^2 \epsilon_k^2}{8V_c^2} \right] \quad (3.88)$$

e

$$\sqrt{Z} = V_c^2 \left(1 - \frac{\sigma \epsilon_k^2}{V_c^2} \right) \quad (3.89)$$

desta forma, a equação de gap pode ser escrita como

$$\frac{1}{g_b \rho_b} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{2V_c \left[1 + \frac{(1-\sigma)^2 \epsilon_k^2}{8V_c^2} \right]} \left\{ 1 + \frac{\sigma^2 \epsilon_k^2}{V_c^2 \left(1 - \frac{\sigma \epsilon_k^2}{V_c^2} \right)} \right\} \quad (3.90)$$

arrumando, temos

$$\frac{1}{g_b \rho_b} = \frac{1}{8\pi V_c} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\epsilon \frac{1 + \sigma(\sigma - 1) \left(\frac{\epsilon}{V} \right)^2}{1 + \left[\frac{1}{8}(1 - \sigma)^2 - \sigma \right] \left(\frac{\epsilon}{V} \right)^2} \quad (3.91)$$

que é uma integral conhecida cuja solução é a seguinte:

$$\int_{-c}^c \frac{1 + ax^2}{1 + bx^2} dx = \frac{2 \left[ac\sqrt{b} + (b - a) \tanh^{-1}(\sqrt{bc}) \right]}{b^{\frac{3}{2}}} \quad (3.92)$$

assim, fazendo a devida mudança de variável e manipulando obtemos

$$\frac{1}{g_b \rho_b} = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{\sigma(\sigma - 1)\omega_D}{V_c \left[\frac{1}{8}(1 - \sigma)^2 - \sigma \right]} + \left(\frac{1}{8}(1 - \sigma)^2 - \sigma \right)^{-\frac{1}{2}} \tanh^{-1} \left[\left(\frac{1}{8}(1 - \sigma)^2 - \sigma \right) \frac{\omega_D}{V_c} \right] \right\} \quad (3.93)$$

que é uma equação transcendental em V_c , que nos dá o comportamento para uma aproximação em segunda ordem de $\left(\frac{\epsilon}{V_c} \right)$

Depois de obtido os resultados aproximados, apresentamos na figura 3.12 a comparação com a solução obtida numericamente.

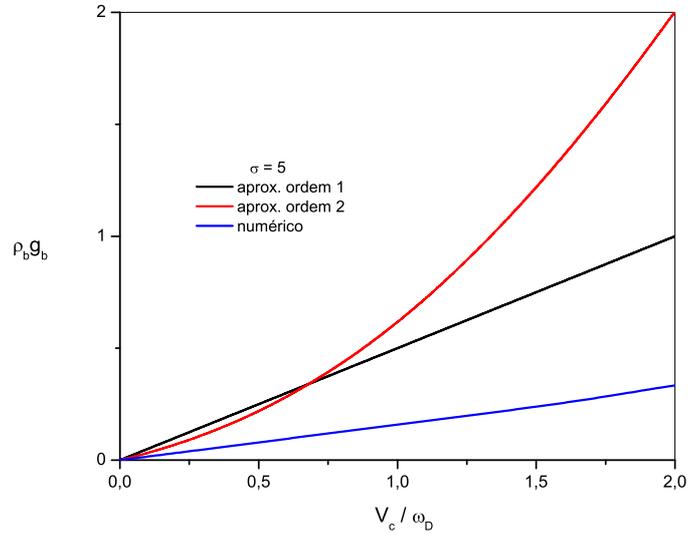


Figura 3.12: Comportamento de V_c para o caso intra-banda comparando todas as aproximações com o caso numérico.

Podemos ver na figura 3.12, que as aproximações de ordem 1 e 2, descrevem de maneira satisfatória o comportamento para $\frac{V_c}{\omega_D}$ e $g_b \rho_b$ pequenos.

3.3.2 Análise para Temperatura Finita

Considerando o caso intra-banda, discutiremos o diagrama de fase na presença de uma hibridização controlada e temperatura finita [34]. Utilizando a equação (3.40) obtida no início deste capítulo e as considerações de que as bandas originalmente são parabólicas $\epsilon_k^a = k^2 - 1$ e $\epsilon_k^b = \alpha k^2 - \mu$, já feitas as mesmas considerações das seções anteriores, conseguimos obter o diagrama de fase apresentado na figura 3.13.

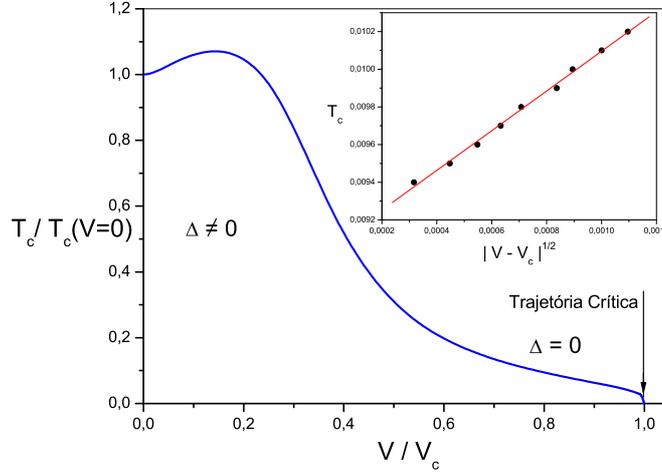


Figura 3.13: Diagrama de fase $T_c \times V$ normalizado das temperaturas críticas supercondutoras como uma função da hibridização. A transição ao longo da linha crítica é contínua e V_c é um ponto crítico quântico supercondutor (PCQS). Em destaque, é mostrado o comportamento de T_c próximo ao PCQS, cujo expoente crítico $\frac{1}{2}$ nos mostra o resultado esperado de um tratamento tipo campo médio.

A figura 3.13 mostra o diagrama de fase $T_c \times V$, com a temperatura crítica expressa como uma função da hibridização. A linha crítica é uma linha de transição de fase de segunda ordem. Para os valores de $\alpha = \frac{1}{7}$ e $\mu = 0.30$, utilizados na obtenção do diagrama, observamos que a hibridização inicialmente aumenta a temperatura crítica antes de destruir a supercondutividade. Uma vez que a transição é contínua, existe um PCQS no valor crítico da hibridização V_c . Para valores de V próximos a V_c , a linha crítica se anula no PCQS com o comportamento do tipo $T_c \propto |V - V_c|^\psi$ com expoente crítico de campo-médio $\psi = \frac{1}{2}$ como mostrado em destaque na figura 3.13. Além da indicação da trajetória crítica ($V = V_c$), ver Apêndice B, para a qual será obtida algumas propriedades do sistema na fase normal.

Cálculo das Bandas Híbridas no Limite sem Supercondutividade

Como já foi calculado para o caso geral, a relação de dispersão do sistema é dada por

$$\omega_{1,2} = \sqrt{A_k \pm \sqrt{B_k}} \quad (3.94)$$

com

$$A_k = \frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} + \Delta_{ab}^2 + V^2 + \frac{\Delta^2}{2} \quad (3.95)$$

$$B_k = \left(\frac{\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}}{2} \right)^2 + V^2 (\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)^2 + \Delta_{ab}^2 (\epsilon_k^a - \epsilon_k^b)^2 \quad (3.96)$$

$$+ 4V^2 \Delta_{ab}^2 + \frac{\Delta^4}{4} - \frac{\Delta^2}{2} (\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}) + \Delta^2 (V^2 + \Delta_{ab}^2)$$

utilizando $\Delta = \Delta_{ab} = 0$, ficamos

$$A_k = \frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} + V^2 = \left(\frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} \right)^2 + \frac{1}{4} [(\epsilon_k^a - \epsilon_k^b)^2 + 4V^2] \quad (3.97)$$

e

$$B_k = \left(\frac{\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}}{2} \right)^2 [(\epsilon_k^a - \epsilon_k^b)^2 + 4V^2] \quad (3.98)$$

das equações (3.97) e (3.98) obtemos

$$A_k \pm \sqrt{B_k} = \left[\frac{\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_k^a - \epsilon_k^b)^2 + 4V^2} \right]^2 \quad (3.99)$$

sendo

$$\omega_{1,2} = \left| \epsilon_k^+ \pm \sqrt{\epsilon_k^{-2} + V^2} \right| \quad (3.100)$$

onde

$$\epsilon_k^\pm = \frac{(\epsilon_k^a \pm \epsilon_k^b)}{2} \quad (3.101)$$

Determinação dos momentos de Fermi das bandas híbridas do sistema

Para determinarmos os momentos de Fermi das bandas híbridas, basta igualar a relação de dispersão a zero, ou seja

$$\omega_{1,2} = \epsilon_{k_F}^+ \pm \sqrt{\epsilon_{k_F}^{-2} + V^2} = 0 \quad (3.102)$$

substituindo os valores de ϵ_k^a e ϵ_k^b , dados a seguir, na relação de dispersão, fica

$$\begin{aligned} \epsilon_k^a &= k^2 - 1 \\ \epsilon_k^b &= \alpha k^2 - \mu \end{aligned} \quad (3.103)$$

arrumando

$$\left[\alpha^{+2} - \alpha^{-2}\right] k_F^4 + \left[\frac{\alpha^- \mu^- - \alpha^+ \mu^+}{2}\right] k_F^2 + \left[\mu^{+2} - \mu^{-2} + V^2\right] = 0 \quad (3.104)$$

onde

$$\begin{aligned} \alpha^\pm &= \frac{1 \pm \alpha}{2} \\ \mu^\pm &= \frac{1 \pm \mu}{2} \end{aligned} \quad (3.105)$$

daí

$$-\alpha k_F^4 + (\alpha + \mu) k_F^2 + (-\mu + V^2) = 0 \quad (3.106)$$

resolvendo a equação (3.106) obtemos

$$k_{F_{1,2}}^2 = \frac{(\alpha + \mu)}{2\alpha} \mp \sqrt{\left[\frac{(\alpha - \mu)}{2\alpha}\right]^2 + \frac{V^2}{\alpha}} \quad (3.107)$$

Agora, podemos determinar qual é o valor da hibridização V que coloca uma das bandas híbridas do sistema acima da energia de Fermi $\omega = 0$, que seria equivalente a esvaziá-la. Para isso, fazemos $k_F = 0$

$$\frac{(\alpha + \mu)}{2\alpha} = \sqrt{\left[\frac{(\alpha - \mu)}{2\alpha}\right]^2 + \frac{V_o^2}{\alpha}} \quad (3.108)$$

daí obtemos

$$V_o = \sqrt{\mu} \quad (3.109)$$

Para o nosso conjunto de parâmetros, $V_o = 0.5477$, enquanto $V_c = 0.3988$, ou seja, $V_c < V_o$ o que implica no fato do sistema mudar de fase antes de uma das bandas esvaziar, provocando uma transição SC-metal e não SC-isolante diretamente. Para $V = V_c$, obtemos $k_{F_1} = 0.6097$ e $k_{F_2} = 1.6517$, lembrando que a hibridização está normalizada por μ_a como podemos ver na figura 3.14 a seguir

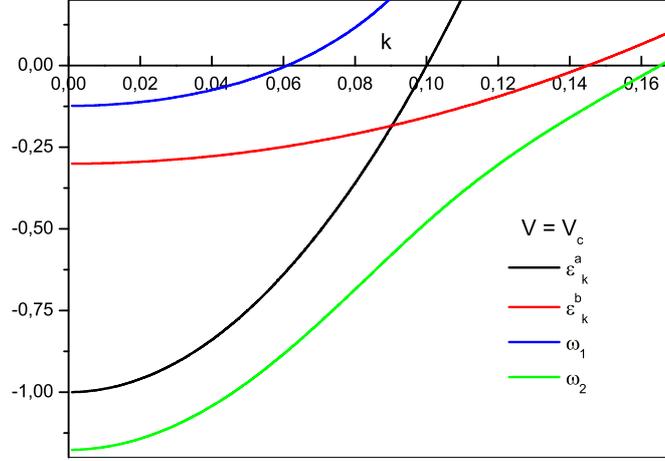


Figura 3.14: Relação de dispersão das bandas híbridas comparadas as inicialmente não hibridizadas, grandezas normalizadas por μ_a .

3.3.3 Cálculo do Calor Específico do Sistema sobre a Trajetória Crítica

Calcularemos o calor específico sobre a trajetória crítica, como descrito no Apêndice B e indicada no diagrama $T_c \times V$ apresentado na figura 3.13, a partir da energia livre do sistema.

A energia livre do sistema pode ser obtida em termos das excitações elementares, sendo dada por

$$F = \frac{\Delta_{ab}^2}{g} + \frac{\Delta^2}{g_b} + \sum_k \left\{ f(\omega_1, \omega_2) - \frac{T}{2} \left[\ln \left(1 + \exp\left(-\frac{\omega_1}{T}\right) \right) \left(1 + \exp\left(\frac{\omega_1}{T}\right) \right) \right. \right. \\ \left. \left. \left(1 + \exp\left(-\frac{\omega_2}{T}\right) \right) \left(1 + \exp\left(\frac{\omega_2}{T}\right) \right) \right] \right\} \quad (3.110)$$

ou ainda

$$F = \frac{\Delta_{ab}^2}{g} + \frac{\Delta^2}{g_b} + \sum_k \left\{ f(\omega_1, \omega_2) - \frac{T}{2} \left[\ln \left[2 \left(1 + \cosh \left(\frac{\omega_1}{T} \right) \right) \right] + \ln \left[2 \left(1 + \cosh \left(\frac{\omega_2}{T} \right) \right) \right] \right] \right\} \quad (3.111)$$

onde $\omega_{1,2}$ são dados pela equação (3.100), $f(\omega_1, \omega_2)$ é uma parcela da energia independente de Δ e Δ_{ab} , sendo irrelevante para o cálculo do calor específico. A equação (3.111) é geral para o sistema com ambas as interações, e será particularizada para o caso intra-banda.

