



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Francisco Dinóla Neto

Orientador: Prof. Dr. Mucio Amado Continentino

Niterói
Setembro - 2011

Francisco Dinóla Neto



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Supercondutividade em Modelos Multi-bandas: *Crossover* BCS-BEC, Potencial Repulsivo e Aplicações.

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

Setembro - 2011

Dedicatória

Aos meus filhos Francisco e Isabelle, à Isabel e ao Estado do Amazonas

Agradecimentos

Tentarei agradecer à todos que me ajudaram a ter concluído esse trabalho

- À Deus, por tudo.
- Ao Prof. Mucio, por ter aceitado me orientar, por passar uma pequena parte do seu vasto conhecimento sobre Física, e pela oportunidade de ter tido contato com grandes centros de pesquisa em Física, como o IF-UFF e o CBPF. Obrigado pela orientação tranquila e proveitosa.
- Ao Prof. José Ricardo por ter acreditado que eu teria condições de sair de Manaus para fazer esse doutorado, e por sempre ter sido além de um grande mestre, um grande amigo.
- À Dona Raimunda e ao Charles por me receberem no Rio. Obrigado Tia Mundinha por me acolher nessa cidade que nunca tinha visitado antes, e por todo o apoio à nossa família nesses 4 anos.
- Agradeço ao Tio Ricardo, Sabrina e ao Junior pelo apoio em Manaus e no Rio.
- Ao Igor, Dona Janine, Iury e Inês por me receberem em Niterói. Em especial agradeço ao Igor pela nossa velha amizade e parceria, para falar de futebol, video game, e para variar, um pouco de Física.
- Aos professores do IF-UFF: Prof. João Carlos, pelo excelente curso de Eletromagnetismo; Aos professores Pedro Venezuela, Rubens do Amaral e Daniel Jonathan pelas dicas e conselhos no exame de qualificação; Ao professor Zelaquett por me ajudar com os incontáveis históricos que pedi para a pós; Ao professor Oxman pelo excelente curso de Teoria de Campos; Ao professor Evandro, agradeço em especial pelo excelente e fundamental curso sobre supercondutividade.

- Ao pessoal da secretaria da pós do IF-UFF por toda a ajuda e prestatividade. Obrigado Valéria, Rafa, Luana, João e Vinicius.
- Aos colegas do IF-UFF: Álvaro Alves, Luciana Hirsh, Thiago Lobo, Minos Adão, Victor Fernandez, Rafael Kasal, Thiago Caramês entre outros; Aos colegas professores do IF-UFF: Marcelo Sarandy, Andréia Saguia, Beatriz Boechat, João Florêncio, Antônio Delfino, Claudette Cordeiro e Marcos Sérgio.
- Ao pessoal do CBPF: Prof^a. Elisa pela oportunidade de visitar os laboratórios do CBPF e participar dos eventos organizados por ela; Aos demais colegas pesquisadores: Prof. Amós, Prof^a. Magda, Prof. Eichler, Prof. Micklitz, Prof. Henrique, Prof. Xing, Edivaldo dos Santos, Julian Cagigas, Tatiana Marcondes, William Trujillo, Ury Denver, Sadi Khodae, Eduardo Zambrano, Mathias Kraken (und Sinja), Hiroyuki Hidaka, Jackeline Collave, Kumaresa Vanji, Miguel Tafur, Daniel Reyes e ao Diogo Pinto pelas dicas sobre RMN e incentivo para o exame de qualificação. Agradeço também ao Bruno e ao Roni, Vivi e Ronaldo da secretaria por toda a ajuda e pelos papos sobre futebol.
- Em especial, agradeço à Scheilla Ramos e Edu Hering, por todos os papos sobre Física, aviação, jornada nas estrelas, e pelos papos sobre a vida real; Também um agradecimento especial para o Martin Silva, que é um grande companheiro nessas contas sobre supercondutividade, e para Aline Ramires, colega de UFF e de CBPF. Obrigado pessoal.
- Agradeço à Prof^a. Claudine Lacroix pelo apoio, incentivo e pela colaboração no desenvolvimento dos trabalhos.
- Agradeço à Prof^a. Debora Coimbra, pelo suporte técnico e por todo apoio na reta final do trabalho.
- Agradeço ao pessoal de Manaus que sempre me ajudou. Da minha família agradeço ao meu pai (Dinóla Filho), minha mãe (Ana Lúcia), Luciana e Adriana. Um agradecimento especial para Adélia e ao Augusto por tudo, e todo o apoio nessas idas e vindas para Manaus. Agradeço ao seu José Raimundo e a Dona Graça por toda a ajuda nesses 4 anos, tanto em Manaus quanto no Rio.

- À todos os meus amigos-irmãos de Manaus: André Luiz, André Zogahib, Davi e Melina, Douglas Herbert, Gustavo, Ideu, Jean, Jonathas, Luciano, Lucio Fábio, Marcelo (katata), Marco Aurélio, McLuhan, Michelle, Otoniel, Robson, Savio e outros.
- À FAPEAM pelo financiamento do trabalho.
- Por fim, mas não menos importante, agradeço à Isabel, minha companheira, que sempre me incentivou a continuar meu trabalho, e ao Francisco e Isabelle por serem fonte de inspiração para eu crescer.

Resumo

Neste trabalho estudamos o comportamento de um sistema supercondutor descrito por um modelo multi-bandas tipo Hubbard. Inicialmente, estudamos o *crossover* entre os limites de acoplamento fraco (BCS) e forte (BEC) para simetria tipo s do parâmetro de ordem em $T = 0$ e na presença de uma hibridização V . Para isso, calculamos os parâmetros de ordem supercondutores intra-banda, inter-banda e o potencial químico como função da interação $1/k_F a_s$. Estudamos as energias de excitação em ambos os limites de acoplamento, analisando suas características em cada caso. Vimos que existem diferenças marcantes na evolução BCS-BEC intra e inter-banda, sendo observadas descontinuidades na amplitude do *gap* inter-banda. Discutimos o diagrama de fases do modelo e a hibridização crítica V_c que destrói a supercondutividade. Quando inserimos o potencial repulsivo local (\mathcal{U}) no caso intra-banda puro, adotamos a aproximação Hubbard I para as simetrias s e d do parâmetro de ordem. Obtivemos assim um novo ramo nas energias de excitação proporcional à \mathcal{U} . Para $\mathcal{U}/E_F \gg 1$, esse novo ramo equivale a uma banda estreita renormalizada. Nos diagramas de fases para onda s e d , são vistos os efeitos de \mathcal{U} em conjunto com V , sendo encontradas as interações atrativas críticas para cada simetria. Por fim, o modelo foi usado para estudar a supercondutividade tipo d do composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ em temperaturas finitas. Obtivemos a linha crítica no diagrama $T/T_c \times V/V_c$ no limite de acoplamentos fracos BCS, e relacionamos a hibridização diretamente com a pressão. Ajustamos os dados experimentais do diagrama de $T_c \times P$, para diferentes concentrações x de Sn com a linha teórica, encontrando um comportamento universal na curva de $T_c(P, x)/T_c(P = 0, x) \times P/P_c(x)$.

Abstract

In this work we study the behavior of a superconducting system described by a multi-band model. First we study the crossover from weak (BCS) to strong coupling (BEC) for an s -like order parameter in the presence of hybridization V . Thus, we calculate both order parameters, intra and inter-band, and the chemical potential as a function of interaction $1/k_F a_s$. We analyze the energy excitations in both BCS-BEC limits, looking for the differences in each case. There are differences in the crossover from intra and inter-band cases, due the existence of discontinuities in the inter-band gap amplitude. We discuss about the phase diagram of the system, and the critical hybridization V_c to destroy superconductivity. When we insert a repulsive potential term \mathcal{U} in the pure intra-band case, we use the Hubbard I approximation to treat s and d order parameter symmetries. Then we obtain a new branch in the excitations energy related to \mathcal{U} . When $\mathcal{U}/E_F \gg 1$ this new branch is equivalent to a renormalized narrow band. In the s and d -wave phase diagrams, we obtain the critical values of the attractive interactions to induce superconductivity. In the last part of this work, we use the model to study the superconductivity in the heavy fermion compound $CeCoIn_{5-x}Sn_x$. We obtain a critical line in the phase diagram $T/T_c \times V/V_c$ in the BCS weak coupling limit, and relate the hybridization with the pressure. We adjust the experimental data of $T_c \times P$ phase diagram for different concentrations x of Sn and pressures with the theoretical line, finding a universal behavior in the $T_c(P, x)/T_c(P = 0, x) \times P/P_c(x)$ curves.

Sumário

Resumo	viii
Abstract	ix
Lista de figuras	xii
Lista de tabelas	xiv
1 Introdução	1
2 Supercondutividade em modelos multi-bandas	9
2.1 Modelos supercondutores convencionais	9
2.2 Modelos multi-bandas e suas vantagens	13
2.2.1 Uma abordagem via Modelo de redes de Kondo-Heisenberg	15
2.2.2 O potencial repulsivo local	17
3 O <i>Crossover</i> BCS-BEC no modelo de duas bandas	20
3.1 O modelo	21
3.2 As equações de movimento	22
3.3 Energias de excitação	26
3.4 Efeitos da hibridização no <i>crossover</i> BCS-BEC	29
3.4.1 Caso intra-banda	31
3.4.2 Caso inter-banda	39
3.5 Discussões em torno da hibridização crítica V_c	43
4 Efeitos da repulsão Coulombiana local intra-banda na Supercondutividade	48
4.1 O modelo e as equações de movimento	49
4.2 Influência de \mathcal{U} no <i>crossover</i> BCS-BEC	52

4.3	Aproximação Hubbard-I para o potencial repulsivo local \mathcal{U}	57
4.4	Espectros de energia das <i>quasi</i> -partículas	62
4.5	Equação do <i>gap</i> , diagramas de fases e discussões	66
4.6	Discussões para o caso onda d	69
5	Aplicação do modelo duas bandas no férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$	74
5.1	Aspectos experimentais	74
5.2	Modelagem do sistema	78
5.3	Teoria e experimento: Resultados obtidos	81
5.4	Considerações finais	84
6	Conclusões e Perspectivas	86
A	Método das Funções de Green	89
B	Renormalização das equações do <i>gap</i> supercondutor pelo comprimento de espalhamento a_s	92
C	Potencial atrativo entre elétrons no caso 2D	97
	Referências Bibliográficas	101

Lista de Figuras

1.1	Ilustração das dependências de temperaturas críticas (T_c) e temperaturas de decomposição do par (T_p) em função da interação atrativa.	4
1.2	Representação esquemática dos níveis eletrônicos do elétron f para o Ce , ilustrando o alto valor da repulsão Coulombiana \mathcal{U}	6
2.1	Gráficos obtidos para o <i>crossover</i> BCS-BEC por Engelbrecht <i>et al.</i> [26]. . .	11
2.2	Gráfico obtido para o <i>crossover</i> BCS-BEC de T_c (linha cheia) por Sá de Melo <i>et al.</i> [16]. A linha tracejada está relacionada com a temperatura de dissociação do par T_p	12
3.1	Como a função de <i>gap</i> intra-banda varia com α	35
3.2	Como a função de <i>gap</i> intra-banda e o potencial químico são afetados pela hibridização ao longo do <i>crossover</i> BCS-BEC para $\alpha = 0.5$	36
3.3	Ajustes feitos nas curvas da amplitude do <i>gap</i> supercondutor intra-banda nos dois diferentes limites, BCS e BEC para $\alpha = 0.5$	37
3.4	As relações de dispersão do sistema no regime de acoplamentos fracos ($1/k_F a_s < 0$) para $\alpha = 0.5$ e $\bar{V} = 0.4$	38
3.5	As relações de dispersão do sistema no acoplamento forte para $\alpha = 0.5$. Note a forma parabólica das energias, representando um comportamento tipo partícula livre dos pares condensados.	39
3.6	Como a função de <i>gap</i> inter-banda e o potencial químico são afetados pela hibridização para $\alpha = 0.5$. Note as discontinuidades no <i>crossover</i> para valores de $\bar{V} > 0$	42
3.7	Comportamento de V_c para ambos os casos, intra e inter-banda adotando as equações de <i>gap</i> renormalizadas por a_s para $\alpha = 0.5$	44

3.8	Comportamento do integrando da função que determina V_c para o caso intra-banda $F_1(k, V_c)$ (Eq. 3.68) para $\bar{V}_c = 0.2$ e $\alpha = 0.5$	45
3.9	Comportamento de V_c versus G_0 para o caso intra-banda com $\alpha = 0.5$	45
3.10	Comportamento do integrando da função $F_2(k, V_c)$ para o caso inter-banda (Eq. 3.69) para $\bar{V}_c = 0.2$ e $\alpha = 0.5$	46
4.1	Soluções para a equação de <i>gap</i> variando as intensidades do potencial repulsivo \bar{U} , para $\bar{V} = 0$ e $\bar{V} = 0.4$ ao longo do <i>crossover</i> BCS-BEC com $\alpha = 0.5$	55
4.2	Soluções para a equação de <i>gap</i> fixando a intensidade de $\bar{U} = 0.1$ para diferentes valores de \bar{V} ao longo do <i>crossover</i> BCS-BEC com $\alpha = 0.5$	56
4.3	Comportamento das energias de excitação do sistema para diferentes intensidades do potencial repulsivo \mathcal{U} fixando $\Delta/E_F = 0.2$, $V/E_F = 0.1$ e $\alpha = 0.5$	63
4.4	Comportamento das energias de excitação do sistema para grandes valores de \mathcal{U} , com $\Delta/E_F = 0.2$, $V/E_F = 0.1$ e $\alpha = 0.5$	64
4.5	Comportamento das energias de excitação do sistema como função de \mathcal{U}/E_F para diferentes valores de n_f , com $k/k_F = 1.0$, $\Delta/E_F = 0.2$, $V/E_F = 0.1$ e $\alpha = 0.5$	65
4.6	Diagrama de fases G_{0c} versus \mathcal{U} para simetria tipo onda <i>s</i> , sob diferentes intensidades de hibridização para $\alpha = 0.5$	68
4.7	Diagrama de fases G_{0c} versus V do sistema sob diferentes intensidades do potencial repulsivo para $\alpha = 0.5$	68
4.8	Diagrama de fases G_{0c}^d versus \mathcal{U} do sistema sob diferentes intensidades da hibridização para $\alpha = 0.1$	71
4.9	Diagrama de fases G_{0c}^d versus V do sistema sob diferentes intensidades do potencial repulsivo para $\alpha = 0.1$	71
4.10	Diagrama de fases \mathcal{U} versus V_c do sistema sob intensidade do potencial atrativo fixo em $G_0^d = 1.75$ para $\alpha = 0.1$	72
5.1	Estrutura cristalina quase 2D do $CeMIn_5$	75

5.2	Comportamento em altas e baixas temperaturas da resistividade no composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ em pressão ambiente, onde no quadro da direita são observadas as transições supercondutoras para $\rho(T) = 0$ [82].	76
5.3	Comportamento em baixas temperaturas da resistividade no composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ para diferentes intensidades da pressão, onde foi fixada a concentração de Sn em $x = 0.10$. Note que ainda são observadas as transições supercondutoras para $\rho(T) = 0$ [82].	77
5.4	Dados experimentais de T_c para diferentes concentrações de Sn no composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ variando a intensidade da pressão[87]. As linhas para cada concentração são “guias para os olhos”.	78
5.5	Gráfico com soluções para a equação do gap como função de V_c , submetido a diferentes temperaturas.	82
5.6	O diagrama de fases $T/T_c \times V/V_c$ teórico, obtido através da equação do gap , para uma solução fixa de $f(\bar{T}, \bar{V}_c) \sim 2.0$	82
5.7	O diagrama de fases $T_c \times P$ experimental para o composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ para diferentes concentrações de estanho Sn superpostos as curvas obtidas teoricamente usando o modelo descrito na equação (5.1)[82].	83

Lista de Tabelas

1.1	Tabela com a razão T_c/T_F para sistemas supercondutores conhecidos . . .	4
-----	---	---

Capítulo 1

Introdução

A supercondutividade é uma notável propriedade física observada em muitos metais simples. Tal propriedade é vista através do desaparecimento total da resistividade elétrica quando o material é resfriado abaixo de uma certa temperatura crítica T_c , que é diretamente influenciada por campos magnéticos externos aplicados no material. Dessa forma, o estado supercondutor é mantido se a temperatura do sistema for mantida abaixo de T_c , e nos supercondutores tipo I[1], os campos magnéticos externos não devem exceder o valor de campo crítico H_c o qual conduz o material para o estado metálico normal. Nos supercondutores tipo II[1] existem dois campos críticos: o primeiro (H_{c1}) é onde linhas de campo penetram o material através de vórtices, enquanto o restante do material permanece supercondutor; e o segundo campo (H_{c2}) que é forte o suficiente tal que o material todo é conduzido ao estado normal.

Uma teoria microscópica robusta para descrever a supercondutividade foi proposta em 1957 pelos físicos J. Bardeen, L. Cooper e J. R. Schrieffer[2], 46 anos depois da descoberta do fenômeno por K. Onnes[3]. Eles descreveram o estado fundamental supercondutor através de uma função de onda de elétrons emparelhados (pares de Cooper), e a interação atrativa entre eles sendo mediada pela vibração da rede cristalina (fônons). A “teoria BCS” foi bem sucedida em explicar boa parte das propriedades dos supercondutores. Entre elas, a descontinuidade no calor específico e sua dependência exponencial com a temperatura, e o surgimento do *gap* de energia no espectro de excitações com dependência exponencial em relação ao termo de interação. Essa teoria também propiciou obter de forma satisfatória as temperaturas críticas para grande parte dos supercondutores

“convencionais”.

Nos supercondutores ditos convencionais, o *gap* de energia é isotrópico no espaço dos momentos k , ou seja, possui mesma magnitude e fase em todas as direções. Essa simetria do *gap* é conhecida como sendo o estado de emparelhamento isotrópico onda s . Uma observação que deu mais credibilidade para a teoria BCS, do ponto de vista das interações via fônons, é o efeito isotópico, que foi observado no mercúrio em 1950[4]. É visto que existe relação entre a temperatura crítica de um material supercondutor e a massa (M) dos seus isótopos, sendo visto que $M^\alpha T_c = cte$ [5]. O expoente isotópico (α) previsto para alguns supercondutores como mercúrio (Hg), chumbo (Pb) e zinco (Zn) vale $\alpha \simeq 1/2$. Em outros sistemas como os supercondutores de alta temperatura crítica, não é observado o efeito isotópico, indicando que os fônons não estariam envolvidos no mecanismo de emparelhamento desses materiais.

O fato desses novos supercondutores de alta temperatura crítica, ou HTSC¹, não apresentarem o efeito isotópico é apenas uma das evidências que esses novos materiais apresentam um mecanismo de emparelhamento não-convencional. Desde a descoberta desses novos materiais[6], foi observado que as temperaturas críticas dos mesmos eram muito maiores do que as previstas pela teoria BCS. Geralmente esses compostos são formados por camadas de óxidos de cobre (CuO_2) tendo como vizinhos camadas contendo íons como lantânio (La), bário (Ba), estrôncio (Sr), ítrio (Y) ou outros. Esses átomos atuam na estabilidade da estrutura dopando as camadas de óxido de cobre ou com elétrons ou buracos. A simetria do estado emparelhado dos HTSC já foi uma questão em aberto. Medidas de ressonância magnética nuclear (RMN) indicaram que o estado emparelhado é singleto[7], restringindo os possíveis candidatos à simetria de emparelhamento entre ser tipo onda s ou tipo onda d . Modelos teóricos sugeriram pela primeira vez que o termo de troca das flutuações antiferromagnéticas de spin poderiam mediar um emparelhamento com simetria $d_{x^2-y^2}$ [8]. Modelos fenomenológicos[9] mostraram que acoplamentos mediados por interações magnéticas inevitavelmente levam a um emparelhamento com simetria d , além de obter intensidades de acoplamento que seriam suficientes para explicar as temperaturas de transição observadas. Assim, com essas fortes evidências experimentais e teóricas, ficou estabelecido que a simetria do emparelhamento nos HTSC é do tipo onda d [10].

¹Do inglês *High Temperature Superconductors*

Outra característica desses novos materiais é seu comprimento de coerência ξ_0 , relacionado com o tamanho do par, ser muito pequeno em comparação com os supercondutores usuais descritos pela teoria BCS. Enquanto em um material BCS convencional com $T_c \sim 10 K$ o comprimento é da ordem de $\xi_0 \sim 5000 \text{ \AA}$, nos HTSC como o $YBa_2Cu_3O_7$ é observado que $\xi_0 \sim 10 \text{ \AA}$. Esse seria um dos motivos desses compostos que são do tipo II, apresentarem o altos campos críticos H_{c2} , pois $H_{c2} \sim 1/\xi_0^2$. Assim, é visto que esses materiais possuem o tamanho do par de Cooper da ordem da distância média entre os portadores de carga. Por esse motivo, esses materiais estão em um regime intermediário entre grandes pares de Cooper tipo BCS e o limite onde os férmions envolvidos estão fortemente ligados podendo ocasionar um condensado de Bose-Einstein, ou BEC², desses bósons efetivos. Daí surge o interesse em estudar a evolução BCS-BEC, analisando as mudanças que ocorrem no sistema à medida que a interação entre os férmions passa do limite de acoplamentos fracos para acoplamentos fortes.

A supercondutividade no regime de acoplamento forte vem sendo amplamente estudada através de modelos simples para um gás de férmions interagentes[11, 12]. Esses estudos tornam-se interessantes de fato, quando podemos ver neles a evolução do estado supercondutor por todos os regimes de acoplamento, desde acoplamentos fracos (BCS usual) até o acoplamento forte. Geralmente encontra-se uma evolução contínua de grandes pares de Cooper no regime BCS para o regime onde os pares são fortemente ligados constituindo um bóson efetivo, podendo ocasionar então o surgimento do condensado de Bose-Einstein. Apesar desse quadro ter sido estudado há muito tempo[12, 13], recentemente tem surgido um novo interesse no sentido de aproveitar as idéias e conceitos na tentativa de explicar os HTSC[14, 15] pelos motivos já ditos anteriormente. Nas últimas décadas, importantes progressos foram feitos para entender a evolução suave entre os regimes de acoplamento fraco e forte para a temperatura de transição[16], analisando a termodinâmica desses sistemas com simetria tipo onda s [17], e também os supercondutores com simetria tipo onda d [18]. Do ponto de vista experimental, estudos sobre transição de fase em átomos frios[19] contribuíram também em aumentar o interesse nesse problema, já que nesses sistemas é possível ajustar a intensidade do acoplamento dos pares[12].

Em todos esses trabalhos, é visto que quando se passa do limite da supercondutividade em acoplamento fraco para o forte ocorre uma mudança suave e contínua entre dois

²Do inglês *Bose-Einstein Condensation*

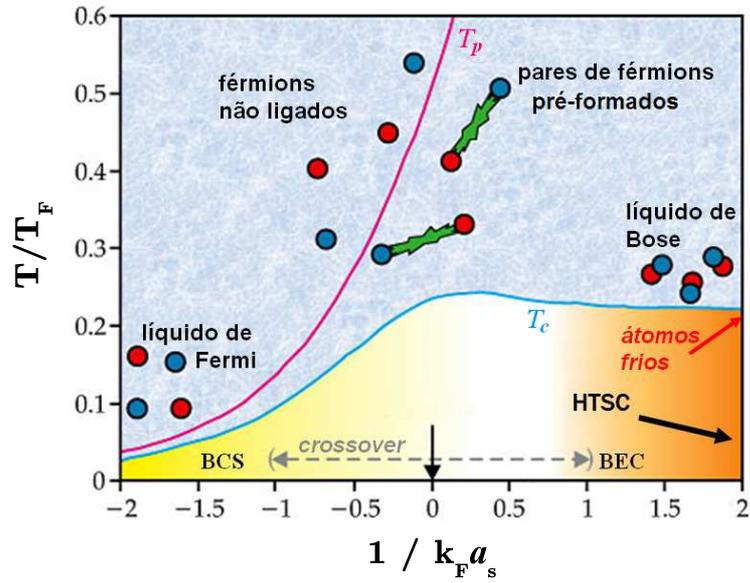


Figura 1.1: Ilustração das dependências de temperaturas críticas (T_c) e temperaturas de decomposição do par (T_p) em função da interação atrativa.