Para determinarmos as funções de gap do sistema devemos minimizar a energia livre em relação a seus parâmetros de ordem. Faremos para o caso assimétrico, ou seja, minimizaremos em relação à Δ_{ab} , portanto,

$$\frac{\partial F}{\partial \Delta_{ab}} = \frac{2\Delta_{ab}}{g} + \sum_k \left\{ -\frac{T}{2} \left[\frac{\frac{1}{T} \frac{\partial \omega_1}{\partial \Delta_{ab}} \sinh\left(\frac{\omega_1}{T}\right)}{\left(1 + \cosh\left(\frac{\omega_1}{T}\right)\right)} + \frac{\frac{1}{T} \frac{\partial \omega_2}{\partial \Delta_{ab}} \sinh\left(\frac{\omega_2}{T}\right)}{\left(1 + \cosh\left(\frac{\omega_2}{T}\right)\right)} \right] \right\} \quad (3.112)$$

mas sabendo que $\frac{\sinh(x)}{(1+\cosh(x))} = \tanh\left(\frac{x}{2}\right)$, podemos reescrever a equação anterior já igualada a zero, como

$$\frac{2\Delta_{ab}}{g} = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \left[\frac{\partial \omega_1}{\partial \Delta_{ab}} \tanh\left(\frac{\omega_1}{2T}\right) + \frac{\partial \omega_2}{\partial \Delta_{ab}} \tanh\left(\frac{\omega_2}{2T}\right) \right] \right\} \quad (3.113)$$

Determinando agora $\frac{\partial \omega_n}{\partial \Delta_{ab}}$, com $n = 1, 2$,

$$\frac{\partial \omega_n}{\partial \Delta_{ab}} = \frac{\partial}{\partial \Delta_{ab}} \left(\sqrt{A_k \pm \sqrt{B_k}} \right) = \frac{1}{2\omega_n} \left(\frac{\partial A_k}{\partial \Delta_{ab}} \pm \frac{1}{2\sqrt{B_k}} \frac{\partial B_k}{\partial \Delta_{ab}} \right) \quad (3.114)$$

sendo

$$\frac{\partial A_k}{\partial \Delta_{ab}} = 2\Delta_{ab} \quad (3.115)$$

$$\frac{\partial B_k}{\partial \Delta_{ab}} = 2\Delta_{ab} \left[\left(\varepsilon_k^a - \varepsilon_k^b \right)^2 + 4V^2 \right] \quad (3.116)$$

substituindo na equação (3.114) obtemos

$$\frac{\partial \omega_n}{\partial \Delta_{ab}} = 4\Delta_{ab} \left(\omega_n^2 - E^2 \right) \quad (3.117)$$

onde

$$\omega_n^2 - E^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\left(\varepsilon_k^a - \varepsilon_k^b \right)^2 + 4V^2 \right) \pm \sqrt{B_k} \right] \quad (3.118)$$

substituindo a equação (3.117) e (3.113) obtemos

$$\frac{1}{g} = \sum_k \sum_{n=1}^2 \frac{(-1)^{n+1}}{2\sqrt{B_k}} \left[\left(\frac{\omega_n^2 - E^2}{2\omega_n} \right) \tanh\left(\frac{\omega_n}{2T}\right) \right] \quad (3.119)$$

que é exatamente a função de gap obtida anteriormente pelo método das funções de Green, nos informando a validade da energia livre utilizada. Conseguimos obter de maneira análoga a equação de gap para o caso simétrico.

Calcularemos agora o calor específico do sistema, dado por

$$C_V(V, T) = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right) \quad (3.120)$$

derivando uma vez a equação (3.111)

$$\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{1}{2} \sum_k \sum_{n=1}^2 \left\{ \ln \left[2 \left(1 + \cosh \left(\frac{\omega_n}{T} \right) \right) \right] - \frac{\omega_n}{T} \tanh \left(\frac{\omega_n}{2T} \right) \right\} \quad (3.121)$$

e derivando novamente, ficamos

$$\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = -\frac{1}{2} \sum_k \sum_{n=1}^2 \frac{\omega_n^2}{2T^3} \operatorname{sech} \left(\frac{\omega_n}{2T} \right) \quad (3.122)$$

portanto, o calor específico será dado por

$$C_V(V, T) = \frac{1}{4} \sum_k \sum_{n=1}^2 \frac{\omega_n^2}{T^2} \operatorname{sech} \left(\frac{\omega_n}{2T} \right) \quad (3.123)$$

ou na forma integral

$$C_V = \pi \sum_{n=1}^2 \frac{1}{T^2} \int_0^{K_{Fn}} \omega_n^2(k) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\omega_n(k)}{2T} \right) k^2 d^3k \quad (3.124)$$

Podemos ver que para $T \rightarrow 0$, temos que $\operatorname{sech}(\infty) \rightarrow 0$, então $C_V(V, T \rightarrow 0) = 0$, como previsto pela 3ª lei da Termodinâmica.

De maneira similar podemos determinar o calor específico a partir da energia interna do sistema, que é dada por

$$E(\Delta, \Delta_{ab}) = \frac{\Delta_{ab}^2}{g} + \frac{\Delta^2}{U} + \sum_k [\omega_1(\Delta = \Delta_{ab} = 0) + \omega_2(\Delta = \Delta_{ab} = 0) - |\omega_1(\Delta, \Delta_{ab})| - |\omega_2(\Delta, \Delta_{ab})|] \quad (3.125)$$

para o caso $\Delta = \Delta_{ab} = 0$

$$\begin{aligned} E(\Delta = \Delta_{ab} = 0) &= \sum_k (\omega_1 + \omega_2 - |\omega_1| - |\omega_2|) \\ &= \sum_k (\omega_1 + \omega_2) - \sum_k (|\omega_1| + |\omega_2|) \\ &= \sum_{k \leq k_F} (\omega_1 + \omega_2) + \sum_{k > k_F} (\omega_1 + \omega_2) - \sum_{k > k_F} (\omega_1 + \omega_2) + \sum_{k \leq k_F} (\omega_1 + \omega_2) \\ &= 2 \sum_{k \leq k_F} (\omega_1 + \omega_2) \end{aligned} \quad (3.126)$$

portanto, levando em consideração a temperatura,

$$E = 2 \int_0^{k_{F1}} d^3k \omega_1(k) f[\omega_1(k), T] + 2 \int_0^{k_{F2}} d^3k \omega_2(k) f[\omega_2(k), T] \quad (3.127)$$

Calculamos então o calor específico diretamente,

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = 2 \int_0^{k_{F1}} d^3k \omega_1(k) \frac{\partial}{\partial T} [f(\omega_1(k), T)] + 2 \int_0^{k_{F2}} d^3k \omega_2(k) \frac{\partial}{\partial T} [f(\omega_2(k), T)] \quad (3.128)$$

derivando

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} [f(\omega_j(k), T)] &= \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{\exp\left(\frac{\omega_j}{T}\right) + 1} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{\omega_j}{2T}\right) \right] \right\} \\ &= \frac{\omega_j}{4T^2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\omega_j}{2T}\right) \end{aligned} \quad (3.129)$$

assim

$$C_v = \pi \sum_{j=1}^2 \frac{1}{T^2} \int_0^{K_{Fj}} \omega_j^2(k) \operatorname{sech}^2\left(\frac{\omega_j(k)}{2T}\right) k^2 d^3k \quad (3.130)$$

que é a mesma expressão obtida derivada da energia livre.

O que nos leva à figura 3.15, que é o gráfico do calor específico ao longo da trajetória crítica ($V = V_c, T$).

Podemos agora, utilizando a expansão de Sommerfeld na ordem mais baixa, determinar a dependência do coeficiente linear γ do calor específico em relação a temperatura, como uma função da hibridização V , como segue

$$E = E_0 + \frac{\pi^2}{6} (T)^2 \rho(\mu_0) \quad (3.131)$$

ou seja,

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\pi^2}{3} T \rho(\mu_0) = \gamma T \quad (3.132)$$

assim, sabemos como determinar analiticamente o coeficiente do termo linear do calor específico,

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} \rho(\mu_0) \quad (3.133)$$

bastando determinar a densidade de estados das bandas híbridas no nível de Fermi.

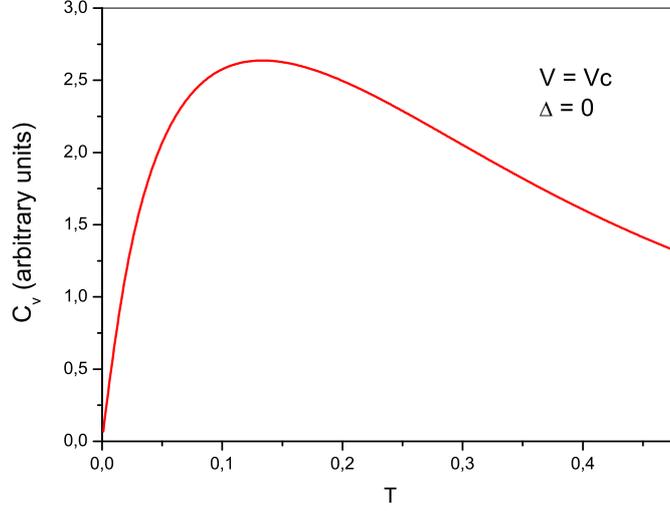


Figura 3.15: Curva do Calor específico versus a temperatura ao longo da trajetória crítica ($V = V_c, T$), onde T e V estão normalizados por μ_a .

A densidade de estados é dada de maneira geral para uma distribuição simétrica de partículas por

$$\rho(\omega) = \frac{\tilde{V}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k^2(\omega)}{\left| \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|} \quad (3.134)$$

onde \tilde{V} é o volume do sistema.

Como temos ω_1 e ω_2 , isto implica que temos ρ_1 e ρ_2 , ficando $\rho = \rho_1 + \rho_2$. Desta maneira

$$\frac{\partial \omega_{1,2}}{\partial k} = 2k \left\{ \alpha^+ \pm \left[\frac{\alpha^- (\alpha^- k^2 - \mu^-)}{\sqrt{(\alpha^- k^2 - \mu^-)^2 + V^2}} \right] \right\} \quad (3.135)$$

porém, como queremos $\rho(\mu_0) \Rightarrow \rho(0)$, ou seja, a densidade de estados calculada em $\omega_{1,2} = 0 \Rightarrow k = k_{F_{1,2}}$, ficaremos

$$\rho_{1,2}(0) = \frac{\tilde{V}}{2\pi^2} \frac{k_{F_{1,2}}}{\left| \alpha^+ \pm \left[\frac{\alpha^- (\alpha^- k_{F_{1,2}}^2 - \mu^-)}{\sqrt{(\alpha^- k_{F_{1,2}}^2 - \mu^-)^2 + V^2}} \right] \right|} \quad (3.136)$$

onde $k_{F_{1,2}}$ já foram calculados anteriormente na equação (3.107) além de α^\pm e μ^\pm serem dados pela equação (3.105). Assim, podemos obter o comportamento de $\gamma(V)$.

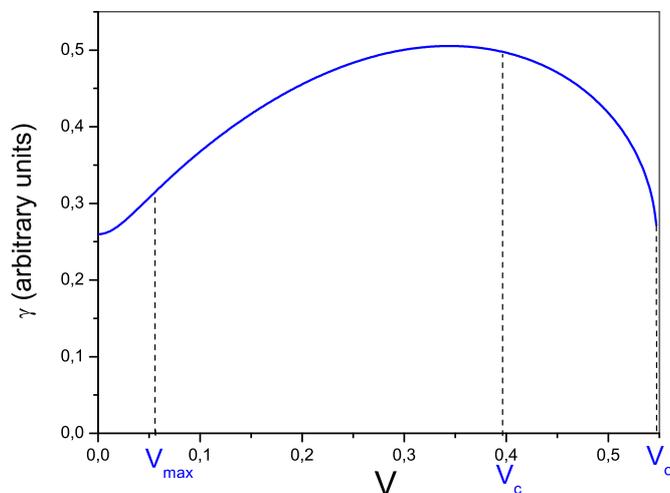


Figura 3.16: Coeficiente da dependência linear com a temperatura da contribuição eletrônica do calor específico na fase normal como uma função da hibridização. Mostramos valores notáveis da hibridização como: V_c hibridização crítica; V_{max} valor de hibridização para o qual T_c é máximo na figura 3.13; $V_0 = \sqrt{\mu}$ onde uma das bandas híbridas fica totalmente acima do nível de Fermi causando uma descontinuidade em γ . Todos os valores de hibridização estão normalizados por μ_a .

A figura 3.16 mostra os valores de γ sobre a transição supercondutora como uma função da hibridização ao longo da linha crítica. É interessante comparar esta com a figura 3.13. Notamos que o valor máximo de T_c ocorre na região do diagrama de fases onde γ cresce com a hibridização V . No valor crítico da hibridização, o coeficiente γ está passando por um largo máximo. Uma vez que γ é finito para $V > V_c$, o PCQS em V_c está associado com uma transição supercondutor-metal normal. Sendo γ proporcional à densidade total de partículas no nível de Fermi, a figura 3.16 nos ajuda a compreender o crescimento inicial de T_c com a hibridização mostrada na figura 3.13. O calor específico aqui determinado foi obtido na fase normal e é devido apenas a contribuição das partículas desemparelhadas das bandas híbridas.

Como foi observado anteriormente, o aumento de T_c para pequenos valores de V é consistente com o comportamento de γ mostrado na figura 3.16. É interessante, no entanto, que a supercondutividade é destruída enquanto ambas as bandas ainda contribuem

para a densidade de estados no nível de Fermi, mostrando que estamos tratando com uma transição de supercondutor para metal normal e não para um estado semicondutor ou isolante.

Pode-se mostrar facilmente que $k_{F_2}^2 - k_{F_1}^2 = 2\sqrt{\left[\frac{(\alpha-\mu)}{2\alpha}\right]^2 + \frac{V^2}{\alpha}}$. Desta expressão podemos observar como que a hibridização aumenta o *mismatch* $\delta k_F = |k_{F_1} - k_{F_2}|$ entre os vetores de Fermi das bandas híbridas. Como já mostrado por Caldas [9], isso pode vir a causar instabilidades supercondutoras às quais, no entanto, sempre ocorrem descontinuamente através de uma transição de fase de primeira ordem. Neste nosso caso a transição supercondutor-normal à $T = 0$ é contínua e associada a um PCQS.

Fica claro que em sistemas multibandas a hibridização pode estar presente mesmo à pressão nula. O ponto chave é que esta pode ser controlada pela pressão aplicada, por forças externas ou por dopagem. Constitui, portanto, um parâmetro de controle nos dando oportunidade para observarmos os efeitos apresentados neste trabalho.

3.4 Caso Geral

Para o caso geral nos limitaremos ao estudo do grau das transições de fase do sistema. Analisando separadamente cada função de gap do sistema tentaremos entender seu comportamento diante da competição entre os dois parâmetros de ordem.

Utilizando as equações originais (3.39) e (3.40) obtidas no fim da primeira seção deste capítulo, no limite de temperatura nula obtemos o seguinte:

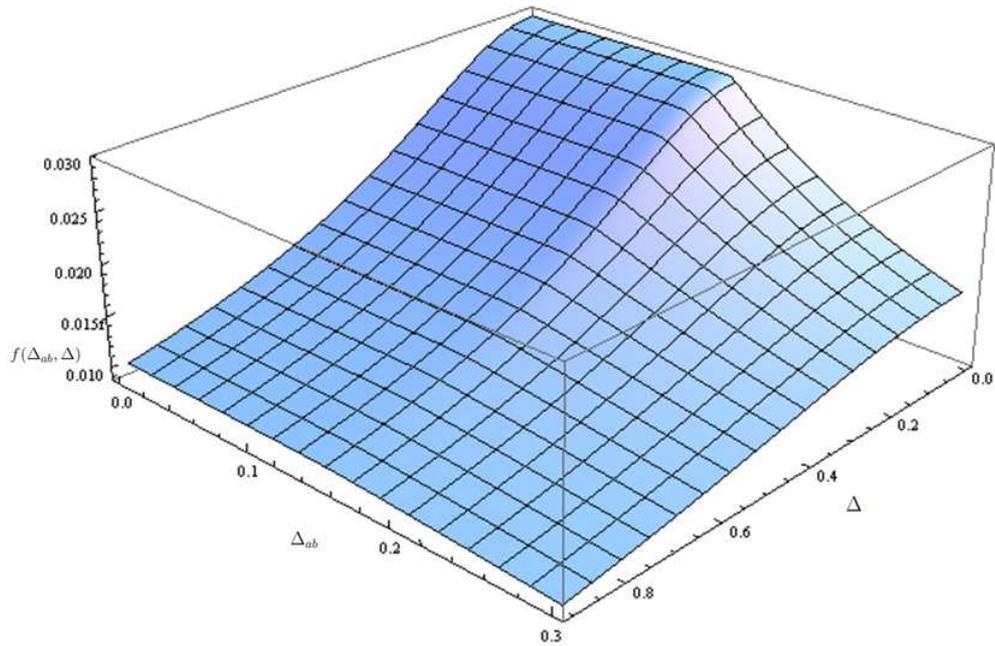


Figura 3.17: Gráfico 3D de $f(\Delta_{ab}, \Delta) \times \Delta_{ab} \times \Delta$ para o valor fixo de hibridização $V = 0.15$. Relembrando que todos os parâmetros estão normalizados por μ_a .