Sistema	T_c/T_F
Supercondutores convencionais	$10^{-5} - 10^{-4}$
${}^3\text{He}$ Superfluido	10^{-3}
Supercondutores HTSC	10^{-2}
Átomos Frios	~ 0.2

Tabela 1.1: Tabela com a razão T_c/T_F para sistemas supercondutores conhecidos

sistemas físicos distintos. Analisando a amplitude do *gap* supercondutor em temperatura nula, é visto que ocorre uma mudança na forma em que a mesma depende da intensidade da interação. É observado que no limite BCS, a amplitude depende exponencialmente da interação, fato já constatado pela teoria BCS usual. Porém, no limite de acoplamentos fortes, foi observado que a amplitude apresenta uma dependência em lei de potências com a interação. Essa mudança de comportamento caracteriza o *crossover* entre os limites BCS e BEC da supercondutividade. Para sistemas com simetria tipo onda s , a interação atrativa pode ser descrita pela razão $1/k_F a_s$, sendo a_s o comprimento de espalhamento das ondas s e k_F é o vetor de onda de Fermi. Essa renormalização é adotada para eliminar problemas de divergências nas integrais no limite ultravioleta, quando é acessado o regime de grandes vetores de onda. Nessa representação, o *crossover* ocorre na região que compreende $-1 < 1/k_F a_s < +1$. Com isso, o limite BCS é obtido quando $1/k_F a_s \rightarrow -\infty$, e o limite BEC $1/k_F a_s \rightarrow +\infty$. Como pode ser visto na Figura (1.1), no limite supercondutor BCS existe a temperatura crítica T_c onde a supercondutividade é suprimida pela quebra dos pares de Cooper devido às excitações térmicas. No caso de um supercondutor de Bose, associado ao limite de acoplamento forte, existem duas temperaturas características: uma é a temperatura crítica (T_c), que tende a não depender da intensidade do acoplamento. A outra, significativamente mais elevada, é a temperatura associada a decomposição do par devido a excitação térmica (T_p). Na Tabela (1.1) é visto as ordens de grandeza das temperaturas críticas de diferentes sistemas físicos supercondutores em complemento ao diagrama na Figura (1.1). Note que T_p está ligado então à um *gap* de pares pré-formados, porém não supercondutores. Esse fato poderia relacionar a existência do pseudo-*gap* nos HTSC como uma manifestação dos pares pré-formados[20], e com isso a linha de T_p na Figura (1.1) estaria relacionada com a linha que limita a observação do pseudo-*gap*, vista nos diagramas de fases dos supercondutores de alta temperatura crítica.

Os HTSC possuem suas propriedades físicas peculiares devido às interações que acontecem entre os elétrons de diferentes bandas eletrônicas. Outros materiais como os férmions pesados (FP)[21] e os metais de transição em geral também apresentam particularidades devido às bandas. As bandas eletrônicas no material se distiguem uma das outras por meio da sua largura e da forma que os elétrons são afetados nas mesmas. As terras raras por exemplo, possuem a banda f estreita em comparação com as bandas s , p , ou d , relacionadas aos elétrons itinerantes, ou de condução. Isso está associado com o caráter

localizado dos estados f nesses materiais. Os FP compostos de terras raras como o cério (Ce), itérbio (Yb) e urânio (U), exibem em baixas temperaturas um aumento da massa efetiva do elétron de condução que são centenas de vezes a massa do elétron livre, motivo esse que é dado o nome de férmion pesado. O aumento da massa efetiva é uma manifestação da ação conjunta da forte repulsão Coulombiana nas camadas $4f$ e $5f$ e a hibridização delas com os elétrons da banda de condução. No regime de altas temperaturas, os elétrons f possuem um caráter mais localizado. Porém, quando o sistema é resfriado, os elétrons f tendem a ser itinerantes devido à hibridização das mesmas com os elétrons de condução nas camadas s , p e d . Essa ambiguidade no comportamento, ora local, ora itinerante dos elétrons f gera uma competição entre uma ordem magnética de longo alcance³ e um estado paramagnético. Assim, os FP se mostram ser sistemas físicos de grande interesse na física da matéria condensada. Parte desse interesse está relacionado com o fato de serem observados pontos críticos quânticos (PCQ) em seus diagramas de fases. A existência desses PCQ propicia através de modelos como o de redes de Kondo[22], fazer uma discussão sobre a fenomenologia associada às transições de fases quânticas. Com isso, é comumente incorporado ao modelo original novos parâmetros para auxiliar na investigação dos efeitos observados nos diagramas de fases. O interesse nesses sistemas tornou-se maior ainda devido ao fato de que em alguns deles é observado a supercondutividade. Além do interesse pelo fenômeno em si, existe a possibilidade de conectar a física dos sistemas FP com a dos HTSC[23].

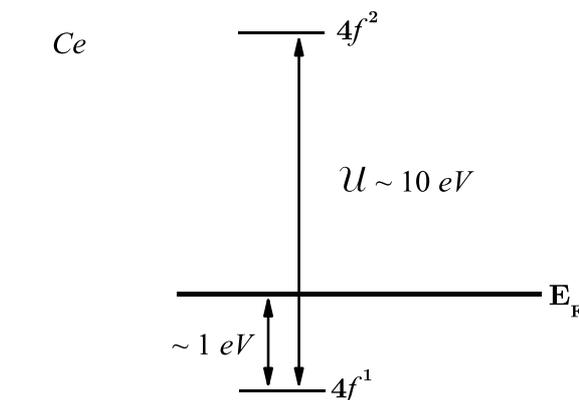


Figura 1.2: Representação esquemática dos níveis eletrônicos do elétron f para o Ce , ilustrando o alto valor da repulsão Coulombiana \mathcal{U} .

³Geralmente, a ordem magnética observada nos FP baseadas no Ce é antiferromagnética.

Um outro ingrediente que não pode faltar na descrição desses sistemas supercondutores HTSC e FP é a repulsão Coulombiana entre os elétrons. Nos FP, a repulsão Coulombiana entre dois elétrons se mostra relevante devido a sua magnitude. Na Figura (1.2), encontra-se um diagrama de níveis eletrônicos simplificado para o Ce , mostrando que no estado $4f^2$ é observada a repulsão Coulombiana da ordem de $10 eV$. Esse alto valor, faz com que o a configuração de um elétron por camadas $4f$ tenda a dominar, já que tem um alto custo energético colocar dois elétrons no mesmo sítio. Nos HTSC também se observa relevância do potencial repulsivo. Nesses supercondutores, as camadas de CuO_2 possuem um número ímpar de elétrons por célula unitária. Com isso, o Cu se encontra na configuração d^9 , com um buraco. Assim, para colocar dois elétrons no mesmo íon de Cu , irá existir uma forte repulsão Coulombiana (U). Nesses sistemas HTSC, se a magnitude da repulsão domina as escalas de energias sendo maior do que a energia do movimento dos elétrons, o estado fundamental é um isolante no caso de um elétron (buraco) por sítio. É visto assim, que o potencial repulsivo tende a evitar o emparelhamento local. Como consequência, a simetria do *gap* nesses sistemas dificilmente é da forma onda s isotrópica, podendo então ser da forma s estendida ou $d[10]$. Tanto os FP quanto os HTSC pertencem aos chamados *sistemas eletrônicos fortemente correlacionados*, ou SCES⁴[24].

Com isso, as observações aqui feitas, servem para localizar o leitor sobre os principais objetivos no desenvolvimento deste trabalho. Neste, estudaremos a supercondutividade por meio de um modelo tipo Hubbard de duas bandas. O desenvolvimento dos capítulos deste trabalho está dividido da seguinte forma:

No Capítulo 2 serão abordados os modelos que são usados para estudar a supercondutividade através da teoria BCS. O foco desse capítulo é de dar uma justificativa para a adoção dos modelos multi-bandas para estudar a supercondutividade, mostrando suas vantagens.

No Capítulo 3 será estudado o *crossover* BCS-BEC utilizando o modelo de duas bandas. Adotamos o método das funções de Green para descrever o efeito da hibridização no *crossover* supercondutor com interações atrativas intra-banda e inter-banda. Será feita também uma breve discussão sobre a hibridização crítica V_c que destrói a supercondutividade nesses sistemas.

No Capítulo 4 será analisada inicialmente a influência de um potencial repulsivo

⁴Do inglês, *Strongly Correlated Electron Systems*.

Coulombiano local no *crossover* BCS-BEC. Após isso, será adotado nos cálculos a aproximação Hubbard I para tratar o limite de grandes intensidades do potencial repulsivo local nas energias de excitações e nos diagramas de fases do sistema.

No Capítulo 5 utilizaremos o modelo de duas bandas para estudar o sistema férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ relacionando a hibridização do modelo com a pressão externa. Assim podemos ajustar os dados experimentais do diagrama de fases T_c versus P (pressão) com os resultados teóricos obtidos pelo modelo.

No Capítulo 6 colocamos as conclusões e as considerações finais, além de sugestões para novas pesquisas relativas aos resultados obtidos neste trabalho.

Por fim, nos apêndices encontram-se o formalismo das funções de Green; os cálculos para renormalização das equações do *gap*; e um breve desenvolvimento sobre o potencial atrativo entre férmions em sistemas bidimensionais.

Capítulo 2

Supercondutividade em modelos multi-bandas

2.1 Modelos supercondutores convencionais

A teoria BCS[2] da supercondutividade foi inicialmente formulada por um modelo que descreve apenas uma banda de elétrons (banda s) interagentes. Nesta descrição, já é desprezada todas as formas de espalhamento que não sejam relacionadas com a formação e transição de pares eletrônicos. Assim é escrito um Hamiltoniano reduzido

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

Os operadores $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) criam (aniquilam) um elétron com momento k e spin σ . A energia cinética dos elétrons é dada pela relação de dispersão $\varepsilon_k = \hbar k^2/2m$, com m sendo a massa do elétron, e g é a interação entre os elétrons. A teoria BCS limita a região onde são formados os pares de Cooper. Essa região compreende uma estreita camada definida pela energia de Debye $\hbar\omega_D$ em torno do nível de Fermi E_F . Nessa região a interação atrativa entre os elétrons é mediada pelos fônons, e no caso de $\hbar\omega_D \ll E_F$ a densidade de estados eletrônica ρ_0 é constante no nível de Fermi. A teoria BCS considera o regime de acoplamento dos pares sendo fraco, tal que $g\rho_0 \ll 1$. No limite BCS, a distribuição de momentos somente é modificada em uma pequena região exponencial - a mesma onde

ocorre o emparelhamento - próxima ao nível de Fermi, como pode ser visto na Figura (2.1) a).

No limite de fracas interações, o potencial químico μ pode ser fixado em E_F , o que torna os cálculos relativamente simples. Porém, Leggett[12] indicou que se a equação do *gap* BCS fosse estudada permitindo que μ variasse, a equação do *gap* se tornaria a equação de Schödinger para uma molécula diatômica no limite em que μ dominasse. Dessa forma, é criado um bóson efetivo de spin nulo, podendo ocorrer o condensado de Bose-Einstein. Assim, apesar de estar sendo adotada a teoria BCS formulada para fracas interações, é possível alcançar pela mesma teoria, o quadro onde o estado fundamental supercondutor é gerado pelo BEC dos pares fortemente ligados. Isso propicia um resultado qualitativamente correto para todo o espectro de interações. Para ilustrar o problema, adotamos um sistema tridimensional descrito pela equação (2.1) para $T = 0$. Adotando a teoria BCS, obtemos a equação do *gap* ($\hbar = 1$)

$$\Delta_k = g \sum_{k'} \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}}, \quad (2.2)$$

sendo $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$, $\xi = \varepsilon_k - \mu$ e $\varepsilon_k = k^2/2m$. É possível também calcular a equação do número

$$N = \sum_k \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right). \quad (2.3)$$

Com o potencial atrativo considerado constante, o *gap* supercondutor é levado em conta como sendo constante também, com isso $\Delta_k = \Delta$. Assim a equação em (2.2) se torna

$$\frac{1}{g} = \sum_k \frac{1}{2E_k}. \quad (2.4)$$

Dentro do limite de fracas interações é obtido o comportamento da amplitude do *gap* supercondutor $\Delta(T = 0) = \Delta_0 = 2\omega_D e^{-1/g\varrho_0}$. Em temperaturas finitas, obtém-se a dependência da temperatura crítica com o potencial atrativo $k_B T_c = 1.14\omega_D e^{-1/g\varrho_0}$ e a relação entre a amplitude do *gap* em $T = 0$ com a temperatura crítica $2\Delta_0 = 3.72k_B T_c$. Passando para o quadro onde as interações passam a ser mais fortes, o corte mediado por ω_D passa a não ser suficiente. Isso ocorre pois elétrons fora da camada imposta pelo corte podem emparelhar. Porém, é visto que a equação (2.4) é divergente para grandes

vetores de onda. Uma solução para o problema da divergência nesse caso, é renormalizar a equação do *gap* (ver apêndice B), descrevendo as interações através do comprimento de espalhamento das ondas s a_s , que é negativo quando o potencial atrativo é fraco e positivo quando o potencial atrativo é forte[25]. Assim a equação do *gap* renormalizada é dada por

$$\frac{m}{4\pi a_s} = \sum_k \left(\frac{1}{2\varepsilon_k} - \frac{1}{2E_k} \right). \quad (2.5)$$

Dessa forma são resolvidas simultaneamente as equações (2.3) e (2.5) para obter como μ e a amplitude Δ_0 são modificados entre os limites fracos e fortes de interação. Note que a interação atrativa será descrita pelo parâmetro adimensional $k_F a_s$: O limite BCS é alcançado quando $1/k_F a_s \rightarrow -\infty$ e o BEC quando $1/k_F a_s \rightarrow +\infty$, sendo $k_F = \sqrt{2mE_F}$ o vetor de onda de Fermi.

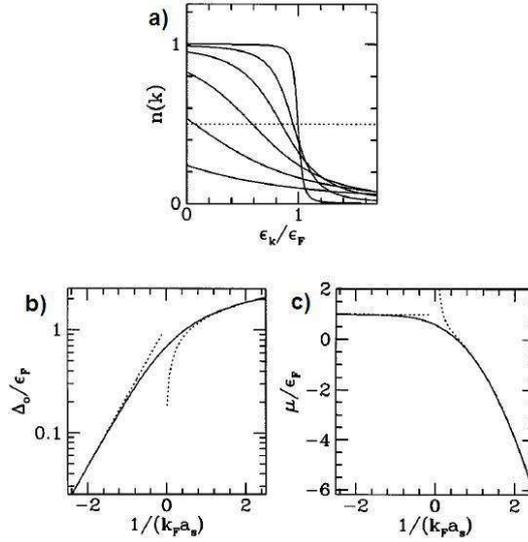


Figura 2.1: Gráficos obtidos para o *crossover* BCS-BEC por Engelbrecht *et al.*[26].

Na Figura (2.1) podemos ver graficamente: a) a distribuição de momentos $n(k)$, b) a amplitude Δ_0 e c) o potencial químico μ sendo afetados pelo aumento da interação $1/k_F a_s$. No limite BCS, μ não difere muito do nível de Fermi E_F . Porém, a medida que a interação aumenta, a função distribuição $n(k)$ sofre um alargamento fazendo μ diminuir se tornando no limite forte BEC $\mu/E_F \sim -(1/k_F a_s)^2$. Assim, amplitude do *gap* no limite BCS é dada por $\Delta_0/E_F \sim e^{-\pi/k_F a_s}$, e no limite BEC $\Delta_0/E_F \sim (1/k_F a_s)^{-1/2}$ [27].

A mudança de comportamento observada ocorre entre a região $-1 \leq 1/k_F a_s \leq +1$, caracteriza o *crossover* entre os limites BCS e BEC da supercondutividade.

A temperatura crítica T_c dos supercondutores é uma característica fundamental desses materiais em temperaturas finitas. Geralmente é observada em medidas de resistividade elétrica - quando a resistividade vai à zero - e de medidas termodinâmicas, como o calor específico, observando uma descontinuidade em $T = T_c$. No limite BCS, é considerado que a temperatura crítica está associada à quebra dos pares de Cooper, assim a temperatura de quebra do par T_p coincide com a da transição T_c . Em termos de a_s , a temperatura crítica é dada por $T_c/T_F \sim e^{-\pi/2k_F a_s}$ [16].

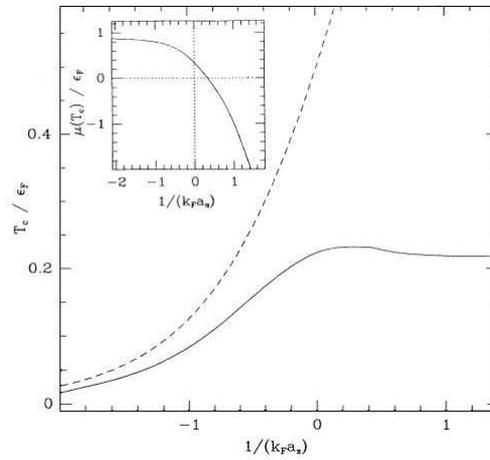


Figura 2.2: Gráfico obtido para o *crossover* BCS-BEC de T_c (linha cheia) por Sá de Melo *et al.*[16]. A linha tracejada está relacionada com a temperatura de dissociação do par T_p .

Entretanto, no limite BEC, Sá de Melo *et al.* obtiveram resultados distintos para as duas temperaturas T_c e T_p como visto na Figura (2.2). Foram incluídas flutuações Gaussianas na equação do número para descrever um sistema de férmions livres no limite BCS e de bósons efetivos no limite BEC. Assim, foi obtido no limite BEC $T_c/T_F = 0.218$ para bósons com massa $2m$, independente da interação $1/k_F a_s$. Já $T_p/T_F \sim (1/k_F a_s)^2$ está associado à um *gap* de pares ligados mas não supercondutores. Aspectos do pseudo-*gap* observados nos HTSC podem ser interpretados como uma manifestação dos pares pré-formados[20], e com isso a linha tracejada de T_p na Figura (2.2) estaria relacionada com o pseudo-*gap* encontrado nos diagramas dos HTSC.

2.2 Modelos multi-bandas e suas vantagens

Como pôde ser visto, modelos descritos pelo Hamiltoniano em (2.1), descrevem a supercondutividade por todo espectro de interações atrativas dos pares de Cooper. Tal modelo para simetria s é ideal para descrever alguns metais puros supercondutores, algumas ligas e os sistemas de átomos frios, onde é observada a ocorrência dos BEC's. Porém, para outros sistemas supercondutores baseados em ligas e estruturas mais complexas, como os já abordados HTSC e FP, tal modelo não é suficiente para descrever suas propriedades não-convencionais observadas experimentalmente. Tais materiais possuem propriedades físicas peculiares devido às interações que acontecem entre os elétrons de diferentes bandas eletrônicas, que se distiguem uma das outras pela sua largura e pela forma a qual os elétrons são afetados nas mesmas.

Com isso, são adotados modelos multi-bandas para descrever esses compostos, possibilitando estudar sistemas supercondutores complexos. Geralmente são adotadas duas bandas, porém, são acrescentados ao modelo outros parâmetros baseados na fenomenologia. Esses parâmetros podem ser comparados com observáveis experimentais, que agem diretamente na supercondutividade. No capítulo 5 por exemplo, adotaremos um modelo de duas bandas com hibridização para estudar o FP $CeCoIn_{5-x}Sn_x$, e compararemos a pressão externa aplicada no sistema em laboratório com a hibridização do modelo teórico.

O primeiro modelo de sistemas multi-bandas foi proposto por Suhl, Mathias e Walker [28] em 1959. A idéia era analisar sistemas supercondutores mais complexos e realistas, descrito por duas bandas de elétrons interagentes. Assim eles propuseram o seguinte Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SMW} = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k^s c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \varepsilon_k^d d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma}) - g_{ss} \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - g_{dd} \sum_{kk'} d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} \\ - g_{sd} \sum_{kk'} (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} + d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}), \end{aligned} \quad (2.6)$$

sendo ε_k^s e ε_k^d as energias cinéticas das bandas s e d , com $c_{k\sigma}$ ($c_{k\sigma}^\dagger$) e $d_{k\sigma}$ ($d_{k\sigma}^\dagger$) os correspondentes operadores de aniquilação (criação). Além disso, g_{ss} e g_{dd} são as interações atrativas efetivas na mesma banda, e g_{sd} é uma interação inter-bandas atrativa, e se diferencia da usual intra-banda por ser mediada entre elétrons itinerantes s e d . No geral, a equação (2.6) é um Hamiltoniano de duas bandas que se cruzam, e o propósito disso é descrever e-

mentos de transição que apresentem uma resistividade afetada pelo espalhamento entre elétrons itinerantes dos níveis s - d . Esse mesmo tipo de interação inter-banda, foi adotada por Iskin e Sá de Melo[29] para tratar da superfluidez em sistemas de duas bandas variando o limite de interações, indo do limite BCS ao BEC.

Dentro do contexto das interações inter-bandas, uma outra forma de emparelhamento não-usual foi abordada por Liu e Wilczek[30] e por Caldas[31]. O modelo LWC¹ é basicamente descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{LWC} = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \varepsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - g \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma}, \quad (2.7)$$

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

Com isso, podemos ver que as formas de interação atrativa para o emparelhamento em sistemas multi-bandas são da forma intra-banda e inter-banda. Assim podemos resumir as interações atrativas sendo da forma descrita por \mathcal{H}_{int}

$$\mathcal{H}_{int} = \mathcal{H}_{intra} + \mathcal{H}_{inter}, \quad (2.8)$$

sendo $\mathcal{H}_{intra} = -g \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger a_{-k'-\sigma}^\dagger a_{-k-\sigma} a_{k\sigma}$ a forma de emparelhamento intra-banda, mais comum e mais adotada para descrever os materiais supercondutores convencionais,

¹Relativo às iniciais Liu, Wilczek e Caldas.

e para \mathcal{H}_{inter} temos

$$\mathcal{H}_{inter} = \mathcal{H}_{inter}^{SWM} + \mathcal{H}_{inter}^{LWC}, \quad (2.9)$$

com

$$\mathcal{H}_{inter}^{SWM} = -g_{ab}^{SWM} \sum_{kk'} (a_{k'\uparrow}^\dagger a_{-k'\downarrow}^\dagger b_{-k\downarrow} b_{k\uparrow} + b_{k'\uparrow}^\dagger b_{-k'\downarrow}^\dagger a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow})$$

representando a interação inter-bandas descrita pelo modelo SWM visto na equação (2.6) e

$$\mathcal{H}_{inter}^{LWC} = -g_{ab}^{LWC} \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma}$$

representando a interação inter-banda do modelo LWC escrito em (2.7). Na próxima seção, vamos abordar os modelos multi-bandas adotando o modelo de redes de Kondo, que é padrão para descrever os férmions pesados. Por meio de algumas aproximações, esperamos obter um Hamiltoniano efetivo contendo os termos de interação atrativa e o mecanismo da mistura das bandas, que é um ingrediente fundamental do nosso trabalho.

2.2.1 Uma abordagem via Modelo de redes de Kondo-Heisenberg

As propriedades de algumas ligas compostas por átomos das terras raras tipo Ce e Yb está sempre relacionada com o fato de existir uma forte competição entre o efeito Kondo[32] e o ordenamento magnético via interação indireta Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida(RKKY)[33] em diferentes sítios da rede. Para descrever esses compostos, um modelo amplamente utilizado é o de redes de Kondo-Heisenberg, ou modelo KHLM². O Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H}_{KHLM} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + J_K \sum_i \vec{s}_i \cdot \vec{S}_i + \sum_{i,j} J_H(i,j) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.10)$$

sendo $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ a energia dos elétrons de condução, J_K o acoplamento Kondo intra-sítio entre um elétron de condução \vec{s} e um spin localizado \vec{S} , e J_H é a interação magnética entre os momentos localizados em primeiros vizinhos. Esse modelo considera momentos f

²Do inglês *Kondo-Heisenberg Lattice Model*

localizados de spin 1/2 com um elétron por sítio, enquanto que a banda de condução tem uma largura $2W$ e densidade de estados constante.