Na figura 3.17 podemos observar que o comportamento característico de uma transição de fase de primeira ordem, que ocorre em um valor não nulo do parâmetro de ordem, para a função de gap assimétrica (figura 3.5) vai sendo destruída conforme a relação entre Δ e Δ_{ab} aumenta mostrando uma mudança na ordem da transição de fase.

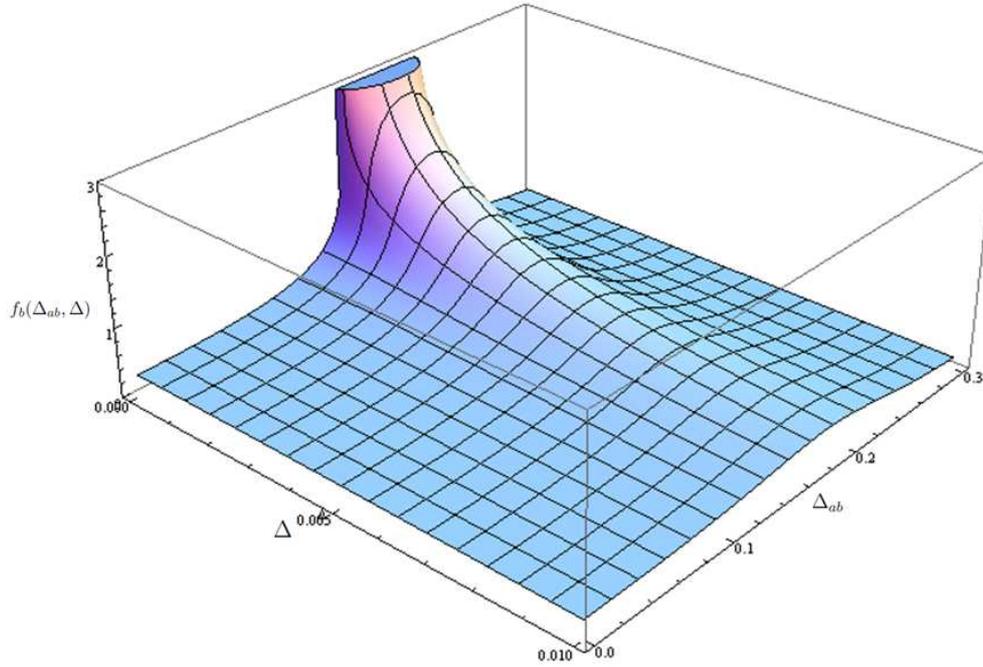


Figura 3.18: Gráfico 3D de $f_b(\Delta_{ab}, \Delta) \times \Delta_{ab} \times \Delta$ para o valor fixo de hibridização $V = 0.15$. Todos os parâmetros estão normalizados por μ_a .

Na figura 3.18 observamos que o comportamento continua característico de segunda ordem, ocorre a transição quando o parâmetro de ordem se anula, tendo valores bem elevados no limite $\Delta_{ab} \simeq V$ e $\Delta \rightarrow 0$, fora deste limite o gap assimétrico pouco influi na função de gap usual.

Podemos concluir então, que para o caso geral as transições de fase do sistema possuem características de segunda ordem, uma vez que para temperatura finita já tínhamos observado que o mesmo ocorre. Ficando bem claro que o domínio sobre o comportamento do sistema fica a cargo do emparelhamento simétrico que é muito mais robusto do que o assimétrico, como já havíamos comentado anteriormente.

Capítulo 4

Fase Supercondutora Inomogênea Induzida por Hibridização

Como foi comentado nos capítulos 2 e 3 em sistemas metálicos multibandas, como compostos intermetálicos e férmions-pesados, elétrons vindos de diferentes orbitais coexistem em torno de uma mesma superfície de Fermi [18, 19], uma vez que estes elétrons possuem diferentes massas efetivas ou ocorrem em diferentes números por átomo e existe uma separação natural dos vetores de onda de Fermi destas quase-partículas. Como consequência, é de se esperar que se possa encontrar a física associada à supercondutividade assimétrica nestes sistemas, mesmo na ausência de um campo magnético externo. Nestes materiais, as funções de onda dos elétrons em diferentes orbitais hibridizam devido ao seu cruzamento (overlap). Em particular, a separação dos vetores de onda de Fermi são afetadas pela hibridização [28]. Foi mostrado em supercondutores multibandas que esta exerce um papel similar ao de um campo magnético externo no estudo da fase FFLO. Porém, neste caso apresenta a vantagem de que, a pressão que induz a fase FFLO não compete com os efeitos orbitais, o que ocorre quando se aplica um campo magnético externo em um supercondutor.

No Capítulo 3, foi investigado a supercondutividade assimétrica em sistemas metálicos multibandas na presença de interações intra e inter-banda [4]. Foram analisados diferentes tipos de estados fundamentais homogêneos, os quais aparecem conforme a hibridização muda. No caso inter-banda, mostramos que quando a hibridização aumenta existe uma transição de fase de primeira ordem do estado BCS [10] para o estado normal. Entre

estes estados, existe uma fase metaestável sem gap com similaridades a fase de Sarma [14], a qual voltou a ser interesse de estudo nos últimos anos [2, 9]. A instabilidade do estado BCS está relacionada ao aparecimento de um modo mole em um vetor de onda característico [4, 9]. Isso sugere que um estado fundamental alternativo gerado pelo aumento da hibridização seja um supercondutor inomogêneo tipo FFLO.

Neste capítulo, consideraremos um sistema metálico de duas bandas, com interações puramente inter-banda, na presença de hibridização e com emparelhamento das quase-partículas tendo momento resultante igual a q [35]. Desta forma, o Hamiltoniano efetivo é dado por:

$$H_{eff} = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^a a_k^\dagger a_k + \epsilon_k^b b_k^\dagger b_k) + \sum_k (\Delta_q a_{k+\frac{q}{2}}^\dagger b_{-k+\frac{q}{2}}^\dagger + \Delta_q^* b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}}) + \sum_k V_k (a_{k+\frac{q}{2}}^\dagger b_{k+\frac{q}{2}} + b_{k+\frac{q}{2}}^\dagger a_{k+\frac{q}{2}}) \quad (4.1)$$

onde o parâmetro de ordem supercondutor inomogêneo agora é expresso por

$$\Delta_q = -g \sum_k \langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle \quad (4.2)$$

com g o parâmetro de interação atrativa. As dispersões eletrônicas são dadas por

$$\epsilon_k^a = k^2 - \mu_a \quad (4.3)$$

$$\epsilon_k^b = \alpha k^2 - \mu_b \quad (4.4)$$

onde $\alpha = \frac{m_a}{m_b} < 1$ é a razão entre as massas.

A fim de obtermos a função de correlação da equação (4.2), utilizaremos mais uma vez o método das funções de Green, descrito no Apêndice A, como foi feito no capítulo anterior. Portanto,

$$\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im} \left[\langle \langle a_{k+\frac{q}{2}}, b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle \rangle \right] \quad (4.5)$$

onde $f(\omega)$ é a função de Fermi.

A equação de movimento do propagador $\langle \langle a_{k+\frac{q}{2}} b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle \rangle$ é dada por,

$$\omega \langle \langle a_{k+\frac{q}{2}}, b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle \rangle = \langle \langle [a_{k+\frac{q}{2}}, H_{eff}], b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle \rangle + \frac{1}{2\pi} \langle \{ a_{k+\frac{q}{2}}, b_{-k+\frac{q}{2}} \} \rangle. \quad (4.6)$$

Desenvolvendo os cálculos de maneira análoga aos feitos no capítulo anterior, conseguimos obter o sistema de equações, em forma matricial, que descreve o problema de interesse, ou seja

$$\begin{pmatrix} (\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^a) & -\Delta_q & -V_k & 0 \\ -\Delta_q^* & (\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^b) & 0 & V_{-k} \\ -V_k & 0 & (\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^b) & \Delta_q \\ 0 & V_{-k} & \Delta_q^* & x(\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^a) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \langle\langle a_{k+\frac{q}{2}}, b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle\rangle \\ \langle\langle b_{-k+\frac{q}{2}}^\dagger, b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle\rangle \\ \langle\langle b_{k+\frac{q}{2}}, b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle\rangle \\ \langle\langle a_{-k+\frac{q}{2}}^\dagger, b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2\pi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Após algumas manipulações, conseguimos obter

$$\langle\langle a_{k+\frac{q}{2}}, b_{-k+\frac{q}{2}} \rangle\rangle = \frac{W_{ab}(\omega)}{W(\omega)} \quad (4.7)$$

onde

$$W_{ab}(\omega) = \frac{\Delta_q}{2\pi} [(\omega + \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^b)(\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^a) - (|\Delta_q|^2 - V_k^2)] \quad (4.8)$$

e

$$\begin{aligned} W(\omega) = & (V_k^2 - |\Delta_q|^2)^2 + (\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^a)(\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^b)(\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^b)(\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^a) \\ & - V_k^2 [(\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^a)(\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^b) + (\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^a)(\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^b)] \\ & - |\Delta_q|^2 [(\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^a)(\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^b) + (\omega + \epsilon_{-k+\frac{q}{2}}^b)(\omega - \epsilon_{k+\frac{q}{2}}^a)]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Os pólos da função de Green, $W(\omega) = 0$, na equação (4.9) nos dão as excitações do sistema. Substituindo as relações de dispersão das bandas

$$\epsilon_{\pm k+\frac{q}{2}}^a = k^2 + \frac{q^2}{4} \pm \vec{k} \cdot \vec{q} - \mu_a \quad (4.10)$$

$$\epsilon_{\pm k+\frac{q}{2}}^b = \alpha k^2 + \alpha \frac{q^2}{4} \pm \alpha \vec{k} \cdot \vec{q} - \mu_b \quad (4.11)$$

na equação (4.9), obtemos uma equação completa de quarto grau para a energia ω das excitações,

$$W(\omega) = \omega^4 + b\omega^3 + c\omega^2 + d\omega + e = 0 \quad (4.12)$$

onde

$$\begin{aligned} b &= -2v_F q X (1 + \alpha) \\ c &= -\left[\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2} + 2(V_k^2 + |\Delta_q|^2) \right] \\ d &= 2v_F q X \left[\epsilon_k^{b2} + \alpha \epsilon_k^{a2} + (1 + \alpha)(V_k^2 + |\Delta_q|^2) \right] \\ e &= \left[\epsilon_k^a \epsilon_k^b - (V_k^2 - |\Delta_q|^2) \right]^2 \\ X &= \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{kq} = \cos \theta \end{aligned}$$

com v_F sendo a velocidade de Fermi, onde também foram desprezados os termos de ordem $O(q^2)$, como feito no tratamento FFLO original.

Com a intenção de resolver esta equação, introduzimos a seguinte mudança de variável,

$$\omega \rightarrow u - \frac{b}{4} = u + v_F q \frac{(1 + \alpha)}{2} \cos \theta \quad (4.13)$$

a qual nos leva a uma forma deprimida da equação de quarto grau

$$u^4 + \beta u^2 + \gamma u + \lambda = 0 \quad (4.14)$$

onde

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{-3b^2}{8} + c = -2(V_k^2 + |\Delta_q|^2) - (\epsilon_k^{a2} + \epsilon_k^{b2}) \\ \gamma &= \frac{b^3}{8} - \frac{bc}{2} + d = -qv_F(1 - \alpha)(\epsilon_k^{a2} - \epsilon_k^{b2}) \cos \theta \\ \lambda &= \frac{-3b^4}{256} + \frac{cb^2}{16} - \frac{bd}{4} + e = (\epsilon_k^a \epsilon_k^b - V_k^2 + |\Delta_q|^2)^2 \end{aligned}$$

todos lineares em q .

Pode-se observar que para o caso $V = 0$, $\alpha = 1$ e $\epsilon_k^a = \epsilon_k^b$, a equação de quarta ordem se reduz ao produto de duas equações de segunda ordem idênticas. Cujas raízes, nos dão as excitações obtidas no problema FFLO usual [3, 16].

Porém, a equação acima continua bastante complicada de se tratar analiticamente. Isto se deve às diferentes massas das quase-partículas ($\alpha \neq 1$) que de maneira conjunta com a mistura entre elas tem um efeito desestabilizante muito forte no estado FFLO.

Uma vez que os efeitos da hibridização agem mais fortemente no ponto de cruzamento das bandas no espaço-k, isto é, $\epsilon_{k_c}^a = \epsilon_{k_c}^b$, podemos progredir analiticamente assumindo o caso de bandas homotéticas, isto é, tomando $\epsilon_k^b = \alpha \epsilon_k^a$, e $\epsilon_k^a = \epsilon_k$. Assim, as bandas se cruzam exatamente em $\epsilon_k^i = 0$. Além disso, consideraremos as massas quase idênticas, ou seja, $\alpha = 1 - \epsilon$, onde $\epsilon \rightarrow 0$, o que nos leva a desprezar os termos $O(\epsilon^2)$. Neste caso, podemos achar a solução da equação (4.14), que é a seguinte:

$$u_{1,2} = \sqrt{\tilde{A}_k \pm \sqrt{\tilde{B}_k}} \quad (4.15)$$

onde

$$\tilde{A}_k = (1 - \epsilon)\epsilon_k^2 + V^2 + \Delta_q^2 \quad (4.16)$$

e

$$\tilde{B}_k = 4V^2[(1 - \epsilon)\epsilon_k^2 + \Delta_q^2] \quad (4.17)$$

que simplificando nos dá

$$u_{1,2} = \xi_k \pm V \quad (4.18)$$

onde

$$\xi_k = \sqrt{(1 - \epsilon)\epsilon_k^2 + \Delta_q^2} \quad (4.19)$$

Assim, voltando à variável original ω pela equação (4.13), obtemos as energias de excitação, que neste caso são dadas por

$$\omega_{1,2}^\pm = u_{1,2}^\pm + \delta\mu \quad (4.20)$$

com

$$\delta\mu = -\frac{b}{4} = v_F q \frac{(1 + \alpha)}{2} \cos \theta \quad (4.21)$$

e

$$u_{1,2}^\pm = \pm u_{1,2}. \quad (4.22)$$

Podemos então calcular a função de correlação dada pela equação (4.5)

$$\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im} \left[\frac{W_{ab}(\omega)}{W(\omega)} \right]. \quad (4.23)$$

Fazendo uma mudança de variável na integral, do tipo $\omega \rightarrow \omega + \delta\mu \Rightarrow d\omega \rightarrow d\omega$, podemos reescrever a equação (4.23) como segue

$$\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = \int d\omega f(\omega + \delta\mu) W_{ab}(\omega + \delta\mu) \text{Im} \left[\frac{1}{W(\omega + \delta\mu)} \right] \quad (4.24)$$

desta forma, reescrevemos $W(\omega)$ como

$$W(\omega + \delta\mu) = (\omega^2 - u_1^2)(\omega^2 - u_2^2). \quad (4.25)$$

Finalmente, obtemos

$$\frac{1}{W(\omega + \delta\mu)} = \frac{1}{8V\xi_k} \left\{ \frac{1}{u_1} \left[\frac{1}{\omega - u_1} - \frac{1}{\omega + u_1} \right] - \frac{1}{u_2} \left[\frac{1}{\omega - u_2} - \frac{1}{\omega + u_2} \right] \right\}. \quad (4.26)$$

Prosseguindo, desenvolveremos $W_{ab}(\omega)$. Da equação (4.8) conseguimos obter, depois de algumas manipulações algébricas, a expressão

$$W_{ab}(\omega + \delta\mu) = \frac{\Delta_q}{2\pi} \left[\omega^2 - \alpha\epsilon_k^2 - \Delta_q^2 + V^2 + (1 - \alpha)\omega\epsilon_k + (1 + \alpha)(\omega + \epsilon_k) \vec{k} \cdot \vec{q} \right]. \quad (4.27)$$

De posse das equações (4.24, 4.26, 4.27), conseguimos obter após utilizar o teorema do salto e algumas manipulações, como mostrado no Apêndice A, que a função de correlação $\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle$ pode ser escrita como

$$\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = G_k(\delta\mu) = \frac{1}{2\pi} \left(G_k^1(\delta\mu) + G_k^2(\delta\mu) + G_k^3(\delta\mu) \right) \quad (4.28)$$

sendo

$$G_k^1(\delta\mu) = \frac{\Delta_q}{4\xi_k} \left\{ 2 - \sum_{\sigma} [f(E_{k\sigma}^1) + f(E_{k\sigma}^2)] \right\}, \quad (4.29)$$

$$G_k^2(\delta\mu) = \frac{-\Delta_q[(1-\alpha)\epsilon_k + 2\alpha \vec{k} \cdot \vec{q}]}{8V\xi_k} \left\{ \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) + f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (4.30)$$

e

$$G_k^3(\delta\mu) = \frac{\Delta_q(1+\alpha)\epsilon_k}{8\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} \left\{ 2 + \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) - f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (4.31)$$

com $E_{k\sigma}^1 = \xi_k + \sigma(V + \delta\mu)$ e $E_{k\sigma}^2 = \xi_k + \sigma(V - \delta\mu)$ com $\sigma = \pm 1$. Consistentemente, desprezamos os termos de ordem $O(q^2)$ e $O(\epsilon^2)$. O desenvolvimento desses cálculos encontra-se no Apêndice D.

4.1 Análise para Temperatura Nula

Quando calculamos a equação de gap à temperatura nula, a função de Fermi pode ser expressa em termos da função degrau θ , o que impõe algumas restrições na soma sobre \vec{k} .

$$\lim_{T \rightarrow 0} f(\omega) = \theta(-\omega) = 1 - \theta(\omega) \quad (4.32)$$

onde

$$\theta(\omega) = \begin{cases} 1, & \omega > 0 \\ 0, & \omega < 0 \end{cases}.$$

Quando as somas são realizadas e a integração angular tomada, a única contribuição que sobra é a que vem da equação (4.29), cálculos no Apêndice D.

Desta forma, substituindo (4.29) na equação (4.2), obtemos

$$\Delta_q = g \sum_k \frac{\Delta_q}{4\xi_k} \left\{ 2 - \sum_{\sigma} [\theta(-E_{k\sigma}^1) + \theta(-E_{k\sigma}^2)] \right\} \quad (4.33)$$

arrumando e escrevendo na forma integral temos

$$-1 + \frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi_k} = \frac{g}{4} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi_k} \left\{ \sum_{\sigma} [\theta(-E_{k\sigma}^1) + \theta(-E_{k\sigma}^2)] \right\} \quad (4.34)$$

para resolvermos esse problema, podemos utilizar a equação de gap da teoria BCS, como segue

$$-1 + \frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi(\Delta_0)} = 0 \quad (4.35)$$

subtraindo a equação (4.35) do termo à esquerda da equação (4.34), temos

$$-1 + \frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi_k} - \underbrace{\left[-1 + \frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi(\Delta_0)} \right]}_{=0} = \frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\xi_k} - \frac{1}{\xi(\Delta_0)} \right] \quad (4.36)$$

ou ainda

$$\frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\xi_k} - \frac{1}{\xi(\Delta_0)} \right] = \frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2}} - \frac{1}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_0^2}} \right]. \quad (4.37)$$

Fazendo a mudança de integração de momento para energia

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \phi(k) \rightarrow \int \rho(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon \quad (4.38)$$

definindo a função L

$$L = \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{\rho(\epsilon) d\epsilon}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta^2}} \simeq \rho \int_0^{v_F\delta} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta^2}} \quad (4.39)$$

onde foi tomada a integral próxima ao nível de Fermi, sendo, portanto, ρ constante nessa região. Introduzimos um *cut-off* ω_D tal que, $\omega_D = v_F\delta$, com v_F sendo a velocidade de Fermi.

Fazendo uma mudança de variável do tipo $y^2 = \alpha\epsilon^2$, conseguimos reescrever a equação (4.38) como

$$L = \frac{\rho}{\sqrt{\alpha}} \int_0^{\sqrt{\alpha}v_F\delta} \frac{dy}{\sqrt{y^2 + \Delta^2}} = \frac{\rho}{\sqrt{\alpha}} \sinh^{-1} \left(\frac{\sqrt{\alpha}v_F\delta}{\Delta} \right) \quad (4.40)$$

no limite de acoplamento fraco, $\lim_{x \rightarrow \infty} \sinh^{-1}(x) = \ln(x)$, resultando

$$L = \frac{\rho}{\sqrt{\alpha}} \ln \left(\frac{\sqrt{\alpha}v_F\delta}{\Delta} \right) \quad (4.41)$$

utilizando o resultado da equação (4.41) nas integrais da equação (4.37) obtemos,

$$-1 + \frac{g}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi_k} = \frac{g\rho}{2\sqrt{\alpha}} \ln \left(\frac{\Delta_0}{\Delta_q} \right) \quad (4.42)$$

Substituindo a equação (4.42) na (4.34) teremos

$$\frac{g\rho}{2\sqrt{\alpha}} \ln \left(\frac{\Delta_0}{\Delta_q} \right) = \frac{g}{4} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi_k} \left\{ \sum_{\sigma} \left[\theta(-E_{k\sigma}^1) + \theta(-E_{k\sigma}^2) \right] \right\}. \quad (4.43)$$

Calcularemos agora, o lado direito desta equação. Considerando, inicialmente, apenas a integral em $\theta(-E_{k\sigma}^1)$ que está no lado direito da equação (4.43), temos

$$R_{1\sigma} = \frac{g}{4} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\xi_k} \theta(-E_{k\sigma}^1) \quad (4.44)$$

pela definição da função degrau, $E_{k\sigma}^1 = \xi_k + \sigma(V + \delta\mu) < 0 \Rightarrow \xi_k < -\sigma(V + \delta\mu)$, mas sendo $\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2} < -\sigma(V + \delta\mu)$, temos que $\epsilon_k < \sqrt{\frac{1}{\alpha} [(V + \delta\mu)^2 - \Delta_q^2]} = x_o$. Assim

$$R_{1\sigma} = \frac{g}{4} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int \frac{k_F^2 dk}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2}} \quad (4.45)$$

discriminando a integral no ângulo sólido e fazendo a mudança de variável $x = \epsilon_k$, ficamos com a equação a seguir

$$R_{1\sigma} = \frac{2g}{4v_F} \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int_0^{x_o} \frac{dx}{\sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}}. \quad (4.46)$$

Fazendo uma nova mudança de variável, $y^2 = \alpha x^2$, ficaremos

$$R_{1\sigma} = \frac{2g}{4v_F} \frac{k_F^2}{(2\pi)^3 \sqrt{\alpha}} \int d\Omega \int_0^{\sqrt{\alpha}x_o} \frac{dy}{\sqrt{y^2 + \Delta_q^2}} \quad (4.47)$$

que é a mesma integral calculada anteriormente, ou seja,

$$R_{1\sigma} = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{(V + \delta\mu)^2 - \Delta_q^2}}{\Delta_q} \right]. \quad (4.48)$$

Analogamente para $\theta(-E_{k\sigma}^2)$, obtemos

$$R_{2\sigma} = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{(V - \delta\mu)^2 - \Delta_q^2}}{\Delta_q} \right] \quad (4.49)$$

e de maneira geral podemos escrever a expressão para o lado direito da equação (4.43) como

$$R = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \sum_{\sigma} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{(V + \sigma\delta\mu)^2 - \Delta_q^2}}{\Delta_q} \right]. \quad (4.50)$$

Como podemos ver, a equação (4.50) apresenta soluções reais apenas para $(V + \sigma\delta\mu)^2 > \Delta_q^2$, sendo $\delta\mu = v_F^* q \cos \theta$ e $v_F^* = \frac{v_F(1+\alpha)}{2}$.

Desenvolvendo separadamente, temos que da equação (4.48) para $\sigma = 1$ ficamos

$$R_1 = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} 2\pi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{(V + v_F^* q \cos \theta)^2 - \Delta_q^2}}{\Delta_q} \right] \quad (4.51)$$

fazendo a mudança de variável $z = -v_F^* q \cos \theta$, podemos reescrever a equação (4.51) na forma

$$R_1 = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{1}{2v_F^* q} \int_{-v_F^* q}^{v_F^* q} dz \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{(V - z)^2 - \Delta_q^2}}{\Delta_q} \right] \quad (4.52)$$

analogamente para $\sigma = -1$

$$R_2 = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{1}{2v_F^* q} \int_{-v_F^* q}^{v_F^* q} dz \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{(V + z)^2 - \Delta_q^2}}{\Delta_q} \right]. \quad (4.53)$$

A fim de resolvermos as integrais, fazemos uma outra mudança de variável $V - z = \Delta_q \cosh \Psi$, assim

$$R_1 = -\frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{\Delta_q}{2v_F^* q} \int_{\Psi_1}^{\Psi_2} \Psi \sinh \Psi d\Psi. \quad (4.54)$$

Resolvendo as integrais (4.53) e (4.54) obtemos

$$R_1 = -\frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{\Delta_q}{2v_F^* q} [G(\Psi_2) - G(\Psi_1)]. \quad (4.55)$$

e

$$R_2 = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{\Delta_q}{2v_F^* q} [G(\Psi_1) - G(\Psi_2)] \quad (4.56)$$

sendo

$$\Psi_{1,2} = \cosh^{-1} \left(\frac{V \pm v_F^* q}{\Delta_q} \right) \quad (4.57)$$

com

$$G(\Psi) = \begin{cases} \Psi \cosh \Psi - \sqrt{\Psi^2 - 1}, & |\Psi| > 1 \\ 0, & |\Psi| \leq 1 \\ -G(-\Psi), & \Psi < 0 \end{cases}$$

o que resulta em

$$R = R_1 + R_2 = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{\Delta_q}{v_F^* q} \left[G\left(\frac{V + v_F^* q}{\Delta_q}\right) - G\left(\frac{V - v_F^* q}{\Delta_q}\right) \right]. \quad (4.58)$$

Utilizando a definição de $G(\Psi)$, obtemos

$$R = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{\Delta_q}{v_F^* q} \left[G\left(\frac{v_F^* q + V}{\Delta_q}\right) + G\left(\frac{v_F^* q - V}{\Delta_q}\right) \right]. \quad (4.59)$$

Finalmente, obtemos substituindo a equação (4.58) na (4.43) a equação de gap do sistema com solução real para temperatura nula que é dada por:

$$\frac{g\rho}{2\sqrt{\alpha}} \ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta_q}\right) = \frac{g\rho}{4\sqrt{\alpha}} \frac{\Delta_q}{v_F^* q} \left[G\left(\frac{v_F^* q + V}{\Delta_q}\right) + G\left(\frac{v_F^* q - V}{\Delta_q}\right) \right] \quad (4.60)$$

ou

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta_q}\right) = \frac{\Delta_q}{2v_F^* q} \left[G\left(\frac{v_F^* q + V}{\Delta_q}\right) + G\left(\frac{v_F^* q - V}{\Delta_q}\right) \right]. \quad (4.61)$$

Note que na equação (4.61), a dependência em α não existe mais explicitamente, aparecendo apenas, pelo menos neste caso $\alpha \simeq 1$, na normalização da velocidade de Fermi.

Para o estado FFLO ser solução é necessário que $\Psi^2 - 1 > 0 \Rightarrow \left(\frac{v_F^* q \pm V}{\Delta_q}\right)^2 > 1$, que pode ser escrito como $\bar{q} = \frac{v_F^* q}{V} > 1$, sendo \bar{q} o vetor de onda reduzido.

Analizando para o caso $G(|\Psi| \leq 1) = 0$, temos da equação (4.61) que

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta_q}\right) = 0 \Rightarrow \Delta_q = \Delta_0 \quad (4.62)$$

o que implica em $\frac{v_F^* q \pm V}{\Delta_0} \leq 1$, que para o limite de igualdade, nos dá

$$\frac{v_F^* q \pm \tilde{V}_1}{\Delta_0} = 1 \Rightarrow \tilde{V}_1(\bar{q}) = \frac{\Delta_0}{\bar{q} + 1} \quad (4.63)$$

como podemos ver, para a solução $V < \tilde{V}_1(\bar{q})$ sempre $\Delta_q = \Delta_0$, ou seja, obtemos o estado BCS. Portanto, a condição necessária para o estado FFLO é $V > \tilde{V}_1(\bar{q})$.

Podemos determinar agora, o valor crítico superior da hibridização para o qual o estado FFLO deixa de existir. Ou seja, determinaremos qual é o valor da hibridização $\tilde{V}_2(\bar{q})$, ao qual abaixo deste o estado FFLO pode ser uma solução da equação de gap (4.61). Para tanto, calcularemos o limite da equação (4.61) para $\Delta_q \rightarrow 0 \Rightarrow V = \tilde{V}_2(\bar{q})$.

Definindo

$$\Gamma(y) = G\left(\frac{a+b}{y}\right) + G\left(\frac{a-b}{y}\right) \quad (4.64)$$

onde $G(\Psi)$ foi definida anteriormente, podemos expandir $\Gamma(y)$ para $y \rightarrow 0$, o que resulta

$$\Gamma(y) = \frac{1}{2a} \left\{ -2a + a \ln \left[\frac{4(a^2 - b^2)}{y^2} \right] + b \ln \left[\frac{a+b}{a-b} \right] \right\}. \quad (4.65)$$

Substituindo a equação (4.65) em (4.61), onde $a = v_F^* q$, $b = V$ e $y = \Delta_q$ e manipulando a solução neste limite, encontramos

$$\tilde{V}_2(\bar{q}) = \frac{\Delta_0 e}{2(\bar{q} + 1)} \left| \frac{\bar{q} + 1}{\bar{q} - 1} \right|^{\frac{\bar{q}-1}{2\bar{q}}} \quad (4.66)$$

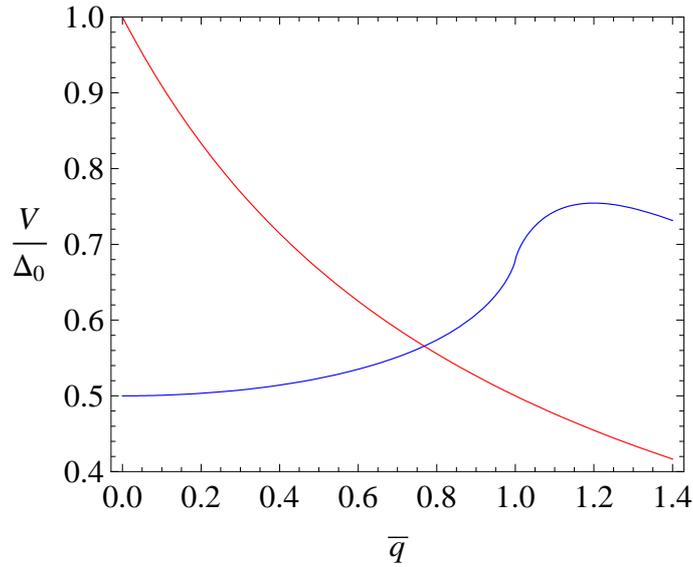


Figura 4.1: Diagrama \tilde{V}_1 (vermelho) e \tilde{V}_2 (azul) como função do vetor de onda reduzido.