O modelo de redes de Kondo é geralmente estudado somente com o termo de interação intra-sítio $J_K \vec{s} \cdot \vec{S}$, sendo J_K a interação de troca antiferromagnética, pois tanto a interação magnética RKKY quanto o efeito Kondo surgem desse termo. Entretanto, é visto que é relativamente complicado obter ambos os resultados somente com o termo intra-sítio. Por esse motivo, Iglesias *et al.*[34] adiciona um termo inter-sítio no Hamiltoniano do modelo para descrever explicitamente ambos os comportamentos vistos na maioria dos FP. Para considerar as interações inter e intra-sítio como sendo antiferromagnéticas, é assumido que J_K e J_H são positivos. Podemos reescrever o Hamiltoniano em (2.10) por meio das relações fermiônicas

$$\begin{aligned} s_i^z &= \frac{1}{2} (n_{i\uparrow}^c - n_{i\downarrow}^c), & S_i^z &= \frac{1}{2} (n_{i\uparrow}^f - n_{i\downarrow}^f) \\ s_i^+ &= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}, & S_i^+ &= f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow} \\ s_i^- &= c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}, & S_i^- &= f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\uparrow} \end{aligned} \quad (2.11)$$

sendo $c_{i\sigma}$ os operadores relacionados com o elétron de condução e $f_{i\sigma}$ relacionado com o momento localizado, além de $n_{i\sigma}^c = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ e $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$ serem os operadores número. Depois de reescrever o Hamiltoniano como função dos operadores fermiônicos, são definidas as funções $\lambda_{i\sigma} \equiv c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$ e $\Gamma_{ij\sigma} \equiv f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma}$, sendo $\lambda_{i\sigma}$ uma função que representa as correlações Kondo intra-sítio e $\Gamma_{ij\sigma}$ representa uma correlação inter-sítio entre dois sítios vizinhos. Utilizamos uma aproximação de campo médio introduzida por Coleman e Andrei[35], levando em conta a invariância por translação, e considerando que não existem estados magnéticos. Assim, podemos escrever $\lambda = \langle \lambda_{i\sigma} \rangle$ para todos os sítios, e $\Gamma = \langle \Gamma_{ij\sigma} \rangle$ para sítios primeiros vizinhos e zero para os demais. Operando todas essas manipulações, obtemos o Hamiltoniano efetivo

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ef} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} (f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma}) + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \\ &\quad - J_K \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^c n_{i-\sigma}^f - \sum_{ij\sigma} J_H(i, j) n_{i\sigma}^f n_{j-\sigma}^f \end{aligned} \quad (2.12)$$

com $V \equiv -\lambda J_K$ sendo um termo de mistura similar à parcela da hibridização no modelo de Anderson[36] e $t_{ij} \equiv -\Gamma J_H(i, j)$ similar a um termo cinético (ou *hopping*) do modelo de Hubbard, que será visto mais adiante. Na verdade, o que foi feito para obter (2.12) foi uma

espécie de transformação Schrieffer-Wolff[37] inversa, pois a transformação usual mapeia o modelo de Anderson no modelo Kondo. Com isso, vemos que a motivação em adotar o modelo KHLM, é pelo fato de após as manipulações feitas, obtemos um Hamiltoniano de duas bandas típico. Ele contém os termos de interação atrativa intra-banda mediado por $J_H(i, j)$ e inter-banda similar ao LWC, mediado por J_K . Além disso, obtivemos a hibridização entre as bandas, e com isso temos um parâmetro que simula um mecanismo de controle externo sobre o sistema, como uma pressão mecânica, dopagem, ou outros mecanismos experimentais.

2.2.2 O potencial repulsivo local

Quando se estuda materiais baseados em metais de transição ou em terras raras, é importante levar em conta os efeitos de correlação elétron-elétron. Tal correlação é fundamental no estudo dos fenômenos magnéticos e dos mecanismos para o surgimento da supercondutividade em alguns desses materiais. Hubbard[38] analisou a competição entre a energia cinética dos elétrons e o potencial repulsivo Coulombiano entre os elétrons, por um modelo que é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{Hubbard} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \mathcal{U} \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.13)$$

com t_{ij} sendo a energia cinética dos férmions, relacionado com a probabilidade de saltar de um sítio i para outro j , e \mathcal{U} a interação Coulombiana entre dois férmions no mesmo sítio com spins contrários. Tal modelo se origina do fato que, nos metais de transição e em alguns metais lantanídeos como o *Ce* e o *Yb*, as propriedades magnéticas observadas neles são devido às bandas estreitas d no caso dos metais de transição, e f no caso dos lantanídeos. Tais bandas são caracterizadas pela pequena extensão espacial das funções de onda d e f . A interação Coulombiana \mathcal{U} é o termo dominante em ordem de grandeza. É observado por exemplo, nos metais de transição da série $3d$, a interação Coulombiana da ordem de $\mathcal{U} = 10 \text{ eV}$. Outras contribuições devido interações entre vizinhos são desprezadas, por serem de ordens de grandeza inferiores ao termo local. Explicitando a forma integral do potencial repulsivo Coulombiano local entre dois elétrons, podemos escrever

$$\mathcal{U} = \int |\phi_l(r - r_i)|^2 \frac{e^2}{|r - r'|} |\phi_l(r' - r_i)|^2 d^3r d^3r', \quad (2.14)$$

com e sendo a carga do elétron e $\phi_i(r - r_i)$ a função de onda atômica em um dado orbital “ l ” (d ou f por exemplo) centrada em um sítio i . Com isso, o potencial repulsivo local \mathcal{U} é um componente que não pode faltar na descrição desses sistemas supercondutores HTSC e FP. É visto que nesses compostos supercondutores, devido ao fato do potencial repulsivo evitar o emparelhamento local, a simetria do gap nesses sistemas dificilmente é da forma onda s isotrópica, podendo então ser da forma s estendida ou d [39]. Com isso, tanto os FP quanto os HTSC, e outros sistemas multi-bandas (em particular duas) de forma geral, podem ser descritos da forma

$$\mathcal{H}_{SC}^{Multi} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_{hib} + \mathcal{H}_{Coul}, \quad (2.15)$$

sendo cada parcela escrita como sendo:

- \mathcal{H}_0 , relativa às energias cinéticas das bandas;

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ij\sigma} (t_{ij}^A a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + t_{ij}^B b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma}). \quad (2.16)$$

- \mathcal{H}_{int} , relativa às interações atrativas que formam os pares de Cooper (sendo a as partículas da banda larga e b as da banda estreita;

$$\mathcal{H}_{int} = -g_{ab} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^a n_{i-\sigma}^b - \sum_{ij\sigma} G_{ij} n_{i\sigma}^b n_{j-\sigma}^b, \quad (2.17)$$

com g_{ab} sendo a interação atrativa local inter-banda similar ao caso LWC e G_{ij} a interação atrativa intra-banda não-local.

- \mathcal{H}_{hib} , relativa à parcela responsável pela mistura, ou hibridização dos férmions nas diferentes bandas;

$$\mathcal{H}_{hib} = V \sum_{i\sigma} (a_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} + b_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}), \quad (2.18)$$

com V sendo a magnitude da hibridização.

- \mathcal{H}_{Coul} , relativa ao potencial repulsivo Coulombiano local entre dois férmions da banda estreita no mesmo sítio;

$$\mathcal{H}_{Coul} = \mathcal{U} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^b n_{i-\sigma}^b, \quad (2.19)$$

com \mathcal{U} sendo dado pela equação (2.14).

Neste trabalho iremos tratar o Hamiltoniano geral proposto em (2.15) de forma separada: No capítulo 3, estudaremos o *crossover* BCS-BEC no modelo de duas bandas com as interações atrativas inter e intra-banda com hibridização sem levar em conta o termo repulsivo Coulombiano. No capítulo 4, o foco será tratar os efeitos de \mathcal{U} no sistema descrito pelo modelo de duas bandas, estudando de forma simples seus efeitos no *crossover* BCS-BEC sob fracas intensidades do potencial repulsivo. Porém, o foco desse capítulo será estudar os efeitos de fortes intensidades de \mathcal{U} adotando a aproximação Hubbard-I[38]. Por fim, no capítulo 5 adotaremos o modelo um pouco mais simplificado para estudar o sistema FP $CeCoIn_{5-x}Sn_x$.

Capítulo 3

O *Crossover* BCS-BEC no modelo de duas bandas

Neste capítulo é proposto estudar a física do *crossover* BCS-BEC e sua relevância para a física da matéria condensada utilizando um modelo multi-banda[40] tipo Hubbard, que é mais apropriado para estudar sistemas como os férmions pesados ou a nova família de supercondutores tipo ferro-pnictídeos (*FeAs*)[41]. Consideraremos um modelo de duas bandas onde as *quasi*-partículas possuem massas efetivas diferentes. Uma banda é associada a banda estreita das *quasi*-partículas pesadas e a outra, a banda larga, associada aos elétrons de condução não correlacionados. Esse tipo de modelo é ideal para descrever compostos de *Ce*, *Yb* e *U*, onde a banda estreita é formada por camadas não preenchidas dos elétrons *f* e a banda larga descreve as *quasi*-partículas *s*, *p* ou *d*. No caso dos pnictídeos de ferro, a banda estreita é formada pelos elétrons *d*. Estudamos o modelo de forma completa levando em conta as interações intra-banda e inter-banda, além do termo de hibridização. As origens microscópicas dessas interações não são especificadas, pois suas relativas importâncias variam de sistema para sistema. O motivo de incluir a hibridização explicitamente no Hamiltoniano é que ela pode ser alterada diretamente pela pressão externa e conseqüentemente, pode ser usado como um parâmetro de controle para explorar o diagrama de fases desses sistemas, como por exemplo ser usado na descrição de pontos críticos quânticos supercondutores (PCQS), separando a fase normal do estado supercondutor. Este mesmo modelo pode ser usado para descrever estados supercondutores[42, 43] com diferentes tipos de simetrias[44]. Os estudos experimentais

de sistemas físicos do estado sólido que são de nosso interesse diferem significativamente dos sistemas dos átomos frios. No caso dos átomos frios é possível controlar a magnitude das interações enquanto nos sólidos, a princípio, não é possível. Nos sistemas sólidos o parâmetro mais comum de controle é a dopagem, pressão ou campo magnético. Em particular, a razão da hibridização com a largura da banda pode ser controlada pela pressão externa. Embora seja possível que a magnitude da interação dependa da hibridização, seu efeito mais importante de fato é transferir *quasi*-partículas entre as diferentes bandas renormalizadas. Para a supercondutividade intra-banda, que geralmente domina nos metais[28], o efeito da hibridização é enfraquecer a interação atrativa e eventualmente destruir o estado supercondutor. De forma simples, é como se o efeito da hibridização V que estudamos fosse similar a dopagem, porém sem efeitos de desordem.

Em resumo, nesse capítulo será estudada a supercondutividade no modelo de duas bandas, com o intuito de obter as equações para as amplitudes dos *gaps* supercondutores e analisar a evolução do sistema entre o limite de acoplamentos fracos (BCS) e acoplamentos fortes (BEC), e ver a influência da hibridização no sistema.

3.1 O modelo

Para tratar o problema será introduzido o modelo e depois serão calculadas as equações de movimento para as funções de Green, e de posse dos propagadores, é possível obter as equações do *gap* (intra e inter-banda) e a equação do número. O Hamiltoniano proposto para descrever o sistema é o seguinte:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^s c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k},\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) - U \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^c n_{i-\sigma}^f - \sum_{ij\sigma} G_{ij} n_{i\sigma}^f n_{j-\sigma}^f \quad (3.1)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) e $f_{i\sigma}^\dagger$ ($f_{i\sigma}$) são os operadores de criação (aniquilação) dos elétrons s ou f . V é o termo de hibridização local, U o termo de interação local atrativo inter-banda e G_{ij} é o termo de atração não-local $f - f$ intra-banda. Os mecanismos por trás das interações atrativas não serão o foco do trabalho, mas é de conhecimento que em sistemas supercondutores convencionais elas podem ter origem nos fônons, como indica o efeito

isotópico nesses materiais, observado por exemplo no caso do mercúrio (*Hg*)[4, 5]; nos supercondutores de alta temperatura crítica e nos compostos supercondutores férmions pesados, os mecanismos por trás das interações atrativas estão relacionados com flutuações de carga ou de spin[45, 46, 47]. Podemos relacionar as energias relativa às duas bandas ($\varepsilon_{\mathbf{k}}^s$ e $\varepsilon_{\mathbf{k}}^f$) com seus respectivos *hoppings* no espaço das posições ($t_{i,j}^A$ e $t_{i,j}^B$) por meio da transformada de Fourier

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{s,f} = \sum_j t_{ij}^{A,B} e^{ik(r_i - r_j)} \quad (3.2)$$

Modelos multi-bandas, em particular de duas bandas, são usados para descrever uma larga variedade de sistemas, como metais de transição[48], compostos baseados em cupratos[49], correlações excitônicas com supercondutividade[50], sistemas férmions pesados[51] e recentemente foi visto que pode ser usado para descrever a supercondutividade nos novos supercondutores baseados em *Fe*[52], como *FeAs*[41] e o *FeSe*[53].

De fato, uma descrição completa de sistemas supercondutores necessita levar em conta um termo devivo à um potencial repulsivo local entre os elétrons da banda estreita onde ocorre o emparelhamento, aqui representada pela banda *f*[54]. Entretanto a proposta inicial nesse capítulo é ver as diferenças entre o *crossover* BCS-BEC no modelo de duas bandas em comparação com o de uma banda, pois no nosso tratamento temos a hibridização e, além do termo atrativo intra-banda usual, temos também o termo inter-banda. Como foi visto no capítulo anterior, os parâmetros no modelo podem ser considerados como parâmetros efetivos obtidos no modelo de redes de Kondo-Heisenberg reescrevendo os operadores de spin em função de operadores fermiônicos.

3.2 As equações de movimento

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

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

onde A, B são operadores fermiônicos e \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema. Assim, calculando $\ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg$ por meio da relação

$$\omega \ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{1}{2\pi} \left\langle \left\{ f_{j\sigma}, f_{i\sigma'}^\dagger \right\} \right\rangle + \ll [f_{j\sigma}, \mathcal{H}]; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (3.4)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \omega \ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &= \frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ &\quad + \Delta_{cf} \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Os outros da mesma forma

$$\omega \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_{cf} \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (3.6)$$

com as funções de Green anômalas introduzidas por Gorkov[55] também calculadas

$$\omega \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = - \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + \Delta_{cf} \ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (3.7)$$

e

$$\begin{aligned} \omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &= - \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ &\quad - \Delta_{cf} \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Nos cálculos, já foram realizados desacoplamentos tipo campo médio, ou Hartree-Fock, para os propagadores de ordem superior introduzindo os parâmetros de ordem supercondutores tipo BCS[2]

$$\begin{aligned} \Delta_{cf} &= U \langle c_{i\sigma}^\dagger f_{i-\sigma}^\dagger \rangle \\ \Delta_{lj} &= G_{lj} \langle f_{l\sigma}^\dagger f_{j-\sigma}^\dagger \rangle, \end{aligned} \quad (3.9)$$

inter-banda e intra-banda ambos considerados sendo reais, respectivamente. Para calcular o propagador $\ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg$, segue-se o mesmo procedimento anterior, obtendo um outro sistema de equações

$$\omega \ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_{cf} \ll f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (3.10)$$

$$\omega \ll f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + \Delta_{cf} \ll c_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (3.11)$$

$$\omega \ll c_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = - \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + \Delta_{cf} \ll f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (3.12)$$

e

$$\omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = - \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_{cf} \ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg. \quad (3.13)$$

Fazendo uma transformada de Fourier nos dois sistemas, obtemos os propagadores do sistema no espaço k

$$\left\{ \begin{array}{l} (\omega - \varepsilon_k^f) \ll f_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg = \frac{\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + V \ll c_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_k \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg + \Delta_{cf} \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ (\omega - \varepsilon_k^s) \ll c_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg = V \ll f_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_{cf} \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ (\omega + \varepsilon_k^s) \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg = -V \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg + \Delta_{cf} \ll f_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ (\omega + \varepsilon_k^f) \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg = -V \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_k \ll f_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_{cf} \ll c_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg \end{array} \right. \quad (3.14)$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} (\omega - \varepsilon_k^s) \ll c_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg = \frac{\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + V \ll f_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_{cf} \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ (\omega - \varepsilon_k^f) \ll f_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg = V \ll c_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_k \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg + \Delta_{cf} \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ (\omega + \varepsilon_k^f) \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg = -V \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_k \ll f_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg - \Delta_{cf} \ll c_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ (\omega + \varepsilon_k^s) \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg = -V \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg + \Delta_{cf} \ll f_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \end{array} \right. \quad (3.15)$$

onde depois da transformada de Fourier o parâmetro de ordem supercondutor intra-banda passa a depender explicitamente de k como segue $\Delta_k = \sum_{k'} G(k, k') < f_{k'\sigma}^\dagger f_{-k'-\sigma}^\dagger >$. A forma de $G(k, k')$ será especificada posteriormente. Passando para forma matricial os dois sistemas de equações, obtemos

$$\begin{pmatrix} (\omega - \varepsilon_k^f) & -V & -\Delta_{cf} & \Delta_k \\ -V & (\omega - \varepsilon_k^s) & 0 & \Delta_{cf} \\ -\Delta_{cf} & 0 & (\omega + \varepsilon_k^s) & V \\ \Delta_k & \Delta_{cf} & V & (\omega + \varepsilon_k^f) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ll f_{k\sigma}; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ \ll c_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k'\sigma'}^\dagger \gg \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

e

$$\begin{pmatrix} (\omega - \varepsilon_k^s) & -V & \Delta_{cf} & 0 \\ -V & (\omega - \varepsilon_k^f) & \Delta_k & -\Delta_{cf} \\ \Delta_{cf} & \Delta_k & (\omega + \varepsilon_k^f) & V \\ 0 & -\Delta_{cf} & V & (\omega + \varepsilon_k^s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ll c_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ \ll f_{k\sigma}; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \\ \ll c_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k'\sigma'}^\dagger \gg \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Assim é possível obter diretamente os propagadores de interesse dos dois sistemas utilizando a regra de Cramer, que resulta em

$$\ll f_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \gg = \frac{(\omega^2 - \varepsilon_k^{s2})(\omega + \varepsilon_k^f) - \Delta_{cf}^2(\omega + \varepsilon_k^s) - V^2(\omega - \varepsilon_k^s)}{2\pi P(\omega)}, \quad (3.18)$$

$$\ll c_{k\sigma}; c_{k\sigma}^\dagger \gg = \frac{(\omega^2 - \varepsilon_k^{f2})(\omega + \varepsilon_k^s) - \Delta_{cf}^2(\omega + \varepsilon_k^f) - V^2(\omega - \varepsilon_k^f) - \Delta_k^2(\omega + \varepsilon_k^s)}{2\pi P(\omega)}, \quad (3.19)$$

$$\ll f_{-k-\sigma}^\dagger; c_{k\sigma}^\dagger \gg = \frac{\Delta_{cf}^3 + V\Delta_k(\omega + \varepsilon_k^s) - \Delta_{cf}V^2 - \Delta_{cf}(\omega + \varepsilon_k^s)(\omega - \varepsilon_k^f)}{2\pi P(\omega)}, \quad (3.20)$$

e

$$\ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \gg = \frac{2\Delta_{cf}\omega V - \Delta_k(\omega^2 - \varepsilon_k^{s2})}{2\pi P(\omega)}, \quad (3.21)$$

onde $P(\omega)$ é o polinômio obtido a partir do determinante das matrizes dos coeficientes dos sistemas (3.16) e (3.17)

$$P(\omega) = \omega^4 - \left[\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} + 2(\Delta_{cf}^2 + V^2) + \Delta_k^2 \right] \omega^2 + \{ [\varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - (V^2 - \Delta_{cf}^2)]^2 + \Delta_k^2 \varepsilon_k^{s2} \}. \quad (3.22)$$

3.3 Energias de excitação

Os pólos das funções de Green descrevem as energias de excitação do sistema, e são obtidos fazendo nulo o denominador das equações (3.18) a (3.21). Assim, calculadas as raízes do polinômio $P(\omega)$ em (3.22), reescreve-se os denominadores dos propagadores em função das energias com segue

$$2\pi P(\omega) = (\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4), \quad (3.23)$$

onde

$$\omega_{1,2,3,4} = \pm \sqrt{A(k) \pm \sqrt{B(k)}}, \quad (3.24)$$

com

$$A(k) = \frac{\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} + 2(\Delta_{cf}^2 + V^2) + \Delta_k^2}{2}$$

e

$$B(k) = \left[\frac{\Delta_k^2 - (\varepsilon_k^{s2} - \varepsilon_k^{f2})}{2} \right]^2 + V^2 \left[(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)^2 + \Delta_k^2 \right] + \Delta_{cf}^2 \left[(\varepsilon_k^s - \varepsilon_k^f)^2 + \Delta_k^2 + 4V^2 \right]. \quad (3.25)$$

É possível notar que

$$\omega_1 = \sqrt{A(k) + \sqrt{B(k)}} = -\omega_3$$

e

$$\omega_2 = \sqrt{A(k) - \sqrt{B(k)}} = -\omega_4.$$

Dessa forma, é reescrito o denominador $2\pi P(\omega)$ em função das raízes como segue

$$2\pi P(\omega) = (\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - \omega_2^2). \quad (3.26)$$

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

$$\ll B; A \gg = \frac{\mathcal{F}_k(\omega)}{(\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - \omega_2^2)}, \quad (3.27)$$

onde $\mathcal{F}_k(\omega)$ é específico de cada propagador. Simplificando em frações parciais, teremos

$$\ll B; A \gg = \frac{\mathcal{F}_k(\omega)}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{1}{\omega_1} \left(\frac{1}{\omega - \omega_1} - \frac{1}{\omega + \omega_1} \right) - \frac{1}{\omega_2} \left(\frac{1}{\omega - \omega_2} - \frac{1}{\omega + \omega_2} \right) \right] \quad (3.28)$$

As funções de correlação são calculadas adotando o teorema do salto (ver apêndice A), e é obtido assim

$$\langle AB \rangle = \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left(\frac{\mathcal{F}_k(\omega_1) f_{FD}(\omega_1) - \mathcal{F}_k(-\omega_1) f_{FD}(-\omega_1)}{\omega_1} - \frac{\mathcal{F}_k(\omega_2) f_{FD}(\omega_2) - \mathcal{F}_k(-\omega_2) f_{FD}(-\omega_2)}{\omega_2} \right). \quad (3.29)$$

Com (3.29) calculamos diretamente as funções de correlação para calcular a equação do número e as equações do *gap*, especificando as funções $\mathcal{F}_k(\omega)$.

- Para $\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \rangle \Rightarrow \mathcal{F}_k^a(\omega) = (\omega^2 - \varepsilon_k^s)(\omega + \varepsilon_k^f) - \Delta_{cf}^2(\omega + \varepsilon_k^s) - V^2(\omega - \varepsilon_k^s)$,
temos

$$\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^s) \varepsilon_k^f - (\Delta_{cf}^2 - V^2) \varepsilon_k^s}{\omega_1} \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^s) \varepsilon_k^f - (\Delta_{cf}^2 - V^2) \varepsilon_k^s}{\omega_2} \tanh\left(\frac{\beta\omega_2}{2}\right) \right] \right\}. \quad (3.30)$$

- Para $\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle \Rightarrow \mathcal{F}_k^b(\omega) = (\omega^2 - \varepsilon_k^f)(\omega + \varepsilon_k^s) - \Delta_{cf}^2(\omega + \varepsilon_k^f) - V^2(\omega - \varepsilon_k^f) - \Delta_k^2(\omega + \varepsilon_k^s)$,
temos

$$\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^f) \varepsilon_k^s - (\Delta_{cf}^2 - V^2) \varepsilon_k^f - \Delta_k^2 \varepsilon_k^s}{\omega_1} \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^f) \varepsilon_k^s - (\Delta_{cf}^2 - V^2) \varepsilon_k^f - \Delta_k^2 \varepsilon_k^s}{\omega_2} \tanh\left(\frac{\beta\omega_2}{2}\right) \right] \right\}. \quad (3.31)$$

- Para $\langle c_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle \Rightarrow \mathcal{F}_k^c(\omega) = \Delta_{cf}^3 + V \Delta_k(\omega + \varepsilon_k^s) - \Delta_{cf} V^2 - \Delta_{cf}(\omega + \varepsilon_k^s)(\omega - \varepsilon_k^f)$,
temos

$$\langle c_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle = \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2) \Delta_{cf} - V \Delta_k \varepsilon_k^s}{\omega_1} \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2) \Delta_{cf} - V \Delta_k \varepsilon_k^s}{\omega_2} \tanh\left(\frac{\beta\omega_2}{2}\right) \right]. \quad (3.32)$$

- Para $\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle \Rightarrow \mathcal{F}_k^d(\omega) = 2\Delta_{cf}\omega V - \Delta_k(\omega^2 - \varepsilon_k^{s2})$,
temos

$$\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle = \frac{\Delta_k}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_1} \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_2} \tanh\left(\frac{\beta\omega_2}{2}\right) \right]. \quad (3.33)$$

Para calcular as funções obtidas anteriormente foram utilizadas as relações entre as funções de Fermi-Dirac

$$f_{FD}(x) + f_{FD}(-x) = 1$$

e

$$f_{FD}(-x) - f_{FD}(x) = \tanh\left(\frac{x}{2}\right).$$

Agora, com as funções de correlação (3.30) e (3.31) montamos a equação do número total somando ambos resultados

$$n_k = \langle n_k^c \rangle + \langle n_k^f \rangle. \quad (3.34)$$

Assim, a função distribuição total dos elétrons é dada por

$$n_k = \left\{ 1 - \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_1^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s[\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f(\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_1} \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) - \frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_2^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s[\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f(\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_2} \tanh\left(\frac{\beta\omega_2}{2}\right) \right] \right\} \quad (3.35)$$

No que segue, será considerado que as bandas são homotéticas[56], ou seja, elas são relacionadas entre si na forma $\varepsilon_k^f = \alpha\varepsilon_k^s$, onde $\alpha = \frac{m}{m_f}$ é a razão entre as massas efetivas das quasi-partículas nas duas bandas. Como a massa efetiva das quasi-partículas relacionadas com a banda estreita é geralmente maior do que a massa da banda larga (ou de condução), tem-se que $\alpha < 1$. A energia de excitação de uma única partícula é escolhida como sendo parabólica (tipo partícula livre) $\varepsilon_k^s = \frac{k^2}{2m} - \mu$. As larguras das bandas larga s e estreita f são consideradas como W e D respectivamente, onde a relação entre elas é dada por $D = \alpha W$. Nas equações e nos cálculos, fixa-se o número total de elétrons para estudar o comportamento das amplitudes dos *gaps* (intra e inter-banda) e do potencial químico μ em função do acoplamento, tomando-se em conta que $N = n_f + n_c = cte$.

3.4 Efeitos da hibridização no *crossover* BCS-BEC

De posse de todas as funções de correlação de interesse do sistema, calculamos agora a equação do número e as equações de *gap* auto-consistentes para os parâmetros de ordem supercondutores inter e intra-banda. Ao longo de todo esse capítulo, será somente tratado o sistema em temperatura nula $T = 0$ e tridimensional (3D) para ver como a hibridização atua no sistema quando passamos do regime de acoplamento fraco para forte na supercondutividade. Assim, com a função distribuição em (3.35) calculamos a equação do número $N = \sum_k n_k$ para $T = 0$

$$N = \sum_k \left\{ 1 - \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_1^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s [\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f (\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_1} - \frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_2^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s [\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f (\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_2} \right] \right\}. \quad (3.36)$$

A soma em k é reescrita na forma integral para o caso $d = 3$ através de

$$\sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k, \quad (3.37)$$

com $d^3k = k^2 \sin\theta d\theta d\phi$. Assim é obtida a equação integral para N , já efetuando as integrais em θ e ϕ por não existir no integrando nenhuma dependência nessas variáveis. Esta equação é dada por

$$N = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \left\{ 1 - \frac{\varepsilon_k^s}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2 - \alpha\varepsilon_k^{s2})(1 + \alpha) - \Delta_k^2}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2 - \alpha\varepsilon_k^{s2})(1 + \alpha) - \Delta_k^2}{\omega_2} \right] \right\} k^2 dk. \quad (3.38)$$

Como já colocamos anteriormente, adotamos a forma da banda larga como sendo parabólica. Fazendo as seguintes considerações

$$\varepsilon_k^s \equiv \xi = \frac{k^2}{2m} - \mu \Rightarrow \frac{d\xi}{dk} = \frac{k}{m} \Rightarrow kdk = md\xi, \quad (3.39)$$

e por sua vez

$$\frac{k^2}{2m} = \xi + \mu \Rightarrow k = \sqrt{2m(\xi + \mu)}. \quad (3.40)$$

Com essa mudança de variável, temos que os novos limites de integração serão modificados de forma que, se $k = 0$, $\xi = -\mu$; e se $k = \infty$, $\xi = \infty$. Dessa maneira a integral em (3.38) é modificada como segue

$$N = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\mu}^{\infty} \left\{ 1 - \frac{\xi}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2 - \alpha\xi^2)(1 + \alpha) - \Delta_k^2}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \Delta_{cf}^2 + V^2 - \alpha\xi^2)(1 + \alpha) - \Delta_k^2}{\omega_2} \right] \right\} \sqrt{2m(\xi + \mu)} md\xi. \quad (3.41)$$

Após algumas manipulações, obtemos uma expressão integral para a equação do número onde todos os parâmetros do sistema estão normalizados pela energia de Fermi $E_F = \frac{k_F^2}{2m}$, onde k_F é o vetor de onda de Fermi, resultando em

$$N = \frac{k_F^3}{4\pi^2} \int_{-\bar{\mu}}^{\infty} \sqrt{x + \bar{\mu}} \left\{ 1 - \frac{x}{2(\bar{\omega}_{1x}^2 - \bar{\omega}_{2x}^2)} \left[\frac{(\bar{\omega}_{1x}^2 - \bar{\Delta}_{cf}^2 + \bar{V}^2 - \alpha x^2)(1 + \alpha) - \bar{\Delta}_k^2}{\bar{\omega}_{1x}} - \frac{(\bar{\omega}_{2x}^2 - \bar{\Delta}_{cf}^2 + \bar{V}^2 - \alpha x^2)(1 + \alpha) - \bar{\Delta}_k^2}{\bar{\omega}_{2x}} \right] \right\} dx, \quad (3.42)$$

onde $x \equiv \xi/E_F$ é a variável de integração adimensional, e as sobre-barras nos outros parâmetros indicam que estão normalizados também por E_F . Dessa maneira, as energias de excitação das *quasi*-partículas também são renormalizadas como segue

$$\bar{\omega}_{1,2x} = \sqrt{A(x) \pm B(x)}, \quad (3.43)$$

sendo que

$$A(x) = \frac{x^2 + \alpha x^2 + 2(\bar{\Delta}_{cf}^2 + \bar{V}^2) + \bar{\Delta}_k^2}{2} \quad (3.44)$$

e

$$B(x) = \left[\frac{\bar{\Delta}_k^2 - x^2(1 - \alpha^2)}{2} \right]^2 + \bar{V}^2 \left[x^2(1 + \alpha)^2 + \bar{\Delta}_k^2 \right] + \bar{\Delta}_{cf}^2 \left[x^2(1 - \alpha)^2 + \bar{\Delta}_k^2 + 4\bar{V}^2 \right]. \quad (3.45)$$

Agora então, iniciamos os cálculos das equações dos *gaps* supercondutores intra e inter-banda, que serão resolvidas simultaneamente com a equação do número já calculada. Isso tornará possível estudar o comportamento do sistema por todas as regiões de interação atrativa, vindo do regime de acoplamentos fracos e indo para o regime de acoplamentos fortes. Assim esperamos encontrar mudanças nesse comportamento através da amplitude do *gap* e do potencial químico em uma dada região de interações, onde poderá ser visto o *crossover* entre os dois limites. Inicialmente, será estudado o caso da supercondutividade intra-banda.

3.4.1 Caso intra-banda

Para inciar os cálculos, o ponto de partida é a equação para o parâmetro de ordem supercondutor intra-banda

$$\Delta_k = \sum_{k'} G(k, k') \langle f_{k'\sigma}^\dagger f_{-k'-\sigma}^\dagger \rangle. \quad (3.46)$$

De posse da função de correlação $\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle$ obtida em (3.33), temos que a equação para o parâmetro de ordem supercondutor para $T = 0$ intra-banda é escrita como segue

$$\Delta_k = \sum_{k'} G(k, k') \frac{\Delta_{k'}}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_{k'}^s{}^2)}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_{k'}^s{}^2)}{\omega_2} \right]. \quad (3.47)$$

A partir daqui, será retratado os detalhes por trás da forma do potencial atrativo $G(k, k')$ e suas implicações na análise da supercondutividade intra-banda. Nesse primeiro caso, o trabalho segue Nozières e Schmitt-Rink[13] para tratar o termo da interação, ou seja, será considerado o potencial como sendo separável da forma que segue

$$G(k, k') = G_0 \gamma(k) \gamma(k') \quad (3.48)$$

com

$$\gamma(k) = (1 + k^2/k_0^2)^{-1/2}, \quad (3.49)$$

onde k_0 é relacionado com a região de interação $R_0 = 1/k_0$ e a intensidade da interação intra-banda G_0 é constante. Na teoria BCS usual, ou seja, quando o sistema encontra-se

no limite de acoplamentos fracos, o emparelhamento ocorre em uma pequena região em torno do nível de Fermi, delimitada através de uma energia de corte. Para tratar do limite de acoplamentos fortes em mesmas condições do limite de acoplamentos fracos, $\gamma(k)$ deve preferivelmente interpolar suavemente entre pequenos e grandes k . Nesse sentido, na referência [57] é proposto que $\gamma(k) = (1 + k^2/k_0^2)^{-\eta}$ com $\eta > 0$. No trabalho citado, eles mostram que a restrição $1/4 < \eta < 3/4$ garante as funções de correlação relevantes para o problema, bem como o raio do estado ligado para o problema de dois corpos associados desaparecer no limite $G_0 \rightarrow \infty$. No que segue os cálculos, adotaremos $\eta = 1/2$ como já tinha sido escrito previamente em (3.49), adotado por Nozières e Schmitt-Rink.

De fato, em uma rede, o potencial deve ser função de $k - k'$; $V(k - k')$ pode ser escrito como sendo a soma das componentes com simetria s, p, d, \dots , sendo então da forma $V(k - k') = V_s(k, k') + V_p(k, k') + V_d(k, k') + \dots$ [58]. Neste capítulo, o foco de interesse é somente em estudar a supercondutividade com simetria de *gap* tipo s -extendida. Além disso, em uma rede cúbica, $V_s(k, k')$ é separável como mostrado por Bastide *et al.*[54]. Se o potencial é da forma como está escrito em (3.48), o parâmetro de ordem superconductor é dado por[13, 18]

$$\Delta_k = \Delta_0 \gamma(k) = \frac{\Delta_0}{(1 + k^2/k_0^2)^{1/2}} \quad (3.50)$$

onde Δ_0 é a amplitude do parâmetro de ordem, que é uma constante. Assim, após as considerações sobre a forma do potencial atrativo e do parâmetro de ordem, a equação (3.47) se torna

$$\frac{\Delta_0}{(1 + k^2/k_0^2)^{1/2}} = \sum_{k'} \frac{\Delta_0 G_0}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)(1 + k^2/k_0^2)^{1/2}(1 + k'^2/k_0^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_{k'}^{s,2})}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_{k'}^{s,2})}{\omega_2} \right]. \quad (3.51)$$

Simplificando

$$\frac{1}{G_0} = \sum_k \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)(1 + k^2/k_0^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^{s,2})}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^{s,2})}{\omega_2} \right]. \quad (3.52)$$

Para um superconductor convencional, a teoria BCS adota um *cutoff* (ou corte) natural para resolver (3.52): nesse caso as interações atrativas são mediadas pelos fônons, e essa

atração pode ser limitada em energias menores que a energia de Debye $\hbar\omega_D$ próximo ao nível de Fermi, como já foi dito anteriormente na discussão sobre a forma do potencial atrativo. No regime de acoplamentos fortes da supercondutividade, esse corte já não pode ser aceito, uma vez que nesse novo quadro todos os elétrons podem participar na interação, incluindo aqueles fora da camada de energia de Debye. Nesse caso, se for efetuada diretamente a soma em (3.52), é encontrada uma divergência que impossibilita estudar a supercondutividade no regime de acoplamentos fortes via teoria BCS usual. Uma das soluções adotadas na literatura é eliminar essa divergência renormalizando a equação do *gap* introduzindo o observável experimental a_s , que é o comprimento de espalhamento das ondas- s . O parâmetro a_s pode ser positivo ou negativo, e experimentalmente é observado através de medidas da ressonância de Feshbach em sistemas de átomos frios[59]. Nos trabalhos onde essa renormalização é efetuada[16, 17, 26], geralmente são tratados sistemas de uma banda de elétrons, e para o qual é utilizada a equação(para $\hbar = 1$)

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{g} + \sum_k \frac{m}{k^2} \quad (3.53)$$

que relaciona o potencial atrativo g do sistema de uma banda com a_s além de uma parcela que corrige a divergência ultravioleta na equação do *gap*. Essa expressão é obtida no limite de baixas energias do problema de dois corpos no vácuo como é discutido em [60]. No atual problema de duas bandas, será considerado que essa relação entre o potencial atrativo e a_s continua válida, bastando somente obter a parcela que é obtida para grandes vetores de onda k , como é sugerido por Randeria *et al.* na referência [61]. Para a equação do *gap* em (3.52), a equação renormalizada obtida é dada por

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{G_0} + \sum_k f(\alpha)\gamma(k)^2 \frac{m}{k^2}, \quad (3.54)$$

onde $f(\alpha)$ é uma função que só depende da razão entre as massas das *quasi*-partículas obtida no limite de grandes vetores de onda. Nesse caso, todas as outras grandezas se tornam desprezíveis, e temos que $f(\alpha) = 1/\alpha$. Assim, com (3.52) e (3.54) elimina-se a dependência explícita da equação do *gap* intra-banda com G_0 como segue

$$-\frac{m}{4\pi a_s} = \sum_k \frac{1}{(1 + k^2/k_0^2)} \left\{ \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_2} \right] - \frac{m}{\alpha k^2} \right\}. \quad (3.55)$$

Como foi feito para a equação do número, reescrevemos a soma discreta para a forma integral tridimensional através da relação (3.37). Integrando em θ e ϕ , encontra-se a seguinte expressão

$$-\frac{m}{4\pi a_s} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{1}{(1+k^2/k_0^2)} \left\{ \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^2)}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^2)}{\omega_2} \right] - \frac{m}{\alpha k^2} \right\} k^2 dk. \quad (3.56)$$

Com auxílio das mudanças feitas em (3.39) e (3.40) e fazendo algumas manipulações para normalizar todos os parâmetros pela energia de Fermi E_F , é possível evidenciar k_F , para obter no lado esquerdo da igualdade o parâmetro adimensional $1/k_F a_s$, que será a nova constante que mediará a intensidade do acoplamento atrativo do sistema da forma que segue na equação (3.57)

$$-\frac{1}{k_F a_s} = \frac{1}{\pi} \int_{-\bar{\mu}}^\infty \frac{1}{\left[1 + \frac{(x+\bar{\mu})}{\bar{E}_0}\right]} \left\{ \frac{\sqrt{(x+\bar{\mu})}}{(\bar{\omega}_{1x}^2 - \bar{\omega}_{2x}^2)} \left[\frac{(\bar{\omega}_{1x}^2 - x^2)}{\bar{\omega}_{1x}} - \frac{(\bar{\omega}_{2x}^2 - x^2)}{\bar{\omega}_{2x}} \right] - \frac{1}{\alpha \sqrt{(x+\bar{\mu})}} \right\} dx. \quad (3.57)$$

\bar{E}_0 é a energia relacionada com o momento k_0 ($E_0 = k_0^2/2m$), e seguindo a mesma notação da equação do número, a sobre-barras nos parâmetros indicam que estão normalizados pela energia de Fermi. Note que para esse caso, está sendo estudado a supercondutividade intra-banda pura, ou seja, o termo atrativo inter-banda é feito $U = 0 \rightarrow \Delta_{cf} = 0$, e dessa maneira as energias das *quasi*-partículas ficam

$$\bar{\omega}_{1,2x} = \sqrt{A(x) \pm \sqrt{B(x)}}; \quad (3.58)$$

$$A(x) = \frac{x^2 + \alpha x^2 + 2\bar{V}^2 + \bar{\Delta}_k^2}{2}, \quad (3.59)$$

e

$$B(x) = \left[\frac{\bar{\Delta}_k^2 - x^2(1 - \alpha^2)}{2} \right]^2 + \bar{V}^2 \left[x^2(1 + \alpha)^2 + \bar{\Delta}_k^2 \right]. \quad (3.60)$$

Agora, $1/k_F a_s$ é a constante de acoplamento intra-banda adimensional. Quando $1/k_F a_s \rightarrow -\infty$, o sistema se encontra no limite de acoplamento fraco ou limite BCS. Já quando $1/k_F a_s \rightarrow +\infty$ o sistema encontra-se no limite de acoplamentos fortes ou limite BEC[62]. Com isso, para ver a evolução da amplitude do *gap* supercondutor com o aumentar da interação atrativa, solucionamos simultaneamente a equação do *gap* em (3.57) com a equação do número (3.42), que será mantido fixo. Com isso analisaremos como o potencial químico se modifica para manter o número fixo ao longo da evolução entre ambos limites.

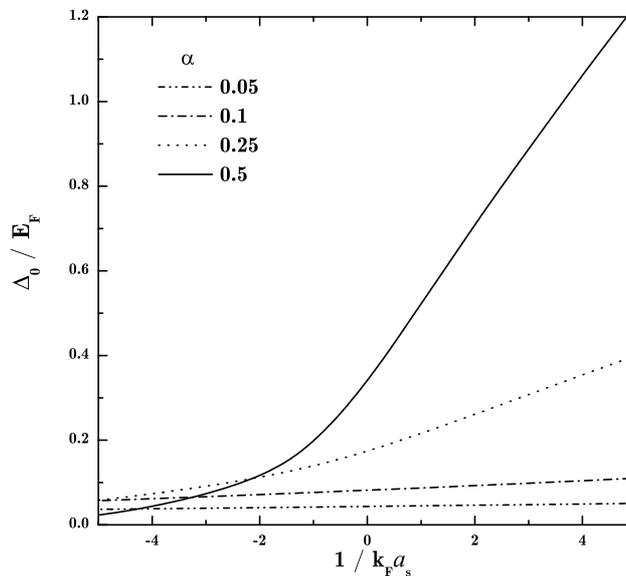


Figura 3.1: Como a função de *gap* intra-banda varia com α

Na Figura (3.1) é visto inicialmente o comportamento das soluções para amplitude do *gap* supercondutor intra-banda para diferentes valores da razão entre as massas das duas bandas α . É possível ver na Figura que, basicamente o efeito da mudança de α é na magnitude da amplitude do *gap* supercondutor. Quando essa razão é muito pequena, ou seja, a massa das *quasi*-partículas na banda estreita são muito pesadas, a amplitude do *gap* praticamente não se altera quando se compara com o caso onde $\alpha \sim 1$. Porém, a evolução contínua entre os limites de acoplamento fraco para acoplamento forte ainda é observada se for aumentado a região de $1/k_F a_s$ a ser analisada. Daqui por diante, por

conveniência será adotado o caso onde $\alpha = 0.5$, que é uma escolha razoável para visualizar a evolução entre ambos os limites que ocorre entre $-1 \leq 1/k_F a_s \leq +1$ para valores de $\bar{\Delta}_0 \sim 1$. Será considerado que o sistema está no limite diluído, ou seja, o espaçamento

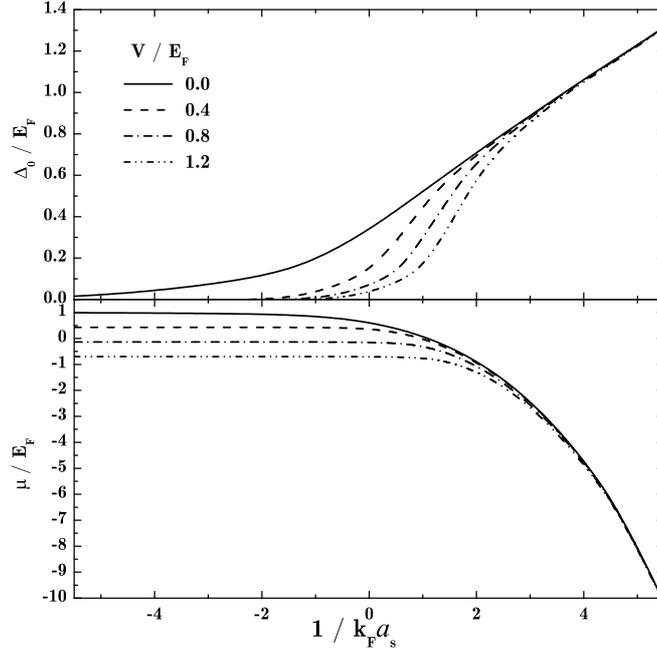


Figura 3.2: Como a função de *gap* intra-banda e o potencial químico são afetados pela hibridização ao longo do *crossover* BCS-BEC para $\alpha = 0.5$

entre as partículas é maior do que a região de interação, tal que $(k_0/k_F)^2 \gg 1$. Essa condição foi imposta nos cálculos através da energia característica escolhendo $\bar{E}_0 = 500$.

No limite de acoplamentos fracos BCS para hibridização nula $\bar{V} = 0$, o potencial químico praticamente não é alterado, e não difere da energia de Fermi, se mantendo então $\bar{\mu} = 1$. Além disso, a amplitude do *gap* supercondutor se mostra ser muito menor do que a energia de Fermi, e esboça o comportamento típico exponencial, característico do limite BCS usual $\bar{\Delta}_0 \sim e^{-1/k_F a_s}$ [27]. Com o aumento da intensidade da interação, os pares tendem a estarem mais fortemente ligados, e a função distribuição de momentos passa a ter um alargamento [13, 26]. Com isso, o potencial químico $\bar{\mu}$ começa a diminuir para manter o número total fixo como é visto na Figura (3.2). O efeito do acréscimo

da hibridização no sistema também é visto nessa Figura. Para $\bar{V} > 0$ no limite BCS, o potencial químico permanece constante, porém agora com soluções de $\bar{\mu} < 1$, e a amplitude do *gap* supercondutor $\bar{\Delta}_0$ permanece dependendo exponencialmente de $1/k_F a_s$, mas com magnitudes menores do que no caso sem hibridização, ou seja, \bar{V} atua como um agente que não favorece o estado supercondutor no limite de acoplamentos fracos BCS. No limite

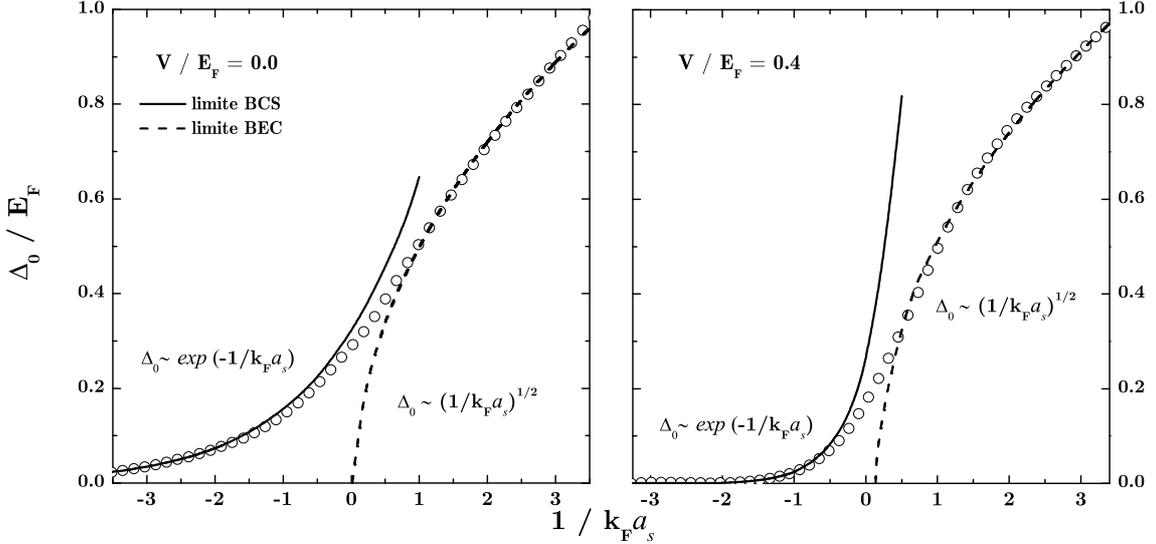


Figura 3.3: Ajustes feitos nas curvas da amplitude do *gap* supercondutor intra-banda nos dois diferentes limites, BCS e BEC para $\alpha = 0.5$.

de acoplamentos fortes, o potencial químico que já diminuía gradativamente para manter o número total de elétrons fixo, alcança $\bar{\mu} = 0$ e torna-se negativo. Além disso, é interessante notar que ocorre uma convergência das soluções dos diferentes valores de $\bar{V} > 0$ para o potencial químico e para a amplitude do *gap* supercondutor, indicando que ambas grandezas não dependem da hibridização quando $1/k_F a_s \rightarrow +\infty$. É importante ressaltar a mudança do comportamento da amplitude supercondutora nesse limite, que deixa de ser exponencial e passa a ter um comportamento tipo lei de potência com $\bar{\Delta}_0 \sim \sqrt{1/k_F a_s}$ [27] tanto para $\bar{V} > 0$ quanto para $\bar{V} = 0$ como pode ser visto na Figura (3.3). Dessa forma, nota-se que mesmo com a hibridização, o *crossover* entre um limite e outro permanece sendo suave e contínuo como acontece nos sistemas de uma banda, e ocorre entre a região de $-1 \leq 1/k_F a_s \leq +1$, porém deslocado mais para a região de $1/k_F a_s > 0$. Assim sendo, o principal efeito da hibridização é deslocar esse *crossover* entre os dois limites, para valores onde as interações são mais fortes.