Na figura 4.1 vemos o comportamento de $\tilde{V}_1(\bar{q})$ e $\tilde{V}_2(\bar{q})$ como uma função do vetor de onda reduzido. Ficando claro que a existência de um intervalo de valores da hibridização $\tilde{V}_1(\bar{q}) < V < \tilde{V}_2(\bar{q})$ para o qual a fase FFLO pode existir, é nesta condição que o valor de \bar{q} é aproximadamente o valor k_c , devidamente normalizado, que amolece o sistema no caso inter-banda tratado no capítulo 3. O valor máximo de \tilde{V}_2 ocorre para $\bar{q} = \bar{q}_c \simeq 1.2$, o qual substituindo na equação (4.66) nos dá $V_c = \tilde{V}_2(\bar{q}_c) \simeq 0.75\Delta_0$. Este valor de \bar{q} é o que minimiza a energia livre no intervalo de estabilidade da fase FFLO [3, 16].

O valor $\widetilde{V}_1(\bar{q})$ delimita o região de estabilidade da fase FFLO. O verdadeiro valor de hibridização pelo qual a transição de fase de primeira ordem ocorre é obtido considerando a energia dos estados relacionados. O argumento é similar ao de Chandrasekhar e Clogston [15] para obtenção do campo crítico em supercondutores BCS. Considerando as bandas híbridas, no limite em que a diferença entre as massas das bandas é muito pequena, podemos mostrar facilmente que a relação de dispersão é dada por $\omega_{1,2} = (\frac{1+\alpha}{2})\epsilon_k \pm V$. Em contrapartida, a energia de condensação para sistemas de massas diferentes foi obtido por Wu [36]. Essa é similar à de um sistema com partículas idênticas, porém trocando a massa m por $2m_r$, onde a massa reduzida é $m_r = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} = \frac{m_a}{1+\alpha}$ na nossa notação. O potencial químico é também modificado e dado por $\mu^* = \frac{\mu_a + \mu_b}{2} = (\frac{1+\alpha}{2})\mu_a$. Então a dispersão efetiva das partículas é $\epsilon_k^* = (\frac{1+\alpha}{2})\epsilon_k$.

Comparando a energia de condensação das quase-partículas, $E_c = \frac{1}{2}\rho^*\Delta_0^2$, com a energia associada à hibridização, $E_V = \rho^*V^2$, obtemos o valor da hibridização para o qual acima deste a supercondutividade BCS se torna instável.

$$E_c = E_V \Rightarrow \frac{1}{2}\rho^*\Delta_0^2 = \rho^*V_t^2 \quad (4.67)$$

ou seja

$$V_t = \frac{\Delta_0}{\sqrt{2}} \simeq 0.71\Delta_0 \quad (4.68)$$

nestas expressões, ρ^* é a densidade de estados no nível de Fermi das partículas com dispersão $\epsilon_k^* = (\frac{1+\alpha}{2})\epsilon_k$.

Consequentemente, existe uma janela de valores para a hibridização, $0.71\Delta_0 < V < 0.75\Delta_0$ para o qual podemos esperar que a fase FFLO ocorra. Como já comentamos, V_t é o ponto de transição onde ocorre uma transição de fase de primeira ordem do estado BCS para o FFLO e V_c é o ponto crítico quântico (pois estamos em temperatura nula) onde ocorre uma transição de fase de segunda ordem do estado FFLO para o normal. As regiões descritas podem ser representadas de maneira esquemática pela figura 4.2.

Nosso resultado, apresenta similaridades ao caso supercondutor FFLO usual na presença de um campo magnético externo. Isso pôde ser antecipado pela forma da relação de dispersão dada na equação (4.18), onde V entra formalmente como um campo magnético externo. No entanto, a analogia com o estado FFLO usual se limita a isso. As funções de Green no presente caso possuem quatro pólos, no lugar de dois e o numerador da equação (4.24) é muito mais complexo além de incluir uma dependência angular. Analisando diretamente o Hamiltoniano, equação (4.1), V mistura diferentes estados e deste

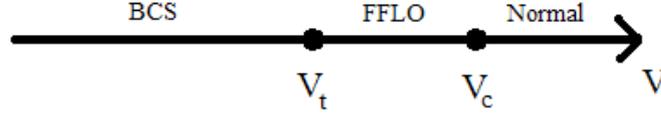


Figura 4.2: Representação esquemática do domínio de cada fase do sistema.

ponto de vista, este atua como um campo transversal e não como um campo longitudinal polarizador. O último apenas faz uma redistribuição dos estados enquanto o anterior muda a natureza do estado quântico. Do ponto de vista experimental, a existência de um estado FFLO deste tipo se mostra bastante interessante, pois, diferentemente do campo magnético que se acopla facilmente à diferentes parâmetros do sistema podendo ter seu efeito mascarado, por exemplo criando vórtices, a hibridização entra de maneira limpa não afetando sistemas que apresentam efeitos de spin-órbita por exemplo, deixando sua detecção muito mais simples e clara.

4.2 Análise para Temperatura Finita

Depois de feita a análise para o limite de temperatura nula, nada mais natural do que estendermos o problema para o caso de temperatura finita a fim de obtermos o diagrama de fases completo do sistema. A equação (4.28) obtida anteriormente e substituída na equação (4.2) é a função de gap geral para o caso FFLO dependente da temperatura, ou seja,

$$\Delta_q = -g \sum_k \langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle \quad (4.69)$$

$$\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = G_k(\delta\mu) = G_k^1(\delta\mu) + G_k^2(\delta\mu) + G_k^3(\delta\mu) \quad (4.70)$$

onde

$$G_k^1(\delta\mu) = \frac{\Delta_q}{4\xi_k} \left\{ 2 - \sum_{\sigma} [f(E_{k\sigma}^1) + f(E_{k\sigma}^2)] \right\}, \quad (4.71)$$

$$G_k^2(\delta\mu) = \frac{-\Delta_q[(1-\alpha)\epsilon_k + 2\alpha\vec{k}\cdot\vec{q}]}{8V\xi_k} \left\{ \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) + f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (4.72)$$

e

$$G_k^3(\delta\mu) = \frac{\Delta_q(1+\alpha)\epsilon_k}{8\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k}\cdot\vec{q} \left\{ 2 + \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) - f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (4.73)$$

onde $E_{k\sigma}^1 = \xi_k + \sigma(V + \delta\mu)$ e $E_{k\sigma}^2 = \xi_k + \sigma(V - \delta\mu)$ com $\sigma = \pm$.

Como pode ser visto, a equação de gap é muito complicada para ser tratada analiticamente. Porém, como estamos interessados no diagrama de fases do sistema, estaremos na região onde o parâmetro de ordem se anula. Podemos então desta forma, fazer uma expansão de Ginzburg-Landau para energia livre e equação de gap em potências do gap do sistema.

Como sabemos do estudo para o caso de temperatura nula, existem pontos de transição de primeira e segunda ordem, isso nos indica a possível existência de um ponto multicrítico no sistema. Na intenção de obtermos uma análise completa é necessária uma expansão até oitava ordem no gap, pois um ponto multicrítico nestas condições é caracterizado por anular simultaneamente os coeficientes de Δ^2 e Δ^4 na expansão da energia livre, o que nos leva à explicação do porque expandir até sexta ordem no gap. Por questões de estabilidade o coeficiente de Δ^6 e Δ^8 devem ser positivos, se isso não ocorrer devemos incluir o termo em Δ^{10} .

Desta forma, a expansão na energia livre nos dá

$$F \simeq \frac{1}{2}\alpha\Delta_q^2 + \frac{1}{4}\beta\Delta_q^4 + \frac{1}{6}\gamma\Delta_q^6 + \frac{1}{8}\lambda\Delta_q^8 \quad (4.74)$$

que minimizando em relação ao gap nos dá a equação de gap

$$\alpha\Delta_q + \beta\Delta_q^3 + \gamma\Delta_q^5 + \lambda\Delta_q^7 = 0 \quad (4.75)$$

Expandindo a equação (4.69) até sétima ordem em Δ_q e comparando com a equação (4.75) podemos determinar os coeficientes α , β , γ e λ . O que nos permite obter a energia livre a menos de uma constante. De posse destes valores, que não explicitarei aqui pois são demasiado grandes, podemos obter a linha de segunda ordem e o ponto multicrítico, faltando apenas determinar a linha de transição de primeira ordem que pode ser obtida igualando as energias livres dos estado FFLO, equação (4.74), com a do estado BCS já

bem conhecida. A linha crítica correspondente ao limite entre as fases inhomogênea FFLO e a normal foi obtida utilizando as informações referentes ao comportamento do expoente crítico tipo campo médio $\psi = \frac{1}{2}$ em torno do ponto crítico quântico supercondutor V_c e o fato das linhas de transição de fase se tangenciarem nos pontos multicríticos. Onde temos na figura 4.3 o diagrama de fase do sistema.

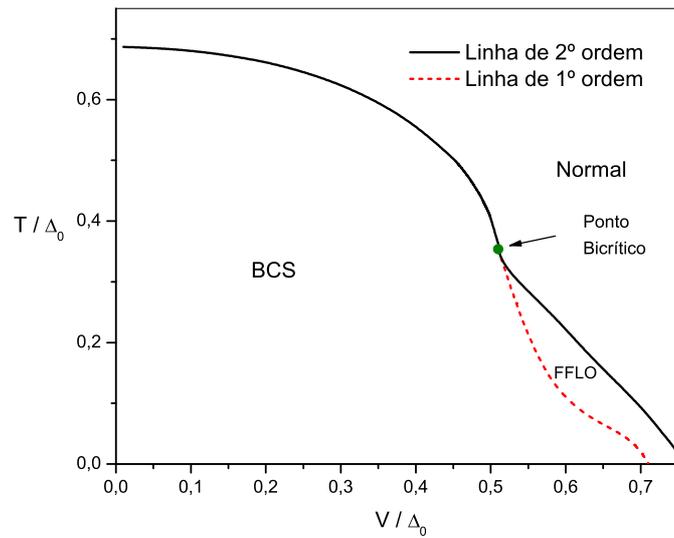


Figura 4.3: Diagrama $\frac{T}{\Delta_0} \times \frac{V}{\Delta_0}$ para um sistema assimétrico na presença de hibridização caracterizando o ponto bicrítico pelo par ordenado $(0.510, 0.354)$.

O diagrama mostrado na figura 4.3 está totalmente de acordo com as previsões feitas para o caso de temperatura nula, que mostrava que a fase FFLO está definida no intervalo $0.71\Delta_0 < V < 0.75\Delta_0$, onde a transição BCS \rightarrow FFLO é de primeira ordem e a FFLO \rightarrow Normal de segunda, podendo agora então caracterizar o ponto multicrítico com um ponto bicrítico por se tratar de um ponto com confluência de duas linhas críticas (segunda ordem).

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho analisamos um sistema de duas bandas com interações atrativas intra e inter-banda e hibridização entre elas, no caso de pares com simetria tipo onda- s numa aproximação de campo médio no regime de acoplamento fraco. Este tratamento, negligencia as flutuações quânticas inerentes ao sistema. Obtivemos as excitações do sistema e as funções de gap associadas aos diferentes parâmetros de ordem. Estudamos o sistema nos casos onde as interações atuam separada e simultaneamente nos regimes de temperatura nula e finita, além de analisarmos a possibilidade da existência de uma fase inhomogênea no caso inter-banda.

Nossa abordagem dá uma descrição adequada dos diagramas de fase de supercondutores multibandas, mas não fornece o comportamento no ponto crítico quântico superconductor associado as flutuações.

Para o caso puro inter-banda à temperatura nula podemos observar uma transição de fase de primeira ordem entre os estados superconductor e normal e uma fase homogênea metaestável com excitações sem gap, sem qualquer indução de uma correlação intra-banda originária da hibridização. Sendo este comportamento alterado para uma transição de segunda ordem na presença de temperatura.

Para o caso puro intra-banda observamos que para temperatura nula, a transição de fase entre os estados superconductor e normal é contínua com o crescimento da hibridização e associada a um ponto crítico quântico superconductor. Obtemos além disso dentro de algumas aproximações, expressões analíticas para a hibridização crítica do sistema. Para temperatura finita, obtivemos o diagrama de fases $T_c \times V$ além do expoente crítico de

deslocamento da transição e o calor específico do sistema sobre a trajetória crítica descrita sobre o ponto crítico quântico.

Observamos, que comparativamente, a interação intra-banda usual é de muito mais fácil detecção que a inter-banda, pois esta ocorre para interações duas ordens de grandeza menores.

Para o caso geral com interações inter e intra-banda mostramos que as transições serão sempre de segunda ordem, devido ao sistema sofrer uma influência muito mais forte das propriedades das interações intra-banda.

Ao analisarmos a possibilidade de uma fase supercondutora inhomogênea induzida por hibridização observamos que nossos resultados apresentam similaridades ao caso supercondutor FFLO, onde a hibridização entra formalmente como um campo magnético externo. Entretanto a hibridização atua como um campo transversal e não como um campo longitudinal polarizador usual como é o caso do campo magnético externo, gerador da fase FFLO original. No nosso caso este "campo transversal" cria uma mudança na natureza do estado quântico não apenas a das quase-partículas. Obtivemos um diagrama de fases geral de $T \times V$, mostrando que todas as transições supercondutoras para a fase normal são de segunda ordem enquanto a BCS-FFLO é de primeira ordem. Salientando que a região para a qual a fase inhomogênea é mais estável fica localizada em uma pequena janela de valores de hibridização e temperatura, mostrando sua possível dificuldade de detecção.

A fase FFLO em sistemas de matéria condensada vem sendo buscada há muito tempo. Neste trabalho apresentamos a possibilidade de obtermos um estado supercondutor inhomogêneo através de aplicação de pressão em supercondutores multibandas. Isso pode ser controlado pela hibridização e, como mostramos, pode oferecer a possibilidade de encontrar novos estados supercondutores inhomogêneos alterando esta através de pressão externa.

Como perspectivas futuras temos que este trabalho nos permite a possibilidade da implementação de um novo estudo levando em consideração as flutuações do sistema, sua possibilidade de expansão para simetria de pares tipo ondas- d , observadas em sistemas de férmions pesados, além do estudo para o limite de acoplamento forte. A possibilidade de comparação dos resultados obtidos neste trabalho com dados experimentais de supercondutores de alta temperatura crítica compostos por MgB_2 que possuem simetria tipo onda- s , além das possíveis motivações experimentais que este apresenta quanto a obtenção

de novos estados supercondutores inomogêneos mediados por pressão.

Apêndice A

Método das Funções de Green

Neste capítulo mostramos de forma sucinta no que consiste basicamente o método das funções de Green que é largamente utilizado em vários campos da física.

Sejam $A(t)$ e $B(t')$ os operadores na representação de Heisenberg, dados por

$$\begin{aligned} A(t) &= \exp(iHt)A(0)\exp(-iHt) \\ B(t') &= \exp(iHt')B(0)\exp(-iHt'), \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

onde usamos $\hbar \equiv 1$. O operador $A(t)$ obedece a equação de Heisenberg

$$i\frac{dA(t)}{dt} = [A(t), H] \quad (\text{A.2})$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema que de maneira geral depende tanto do operador $A(t)$ quanto do $B(t')$.

Podemos então definir as funções de Green dependentes do tempo, que em geral são de três tipos: retardada (r), avançada (a) e causal (c), que são assim denominadas devido a evolução temporal do propagador definido por

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

$$G_{AB}^{(a)}(t, t') = \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle^a = -\theta(t' - t)\langle[A(t), B(t')]_{\eta}\rangle \quad (\text{A.4})$$

$$G_{AB}^{(c)}(t, t') = \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle^c = \langle T_{\eta}A(t)B(t') \rangle \quad (\text{A.5})$$

onde

$$[A(t), B(t')]_{\eta} = A(t)B(t') - \eta B(t')A(t) \quad (\text{A.6})$$

$$T_{\eta}A(t)B(t') = \theta(t - t')A(t)B(t') + \eta\theta(t' - t)B(t')A(t) \quad (\text{A.7})$$

com $\eta = 1$ para bósons e $\eta = -1$ para férmions.

Definindo a função degrau $\theta(t)$ como

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \exp(\epsilon t') \delta(t) dt' \quad (\epsilon \rightarrow +0) \quad (\text{A.8})$$

obtemos

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \delta(t). \quad (\text{A.9})$$

Uma vez definidas todas as relações necessárias, podemos determinar qual é a equação de movimento, na representação de Heisenberg, para as funções de Green definidas acima. Tomando como exemplo a função causal, temos (omitindo o índice)

$$i \frac{d}{dt} G_{AB}(t, t') = i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle \quad (\text{A.10})$$

ou

$$i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle^c = i \frac{d}{dt} \langle \theta(t - t')A(t)B(t') + \eta\theta(t' - t)B(t')A(t) \rangle \quad (\text{A.11})$$

que após derivação obtemos

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle^c &= i \left\langle \frac{d}{dt} \theta(t - t')A(t)B(t') + \theta(t - t') \frac{d}{dt} A(t)B(t') \right. \\ &\quad \left. + \eta \frac{d}{dt} \theta(t' - t)B(t')A(t) + \eta\theta(t' - t)B(t') \frac{d}{dt} A(t) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

ou ainda reescrevendo

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle^c &= i\delta(t - t') \langle A(t)B(t') + \eta B(t')A(t) \rangle \\ &\quad + \langle \theta(t - t')[A(t), H]B(t') + \eta\theta(t' - t)B(t')[A(t), H] \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

usando as equações (A.5) e (A.7) obtemos

$$i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle^c = i\delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle + \langle \langle [A(t), H], B(t') \rangle \rangle \quad (\text{A.14})$$

que representa a equação de movimento no espaço real. Este resultado é geral, valendo para quaisquer das funções de Green definidas anteriormente.

Definindo a transformada de Fourier por

$$G_{AB}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_{AB}(\omega) \exp(-i\omega(t - t')) d\omega \quad (\text{A.15})$$

conseguimos obter da equação (A.14)

$$\omega \langle \langle A, B \rangle \rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \langle [A, B]_{\eta} \rangle + \langle \langle [A, H], B(t') \rangle \rangle_{\omega} \quad (\text{A.16})$$

que é a equação de movimento das funções de Green no espaço dos momentos. Tal equação é utilizada com frequência no decorrer do trabalho.

A transformada inversa da equação (A.15) é dada por

$$G_{AB}(\omega) = \langle \langle A, B \rangle \rangle_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{AB}(t) \exp(i\omega t) dt. \quad (\text{A.17})$$

Calculando as funções de correlação da maneira usual temos

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp(-i\omega(t - t')) d\omega \quad (\text{A.18})$$

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp(\beta\omega) \exp(-i\omega(t - t')) d\omega \quad (\text{A.19})$$

onde

$$I_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{\mu, \nu} \langle \nu | B | \mu \rangle \langle \mu | A | \nu \rangle \exp(-\beta E_{\nu}) \delta(E_{\nu} - E_{\mu} - \omega). \quad (\text{A.20})$$

Para $t = t' = 0$ as equações (A.18, A.19) se reduzem a

$$\langle B(0)A(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) d\omega \quad (\text{A.21})$$

$$\langle A(0)B(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp(\beta\omega) d\omega \quad (\text{A.22})$$

Determinando $G_{AB}^r(\omega)$ (função de Green retardada), por exemplo, em termos das equações anteriores obtemos

$$G_{AB}^r(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega(t - t')) \theta(t - t') \langle A(t)B(t') - \eta B(t')A(t) \rangle \quad (\text{A.23})$$

e após substituição das equações (A.18, A.19) temos

$$G_{AB}^r(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' I_{AB}(\omega') (\exp(\beta\omega') - \eta) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega(t - t')) \theta(t). \quad (\text{A.24})$$

Como

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega(t-t'))\theta(t) = \frac{i}{\omega - \omega' + i\epsilon} \quad (\text{A.25})$$

de maneira análoga determinamos $G_{AB}^a(\omega)$.

Substituindo a equação (A.25) em (A.24) obtemos

$$G_{AB}^{r,a}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\exp(\beta\omega') - \eta \right) \frac{I_{AB}(\omega')d\omega'}{\omega - \omega' \pm i\epsilon} \quad (\text{A.26})$$

que é a representação espectral das funções de Green.

Como as funções $G_{AB}^{r,a}(\omega)$ são analíticas nos semi-planos superior e inferior, respectivamente, podemos considerá-las como uma única função analítica $G_{AB}(\omega)$ possuindo suas singularidades.

Calculando o salto sobre o eixo real desta função dada por

$$G_{AB}(\omega+i\epsilon) - G_{AB}(\omega-i\epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \left(\exp(\beta\omega') - \eta \right) I_{AB}(\omega') \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} - \frac{1}{\omega - \omega' - i\epsilon} \right] \quad (\text{A.27})$$

utilizando a relação

$$\frac{1}{\omega - \omega' \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{\omega - \omega'}\right) \mp i\pi\delta(\omega - \omega') \quad (\text{A.28})$$

reduzimos a equação (A.27) para

$$G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon) = (\exp(\beta\omega) - \eta) I_{AB}(\omega) \quad (\text{A.29})$$

e reescrevendo

$$I_{AB}(\omega) = \frac{1}{\exp(\beta\omega) - \eta} [G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon)]. \quad (\text{A.30})$$

Finalmente, substituindo a equação (A.30) na (A.21) obtemos

$$\langle B(0)A(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\exp(\beta\omega) - \eta} [G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon)] \quad (\text{A.31})$$

que o chamado Teorema do Salto.

Como foi mencionado anteriormente temos que $\eta = \pm 1$, portanto

$$\frac{1}{\exp(\beta\omega) - \eta} = \begin{cases} \eta = 1 \rightarrow & f_{BE}(\omega) \text{ (Distribuição de Bose-Einstein)} \\ \eta = -1 \rightarrow & f_{FD}(\omega) \text{ (Distribuição de Fermi-Dirac)} \end{cases}$$

Como na maioria dos casos $G_{AB}(\omega + i\epsilon) - G_{AB}(\omega - i\epsilon) = \text{Im}(G_{AB}(\omega))$, podemos reescrever a equação (A.31) por

- Para Bósons

$$\langle B(0)A(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_{BE}(\omega) \text{Im}(G_{AB}(\omega)) \quad (\text{A.32})$$

- Para Férmions

$$\langle B(0)A(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_{FD}(\omega) \text{Im}(G_{AB}(\omega)) \quad (\text{A.33})$$

onde

$$G_{AB}(\omega) = \langle \langle A, B \rangle \rangle_{\omega} \quad (\text{A.34})$$

Apêndice B

Conceitos sobre Transições de Fase

A teoria de transição de fase e fenômenos críticos têm origem na década de 60 quando os conceitos básicos de classe de universalidade e escala de funções termodinâmicas foram introduzidos, além dos princípios do procedimento do cálculo associado ao grupo de renormalização. O pioneirismo no aspecto da universalidade em transições de fase se deve a Kadanoff e seus colaboradores [37].

B.1 Transição de Fase Térmica

A transição de fase de um sistema é caracterizada por singularidades nas suas funções termodinâmicas: no caso de sistemas magnéticos a energia livre e suas correspondentes derivadas, associadas a magnetização e susceptibilidade, por exemplo. No caso de sistemas supercondutores, que é o nosso caso, além da energia, a transição de fase é associada ao comportamento do gap supercondutor do sistema.

Podemos estudar esse comportamento das transições de fases de um dado sistema através de um diagrama de fase que delimita a região de existência de cada fase em função da variação dos parâmetros externos, ou através de uma função de estado. A função de estado assume valores diferentes nas diferentes fases e se anula na fase mais desordenada, então esta é denominada parâmetro de ordem.

O parâmetro de ordem é uma quantidade não-nula na fase em que o sistema encontra-se ordenado e nula na fase desordenada. Os parâmetros externos relevantes em que ocorrem as transições de fase de sistemas magnéticos e supercondutores são, de maneira geral,

a temperatura T e o campo magnético uniforme H . Porém, nada impede que outros parâmetros externos sejam relevantes para transição, como mostraremos neste trabalho que é o caso da pressão ou hibridização. Portanto, para $T < T_c$ o sistema está ordenado, próximo de T_c o sistema começa a se desordenar e logo acima de T_c o sistema encontra-se desordenado. Num sistema ferromagnético, a magnetização é o parâmetro de ordem. Num sistema antiferromagnético o parâmetro de ordem é a magnetização de uma dada subrede ou a diferença entre elas. Enquanto isso num sistema supercondutor o parâmetro de ordem é o gap supercondutor do sistema.

Podemos classificar a ordem de uma transição pela ordem mais baixa da derivada da energia livre que apresenta descontinuidade: uma transição de 1ª ordem é caracterizada pela descontinuidade do parâmetro de ordem (primeira derivada da energia livre), caracterizada pela presença de calor latente (em transições térmicas), e uma transição de 2ª ordem vai a zero continuamente quando $T \rightarrow T_c$, onde a aproximação é a esquerda de T_c ($T \rightarrow T_c^-$), porém a derivada segunda da energia livre diverge.

De maneira geral, na vizinhança de uma transição de fase de segunda ordem muitas quantidades físicas divergem com leis de potência, onde se caracterizam os expoentes críticos. O conjunto de expoentes críticos associados a um ponto crítico caracterizam a classe de universalidade da transição.

O ponto crítico é o ponto onde o parâmetro de ordem sofre mudança, se anula para uma nova fase. Um fato relevante é referente a sua nomenclatura: a denominação *ponto crítico* só é dada para aqueles pontos referentes a transições de segunda ordem. Os pontos de transição de primeira ordem são chamados apenas de *ponto de transição*. A medida que este ponto começa a ser alcançado, o sistema simplesmente começa a se ajustar sobre uma escala microscópica. Estes ajustes aparecem em forma de flutuações (flutuações no gap para o caso de sistemas supercondutores) os quais se tornam muito grandes nas proximidades do ponto crítico. Pode ocorrer contudo que o parâmetro de ordem tenda a zero de forma descontínua, não havendo mais ordem de longo alcance. Todavia, haverá não só ordem de curto alcance mas também uma coexistência dinâmica de várias fases. A junção dessas fases no diagrama de fase é dada por um ponto denominado multicrítico. O ponto multicrítico mais comum é o chamado ponto tricrítico, onde sobre este existe a confluência de uma linha contínua ou crítica (segunda ordem) com uma descontínua (primeira ordem). Porém existem outras classificações para pontos multicríticos como é

o caso dos pontos bicríticos, onde sobre ele existe uma confluência de duas linha críticas (que é observado no nosso caso) ou tetracríticos pela confluência de quatro linhas críticas.

B.2 Transição de Fase Quântica

Em 1976, Hertz [38] fez um dos primeiros estudos sobre a influência de efeitos da mecânica quântica em fenômenos críticos. Neste trabalho ele mostrou que se a energia das flutuações quânticas é muito menor que a energia térmica envolvida, um tratamento clássico é apropriado. Mas, se analisamos uma transição à temperatura nula, que ocorre devido a mudança de algum parâmetro, como o campo magnético, dopagem ou a pressão sobre o material, que estão relacionadas diretamente com a intensidade ou a natureza de alguma interação do sistema, não teremos flutuações térmicas envolvidas, de forma que um tratamento baseado simplesmente na estatística clássica se torna inapropriado. A temperaturas muito baixas, ou seja, $k_B T$ muito menor que as energias características do sistema (onde k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura), também espera-se que as flutuações não térmicas tenham um papel importante.

A introdução dos efeitos quânticos não apenas afetam as propriedades de equilíbrio mas leva a dinâmicas muito diferentes das que ocorrem no limite clássico. Isto porque não se pode separar a estática da dinâmica no caso quântico, já que estas estão intimamente ligadas pelo expoente crítico dinâmico z . O expoente crítico z é exclusivo de transições quânticas, uma vez que está associado a divergência temporal presente somente neste caso. Além de influenciar diretamente na dimensão efetiva do sistema, como pode ser vista na chamada relação de hiperescala, obtida da teoria de escala para fenômenos críticos, abaixo

$$2 - \alpha = \nu d_{eff} \tag{B.1}$$

onde $d_{eff} = d + z$, α e ν expoentes críticos relacionados à energia livre e ao comprimento de correlação, respectivamente. Como em teorias clássicas temos esta mesma relação a menos da presença do expoente z , os expoentes críticos de teorias quânticas serão os mesmos de teorias clássicas em $d + z$ dimensões. Além disso, pode-se mostrar que se d_{eff} está acima de uma dimensão crítica, os expoentes passam a assumir valores obtidos pela teoria gaussiana [38].

Uma característica interessante da abordagem da teoria de escala é que podemos determinar o comportamento singular de quantidades físicas de interesse como função da

temperatura sobre o ponto crítico quântico, que nada mais é do que a nomenclatura dada a um ponto crítico em uma transição de fase quântica. Ou seja, sobre uma trajetória crítica a $|g| = 0$, onde $|g|$ é a distância ao ponto crítico quântico. Dada uma quantidade física podemos conhecer a lei de potência com a qual ela diverge e a respectiva função de escala dependente da temperatura. Desta forma encontraremos uma lei de potência que nos diz como esta grandeza diverge com a diminuição da temperatura na trajetória crítica. Apresentamos um resultado utilizando este fato na Seção 3.4 .