Nas Figuras (3.4) e (3.5) são mostradas as relações de dispersão das excitações das *quasi*-partículas no estado fundamental supercondutor para os regimes de acoplamentos fracos e fortes respectivamente. No primeiro caso onde $1/k_F a_s < 0$, encontramos as dispersões que são típicas daquelas encontradas nos sistemas multi-bandas no limite de acoplamentos fracos BCS, com uma acentuada diminuição em torno do vetor de onda de Fermi na banda dos elétrons com interações atrativas[63], sendo possível ver o *gap* $\bar{\Delta}_0 \sim 0.1$. Nesse caso, através das soluções numéricas já obtidas da combinação das equações do *gap* e do número que estão na Figura (3.2), é conhecido o valor do potencial químico $\bar{\mu} = 0.4$. Para efeito de comparação, será fixado $\bar{V} = 0.4$ em ambos os casos, para ver como as dipersões são modificadas nos diferentes limites de acoplamentos, porém sob a mesma magnitude da hibridização e a mesma razão entre as massas $\alpha = 0.5$.

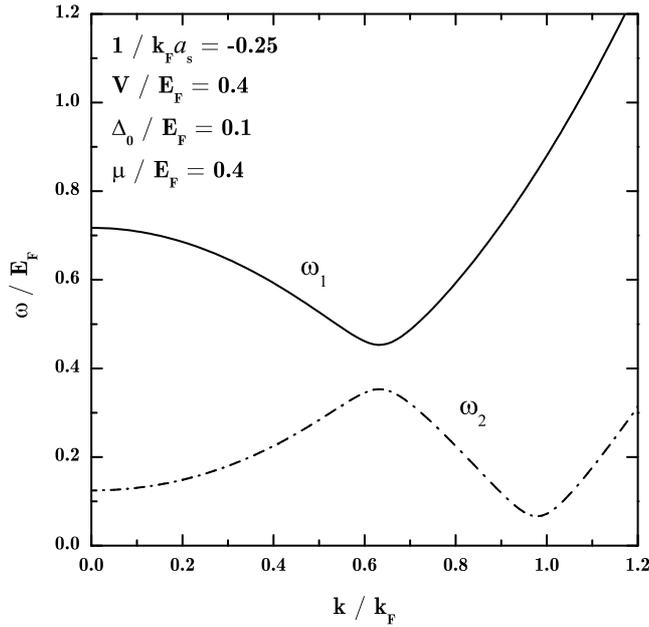


Figura 3.4: As relações de dispersão do sistema no regime de acoplamentos fracos ($1/k_F a_s < 0$) para $\alpha = 0.5$ e $\bar{V} = 0.4$.

No caso onde as interações são forte o suficientes tal que $1/k_F a_s > 0$, é visto que as relações de dispersão do sistema na Figura (3.5) exibem formas que são diferentes do caso anterior, pois possuem relações que são similares as de partículas livres, com uma

dependência quadrática com k . O *gap* em $k = 0$ é justamente a energia de dissociação do bóson efetivo formado pelos pares fermiônicos de *quasi*-partículas fortemente acopladas.

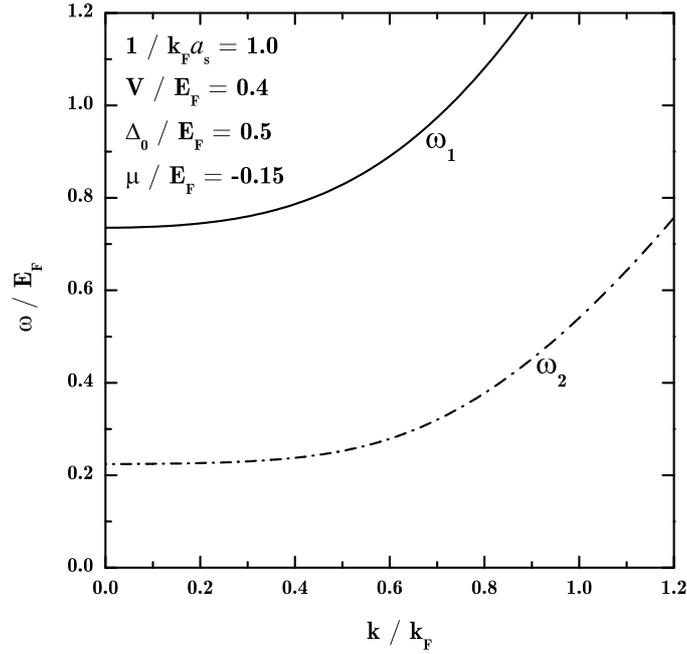


Figura 3.5: As relações de dispersão do sistema no acoplamento forte para $\alpha = 0.5$. Note a forma parabólica das energias, representando um comportamento tipo partícula livre dos pares condensados.

No que segue, será tratado o caso das interações inter-banda.

3.4.2 Caso inter-banda

Agora abordaremos o caso da supercondutividade inter-banda por meio da função de correlação já calculada em (3.32)

$$\langle c_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle = \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2) \Delta_{cf} - V \Delta_k \varepsilon_k^s}{\omega_1} \tanh\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right) - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2) \Delta_{cf} - V \Delta_k \varepsilon_k^s}{\omega_2} \tanh\left(\frac{\beta\omega_2}{2}\right) \right].$$

Será estudado o caso inter-banda puro, ou seja, $G_0 = 0 \Rightarrow \Delta_0 = 0$. Com isso tem-se que a função de correlação é simplificada, e para $T = 0$ fica

$$\langle c_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle = \frac{\Delta_{cf}}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2)}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2)}{\omega_2} \right]. \quad (3.61)$$

A equação para o parâmetro de ordem superconductor inter-banda dada por $\Delta_{cf} = U \langle c_{i\sigma}^\dagger f_{i-\sigma}^\dagger \rangle$, após a transformação de Fourier se torna $\Delta_{cf} = U \sum_k \langle c_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle$, e que com (3.61) resulta em

$$\frac{1}{U} = \sum_k \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2)}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2)}{\omega_2} \right]. \quad (3.62)$$

Modelos multi-banda com emparelhamento inter-bandas, ou assimétrico, podem ser utilizados para descrever supercondutores que apresentam a fase FFLO[64], um tipo de supercondutividade inhomogênea com emparelhamento de momento total não nulo. Em específico, modelos multibandas com hibridização podem ser utilizados para tratar o surgimento da fase inhomogênea FFLO por meio da aplicação de uma pressão mecânica externa[65], e não campos magnéticos como já é conhecido na literatura[66]. Nesta seção, o objetivo de estudar a supercondutividade inter-banda, é somente analisar como a amplitude do *gap* é afetada variando a intensidade do acoplamento para diferentes valores de hibridização, sem se preocupar em estudar o surgimento de outros fenômenos como a já citada fase inhomogênea FFLO. Assim, seguimos os mesmos procedimentos já feitos no caso intra-banda: escrever a equação do *gap* renormalizada inserindo o comprimento de espalhamento das ondas-*s* (a_s) e calcular simultaneamente Δ_{cf} e o potencial químico μ por meio da equação do número N .

Procedendo da mesma forma do caso intra-banda, foi renormalizada a equação do *gap* superconductor inter-banda, relacionando o potencial atrativo U com o comprimento de espalhamento a_s através de

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{U} + \sum_k f(\alpha) \frac{m}{k^2}, \quad (3.63)$$

e nesse caso $f(\alpha) = 2/(1 + \alpha)$. Assim então, através de (3.62) e (3.63) é obtida uma expressão para o *gap* que não depende mais de U explicitamente como segue

$$-\frac{m}{4\pi a_s} = \sum_k \left\{ \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2)}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - \Delta_{cf}^2 + V^2)}{\omega_2} \right] - \frac{2m}{(1 + \alpha)k^2} \right\}. \quad (3.64)$$

Quando é escrita(3.64) na forma integral, e fazendo as mesmas mudanças de variáveis do caso intra-banda, a equação para *gap* inter-banda obtida é

$$-\frac{1}{k_F a_s} = \frac{1}{\pi} \int_{-\bar{\mu}}^{\infty} \left\{ \frac{\sqrt{(x + \bar{\mu})}}{(\bar{\omega}_{1x}^2 - \bar{\omega}_{2x}^2)} \left[\frac{(\bar{\omega}_{1x}^2 - \alpha x^2 - \bar{\Delta}_{cf}^2 + \bar{V}^2)}{\bar{\omega}_{1x}} - \frac{(\bar{\omega}_{2x}^2 - \alpha x^2 - \bar{\Delta}_{cf}^2 + \bar{V}^2)}{\bar{\omega}_{2x}} \right] - \frac{2}{(1 + \alpha)\sqrt{(x + \bar{\mu})}} \right\} dx. \quad (3.65)$$

Nesse caso é visto então que, as já conhecidas energias de excitação escritas na forma $\bar{\omega}_{1,2x} = \sqrt{A(x) \pm \sqrt{B(x)}}$ terão seus coeficientes simplificados da forma que segue nesse caso inter-banda puro ($\Delta_0 = 0$),

$$A(x) = \frac{x^2 + \alpha x^2 + 2(\bar{\Delta}_{cf}^2 + \bar{V}^2)}{2} \quad (3.66)$$

e

$$B(x) = \left[\frac{x^2(1 - \alpha^2)}{2} \right]^2 + \bar{V}^2 [x^2(1 + \alpha)^2] + \bar{\Delta}_{cf}^2 [x^2(1 - \alpha)^2 + 4\bar{V}^2]. \quad (3.67)$$

Com as equações para o *gap* em (3.65) e a do número em (3.42) sendo solucionadas simultaneamente como feito no caso intra-banda, os resultados para as amplitudes do *gap* supercondutor inter-banda $\bar{\Delta}_{cf}$ são obtidos através do potencial químico $\bar{\mu}$ que fixa

o número total de elétrons ao variar a magnitude da interação atrativa. Essas soluções podem ser vistas graficamente na Figura (3.6).

Para hibridização nula ($\bar{V} = 0$), notamos que as soluções obtidas são qualitativamente semelhantes com a do caso intra-banda. É visto um comportamento tipo exponencial no regime BCS ($1/k_F a_s < 0$), e lei de potência no acoplamento forte BEC ($1/k_F a_s > 0$), tendo uma evolução suave e contínua entre ambos os limites com a mudança de comportamento entre $-1 \leq 1/k_F a_s \leq +1$.

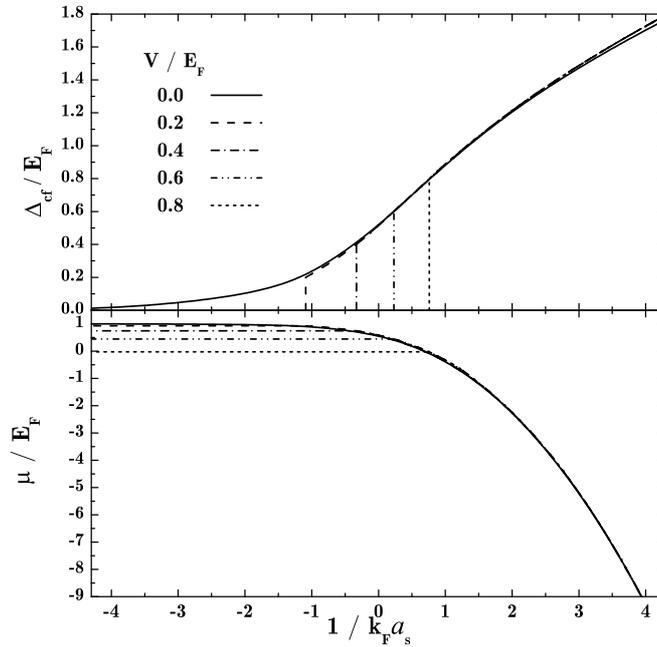


Figura 3.6: Como a função de *gap* inter-banda e o potencial químico são afetados pela hibridização para $\alpha = 0.5$. Note as descontinuidades no *crossover* para valores de $\bar{V} > 0$.

Entretanto, a evolução entre os limites BCS e BEC mediada pelo aumento da intensidade da interação na presença da hibridização ($\bar{V} > 0$) é diferente do caso intra-banda. Os resultados apresentam claramente descontinuidades nas soluções para o *gap* supercondutor $\bar{\Delta}_{cf}$, indicando transições de 1ª ordem mesmo no regime de acoplamentos fortes. Para $\bar{V} > 0.4$ e $\alpha = 0.5$, a transição começa a ser vista já na região de acoplamentos fortes, sendo ainda observada a descontinuidade na amplitude do *gap*. Assim, para o caso da supercondutividade inter-banda puro sob efeito da hibridização, o sistema não apresenta

uma evolução contínua e suave como visto no caso intra-banda estudado na seção anterior e já conhecido previamente na literatura nos sistemas de uma banda de elétrons[26]. Essa sem dúvida é a mais importante diferença entre ambos os tipos de supercondutividade estudados no modelo multibanda proposto. Apesar dessa diferença entre ambos os casos, é visto que a hibridização permanece agindo em detrimento da supercondutividade. Para um valor de interação fixo, o aumento da razão V/E_F por fim destrói a supercondutividade, quer sendo de forma contínua (intra-banda) quer sendo de forma descontínua no caso inter-banda.

3.5 Discussões em torno da hibridização crítica V_c

Nas seções anteriores, tanto no caso intra-banda quanto no inter-banda, as amplitudes eram consideradas como sendo não nulas. Assim, foi estudado somente a mudança do comportamento do estado fundamental supercondutor, variando a intensidade das interações atrativas e a hibridização. Agora, para estudar como a hibridização destrói o estado supercondutor, é importante atentar para alguns detalhes na obtenção da hibridização crítica V_c .

Aqui serão considerados os caso intra-banda e inter-banda. Porém, daremos mais ênfase ao caso intra-banda, pois se trata da forma de emparelhamento explorada nos próximos dois capítulos. Além disso, se trata da forma mais comum nos sistemas supercondutores conhecidos[28]. Com isso, as equações para obter V_c em $T = 0$, levarão em conta as energias de excitação com as amplitudes supercondutoras nulas $\omega_{1,2k} = \sqrt{A(k) \pm \sqrt{B(k)}}$, com os coeficientes

$$A(k) = \frac{\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} + 2V_c^2}{2}; \quad B(k) = \left(\frac{\varepsilon_k^{s2} - \varepsilon_k^{f2}}{2} \right)^2 + V_c^2(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)^2.$$

À primeira vista, seria simples obter a hibridização crítica V_c como função da intensidade da interação. Adotando novamente as equações de *gap* renormalizadas intra e inter-bandas em (3.57) e (3.65), bastaria efetuar a integral como feito para estudar a evolução da amplitude do *gap*. Assim, fixamos o número total de elétrons e analisamos como o potencial químico varia. Fazendo dessa maneira, são obtidas as soluções numéricas para o diagrama $\bar{V}_c \times 1/k_F a_s$ para ambos os casos, como se encontra na Figura (3.7)

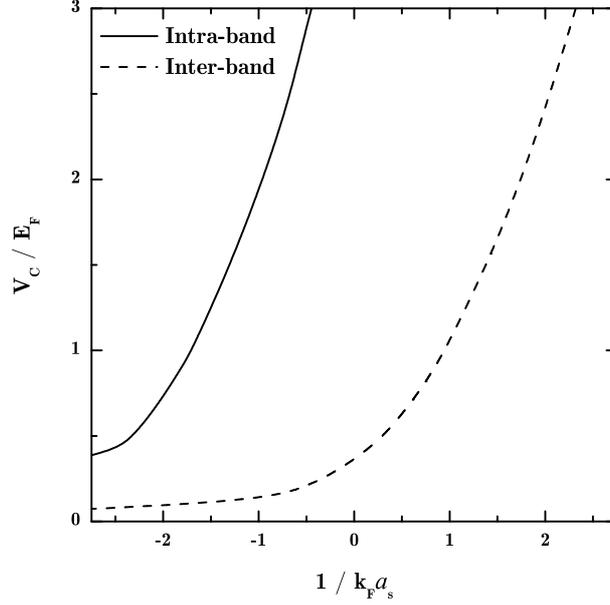


Figura 3.7: Comportamento de V_c para ambos os casos, intra e inter-banda adotando as equações de *gap* renormalizadas por a_s para $\alpha = 0.5$.

Porém, traçando o gráfico do integrando da equação intra-banda

$$F_1(k, V_c) = \frac{1}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)(1 + k^2/k_0^2)} \left[\frac{(\omega_{1k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{1k}} - \frac{(\omega_{2k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{2k}} \right] \quad (3.68)$$

em função de k , encontramos picos devido à singularidades relacionadas com $V > 0$, como visto na Figura (3.8). Tais singularidades ocorrem nos pontos $\bar{k}_{c1,2} = \sqrt{\mu \mp \alpha^{1/2} V}$ onde $\omega_{2k} = 0$. Essas singularidades são relacionadas com os pólos característicos da interação BCS. Assim, e se for integrado sobre todos os valores de k estaremos sempre levado em conta o fato do par estar ligado, não sendo obtido de fato a hibridização crítica V_c que suprime o estado supercondutor. Por isso não é aconselhável adotar a equação de *gap* renormalizada por a_s para determinar V_c , pois a integral é efetuada sempre até infinito passando pelas singularidades.

Assim, vemos que é preciso impor momentos de corte para determinar V_c corretamente. Com isso, delimitamos a região de integração entre \bar{k}_{c1} e $k = k_F$ para não passar pelas singularidades já vistas para valores de $V > 0$. Ocasionalmente, para um dado valor de V , $\bar{k}_{c1} = 0$. Daí em diante, para valores maiores da hibridização é considerado o limite de integração entre 0 e $k = k_F$. Com as considerações feitas sobre os momentos de corte,

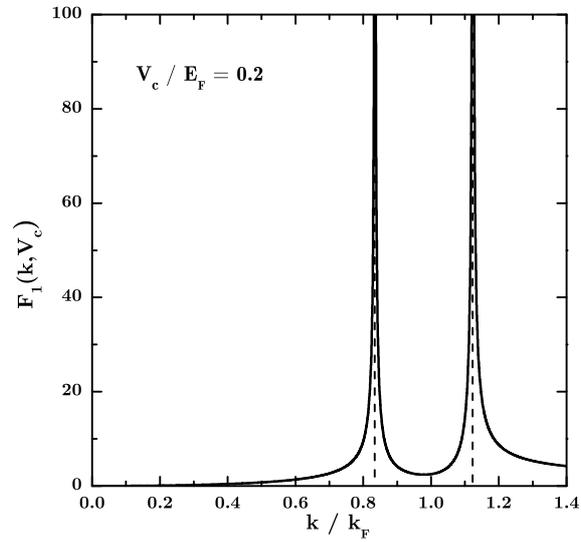


Figura 3.8: Comportamento do integrando da função que determina V_c para o caso intra-banda $F_1(k, V_c)$ (Eq. 3.68) para $\bar{V}_c = 0.2$ e $\alpha = 0.5$.

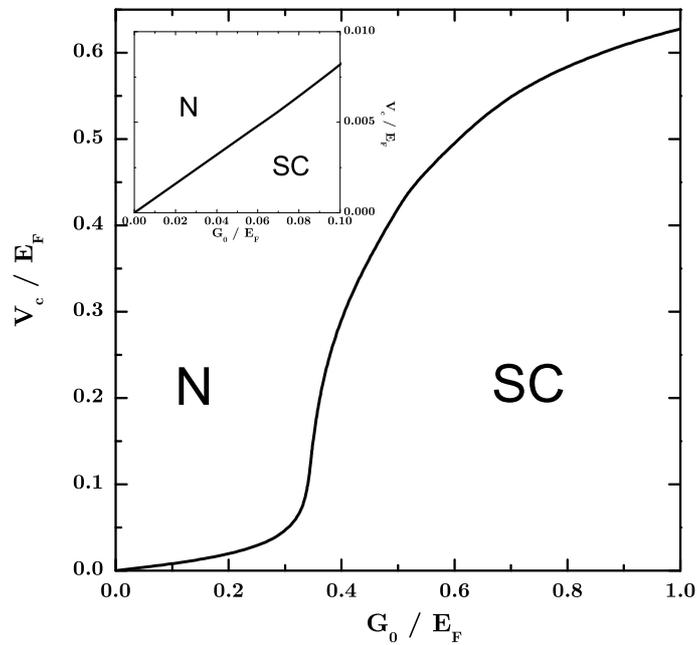


Figura 3.9: Comportamento de V_c versus G_0 para o caso intra-banda com $\alpha = 0.5$.

é obtido o diagrama de fases para $T = 0$ na Fig.(3.9), com a linha separando o estado normal (N) do supercondutor (SC). É visto que no regime onde os acoplamentos são fracos (no gráfico menor) existe uma relação linear entre \bar{V}_c e \bar{G}_0 . As ordens de grandezas características condizem com o regime de acoplamentos fracos, com ambas as propriedades em torno de 10^{-3} e 10^{-2} respectivamente. No regime onde as energias envolvidas são da ordem da energia de Fermi ($G_0 \sim E_F$) é visto que o comportamento linear não é mais encontrado. Isso sugere que o sistema pode ser afetado pela mudança de comportamento do parâmetro de ordem em função do acoplamento (visto na seção anterior) quando o mesmo torna-se nulo. Assim, o *crossover* entre o limite de acoplamentos fracos (BCS) e forte (BEC) fica caracterizado no diagrama $\bar{V}_c \times \bar{G}_0$ quando a relação entre eles deixa de ser linear passando para uma outra lei de potência.

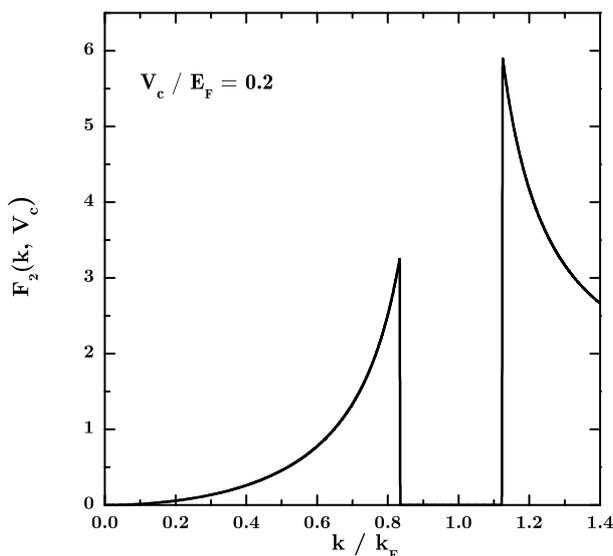


Figura 3.10: Comportamento do integrando da função $F_2(k, V_c)$ para o caso inter-banda (Eq. 3.69) para $\bar{V}_c = 0.2$ e $\alpha = 0.5$.

No caso inter-banda, observa-se que quando $V > 0$ existe uma região no eixo k onde o integrando $F_2(k, V_c)$

$$F_2(k, V_c) = \frac{1}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} \left[\frac{(\omega_{1k}^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f + V_c^2)}{\omega_{1k}} - \frac{(\omega_{2k}^2 - \varepsilon_k^s \varepsilon_k^f + V_c^2)}{\omega_{2k}} \right] \quad (3.69)$$

é nulo, como visto na Figura (3.10). Assim, o caso das interações inter-banda é bastante distinto e necessita de considerações adicionais. Neste problema, dependendo dos valores

da interação e da hibridização, o sistema apresenta uma transição de 1^a ordem com separação de fases entre uma fase supercondutora BCS e uma fase normal de elétrons desemparelhados. Esta transição de fase é sinalizada por um modo mole no espectro de excitações para um dado valor do vetor de onda $k = k_c$. Por outro lado este modo mole assinala um novo estado fundamental supercondutor com parâmetro de ordem inomogêneo do tipo descrito por Fulde, Ferrell, Larkin e Ovchinnikov[64].

Vale a pena ressaltar que origem microscópica da hibridização V varia de acordo com os diferentes sistemas físicos estudados. Na matéria condensada, os sistemas metálicos, inter-metálicos e nos férmions pesados, a hibridização surge da superposição (*overlap*) das funções de onda do potencial cristalino, podendo ser controlada por pressão ou dopagem. Isso possibilita explorar os diagramas de fases utilizando a hibridização como parâmetro externo de controle.

No próximo capítulo, será adotado o mesmo modelo de duas bandas, porém somente com interação intra-banda. Nele será adicionado um termo repulsivo Coulombiano local para estudar seus efeitos na supercondutividade em conjunto com a hibridização. Por fim, no capítulo 5 será adotada a forma mais simples do modelo para supercondutividade, tratando do caso da simetria do *gap* tipo onda d no espaço bidimensional. O objetivo é descrever um sistema férmion pesado e comparar os dados teóricos com dados experimentais.

Capítulo 4

Efeitos da repulsão Coulombiana local intra-banda na Supercondutividade

A descoberta da supercondutividade nos compostos férmions pesados[67], e nos óxidos de cobre que compõem os mais conhecidos supercondutores de alta temperatura crítica[6], estimulou o estudo e desenvolvimento de novos modelos teóricos para descrever o fenômeno nesses materiais. Os férmions pesados por exemplo, são sistemas muito interessantes, pois possuem um rico diagrama de fases com supercondutividade, fases magnéticas e a coexistência de supercondutividade e magnetismo[68]. Esses novos supercondutores possuem uma característica comum entre si: a presença da repulsão Coulombiana local na banda estreita. A presença desse potencial possivelmente tem relação com os mecanismos de emparelhamento para a formação dos pares de Cooper desses sistemas, que podem ter uma origem puramente eletrônica[45] ou em flutuações de spin[46], deixando de ser necessariamente devido aos fônons como na teoria BCS. Essa variedade de fenômenos torna complicado descrever esses sistemas por meio de modelos de uma banda como na teoria BCS.

Neste capítulo abordaremos os efeitos do potencial repulsivo local Coulombiano \mathcal{U} na supercondutividade, adotando o modelo de duas bandas com interações atrativas intra-banda não local[69]. Consideraremos inicialmente a simetria de emparelhamento tipo s , adotando o desacoplamento tipo campo médio (Hartree-Fock) para ver os efeitos de \mathcal{U}

no *crossover* BCS-BEC, analisando em conjunto os efeitos da hibridização V . Após isso, adotaremos o desacoplamento mais apropriado para o problema quando a magnitude de \mathcal{U} é relativamente grande e os efeitos de preenchimento da banda estreita são importantes, que é o desacoplamento tipo Hubbard-I[38]. O estudo será feito tanto para a simetria tipo s quanto para a simetria d do parâmetro de ordem supercondutor, que é de fato a simetria observada nos sistemas HTSC, e em alguns FP[70], que apresentam a repulsão Coulombiana local na banda estreita.

4.1 O modelo e as equações de movimento

Como foi dito no capítulo anterior, a inclusão do potencial repulsivo dá uma descrição completa de sistemas fortemente correlacionados supercondutores na banda onde ocorre o emparelhamento eletrônico[54]. O Hamiltoniano para esse sistema é como segue

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^s c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}, \sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) \\ + \mathcal{U} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^f n_{i-\sigma}^f - \sum_{ij\sigma} G_{ij} n_{i\sigma}^f n_{j-\sigma}^f. \end{aligned} \quad (4.1)$$

com \mathcal{U} sendo o potencial repulsivo local entre os elétrons f , e os outros parâmetros são os mesmos do Hamiltoniano escrito em (3.1).

Como no capítulo anterior, tem-se como objetivo calcular o propagador $\ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg$ para obter o parâmetro de ordem supercondutor do sistema. Utilizando a equação de movimento para este propagador, obtemos

$$\begin{aligned} \omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = - \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + \sum_l G_{lj} \ll n_{l\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ - \mathcal{U} \ll n_{j\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Assim, novos propagadores são gerados, e escrevendo a equação de movimento para eles obtemos

$$\omega \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = - \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.3)$$

$$\omega \ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l G_{lj} \ll n_{l-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + \mathcal{U} \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.4)$$

e

$$\omega \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg. \quad (4.5)$$

Com o intuito de calcular a equação do número total como feito no capítulo anterior, é necessário calcular o propagador $\ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg$, e como consequência temos o outro sistema

$$\omega \ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.6)$$

$$\omega \ll f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l G_{lj} \ll n_{l-\sigma}^f f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + \mathcal{U} \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.7)$$

$$\omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = - \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + \sum_l G_{lj} \ll n_{l\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg - \mathcal{U} \ll n_{j\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.8)$$

e

$$\omega \ll c_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = - \sum_l t_{lj}^A \ll c_{l-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg. \quad (4.9)$$

Olhando somente para as equações com propagadores de ordens superiores, será realizado o desacoplamento via campo médio

$$\begin{aligned} \ll n_{l\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger(c_{i\sigma'}^\dagger) \gg &\sim - \langle f_{l\sigma}^\dagger f_{j-\sigma}^\dagger \rangle \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger(c_{i\sigma'}^\dagger) \gg, \\ \ll n_{l-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger(c_{i\sigma'}^\dagger) \gg &\sim \langle f_{l-\sigma} f_{j\sigma} \rangle \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger(c_{i\sigma'}^\dagger) \gg, \end{aligned}$$

e tem-se assim

$$\omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = -\sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg -V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg -\sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.10)$$

$$\omega \ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg +V \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg -\sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.11)$$

$$\omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = -\sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg -V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg -\sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.12)$$

$$\omega \ll f_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg = \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg +V \ll c_{j\sigma}; c_{i\sigma'}^\dagger \gg -\sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l-\sigma}^\dagger; c_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.13)$$

onde foi considerada a amplitude do *gap* supercondutor intra-banda sendo real. A amplitude localmente tem a contribuição do potencial repulsivo \mathcal{U} da forma

$$\Delta_{lj} = (G_{lj} - \mathcal{U}\delta_{lj}) \langle f_{l\sigma}^\dagger f_{j-\sigma}^\dagger \rangle, \quad (4.14)$$

com δ_{lj} sendo o delta de Kronecker. Daqui por diante, os cálculos são iguais para calcular a equação do número e a equação para o *gap* supercondutor intra-banda feitos no capítulo anterior. Com isso, será visto inicialmente qual a influência do potencial repulsivo \mathcal{U} local no *crossover* BCS-BEC, além da presença da hibridização. Assim, após as transformadas de Fourier nos sistemas de equações, nota-se que as equações para o número e para o *gap* são praticamente as mesmas obtidas no capítulo 3, se diferenciando apenas na forma do parâmetro de ordem

$$\Delta_k = \sum_{k'} (G(k, k') - \mathcal{U}) \langle f_{k'\sigma}^\dagger f_{-k'-\sigma}^\dagger \rangle. \quad (4.15)$$

4.2 Influência de \mathcal{U} no *crossover* BCS-BEC

Nessa seção será estudada a influência de \mathcal{U} no *crossover* BCS-BEC. Para isso, obtemos as funções de correlação para o *gap* supercondutor intra-banda e da distribuição total dos elétrons n_k , e assim obter a equação do *gap* intra-banda e a do número. Em temperatura nula obtemos

$$n_k = \left\{ 1 - \frac{1}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} \left[\frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_{1k}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s[\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f(\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_{1k}} - \frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_{2k}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s[\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f(\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_{2k}} \right] \right\} \quad (4.16)$$

e

$$\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle = \frac{\Delta_k}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} \left[\frac{(\omega_{1k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{1k}} - \frac{(\omega_{2k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{2k}} \right]. \quad (4.17)$$

Com isso, após as mesmas manipulações feitas no capítulo anterior, são obtidas as equações do número e a equação do *gap* da forma que está escrito em (4.15), respectivamente

$$N = \sum_k \left\{ 1 - \frac{1}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} \left[\frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_{1k}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s[\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f(\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_{1k}} - \frac{(\varepsilon_k^s + \varepsilon_k^f)(\omega_{2k}^2 + V^2) - \varepsilon_k^s[\Delta_k^2 + \varepsilon_k^f(\varepsilon_k^f + \varepsilon_k^s)]}{\omega_{2k}} \right] \right\} \quad (4.18)$$

e

$$\Delta_k = \sum_{k'} (G(k, k') - \mathcal{U}) \frac{\Delta_{k'}}{2(\omega_{1k'}^2 - \omega_{2k'}^2)} \left[\frac{(\omega_{1k'}^2 - \varepsilon_{k'}^{s2})}{\omega_{1k'}} - \frac{(\omega_{2k'}^2 - \varepsilon_{k'}^{s2})}{\omega_{2k'}} \right]. \quad (4.19)$$

Nesta seção trataremos a supercondutividade com simetria tipo s , e para isso adotaremos então a mesma forma separável de $G(k, k')$ escrita na equação (3.48)

$$G(k, k') = \frac{G_0}{\sqrt{[1 + (k/k_0)^2][1 + (k'/k_0)^2]}}. \quad (4.20)$$

A presença da parcela \mathcal{U} na equação para o parâmetro de ordem, leva a considerar que Δ_k é similar a equação (3.50), porém acrescido da amplitude relativa ao potencial local,

e então é escrita como uma composição da forma

$$\Delta_k = \Delta_1 \gamma(k) - \Delta_0 \quad (4.21)$$

como feito na referência [54], onde $\gamma(k) = [1 + (k/k_0)^2]^{-1/2}$ é o mesmo de (3.49), e Δ_1 e Δ_0 sendo constantes. Com a consideração feita em (4.21), a equação para o *gap* supercondutor escrita em (4.19) será reescrita como

$$\Delta_1 \gamma(k) - \Delta_0 = \sum_{k'} (G_0 \gamma(k) \gamma(k') - \mathcal{U}) (\Delta_1 \gamma(k') - \Delta_0) F_{k'}, \quad (4.22)$$

onde F_k é a função

$$F_k = \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\frac{(\omega_1^2 - \varepsilon_k^s)^2}{\omega_1} - \frac{(\omega_2^2 - \varepsilon_k^s)^2}{\omega_2} \right]. \quad (4.23)$$

Reescrevendo (4.22) separando os coeficientes de $\gamma(k)$ em ambos os lados da equação dos outros termos, obtemos o sistema de equações

$$\begin{cases} \Delta_1 = G_0 \Delta_1 \sum_k \gamma(k)^2 F_k - G_0 \Delta_0 \sum_k \gamma(k) F_k \\ \Delta_0 = \mathcal{U} \Delta_1 \sum_k \gamma(k) F_k - \mathcal{U} \Delta_0 \sum_k F_k. \end{cases} \quad (4.24)$$

A partir do sistema (4.24), é possível determinar através da razão entre as duas equações, uma outra equação que torna possível obter T_c no caso de temperaturas finitas. No caso estudado aqui ($T = 0$), é a equação para obter V_c . O resultado desta operação é dado por

$$1 - G_0 \sum_k \gamma(k)^2 F_k + \mathcal{U} \left\{ \sum_k F_k - G_0 \left[\left(\sum_k \gamma(k)^2 F_k \right) \left(\sum_k F_k \right) - \left(\sum_k \gamma(k) F_k \right)^2 \right] \right\} = 0, \quad (4.25)$$

que é semelhante ao resultado obtido por Bastide *et al.*[54] no caso para o sistema de uma banda. Note que fazendo $\mathcal{U} = 0$, imediatamente obtemos o resultado (3.52) do capítulo anterior. Dessa maneira, o resultado (4.25) pode ser escrito de uma forma mais compacta, escrevendo do lado esquerdo da igualdade a razão $1/G_0$ e do lado direito as somas com as parcelas proporcionais ao potencial \mathcal{U} :

$$\frac{1}{G_0} = \frac{\phi_2 + \mathcal{U}(\phi_2 \phi_0 - \phi_1^2)}{1 + \mathcal{U} \phi_0}, \quad (4.26)$$

onde

$$\phi_n = \sum_k \frac{\gamma(k)^n}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} \left[\frac{(\omega_{1k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{1k}} - \frac{(\omega_{2k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{2k}} \right]. \quad (4.27)$$

Para ver os efeitos de \mathcal{U} no *crossover* BCS-BEC, será adotada o mesmo procedimento feito para a equação de *gap* em (3.55) para renormalizar cada soma em (4.26), e teremos assim uma expressão escrita como função do comprimento de espalhamento das ondas- s a_s da forma que segue

$$-\frac{1}{k_F a_s} = \frac{1}{\pi(1 + \overline{\mathcal{U}}\overline{\phi}_0)} \left[\overline{\phi}_2 + \overline{\mathcal{U}} \left(\overline{\phi}_2 \overline{\phi}_0 - \overline{\phi}_1^2 \right) \right] \quad (4.28)$$

sendo

$$\overline{\phi}_n = \int_{-\overline{\mu}}^{\infty} \left[1 + \frac{(x + \overline{\mu})}{\overline{E}_0} \right]^{-n/2} \left\{ \frac{\sqrt{(x + \overline{\mu})}}{(\overline{\omega}_{1x}^2 - \overline{\omega}_{2x}^2)} \left[\frac{(\overline{\omega}_{1x}^2 - x^2)}{\overline{\omega}_{1x}} - \frac{(\overline{\omega}_{2x}^2 - x^2)}{\overline{\omega}_{2x}} \right] - \frac{1}{\alpha \sqrt{(x + \overline{\mu})}} \right\} dx, \quad (4.29)$$

lembrando que x é a variável de integração adimensional e a sobre-barras indica que a grandeza está normalizada pela energia de Fermi E_F . Note que fazendo $\overline{\mathcal{U}} = 0$ em (4.28) obtém-se a equação (3.57). Agora é possível resolver (4.28) em conjunto com a forma integral da equação do número em (4.18)

$$N = \frac{k_F^3}{4\pi^2} \int_{-\overline{\mu}}^{\infty} \sqrt{x + \overline{\mu}} \left\{ 1 - \frac{x}{2(\overline{\omega}_{1x}^2 - \overline{\omega}_{2x}^2)} \left[\frac{(\overline{\omega}_{1x}^2 + \overline{V}^2 - \alpha x^2)(1 + \alpha) - \overline{\Delta}_k^2}{\overline{\omega}_{1x}} - \frac{(\overline{\omega}_{2x}^2 + \overline{V}^2 - \alpha x^2)(1 + \alpha) - \overline{\Delta}_k^2}{\overline{\omega}_{2x}} \right] \right\} dx. \quad (4.30)$$

Aqui, tanto para a equação (4.29) quanto para (4.30), as energias de excitação $\overline{\omega}_{1,2x}$ são as mesmas escritas em (3.58). Com isso, esboçamos como a amplitude total do *gap* supercondutor ($\Delta \equiv \Delta_1 - \Delta_0$) varia com a intensidade de $1/k_F a_s$ para alguns valores de \overline{V} e $\overline{\mathcal{U}}$, visto nas Figuras (4.2) e (4.2). Na primeira, foi fixado o valor da hibridização e aumentamos a intensidade a interação para diferentes valores do potencial repulsivo. A diferença entre o caso $\overline{V} = 0$ para o caso onde $\overline{V} = 0.4$ é sutil, visto que o efeito da hibridização permanece o mesmo do discutido no capítulo anterior, de afastar a região do *crossover* para a região de acoplamentos fortes ($1/k_F a_s > 0$), além de deslocar o potencial

químico para valores de $\bar{\mu} < 1$. Porém, à medida em que aumentamos a intensidade de \bar{U} vemos que a amplitude do *gap* tende a convergir para uma solução que aparentemente independe do potencial repulsivo na região do *crossover* ($-1 < 1/k_F a_s < 1$). Entretanto na região que compreende $1/k_F a_s > 1$ (limite BEC), as soluções para a amplitude do *gap* se separam novamente, tornando possível ver que à medida em que se aumenta \bar{U} diminui-se a amplitude Δ . Note que o valores de \bar{U} não excederam 0.2 para estar dentro de um limite tolerável para a aproximação de campo médio adotada. Para valores maiores de \bar{U} será adotado o desacoplamento via aproximação Hubbard-I[38], mais adequado para tratar sistemas fortemente correlacionados onde as ordens de grandeza do potencial repulsivo são muito grandes em relação a largura da banda estreita.

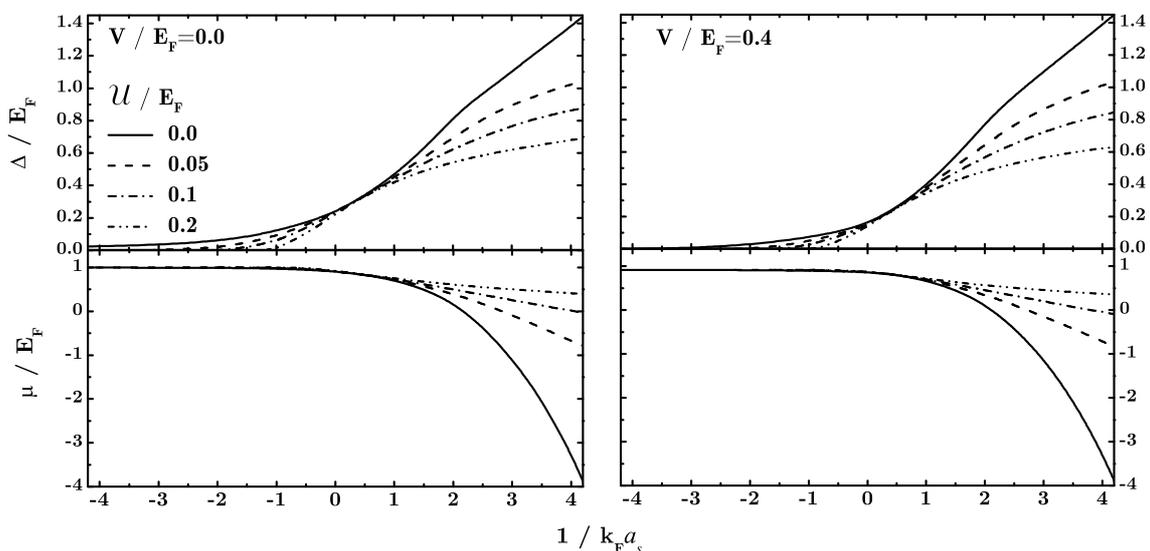


Figura 4.1: Soluções para a equação de *gap* variando as intensidades do potencial repulsivo \bar{U} , para $\bar{V} = 0$ e $\bar{V} = 0.4$ ao longo do *crossover* BCS-BEC com $\alpha = 0.5$.

Na Figura (4.2) fixamos $\bar{U} = 0.1$ e variamos a intensidade da hibridização. Nesse gráfico fica evidente a principal diferença entre o sistema supercondutor sem a presença de \bar{U} e com a presença do mesmo. No caso intra-banda estudado no capítulo anterior, era visto que no limite de acoplamentos fracos, a hibridização separava as soluções do *gap* supercondutor, afastando a região do *crossover* para a região de acoplamentos fortes. Porém, quando o sistema era encaminhado para o limite de acoplamentos fortes, as soluções convergiam para uma única linha de soluções, indicando que nesse limite, a amplitude do *gap* se tornava independente de V . Já na presença do potencial repulsivo, é visto que os

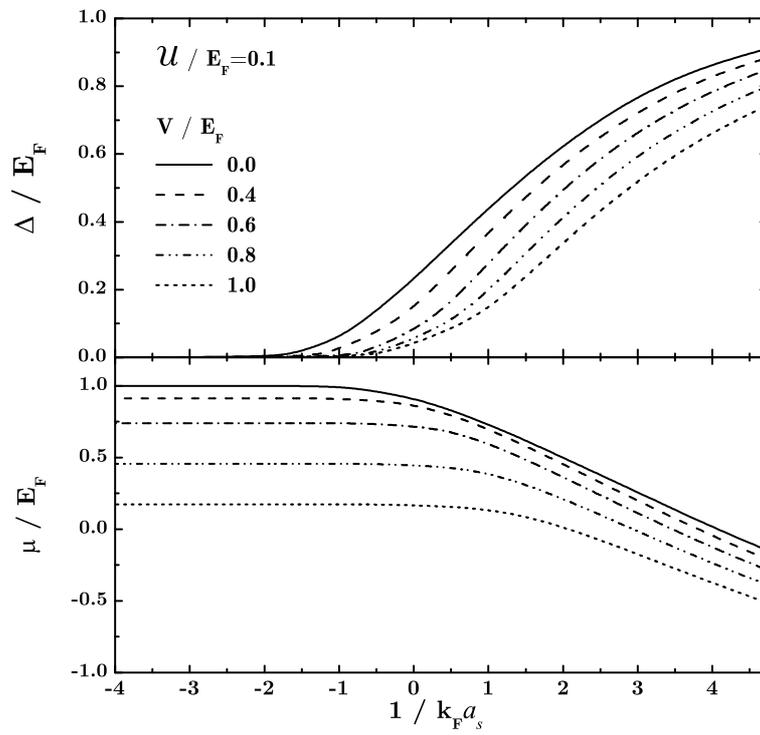


Figura 4.2: Soluções para a equação de *gap* fixando a intensidade de $\bar{\mathcal{U}} = 0.1$ para diferentes valores de \bar{V} ao longo do *crossover* BCS-BEC com $\alpha = 0.5$.

resultados para o *gap* supercondutor não convergem mais para um único ramo de soluções, ocorrendo uma separação das mesmas mesmo no regime BEC ($1/k_F a_s > 0$). Isso indica que, para esse regime de fracas intensidades de \bar{U} , há uma potencialização do efeito da hibridização, que opera para destruir o estado supercondutor em todos os regimes de acoplamentos, não mais se restringindo ao limite de acoplamentos fracos. Com isso, \mathcal{U} e V são ambos agentes que atuam no detrimento da supercondutividade. Entretanto, essa afirmação não é estendida ao domínio de grandes valores de \mathcal{U} , que será abordado na próxima seção. Mesmo com essas diferenças, o sistema continua apresentando uma evolução suave entre ambos os limites de acoplamento, sem nenhuma descontinuidade ao passar do limite BCS para o BEC.

4.3 Aproximação Hubbard-I para o potencial repulsivo local \mathcal{U}

Nesta seção, serão estudados os efeitos do potencial repulsivo \mathcal{U} no sistema supercondutor descrito pelo modelo de duas bandas no Hamiltoniano proposto na seção anterior, porém adotando a aproximação Hubbard-I[38] nas equações para os propagadores de ordens superiores (4.2), (4.4), (4.7) e (4.8), que são do tipo $\ll n_{j\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger (c_{i\sigma'}^\dagger) \gg$ e $\ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger (c_{i\sigma'}^\dagger) \gg$. Nesta seção, o foco não será mais em estudar o *crossover* entre acoplamentos fracos e fortes. Com isso, não será preciso calcular os propagadores de ordem superior para a banda de condução com o objetivo de fixar o número total de elétrons.