Apêndice C

Cálculo das Funções de Correlação

A seguir apresentamos os cálculos das correlações do sistema:

Das equações (3.34) e (3.5) temos

$$\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = \frac{\Delta_{ab}[(\omega + L_k)^2 - J_k^2]}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_1)} - \frac{1}{(\omega - \omega_1)} \right) + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_2)} - \frac{1}{(\omega + \omega_2)} \right) \right] \quad (\text{C.1})$$

e

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im}[\langle\langle a_k b_{-k} \rangle\rangle]. \quad (\text{C.2})$$

Substituindo a equação (C.1) em (C.2) obtemos

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im} \left\{ \frac{\Delta_{ab}[(\omega + L_k)^2 - J_k^2]}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_1)} - \frac{1}{(\omega - \omega_1)} \right) + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_2)} - \frac{1}{(\omega + \omega_2)} \right) \right] \right\} \quad (\text{C.3})$$

ou reescrito na forma

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \int d\omega f(\omega) \frac{\Delta_{ab}[(\omega + L_k)^2 - J_k^2]}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left\{ \frac{1}{2\omega_1} \left[\text{Im} \left(\frac{1}{\omega + \omega_1} \right) - \text{Im} \left(\frac{1}{\omega - \omega_1} \right) \right] + \frac{1}{2\omega_2} \left[\text{Im} \left(\frac{1}{\omega - \omega_2} \right) - \text{Im} \left(\frac{1}{\omega + \omega_2} \right) \right] \right\} \quad (\text{C.4})$$

e como mostrado no Apêndice A, obtemos

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \frac{\Delta_{ab}}{\omega_1^2 - \omega_2^2} \int d\omega f(\omega) [(\omega + L_k)^2 - J_k^2] \cdot \left\{ \frac{1}{2\omega_1} [\delta(\omega + \omega_1)) - \delta(\omega - \omega_1)] \right. \\ \left. + \frac{1}{2\omega_2} [\delta(\omega - \omega_2)) - \delta(\omega + \omega_2)] \right\} \quad (\text{C.5})$$

que após integração

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \frac{\Delta_{ab}}{\omega_1^2 - \omega_2^2} \left\{ \frac{1}{2\omega_1} M_1 + \frac{1}{2\omega_2} M_2 \right\} \quad (\text{C.6})$$

sendo

$$M_1 = f(-\omega_1) [(-\omega_1 + L_k)^2 - J_k^2] - f(\omega_1) [(\omega_1 + L_k)^2 - J_k^2] \quad (\text{C.7})$$

e

$$M_2 = f(\omega_2) [(\omega_2 + L_k)^2 - J_k^2] - f(-\omega_2) [(-\omega_2 + L_k)^2 - J_k^2] \quad (\text{C.8})$$

e definindo

$$\gamma_k^2 = J_k^2 - L_k^2 \quad (\text{C.9})$$

encontramos

$$M_1 = f(-\omega_1) [(\omega_1^2 - \gamma_k^2) - 2\omega_1 L_k] - f(\omega_1) [(\omega_1^2 - \gamma_k^2) + 2\omega_1 L_k] \quad (\text{C.10})$$

ou

$$M_1 = (\omega_1^2 - \gamma_k^2) [f(-\omega_1) - f(\omega_1)] - 2\omega_1 L_k [f(-\omega_1) + f(\omega_1)]. \quad (\text{C.11})$$

Sendo

$$f(-\omega_1) - f(\omega_1) = \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) \quad (\text{C.12})$$

e

$$f(-\omega_1) + f(\omega_1) = 1 \quad (\text{C.13})$$

reescrevemos a equação (C.10) por

$$M_1 = (\omega_1^2 - \gamma_k^2) \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) - 2\omega_1 L_k \quad (\text{C.14})$$

e de forma análoga

$$M_2 = -(\omega_2^2 - \gamma_k^2) \tanh\left(\frac{\beta\omega_2}{2}\right) + 2\omega_2 L_k. \quad (\text{C.15})$$

Portanto, substituindo as equações (C.14) e (C.15) na equação (C.6), obtemos

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \frac{\Delta_{ab}}{\omega_1^2 - \omega_2^2} \left\{ \frac{1}{2\omega_1} (\omega_1^2 - \gamma_k^2) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) - \frac{2\omega_1 L_k}{2\omega_1} - \frac{1}{2\omega_2} (\omega_2^2 - \gamma_k^2) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) + \frac{2\omega_2 L_k}{2\omega_2} \right\} \quad (\text{C.16})$$

e finalmente

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \frac{\Delta_{ab}}{\omega_1^2 - \omega_2^2} \left\{ \frac{1}{2\omega_1} (\omega_1^2 - \gamma_k^2) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) - \frac{1}{2\omega_2} (\omega_2^2 - \gamma_k^2) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) \right\} \quad (\text{C.17})$$

que é a equação (3.36) descrita no Capítulo 3.

Similarmente determinamos a outra correlação. A partir das equações (3.35) e (3.6) temos

$$\langle\langle b_k, b_{-k} \rangle\rangle = \frac{[2V\Delta_{ab}\omega - \Delta(\omega^2 + \epsilon_k^{a2})]}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{(\omega + \omega_1)} - \frac{1}{(\omega - \omega_1)} \right) + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_2)} - \frac{1}{(\omega + \omega_2)} \right) \right] \quad (\text{C.18})$$

e

$$\langle b_{-k} b_k \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im}[\langle\langle b_k b_{-k} \rangle\rangle] \quad (\text{C.19})$$

após algumas manipulações algébricas obtemos

$$\langle b_{-k} b_k \rangle = \frac{-1}{\omega_1^2 - \omega_2^2} \left\{ \frac{1}{2\omega_1} \left[-2V\Delta_{ab}\omega_1 - \Delta(\omega_1^2 - \epsilon_k^{a2}) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) \right] + \frac{1}{2\omega_2} \left[2V\Delta_{ab}\omega_2 + \Delta(\omega_2^2 - \epsilon_k^{a2}) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) \right] \right\} \quad (\text{C.20})$$

e simplificando

$$\langle b_{-k}, b_k \rangle = \frac{\Delta}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \cdot \left[\left(\frac{\omega_1^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_1} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) - \left(\frac{\omega_2^2 - \epsilon_k^{a2}}{2\omega_2} \right) \tanh \left(\frac{\beta\omega_2}{2} \right) \right], \quad (\text{C.21})$$

que é a equação (3.38) descrita no Capítulo 3.

Apêndice D

Cálculos da Fase Inomogênea

D.1 Cálculo das Parcelas da Correlação Geral

Nesta seção mostramos os cálculos para obtenção da correlação $\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle$ dada pela equação (4.28).

Definimos

$$\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = \int d\omega f(\omega + \delta\mu) W_{ab}(\omega + \delta\mu) \text{Im} \left[\frac{1}{W(\omega + \delta\mu)} \right] \quad (\text{D.1})$$

onde

$$\frac{1}{W(\omega + \delta\mu)} = \frac{1}{8V\xi_k} \left\{ \frac{1}{u_1} \left[\frac{1}{\omega - u_1} - \frac{1}{\omega + u_1} \right] - \frac{1}{u_2} \left[\frac{1}{\omega - u_2} - \frac{1}{\omega + u_2} \right] \right\} \quad (\text{D.2})$$

e

$$W_{ab}(\omega + \delta\mu) = \frac{\Delta_q}{2\pi} \left[\omega^2 - \alpha\epsilon_k^2 - \Delta_q^2 + V^2 + (1 - \alpha)\omega\epsilon_k + (1 + \alpha)(\omega + \epsilon_k) \vec{k} \cdot \vec{q} \right]. \quad (\text{D.3})$$

Considerando

$$W_{ab}^1(\omega) = \frac{\Delta_q}{2\pi} \left[\omega^2 - \alpha\epsilon_k^2 - \Delta_q^2 + V^2 \right] \quad (\text{D.4})$$

$$W_{ab}^2(\omega) = \frac{\Delta_q}{2\pi} \left[(1 - \alpha)\omega\epsilon_k \right] \quad (\text{D.5})$$

$$W_{ab}^3(\omega) = \frac{\Delta_q}{2\pi} \left[(1 + \alpha)(\omega + \epsilon_k) \vec{k} \cdot \vec{q} \right] \quad (\text{D.6})$$

podemos redefinir a equação (D.1) como

$$\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = G_k(\delta\mu) = \frac{1}{2\pi} \left(G_k^1(\delta\mu) + G_k^2(\delta\mu) + G_k^3(\delta\mu) \right) \quad (\text{D.7})$$

onde

$$G_k^i(\delta\mu) = \int d\omega f(\omega + \delta\mu) W_{ab}^i(\omega) \text{Im} \left[\frac{1}{W(\omega + \delta\mu)} \right] \quad (\text{D.8})$$

com $i = 1, 2, 3$.

Vejamos o primeiro caso: $i=1$.

Temos

$$G_k^1(\delta\mu) = \int d\omega f(\omega + \delta\mu) W_{ab}^1(\omega) \text{Im} \left[\frac{1}{W(\omega + \delta\mu)} \right] \quad (\text{D.9})$$

segue que

$$G_k^1(\delta\mu) = \frac{1}{8V\xi_k} \int d\omega \left[\frac{1}{u_1} \left(\frac{1}{\omega - u_1} - \frac{1}{\omega + u_1} \right) - \frac{1}{u_2} \left(\frac{1}{\omega - u_2} - \frac{1}{\omega + u_2} \right) \right] f(\omega + \delta\mu) W_{ab}^1(\omega) \quad (\text{D.10})$$

o que resulta

$$G_k^1(\delta\mu) = \frac{1}{8V\xi_k} \int d\omega \left[\frac{1}{u_1} \left(\delta(\omega - u_1) - \delta(\omega + u_1) \right) - \frac{1}{u_2} \left(\delta(\omega - u_2) - \delta(\omega + u_2) \right) \right] f(\omega + \delta\mu) W_{ab}^1(\omega). \quad (\text{D.11})$$

Integrando obtemos

$$G_k^1(\delta\mu) = \frac{1}{8V\xi_k} \left\{ \frac{W_{ab}^1(u_1)}{u_1} \left[f(u_1 + \delta\mu) - f(-(u_1 - \delta\mu)) \right] - \frac{W_{ab}^1(u_2)}{u_2} \left[f(u_2 + \delta\mu) - f(-(u_2 - \delta\mu)) \right] \right\} \quad (\text{D.12})$$

e desenvolvendo $W_{ab}^1(u_1)$, temos

$$W_{ab}^1(u_1) = \frac{\Delta_q}{2\pi} \left[u_1^2 - \underbrace{(\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2)}_{\xi_k^2} - V^2 \right]. \quad (\text{D.13})$$

Sabendo que $u_{1,2} = \xi_k \pm V$, temos que $u_1 u_2 = \xi_k^2 - V^2$ e $u_1 - u_2 = -2V$, o que nos permite reescrever a equação anterior como

$$W_{ab}^1(u_1) = -2\Delta_q u_1 V. \quad (\text{D.14})$$

Analogamente

$$W_{ab}^2(u_1) = 2\Delta_q u_2 V \quad (\text{D.15})$$

substituindo as equações (D.14, D.15) na equação (D.12) e lembrando que

$$\delta\mu = -\frac{b}{4} = v_F q \frac{(1 + \alpha)}{2} \cos \theta = \frac{(2 + \varepsilon)}{2} k q \cos \theta \simeq k q \cos \theta = \vec{k} \cdot \vec{q} \quad (\text{D.16})$$

obtemos

$$G_k^1(\delta\mu) = \frac{\Delta_q}{4\xi_k} \left\{ 2 - \left[f(u_1 + \vec{k} \cdot \vec{q}) + f(u_2 + \vec{k} \cdot \vec{q}) + f(u_1 - \vec{k} \cdot \vec{q}) + f(u_2 - \vec{k} \cdot \vec{q}) \right] \right\} \quad (\text{D.17})$$

que resulta na equação (4.29)

$$G_k^1(\delta\mu) = \frac{\Delta_q}{4\xi_k} \left\{ 2 - \sum_{\sigma} [f(E_{k\sigma}^1) + f(E_{k\sigma}^2)] \right\}, \quad (\text{D.18})$$

onde $E_{k\sigma}^1 = \xi_k + \sigma(V + \delta\mu)$ e $E_{k\sigma}^2 = \xi_k + \sigma(V - \delta\mu)$ com $\sigma = \pm$.

Similarmente podemos desenvolver os cálculos para $W_{ab}^2(\omega)$ e $W_{ab}^3(\omega)$, obtendo as equações abaixo já apresentadas no corpo principal do trabalho

$$G_k^2(\delta\mu) = \frac{-\Delta_q[(1-\alpha)\epsilon_k + 2\alpha\vec{k} \cdot \vec{q}]}{8V\xi_k} \left\{ \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) + f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (\text{D.19})$$

e

$$G_k^3(\delta\mu) = \frac{\Delta_q(1+\alpha)\epsilon_k}{8\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} \left\{ 2 + \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) - f(E_{k-}^j)] \right\}. \quad (\text{D.20})$$

D.2 Cálculo das Integrais para Temperatura Nula

Como foi comentado na seção 4.1 a única parcela da correlação $\langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle$ que não se anula é a dada por $G_k^1(\delta\mu)$.

Nesta seção, mostramos o desenvolvimento das integrais dos termos restantes e como estes se anulam.

Por definição

$$\Delta_q = -g \sum_k \langle b_{-k+\frac{q}{2}} a_{k+\frac{q}{2}} \rangle = -g \sum_k G_k(\delta\mu) = -\frac{g}{2\pi} \sum_k \left(G_k^1(\delta\mu) + G_k^2(\delta\mu) + G_k^3(\delta\mu) \right). \quad (\text{D.21})$$

Considerando

$$\Delta_q = -\frac{g}{2\pi} \left(\Delta^{(1)} + \Delta^{(2)} + \Delta^{(3)} \right) \quad (\text{D.22})$$

onde

$$\Delta^{(i)} = \sum_k G_k^i(\delta\mu) \quad (\text{D.23})$$

com $i = 1, 2, 3$.

Com esta definição, vejamos a análise a seguir:

- Analisando $\Delta^{(2)}$

Temos

$$\Delta^{(2)} = \sum_k G_k^2(\delta\mu) = \sum_k \frac{-\Delta_q[(1-\alpha)\epsilon_k + 2\alpha \vec{k} \cdot \vec{q}]}{8V\xi_k} \left\{ \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) + f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (\text{D.24})$$

dividindo em duas parcelas obtemos

$$\Delta_A^{(2)} = -\frac{\Delta_q}{8V} \sum_{j=1,2} \sum_{\sigma=\pm} \sum_k (-1)^{j-1} \frac{(1-\alpha)\epsilon_k}{\xi_k} f(E_{k\sigma}^j) \quad (\text{D.25})$$

ou ainda

$$\Delta_A^{(2)} = -(1-\alpha) \frac{\Delta_q}{8V} \sum_{j=1,2} \sum_{\sigma=\pm} (-1)^{j-1} \Psi_{A,j,\sigma}^{(2)} \quad (\text{D.26})$$

onde

$$\Psi_{A,j,\sigma}^{(2)} = \sum_k \frac{\epsilon_k}{\xi_k} f(E_{k\sigma}^j) \quad (\text{D.27})$$

e

$$\Delta_B^{(2)} = -\frac{\Delta_q}{8V} \sum_{j=1,2} \sum_{\sigma=\pm} \sum_k (-1)^{j-1} \frac{2\alpha \vec{k} \cdot \vec{q}}{\xi_k} f(E_{k\sigma}^j) \quad (\text{D.28})$$

que pode ser reescrito como

$$\Delta_B^{(2)} = -\frac{\alpha\Delta_q}{4V} \sum_{j=1,2} \sum_{\sigma=\pm} (-1)^{j-1} \Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} \quad (\text{D.29})$$

onde

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} = \sum_k \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{\xi_k} f(E_{k\sigma}^j) \quad (\text{D.30})$$

onde $\Delta^{(2)} = \Delta_A^{(2)} + \Delta_B^{(2)}$.