O objetivo dessa seção é calcular as energias de excitação do sistema via método Hubbard-I estudando os efeitos de \mathcal{U} nas mesmas, inclusive analisando o caso de $\mathcal{U}/E_F \gg 1$ e o comportamento de V através dos diagramas de fases do sistema, tanto para a simetria s estendida quanto para a simetria d . Assim sendo, serão analisadas somente as equações que são necessárias para fazer o desacoplamento

$$\begin{aligned} \omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = & - \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + \sum_l G_{lj} \ll n_{l\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ & - \mathcal{U} \ll n_{j\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \end{aligned} \quad (4.31)$$

e

$$\omega \ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + V \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l G_{lj} \ll n_{l-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + \mathcal{U} \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \quad (4.32)$$

além claro das outras duas em (4.3) e (4.5) para fechar o sistema de equações dos propagadores. Para iniciar os cálculos, desenvolvemos via equações de movimento, os propagadores de ordem superior contidos nas duas equações anteriores, relativas a parcela do potencial repulsivo \mathcal{U} , escritos na forma que segue

$$\omega \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg = \frac{1}{2\pi} \langle \{n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}, f_{i\sigma'}^\dagger\} \rangle + \ll [n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}, \mathcal{H}], f_{i\sigma'}^\dagger \gg. \quad (4.33)$$

Efetuada as relações de anti-comutação e comutação com o Hamiltoniano obtém-se

$$\begin{aligned} \omega \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &= \frac{\langle n_{f-\sigma} \rangle}{2\pi} \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'} + \sum_l t_{lj}^B \ll n_{j-\sigma}^f f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ + V \ll n_{j-\sigma}^f c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + \mathcal{U} \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &- \sum_l G_{lj} \ll n_{j-\sigma}^f n_{l-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ &+ \sum_l t_{lj}^B \ll (f_{j-\sigma}^\dagger f_{l-\sigma} - f_{l-\sigma}^\dagger f_{j-\sigma}) f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \end{aligned} \quad (4.34)$$

onde $\langle n_{f\sigma} \rangle = \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle$. Manipulando a equação, obtemos

$$\begin{aligned} (\omega - \mathcal{U}) \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &= \frac{\langle n_{f-\sigma} \rangle}{2\pi} \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'} + \langle n_{f-\sigma} \rangle \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ + V \langle n_{f-\sigma} \rangle \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &- \langle n_{f-\sigma} \rangle \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg, \end{aligned} \quad (4.35)$$

onde usamos as aproximações que caracterizam o tratamento Hubbard-I

$$\sum_l t_{lj}^B \ll (f_{j-\sigma}^\dagger f_{l-\sigma} - f_{l-\sigma}^\dagger f_{j-\sigma}) f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \approx 0,$$

além de

$$\ll n_{j-\sigma}^f f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \approx \langle n_{f-\sigma} \rangle \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg,$$

$$\ll n_{j-\sigma}^f c_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \approx \langle n_{f-\sigma} \rangle \ll c_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg.$$

Note que já foi feito o desacoplamento na parcela da parte atrativa não-local originando Δ_{lj} . A outra equação, após seu desenvolvimento e simplificação é dada por

$$\begin{aligned} (\omega + \mathcal{U}) \ll n_{j\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &= - \langle n_{f-\sigma} \rangle \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \\ -V \langle n_{f-\sigma} \rangle \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &- \langle n_{f-\sigma} \rangle \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Isolando os propagadores de ordem superior calculados em (4.35) e (4.36), é encontrado que

$$\begin{aligned} \ll n_{j-\sigma}^f f_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &= \frac{\langle n_{f-\sigma} \rangle}{(\omega - \mathcal{U})} \left(\frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \right. \\ &\left. +V \ll c_{j\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg - \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \right), \end{aligned} \quad (4.37)$$

e

$$\begin{aligned} \ll n_{j\sigma}^f f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg &= - \frac{\langle n_{f-\sigma} \rangle}{(\omega + \mathcal{U})} \left(\sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \right. \\ &\left. +V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma'}^\dagger \gg + \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma'}^\dagger \gg \right). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Substituindo esses resultados nas equações (4.31) e (4.32) são obtidas as equações para os propagadores $\ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma}^\dagger \gg$ e $\ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma}^\dagger \gg$ escritos da forma que segue

$$\begin{aligned} \omega \ll f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma}^\dagger \gg &= - \frac{[\omega + \mathcal{U}(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)]}{(\omega + \mathcal{U})} \left(\sum_l t_{lj}^B \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma}^\dagger \gg \right. \\ &\left. +V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma}^\dagger \gg + \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma}^\dagger \gg \right) \end{aligned} \quad (4.39)$$

e

$$\begin{aligned} \omega \ll f_{j\sigma}; f_{i\sigma}^\dagger \gg &= \frac{[\omega - \mathcal{U}(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)]}{(\omega - \mathcal{U})} \left(\frac{\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}}{2\pi} + \sum_l t_{lj}^B \ll f_{l\sigma}; f_{i\sigma}^\dagger \gg \right. \\ &\left. +V \ll c_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma}^\dagger \gg - \sum_l \Delta_{lj} \ll f_{l-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma}^\dagger \gg \right). \end{aligned} \quad (4.40)$$

onde Δ_{lj} é real e volta a ser como no capítulo 3, dependendo somente do termo atrativo $\Delta_{lj} = G_{lj} \langle f_{l\sigma}^\dagger f_{j-\sigma}^\dagger \rangle$. Com esses novos resultados para $\langle\langle f_{j-\sigma}^\dagger; f_{i\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ e $\langle\langle f_{j\sigma}; f_{i\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ montamos o sistema de equações para determinar os propagadores desejados. Com estes obtemos a função do *gap* e as energias de excitação, diagonalizando a matriz dos coeficientes como será feito mais adiante. Primeiro é efetuada a transformada de Fourier no sistema de equações, resultando em

$$\begin{cases} \overline{(\omega + \varepsilon_k^f)} \langle\langle f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle = -(\omega + \tilde{\mathcal{U}})(V \langle\langle c_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \Delta_k \langle\langle f_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle) \\ (\omega + \varepsilon_k^s) \langle\langle c_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle = -V \langle\langle f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle \\ \overline{(\omega - \varepsilon_k^f)} \langle\langle f_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle = (\omega - \tilde{\mathcal{U}})(\frac{1}{2\pi} + V \langle\langle c_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - \Delta_k \langle\langle f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle) \\ (\omega - \varepsilon_k^s) \langle\langle c_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle = V \langle\langle f_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle \end{cases} \quad (4.41)$$

onde $\overline{(\omega \pm \varepsilon_k^f)} = [(\omega \pm \varepsilon_k^f)(\omega \pm \mathcal{U}) - \varepsilon_k^f \mathcal{U} \langle n_{f-\sigma} \rangle]$, $\tilde{\mathcal{U}} = \mathcal{U}(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)$. Iremos considerar que o sistema não apresenta soluções magnéticas além da invariância por translação, com isso $\langle n_{f-\sigma} \rangle = \langle n_{f\sigma} \rangle = n_f/2$. De posse do sistema (4.41) é possível calcular as energias de excitação do sistema e o propagador relacionado com a equação do *gap* intra-banda $\langle\langle f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle$. Note que fazendo $\mathcal{U} = 0$ em (4.41) obtemos imediatamente o sistema (3.14) do capítulo anterior. Escrevendo o sistema de equações na forma matricial, obtemos

$$\begin{pmatrix} \overline{(\omega + \varepsilon_k^f)} & V(\omega + \tilde{\mathcal{U}}) & \Delta_k(\omega + \tilde{\mathcal{U}}) & 0 \\ V & (\omega + \varepsilon_k^s) & 0 & 0 \\ \Delta_k(\omega - \tilde{\mathcal{U}}) & 0 & \overline{(\omega - \varepsilon_k^f)} & -V(\omega - \tilde{\mathcal{U}}) \\ 0 & 0 & -V & (\omega - \varepsilon_k^s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{(\omega - \tilde{\mathcal{U}})}{2\pi} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

onde $C_1 = \langle\langle f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle$, $C_2 = \langle\langle c_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle$, $C_3 = \langle\langle f_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ e $C_4 = \langle\langle c_{k\sigma}; f_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle$. O primeiro passo é calcular o determinante da matriz M dos coeficientes em (4.42). Com isso temos que

$$\begin{aligned} \det M &= (\omega^2 + \varepsilon_k^{s2}) \overline{(\omega + \varepsilon_k^f)} \overline{(\omega - \varepsilon_k^f)} - \Delta_k^2 (\omega^2 + \varepsilon_k^{s2}) (\omega^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2) \\ &- V^2 \left[(\omega - \varepsilon_k^s) \overline{(\omega - \varepsilon_k^f)} (\omega + \tilde{\mathcal{U}}) + (\omega + \varepsilon_k^s) \overline{(\omega + \varepsilon_k^f)} (\omega - \tilde{\mathcal{U}}) - V^2 (\omega^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2) \right]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Simplificando o resultado, encontramos um polinômio em potências de ω de grau 6

$$\begin{aligned}
P(\omega) = & \omega^6 - \left(\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} + \Delta_k^2 + 2V^2 + \mathcal{U}^2 + 2\mathcal{U}\varepsilon_k^f \langle n_{f-\sigma} \rangle \right) \omega^4 \\
& + \left\{ (\varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - V^2)^2 + (\Delta_k \varepsilon_k^s)^2 + 2\mathcal{U}\varepsilon_k^f \langle n_{f-\sigma} \rangle (\varepsilon_k^{s2} - 2V^2) \right. \\
& \left. + \mathcal{U}^2 \left[\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2 + \Delta_k^2 (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2 + 2V^2 (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle) \right] \right\} \omega^2 \\
& - \mathcal{U}^2 \left[(\varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - V^2)^2 + (\Delta_k \varepsilon_k^s)^2 \right] (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2. \quad (4.44)
\end{aligned}$$

Calculando as raízes do polinômio em (4.44), ou seja, os pólos das funções de Green, obtemos as energias de excitação da mesma forma como foi feito no capítulo 3, porém agora para um polinômio de grau 6. Assim, fazendo para um polinômio do tipo $P(\omega) = \omega^6 + A_k \omega^4 + B_k \omega^2 + C_k$ a mudança $x = \omega^2$, é encontrado

$$x^3 + A_k x^2 + B_k x + C_k = 0. \quad (4.45)$$

Fazendo a manipulação $x = y - A_k/3$, o polinômio se reduz para $y^3 + D_k y + E_k$, onde $D_k = (B_k - \frac{A_k^2}{3})$ e $E_k = (C_k - \frac{A_k B_k}{3} + \frac{2A_k^3}{27})$. Para esse caso, os coeficientes em questão são dados por

$$\begin{aligned}
A_k = & - \left(\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} + \Delta_k^2 + 2V^2 + \mathcal{U}^2 + 2\mathcal{U}\varepsilon_k^f \langle n_{f-\sigma} \rangle \right); \\
B_k = & \left\{ (\varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - V^2)^2 + (\Delta_k \varepsilon_k^s)^2 + 2\mathcal{U}\varepsilon_k^f \langle n_{f-\sigma} \rangle (\varepsilon_k^{s2} - 2V^2) \right. \\
& \left. + \mathcal{U}^2 \left[\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2 + \Delta_k^2 (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2 + 2V^2 (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle) \right] \right\}; \\
C_k = & - \mathcal{U}^2 \left[(\varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - V^2)^2 + (\Delta_k \varepsilon_k^s)^2 \right] (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2. \quad (4.46)
\end{aligned}$$

Dessa forma, as soluções para o polinômio de 3º grau são dadas por

$$\begin{aligned}
x_1 = & 2\sqrt{\frac{|D_k|}{3}} \cos\left(\frac{\phi_k}{3}\right) - \frac{A_k}{3}, \\
x_2 = & 2\sqrt{\frac{|D_k|}{3}} \cos\left(\frac{\phi_k + 2\pi}{3}\right) - \frac{A_k}{3}, \\
x_3 = & 2\sqrt{\frac{|D_k|}{3}} \cos\left(\frac{\phi_k + 4\pi}{3}\right) - \frac{A_k}{3}, \quad (4.47)
\end{aligned}$$

onde $\phi_k = \arccos\left[-\frac{E_k}{2\sqrt{(|D_k|/3)^3}}\right]$. Com as raízes obtidas, é visto então que as seis energias de excitação do sistema são dadas por

$$\omega_{1,2k} = \pm\sqrt{x_1}, \quad \omega_{3,4k} = \pm\sqrt{x_2}, \quad \omega_{5,6k} = \pm\sqrt{x_3}. \quad (4.48)$$

É possível ver que $\omega_{2k} = -\omega_{1k}$, $\omega_{4k} = -\omega_{3k}$, e $\omega_{6k} = -\omega_{5k}$. Com isso, reescrevemos o polinômio $P(\omega)$ como função das raízes

$$P(\omega) = (\omega^2 - \omega_{1k}^2)(\omega^2 - \omega_{2k}^2)(\omega^2 - \omega_{3k}^2), \quad (4.49)$$

onde é colocado de forma geral as energias das *quasi*-partículas ω_{nk} como sendo

$$\omega_{nk} = \sqrt{2\sqrt{\frac{|D_k|}{3}} \cos\left(\frac{\phi_k + 2\pi(n-1)}{3}\right) - \frac{A_k}{3}}, \quad (n = 1, 2, 3), \quad (4.50)$$

sendo este resultado similar ao obtido por Caixeiro e Troper[71], que adotaram a aproximação Hubbard-I nas funções de Green relativas ao termo atrativo. É interessante notar que, a inclusão do potencial repulsivo \mathcal{U} adotando o tratamento Hubbard-I nos desacoplamentos, fez com que surgisse um novo ramo das energias de excitação, que aparece exclusivamente devido a presença desse potencial. Da forma que foi feita na seção anterior relativa ao *crossover* BCS-BEC, não era visto esse novo ramo, pois \mathcal{U} só é levado em conta como sendo uma contribuição local na amplitude do *gap* supercondutor, consequência do desacoplamento tipo campo médio adotado.

Assim, de posse das soluções em (4.50), é possível esboçar as relações de dispersão das energias das *quasi*-partículas do sistema, como será visto na próxima seção, e já é metade dos esforços em obter a equação para o *gap* supercondutor.

4.4 Espectros de energia das *quasi*-partículas

Nesta seção, serão esboçados e discutidos os espectros de energia das *quasi*-partículas, observando quais são os efeitos de \mathcal{U} no sistema, em conjunto com a hibridização. Será visto também como o número de ocupação da banda f influencia o sistema. No capítulo anterior, foi visto o comportamento das relações de dispersão para o sistema sem a presença do potencial repulsivo local, nos limites de acoplamentos fracos e fortes. Naquele caso só existia a presença da hibridização como agente que poderia afetar as relações de dispersão, afastando as bandas uma da outra devido a transferência de partículas entre as bandas que ela proporciona.

Agora com a presença do potencial repulsivo, são esboçadas as relações de dispersão do sistema como vemos na Figura (4.3). É visto uma coleção de gráficos para diferentes valores de \mathcal{U} e como as energias são afetadas, fixando $\Delta/E_F = 0.2$, $V/E_F = 0.1$ e $n_f = 1.0$.

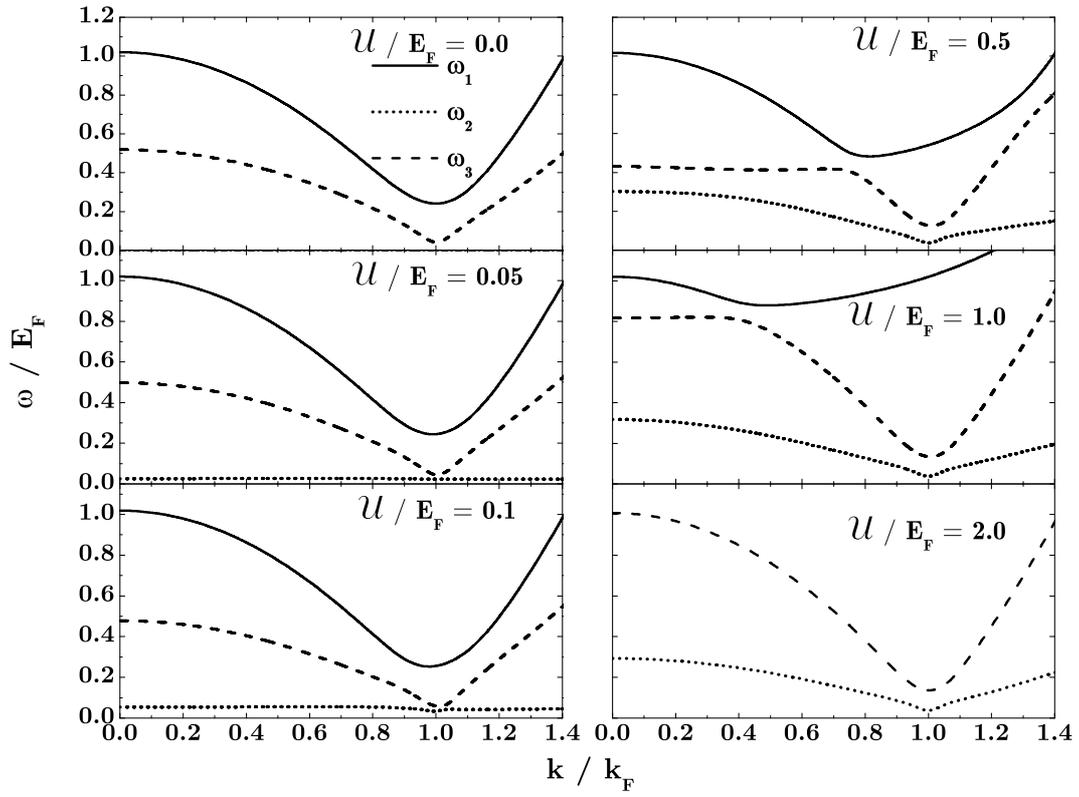


Figura 4.3: Comportamento das energias de excitação do sistema para diferentes intensidades do potencial repulsivo \mathcal{U} fixando $\Delta/E_F = 0.2$, $V/E_F = 0.1$ e $\alpha = 0.5$.

Para $\mathcal{U} = 0$, obtemos somente dois ramos como era de se esperar. À medida em que se aumenta a intensidade de \mathcal{U} é visto que surge um ramo que inicialmente parece ser constante, sem dispersão. Para valores de $\bar{\mathcal{U}} > 0.1$, o novo ramo começa a ser afetado e ganha uma forma típica das relações de dispersão já conhecidas, partindo de um valor finito, apresentando um mínimo em torno de $k = k_F$ e tornando a crescer novamente para valores maiores do que k_F . Quando a intensidade do potencial repulsivo é grande suficiente tal que $\bar{\mathcal{U}} > 1.0$, é observado que o sistema exibe um comportamento interessante, pois ω_{2k} e ω_{3k} não se modificam mais, mesmo com o aumento do potencial. Somente ω_{1k} é afetado, sendo deslocado para valores maiores de energia, porém não afetando sua forma parabólica, similar a forma encontrada por Japiassu, Continentino e Troper[72]. Esse deslocamento é visível se for analisado o valor da energia de ω_{1k} na Fig.(4.4). No que

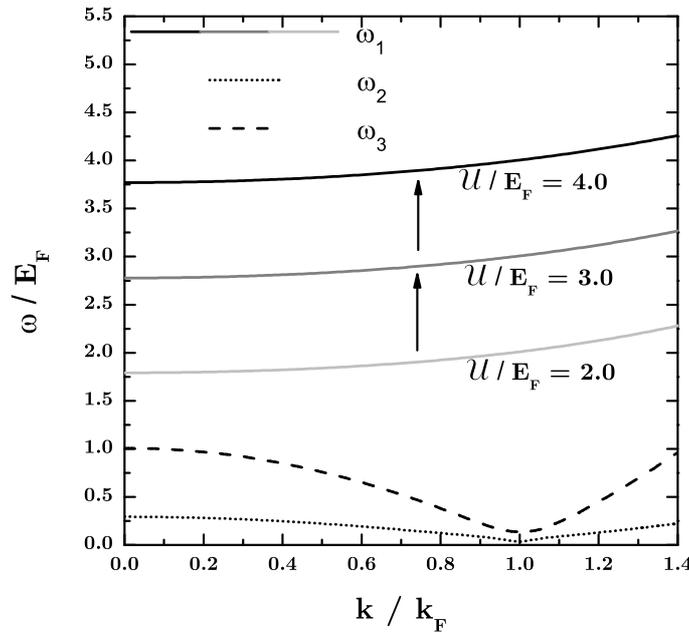


Figura 4.4: Comportamento das energias de excitação do sistema para grandes valores de \mathcal{U} , com $\Delta/E_F = 0.2$, $V/E_F = 0.1$ e $\alpha = 0.5$.

diz respeito a supercondutividade, o efeito de \mathcal{U} segundo os resultados, é de renormalizar a banda estreita em função do novo ramo de energias que surge, sem destruir o *gap* em $k = k_F$, pelo menos para o caso da banda semi-preenchida $n_f = 1.0$, que será adotado como padrão mais adiante. Para visualizar melhor a ação do potencial nas energias de excitação, foi esboçado na Figura (4.5) uma coleção de gráficos de energias *versus*

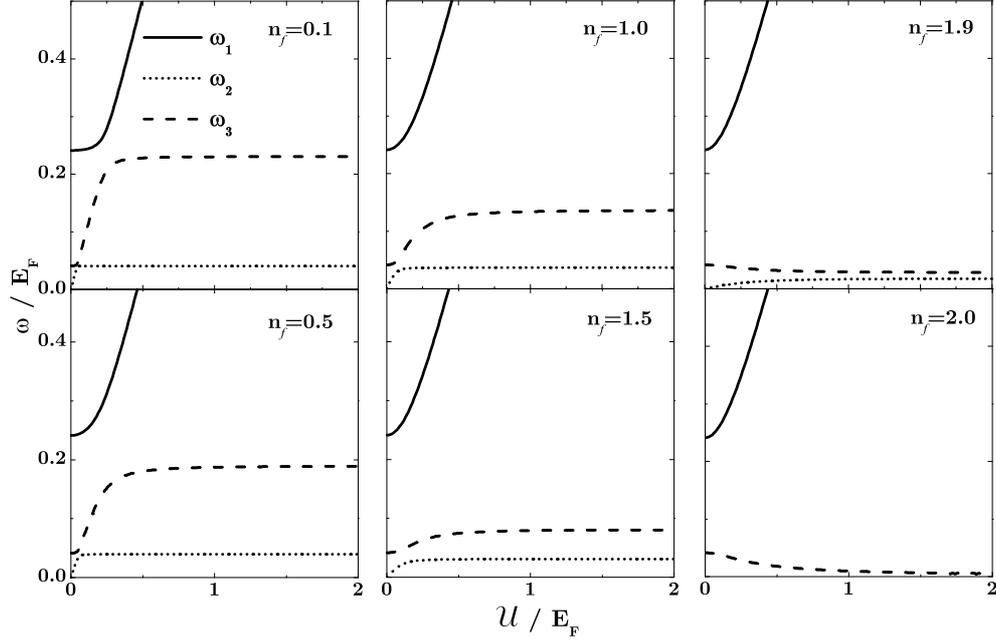


Figura 4.5: Comportamento das energias de excitação do sistema como função de U/E_F para diferentes valores de n_f , com $k/k_F = 1.0$, $\Delta/E_F = 0.2$, $V/E_F = 0.1$ e $\alpha = 0.5$.

potencial repulsivo, para diferentes valores do número n_f . Nos quatro primeiros quadros é visto que os ramos ω_{2k} e ω_{3k} crescem para pequenos valores de \bar{U} , até um certo valor onde passa a ser constante. Já ω_{1k} sempre cresce ao passo em que se aumenta \bar{U} para todos os valores de n_f , não sendo observado o comportamento tipo saturação visto nos outros dois ramos. Quando $n_f = 1.9$ é visto que ω_{3k} passa a diminuir com o aumento de \bar{U} , mas logo se torna constante. Quando fixa-se $n_f = 2.0$, $\omega_2 = 0$ e na medida em que se aumenta \bar{U} , ω_3 tende à zero. Assim, vemos que o *gap* na banda estreita tende a ser nulo quando $\bar{U} \gg 1$ e quando a banda está cheia, com $n_f \rightarrow 2.0$.

É interessante notar agora como a hibridização e o potencial repulsivo agem mutuamente no estado supercondutor analisando os diagramas de fases do sistema. Para isso, na próxima seção será obtida a equação de *gap* para então estudar as transições do estado supercondutor (SC) para o estado normal (N), adotando a forma convencional das equações de *gap*, sem o emprego do comprimento de espalhamento a_s .