Como já foi comentado no texto principal, para temperatura nula a função de Fermi pode ser reescrita como uma função de Heaviside (função degrau), $f(E_{k\sigma}^j) \rightarrow \theta(-E_{k\sigma}^j)$. Desta forma iremos tratar separadamente cada caso.

Começando com $\Psi_{A,j,\sigma}^{(2)}$, temos já substituindo o somatório por uma integral

$$\Psi_{A,j,\sigma}^{(2)} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\epsilon_k}{\xi_k} \theta(-E_{k\sigma}^j) \quad (\text{D.31})$$

pela definição da função degrau, $E_{k\sigma}^j = \xi_k + \sigma(V \pm \delta\mu) < 0 \Rightarrow \xi_k < -\sigma(V \pm \delta\mu)$, mas sendo $\xi_k = \sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2} < -\sigma(V \pm \delta\mu)$, portanto

$$\Psi_{A,j,\sigma}^{(2)} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2}} = \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int \frac{dk \epsilon_k}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2}}. \quad (\text{D.32})$$

Denotando $x = \epsilon_k = v_F(k - k_F) = v_F\delta \Rightarrow dx = v_F dk$

$$\Psi_{A,j,\sigma}^{(2)} = \frac{k_F^2}{v_F(2\pi)^3} \int d\Omega \underbrace{\int_{-v_F\delta}^{v_F\delta} \frac{xdx}{\sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}}}_{=0} = 0 \quad (\text{D.33})$$

anula-se pois é uma integral ímpar em limites simétricos. O que significa que $\Delta_A^{(2)} = 0$.

Vejamos agora a outra parcela,

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} = \sum_k \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{\xi_k} \theta(-E_{k\sigma}^j) \quad (\text{D.34})$$

da mesma forma que no caso anterior $\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2} < -\sigma(V \pm \delta\mu)$, que manipulando obtemos

$$\epsilon_k < \sqrt{\frac{1}{\alpha} [(V \pm \delta\mu)^2 - \Delta_q^2]} = x_o^\pm \quad (\text{D.35})$$

que independe de σ . Daí,

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} = \frac{k_F^2 q}{(2\pi)^3} \int d\Omega \cos\theta \int \frac{kdk}{\sqrt{\alpha\epsilon_k^2 + \Delta_q^2}}. \quad (\text{D.36})$$

Tomando $x = \epsilon_k = v_F(k - k_F) = v_F\delta \Rightarrow dx = v_F dk$, podemos reescrever a equação acima como

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} = \frac{k_F^2 q}{v_F(2\pi)^3} \int d\Omega \cos\theta \int \frac{dx(k_F + \frac{x}{v_F})}{\sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}} \quad (\text{D.37})$$

o que dá

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} = \frac{k_F^2 q}{v_F(2\pi)^3} \int d\Omega \cos\theta \left[k_F \int \frac{dx}{\sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}} + \frac{1}{v_F} \underbrace{\int \frac{xdx}{\sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}}}_{=0} \right] \quad (\text{D.38})$$

onde a integral se anula exatamente como no caso anterior, restando

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} = \frac{k_F^3 q}{v_F(2\pi)^3} \int d\Omega \cos\theta \int \frac{dx}{\sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}} \quad (\text{D.39})$$

que é a mesma integral desenvolvida na equação (4.46) que resulta

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(2)} = \frac{k_F^3 q}{v_F(2\pi)^3} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{(V + v_F^* q \cos\theta)^2 - \Delta_q^2}}{\Delta_q} \right] \quad (\text{D.40})$$

que independe de j e σ , resultando diretamente em $\Delta_B^{(2)} = C(\Psi_B^{(2)} - \Psi_B^{(2)}) = 0$, com C constante. Isto implica que

$$\Delta^{(2)} = \Delta_A^{(2)} + \Delta_B^{(2)} = 0 \quad (\text{D.41})$$

Vejamos agora o próximo termo:

- Analisando $\Delta^{(3)}$

Temos

$$\Delta^{(3)} = \sum_k G_k^3(\delta\mu) = \sum_k \frac{\Delta_q(1+\alpha)\epsilon_k}{8\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} \left\{ 2 + \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) - f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (\text{D.42})$$

que pode ser dividido como no caso anterior em duas parcelas, tal que $\Delta^{(3)} = \Delta_A^{(3)} + \Delta_B^{(3)}$, onde

$$\Delta_A^{(3)} = \frac{\Delta_q(1+\alpha)}{4} \sum_k \frac{\epsilon_k}{\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} = \frac{\Delta_q(1+\alpha)}{4} \Psi_A^{(3)} \quad (\text{D.43})$$

onde

$$\Psi_A^{(3)} = \sum_k \frac{\epsilon_k}{\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} \quad (\text{D.44})$$

e

$$\Delta_B^{(3)} = \frac{\Delta_q(1+\alpha)}{8} \sum_k \frac{\epsilon_k}{\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} \left\{ \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} [f(E_{k+}^j) - f(E_{k-}^j)] \right\} \quad (\text{D.45})$$

ou ainda

$$\Delta_B^{(3)} = \frac{\Delta_q(1+\alpha)}{8} \sum_{j=1,2} (-1)^{j-1} \sum_{\sigma=\pm} \sigma \Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} \quad (\text{D.46})$$

onde

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \sum_k \frac{\epsilon_k}{\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} f(E_{k\sigma}^j). \quad (\text{D.47})$$

Iniciando com $\Psi_A^{(3)}$ e já transformando o somatório em integral, temos

$$\Psi_A^{(3)} = \int \frac{\epsilon_k d^3k}{\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} \quad (\text{D.48})$$

organizando os termos temos

$$\Psi_A^{(3)} = q \underbrace{\int d\Omega \cos\theta}_{=0} \int \frac{k \epsilon_k d^3k}{\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} = 0 \quad (\text{D.49})$$

que se anula por ortogonalidade. Segue então que $\Delta_A^{(3)} = 0$.

Passando para a próxima parcela, já fazendo o limite de temperatura nula e transformando a soma em uma integral, obtemos

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \int \frac{\epsilon_k d^3k}{\xi_k(\xi_k^2 - V^2)} \vec{k} \cdot \vec{q} \theta(-E_{k\sigma}^j) \quad (\text{D.50})$$

assim como nos casos anteriores $\epsilon_k < \sqrt{\frac{1}{\alpha} [(V \pm \delta\mu)^2 - \Delta_q^2]} = x_o^\pm$, desenvolvendo

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = k_F^2 q \int d\Omega \cos \theta \int \frac{\epsilon_k k dk}{(\alpha \epsilon_k^2 + \Delta_q^2 - V^2) \sqrt{\alpha \epsilon_k^2 + \Delta_q^2}} \quad (\text{D.51})$$

e denotando $x = \epsilon_k = v_F(k - k_F) = v_F \delta \Rightarrow dx = v_F dk$, podemos reescrever a equação acima como

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \frac{k_F^2 q}{v_F} \int d\Omega \cos \theta \int \frac{x(\frac{x}{v_F} + k_F) dx}{(\alpha x^2 + \Delta_q^2 - V^2) \sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}} \quad (\text{D.52})$$

e finalmente

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \frac{k_F^2 q}{v_F} \int d\Omega \cos \theta \left[\frac{1}{v_F} \int_{-v_F \delta}^{v_F \delta} \frac{x^2 dx}{(\alpha x^2 + \Delta_q^2 - V^2) \sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}} + k_F \underbrace{\int_{-v_F \delta}^{v_F \delta} \frac{x dx}{(\alpha x^2 + \Delta_q^2 - V^2) \sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}}}_{=0} \right]. \quad (\text{D.53})$$

A segunda integral se anula pois se trata de uma integral ímpar com limites simétricos. Podemos reescrever a primeira integral, por ser uma integral par, como segue

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \frac{2k_F^2 q}{v_F^2} \int d\Omega \cos \theta \int_0^{v_F \delta} \frac{x^2 dx}{(\alpha x^2 + \Delta_q^2 - V^2) \sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}} \quad (\text{D.54})$$

ou ainda, para o limite imposto pela condição da função degrau, obtemos

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \frac{2k_F^2 q}{v_F^2} \int d\Omega \cos \theta \int_0^{x_o^\pm} \frac{x^2 dx}{(\alpha x^2 + \Delta_q^2 - V^2) \sqrt{\alpha x^2 + \Delta_q^2}}. \quad (\text{D.55})$$

Fazendo a mudança de variável $x = \frac{\Delta_q}{\sqrt{\alpha}} \tan \gamma \Rightarrow \frac{\Delta_q}{\sqrt{\alpha}} \sec^2 \gamma$, obtemos que

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \frac{2\Delta_q k_F^2 q}{\alpha \sqrt{\alpha} v_F^2} \int d\Omega \cos \theta \int_{\gamma_0}^{\gamma_1} \frac{\tan^2 \gamma \sec \gamma d\gamma}{\Delta_q^2 \sec^2 \gamma - V^2} \quad (\text{D.56})$$

e fazendo mais uma mudança de variável $y = \sec \gamma \Rightarrow dy = \sec \gamma \tan \gamma d\gamma$. Assim

$$\Psi_{B,j,\sigma}^{(3)} = \frac{2\Delta_q k_F^2 q}{\alpha \sqrt{\alpha} v_F^2} \int d\Omega \cos \theta \underbrace{\int_{y_0}^{y_1} \frac{dy \sqrt{y^2 - 1}}{\Delta_q^2 y^2 - V^2}}_{=\Gamma(y_1) - \Gamma(y_0)} \quad (\text{D.57})$$

onde $y_0 = 1$ e $y_1 = \sec \left[\arctan \left(\frac{x_o \sqrt{\alpha}}{\Delta_q} \right) \right]$ sendo

$$y_1 = \begin{cases} y_1^+ = y_1(x_o^+), & j = 1 \\ y_1^- = y_1(x_o^-), & j = 2 \end{cases}$$

que independem de σ . De forma que ao substituirmos a equação (D.57) na (D.46), temos $\Delta_B^{(3)} = C(\Psi_{B,j}^{(3)} - \Psi_{B,j}^{(3)}) = 0$.

Isto implica no resultado final

$$\Delta^{(3)} = \Delta_A^{(3)} + \Delta_B^{(3)} = 0 \quad (\text{D.58})$$

Referências Bibliográficas

- [1] Para uma revisão, ver *Nature* (London) **416**, 205 (2002).
- [2] A. Sedrakian, J. W. Clark e M. Alford, *Pairing in Fermionic Systems*, editado por World Scientific, Singapore (2006).
- [3] R. Casalbuoni e G. Nardulli, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 263 (2004).
- [4] M. A. Continentino e I. T. Padilha, *J. of Phys. Cond. Matter* **20**, 095216 (2008).
- [5] A. I. Larkin e Yu N. Ovchinnikov, *Sov. Phys. JETP* **20**, 762 (1965).
- [6] P. Fulde e R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964).
- [7] W. V. Liu e F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047002 (2003).
- [8] M. M. Forbes, E. Gubankova, W. V. Liu e F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 017001 (2005).
- [9] P. F. Bedaque, H. Caldas e G. Rupak, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 247002 (2003); H. Caldas, *Phys. Rev. A* **69**, 063602 (2004).
- [10] J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [11] S. M. Ramos et. al., submetido ao *Phys. Rev. Lett.*.
- [12] H. Suhl, B. T. Matthias e L. R. Walker *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
- [13] N. N. Bogoliubov, *J. Exptl. Theoret. Phys. U.S.S.R.* **35**, 65 (1958).
- [14] G. Sarma, *J. Phys. Chem. Solids* **24**, 1029 (1963).

- [15] B. S. Cherasekar, *Appl. Phys. Lett.* **1**, 7 (1962).
A. M. Clogston, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 266 (1962).
- [16] S. Takada e T. Izuyama *Prog. Theor. Phys.* **41**, 635 (1969).
- [17] L. Mathey, S.-W. Tsai e A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 030601 (2006).
- [18] S. Bud'ko, R. H. T. Wilke, M. Angst e P. C. Canfield, *Physica C* **420**, 83 (2005).
- [19] A. Bianchi, R. Movshovich, I. Vekhter, P. G. Pagliuso, e J. L. Sarrao, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 257001 (2003).
- [20] R. Ramazashvili e P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3752 (1997).
- [21] H. Suhl, et al., *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **29**, 1 (1963).
- [22] M. Alford, hep-lat/0610046 e referências deste trabalho.
- [23] X. Huang, X. Hao e P. Zhuang, *New J. Phys.* **9**, 375 (2007).
X. Huang, X. Hao e P. Zhuang, *Int. J. Mod. Phys. E* **16**, 2307 (2007).
- [24] W. V. Liu, F. Wilczek e P. Zoller, *Phys. Rev. A* **70**, 033603 (2004).
E. Gubankova, A. Schmitt e F. Wilczek, *Phys. Rev. B* **74**, 064505 (2006).
- [25] R. Kishore e S. K. Joshi, *Phys. Rev. B* **2**, 1411 (1970).
- [26] R. Jullien e B. Coqblin, *Phys. Rev. B* **8**, 5263 (1973).
B. Coqblin, *J. Magn. Magn. Mater.* **29**, 1 (1982).
- [27] L. Mendonça Ferreira, T. Park, V. Sidorov, M. Nicklas, E. M. Bittar, R. Lora-Serrano, E. N. Hering, S. M. Ramos, M. B. Fontes, E. Baggio-Saitovich, Hanoh Lee, J. L. Sarrao, J. D. Thompson e P. G. Pagliuso, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 017005 (2008).
- [28] G. M. Japiassu, M. A. Continentino e A. Troper, *J. Appl. Phys.* **73**, 6648 (1993).
G. M. Japiassu, M. A. Continentino e A. Troper, *J. Magn. Magn. Mater.* **104**, 1945 (1992).
G. M. Japiassu, M. A. Continentino e A. Troper, *Phys. Rev. B* **45**, 2986 (1992).
G. M. Japiassu, M. A. Continentino e A. Troper, *Physica B* **171**, 98-101 (1991).

- [29] L. G. Sarasua e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **65**, 184503 (2002).
- [30] M. Alford, J. Berges e K. Rajagopal, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 598 (2000).
- [31] M. A. Continentino e I. T. Padilha, *Physica B* **403**, 764 (2008).
- [32] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, editado por World Scientific, Singapore (2001).
M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **47**, 11587 (1993)
- [33] I. T. Padilha e M. A. Continentino, *Physica B* **404**, 2920 (2009)
- [34] I. T. Padilha e M. A. Continentino, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 3466 (2009)
- [35] I. T. Padilha e M. A. Continentino, *J. of Phys. Cond. Matter* **21**, 095603 (2009).
- [36] Shin-tza Wu, C.-H. Pao e S.-K. Yip, *Phys. Rev. B* **74**, 224504 (2006).
- [37] L. P. Kadanoff, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 1113 (1967).
- [38] J. A. Hertz, *Phys. Rev. B* **14**, 1165 (1976).