4.5 Equação do *gap*, diagramas de fases e discussões

Nessa seção temos como objetivo obter os diagramas de fase do sistema e discutir os resultados agora do ponto de vista da aproximação Hubbard-I abordada na seção anterior. Para dar início aos estudos, é necessário obter o propagador $\ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \gg$. Para calculá-lo é preciso voltar para a matriz em (4.42) e utilizar a regra de Cramer para determinar a componente $C_1 = \ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \gg$. Pela regra, a forma de determinar C_1 é da forma

$$C_1 = \frac{\det M_{C_1}}{\det M}, \quad (4.51)$$

onde

$$M_{C_1} = \begin{pmatrix} 0 & V(\omega + \tilde{\mathcal{U}}) & \Delta_k(\omega + \tilde{\mathcal{U}}) & 0 \\ 0 & (\omega + \varepsilon_k^s) & 0 & 0 \\ \frac{(\omega - \tilde{\mathcal{U}})}{2\pi} & 0 & (\omega - \varepsilon_k^f) & -V(\omega - \tilde{\mathcal{U}}) \\ 0 & 0 & -V & (\omega - \varepsilon_k^s) \end{pmatrix}. \quad (4.52)$$

Como $\det M$ já foi calculado em (4.43) e simplificado em (4.49), basta calcular $\det M_{C_1}$, que sem muitas dificuldades é obtido como sendo

$$\det M_{C_1} = -\frac{\Delta_k(\omega^2 - \varepsilon_k^{s2})(\omega^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2)}{2\pi}. \quad (4.53)$$

Com isso, o propagador $\ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \gg$ é escrito como

$$\ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \gg = -\frac{\Delta_k(\omega^2 - \varepsilon_k^{s2})(\omega^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2)}{2\pi P(\omega)} \quad (4.54)$$

onde $P(\omega)$ está da forma que foi escrito em (4.49). Para obter a função de correlação para o *gap* supercondutor, é utilizado o teorema do salto, porém nesse caso onde temos seis pólos no denominador de (4.54), a forma geral para uma das 3 parcelas da função de correlação é a seguinte:

$$\langle AB \rangle_{i=1} = \frac{\mathcal{F}_k(\omega_i) f_{FD}(\omega_i) - \mathcal{F}_k(-\omega_i) f_{FD}(-\omega_i)}{2\omega_i(\omega_i^2 - \omega_j^2)(\omega_i^2 - \omega_l^2)}, \quad i, j, l = 1, 2, 3 \quad (4.55)$$

onde $f_{FD}(\omega_i)$ é a função Fermi-Dirac e \mathcal{F}_k é a função correspondente ao numerador de um propagador $\ll B; A \gg$ qualquer. Assim, para calcular $\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle$, é conhecido que a função $\mathcal{F}_k = \Delta_k(\omega^2 - \varepsilon_k^{s2})(\omega^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2)$, e assim obtemos

$$\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle = \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ijl} \frac{\Delta_k(\omega_{ik}^2 - \varepsilon_k^{s2})(\omega_{ik}^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2)}{2\omega_{ik}(\omega_{ik}^2 - \omega_{jk}^2)(\omega_{ik}^2 - \omega_{lk}^2)} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{ik}}{2}\right), \quad (4.56)$$

onde é colocado o tensor Levi-Civita para garantir que as permutações sejam cíclicas na ordem $(i, j, l) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)$, e assim $\epsilon_{ijl} = +1$, gerando três parcelas na soma. Com isso, é encontrado de imediato a equação para o *gap* supercondutor sabendo que $\Delta_k = \sum_{k'} G(k, k') \langle f_{k'\sigma}^\dagger f_{-k'-\sigma}^\dagger \rangle$,

$$\Delta_k = \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ijl} \sum_{k'} G(k, k') \frac{\Delta_{k'} (\omega_{ik'}^2 - \epsilon_{k'}^{s,2}) (\omega_{ik'}^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2)}{2\omega_i (\omega_{ik'}^2 - \omega_{jk'}^2) (\omega_{ik'}^2 - \omega_{lk'}^2)} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{ik'}}{2}\right). \quad (4.57)$$

Adotando a mesma forma do potencial separável do capítulo anterior, temos por consequência que a equação do *gap* para temperatura nula ($T = 0$) se simplifica sendo

$$\frac{1}{G_0} = \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ijl} \sum_k \gamma(k)^2 \frac{(\omega_{ik}^2 - \epsilon_k^{s,2}) (\omega_{ik}^2 - \tilde{\mathcal{U}}^2)}{2\omega_{ik} (\omega_{ik}^2 - \omega_{jk}^2) (\omega_{ik}^2 - \omega_{lk}^2)}, \quad (4.58)$$

onde G_0 e $\gamma(k)$ são relativos ao caso da simetria tipo onda s já escritos em (3.48) e (3.49), além de $\tilde{\mathcal{U}} = \mathcal{U}(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)$. Agora com a equação (4.58) é possível obter o diagrama de fases do sistema. Para resolver a integral em (4.58), adotamos o mesmo corte no espaço dos momentos que foi usado para obter V_c na seção 5 do capítulo anterior, além de fixarmos $n_f = 1.0$.

Na Figura (4.6) é esboçado o diagrama de fases das interações atrativas críticas G_{0c} *versus* \mathcal{U} . Para o mesmo, foram obtidas diferentes soluções para diferentes intensidades da hibridização V . Nesse caso é possível ver como a hibridização força o sistema a aumentar a intensidade de \overline{G}_{0c} para passar do estado normal para o supercondutor. À medida em que aumentamos $\overline{\mathcal{U}}$, é visto que qualitativamente as linhas críticas são parecidas, apresentando um comportamento tipo saturação para grandes intensidades do potencial repulsivo, não diminuído mais a fase SC como no caso $\overline{\mathcal{U}} \leq 0.1$.

Na Figura (4.7) é visto outro diagrama de fases do sistema com G_{0c} *versus* V . Foram calculadas as linhas para diferentes intensidades do potencial repulsivo \mathcal{U} . Note que para $\overline{\mathcal{U}} = 0$, o diagrama é o mesmo obtido para V_c no capítulo anterior. Para valores de $\overline{\mathcal{U}}$ finitos, é visto que o comportamento tipo saturação mais uma vez aparece, pois as soluções para $\overline{\mathcal{U}} = 1.0$ e $\overline{\mathcal{U}} = 2.0$ são praticamente as mesmas.

Isso pode indicar mais uma vez que o fim do comportamento linear de V para fracas interações, está relacionada com a mudança de comportamento no parâmetro de ordem supercondutor através do *crossover* BCS-BEC, mudança essa que não é afetada diretamente por $\overline{\mathcal{U}}$.

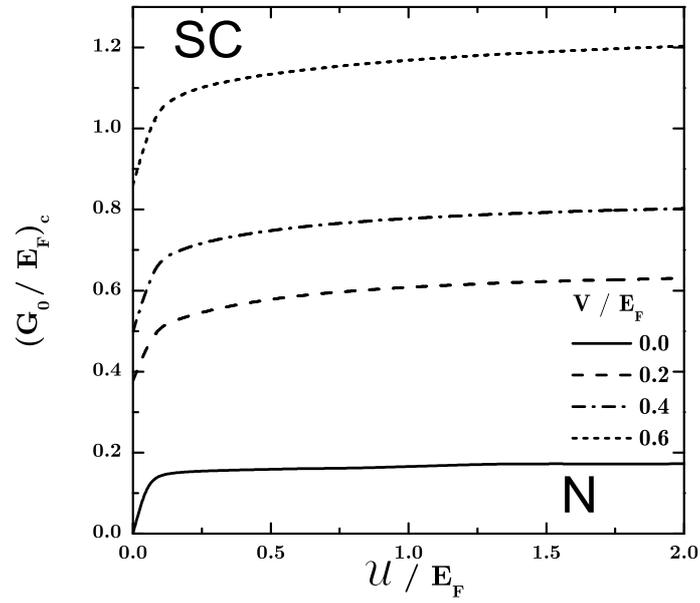


Figura 4.6: Diagrama de fases G_{0c} versus U para simetria tipo onda s , sob diferentes intensidades de hibridização para $\alpha = 0.5$.

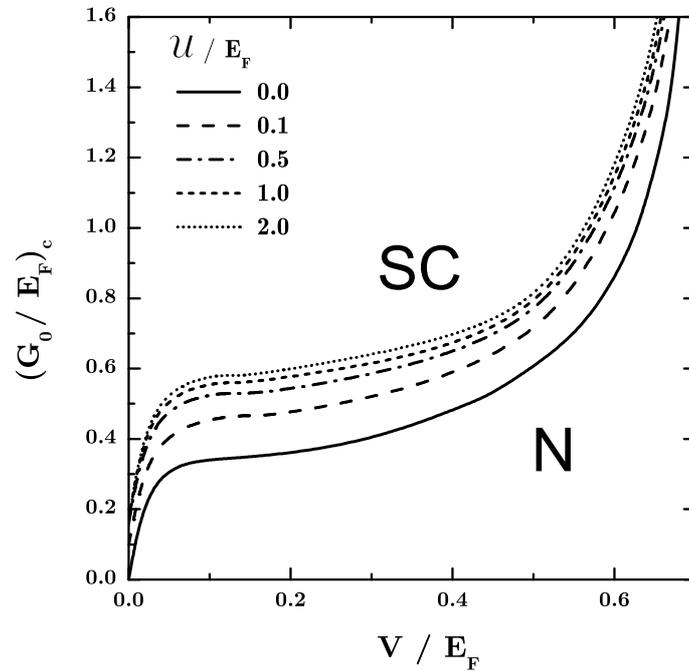


Figura 4.7: Diagrama de fases G_{0c} versus V do sistema sob diferentes intensidades do potencial repulsivo para $\alpha = 0.5$.

4.6 Discussões para o caso onda d

A compreensão dos mecanismos por trás da supercondutividade nos materiais cupratos “High T_c ” (HTSC), nos férmions pesados, e nos sistemas fortemente correlacionados em geral é ainda um dos maiores objetivos da física da matéria condensada. Surgiu desde a descoberta dos HTSC[6] um ingrediente importante para descrever esses novos sistemas: a simetria do estado emparelhado e seus mecanismos nesses novos compostos. Desde a descoberta da supercondutividade nesses novos materiais, uma imensa lista de trabalhos teóricos e experimentais sugere que esses novos compostos exibem uma forma não convencional de emparelhamento. Quando é dito não convencional, trata-se um estado onde o parâmetro de ordem ou o *gap* de energia possuem uma simetria diferente da simetria tipo s isotrópica do par de Cooper, que acredita-se ser a forma padrão da maioria dos supercondutores de baixa temperatura crítica. Dentro dessas simetrias não convencionais, destaca-se a simetria d , com emparelhamento tipo $d_{x^2-y^2}$ [10].

Os cupratos HTSC são materiais compostos de camadas onde a supercondutividade ocorre nos planos de CuO_2 bidimensional fracamente ligado com os outros planos no material. Na família do composto férmion pesado $CeMIn_5$, onde $M = Co, Rh, Ir$, é observado que do ponto de vista estrutural, a rede pode ser vista como uma série alternada de camadas de MIn_2 e $CeIn_3$, onde na última é onde ocorre a supercondutividade, assim tendo um caráter bidimensional como no caso dos HTSC. Além disso, outra informação importante sobre os FP supercondutores baseados em Ce , é que a simetria do *gap* é do tipo $d_{x^2-y^2}$ [70]. Como foi dito no início do capítulo, outro fato que faz esses novos supercondutores sistemas em comum entre si, é a presença da repulsão Coulombiana local.

Nesta seção abordaremos a supercondutividade em sistemas multi-bandas para o caso bidimensional, com simetria do *gap* supercondutor tipo onda- d em $T = 0$. Para isso, o ponto de partida é a equação (4.58), que *a priori* pode assumir diferentes simetrias de emparelhamento especificando a forma de $\gamma_l(k)$. Para onda d ($l = 2$) obtemos a equação

$$\frac{1}{G_0^d} = \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ijl} \sum_k \gamma_d(k)^2 \frac{(\omega_{ik}^2 - \epsilon_k^{s2})(\omega_{ik}^2 - \tilde{U}^2)}{2\omega_{ik}(\omega_{ik}^2 - \omega_{jk}^2)(\omega_{ik}^2 - \omega_{lk}^2)}. \quad (4.59)$$

Como pode ser visto no Apêndice C, a forma separável do potencial atrativo no espaço bidimensional, gera de acordo com os limites físicos impostos, uma forma diferente para

a função $\gamma_d(k)$, que é como segue

$$\gamma_d(k) = \frac{(k/k_1)^2}{(1 + k/k_0)^{\frac{5}{2}}} \cos(2\varphi), \quad (4.60)$$

onde φ é a coordenada angular polar no espaço dos momentos. Essa função controla o alcance de interação R_0 com o parâmetro $k_0 \sim 1/R_0$, e k_1 define a escala no regime de pequenos momentos. É importante ressaltar que o comportamento das energias de excitação para o caso onda d é o mesmo para onda s , no que diz respeito ao aumento do potencial repulsivo. À medida em que se aumenta a intensidade de \bar{U} , as bandas passam por um processo de renormalização já discutido para o caso das ondas s , que pode ser vista no polinômio $P(\omega)$ escrito em (4.44) no limite de $\mathcal{U} \gg 1$ como segue

$$P(\omega) = \omega^6 - \mathcal{U}^2 \left\{ \omega^4 - \left[\varepsilon_k^{s2} + \varepsilon_k^{f2} (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2 + \Delta_k^2 (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2 + 2V^2 (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle) \right] \omega^2 - [(\varepsilon_k^s \varepsilon_k^f - V^2)^2 + (\Delta_k \varepsilon_k^s)^2] (1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)^2 \right\}. \quad (4.61)$$

Note que em (4.61) a parcela entre as chaves diretamente proporcional ao \mathcal{U} é praticamente idêntico ao polinômio obtido para o sistema sem a presença explícita do potencial repulsivo, visto no capítulo 3 (ver Eq.(3.22)). Com isso, é possível ver que a banda estreita é afetada pelo termo $(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)$ quando o potencial repulsivo é levado em consideração, além da razão $\alpha = m/m_f$. Com isso, a descrição de sistema supercondutor com simetria tipo d , sob forte repulsão local na banda onde ocorre o emparelhamento, pode ser feita por um modelo multi-banda, onde a banda estreita seja considerada uma banda efetiva que leve em conta a massa reduzida $(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle)$ além de α . Com isso, o único termo de muitos corpos remanescente é a parcela relacionada com a interação atrativa não-local entre os elétrons da banda estreita efetiva.

Assim sendo, obtemos os diagramas de fases para o sistema, adotando a razão entre as massas $\alpha = 0.1$ para melhor representar as bandas estreitas e $n_f = 1.0$. Escolhemos $\bar{k}_0 = 5.0$ e $\bar{k}_1 = \sqrt{\bar{k}_0}$, na mesma ordem de grandeza do adotado por Duncan *et al.*[18] que estuda a supercondutividade para simetria d . A sobre-barras nos momentos indica a normalização pelo momento de Fermi k_F . Na Figura (4.8) encontra-se o diagrama de fases das interações atrativas críticas G_{0c}^d versus \mathcal{U} para o sistema supercondutor bidimensional. Nas soluções para os diferentes valores de \bar{V} e $\bar{U} < 0.1$, o comportamento é similar ao observado no caso onda s tridimensional, sendo visto um crescimento uniforme das

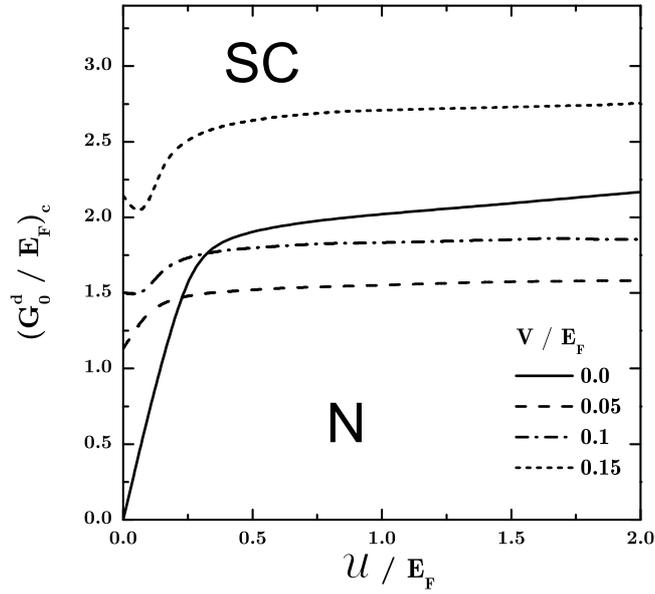


Figura 4.8: Diagrama de fases G_{0c}^d versus U do sistema sob diferentes intensidades da hibridização para $\alpha = 0.1$.

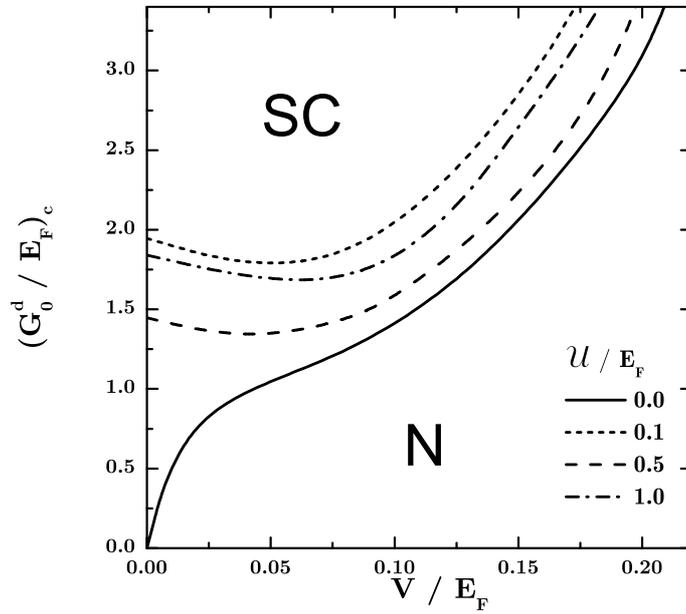


Figura 4.9: Diagrama de fases G_{0c}^d versus V do sistema sob diferentes intensidades do potencial repulsivo para $\alpha = 0.1$.

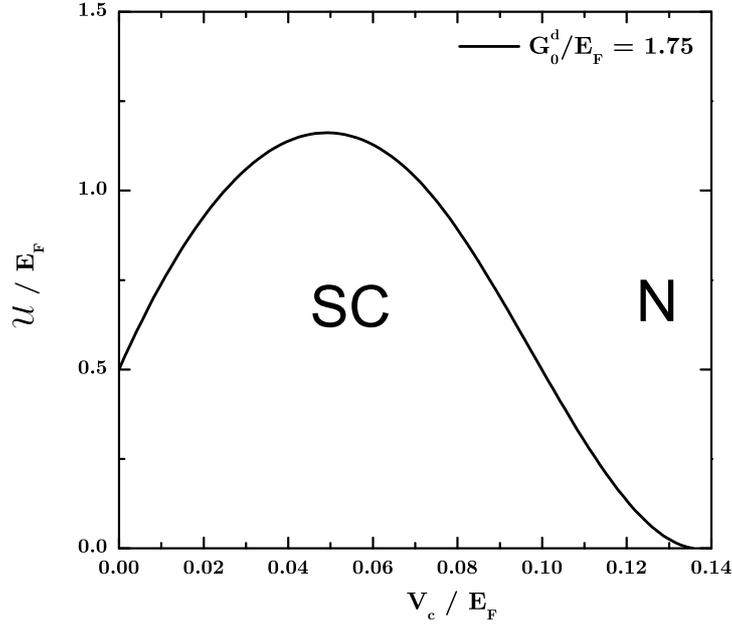


Figura 4.10: Diagrama de fases \mathcal{U} versus V_c do sistema sob intensidade do potencial atrativo fixo em $G_0^d = 1.75$ para $\alpha = 0.1$.

soluções à medida em que $\bar{\mathcal{U}}$ cresce. Porém, para intensidades de $\bar{\mathcal{U}} > 0.1$ começa a ser visto que soluções de \bar{G}_{0c}^d para $\bar{V} = 0$ são maiores do que as soluções para $\bar{V} = 0.05$ e $\bar{V} = 0.1$. A partir de $\bar{V} = 0.15$ é observado novamente soluções para \bar{G}_{0c}^d maiores do que o caso de hibridização nula, ou seja, é retomado o crescimento uniforme que era observado no caso onda s . Isso pode ser visto também no outro diagrama na Figura (4.9), de G_{0c}^d versus V . Note que para interações fixas da ordem de $\bar{G}_0^d \geq 1.5$, a relação entre \mathcal{U} e V_c apresenta um domo SC como pode ser visto na Figura (4.10), o que faz esse sistema supercondutor bidimensional com simetria d ser distinto do caso com simetria s . Com isso, é possível dizer que os efeitos do potencial repulsivo local em cada caso se tornam completamente diferentes quando o sistema sofre o efeito da hibridização: no caso das ondas s o efeito saturação para grandes intensidades de \mathcal{U} é observado em todas as propriedades físicas, desde as relações de dispersão das *quasi*-partículas até os diagramas de fases; para simetria d é observada a saturação nas energias de excitação e nos diagramas de fases onde se varia a intensidade da interação G_0^d , porém quando é fixado valores relativamente grandes desse potencial, são observados domos supercondutores no plano $\mathcal{U} \times V_c$, que não foram observados para simetria s .

Em linhas gerais, foi visto que o efeito do potencial repulsivo local no sistema é de não favorecer o estado supercondutor. No estudo *crossover* BCS-BEC dentro do limite de fracas intensidades do potencial repulsivo $\mathcal{U} \leq 0.1$, foi visto que seu efeito é separar as diferentes soluções para diferentes intensidades da hibridização V . Isso não era observado analisando a amplitude do *gap* supercondutor com $\mathcal{U} = 0$, e sim uma convergência de todas as soluções no limite de acoplamentos fortes. Assim, \mathcal{U} age evidenciando o efeito da hibridização de diminuir a amplitude do *gap* supercondutor mesmo no limite BEC.

Para estudar o sistema para valores de $\mathcal{U} > 1.0$ foi adotada a aproximação Hubbard-I, sendo que nesse caso o foco não era mais estudar o *crossover* entre acoplamentos fracos e fortes visto anteriormente. O objetivo de adotar a técnica Hubbard-I agora é de ver os efeitos do potencial repulsivo nas relações de dispersão do sistema, analisando o comportamento das *quasi*-partículas. Nesse novo cenário, foi observado um quadro diferente, pois para $\mathcal{U} > 0$ surge um novo ramo de soluções para as energias de excitação do sistema, consequência das soluções do polinômio obtido para determinar as energias que era de ordem 6. Quando $\mathcal{U} > 1.0$, as relações de dispersão das energias de excitação mostram que o sistema passa por uma espécie de renormalização da banda estreita, não sendo mais alteradas para valores de $\mathcal{U} > 2.0$. Assim, pode-se concluir que para sistemas com forte repulsão local, o modelo duas bandas da forma mais simples, somente levando em conta a parcela da atração é suficiente para descrever sistemas supercondutores como os férmions pesados, considerando que a banda f onde ocorre o emparelhamento é uma banda efetiva que já foi renormalizada pelo potencial repulsivo \mathcal{U} .

Capítulo 5

Aplicação do modelo duas bandas no férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$

Nos sistemas físicos da matéria condensada, o estudo da criticalidade quântica é uma das principais áreas de estudo da atualidade, e grande parte dos trabalhos experimentais e teóricos se focam em estudar pontos críticos quânticos magnéticos. Essas investigações estimularam a estudar e investigar outros tipos de pontos críticos quânticos, que podem ser mediados ou alcançados experimentalmente servindo de parâmetro para testar os resultados teóricos que analisam a classe de universalidade em torno da criticalidade. Neste capítulo será descrito brevemente um sistema férmion pesado baseado na terra rara cério (Ce), e depois utilizaremos o modelo de duas bandas adotado previamente nos capítulos anteriores, para obter o diagrama de fases de $T_c \times P$. Nesse caso, a pressão externa controla a hibridização no limite de acoplamentos fracos, e assim pretendemos discutir as propriedades do sistema quando $T_c \rightarrow 0$ através da pressão externa.

5.1 Aspectos experimentais

A família de sistemas férmions pesados da série 115 baseados no Ce , $CeMIn_5$ ($M = Co, Rh$ ou Ir) já foi amplamente investigada devido ao fato desse composto apresentar propriedades físicas interessantes[73, 74, 75, 76]. Comparando diferentes ligas dessa família, o $CeCoIn_5$ é um férmion pesado supercondutor e tem em pressão ambiente a temperatura crítica $T_c = 2.3K$ [75]. Já o $CeRhIn_5$, que é um férmion pesado antiferromagnético

com $T_N = 3.8K$, só tem a fase supercondutora sob pressão e apresenta a temperatura crítica máxima $T_c = 2.8K$ [77]. Do ponto de vista estrutural, esses materiais apresentam uma estrutura cristalina tetragonal, e podem ser vistos como sendo camadas alternadas de $CeIn_3$ e MIn_2 , o que faz com que tenham uma característica quase bidimensional. A estrutura cristalina por inteira pode ser vista na Figura(5.1). O $CeCoIn_5$, que apresenta supercondutividade com simetria tipo onda d [70], é fortemente afetado pela dopagem com estanho (Sn), que destrói o estado supercondutor[78, 79, 80]. Modelos para o PCQS devido a quebra de pares por efeito de impurezas[81], estendidos para o caso onda d , foram sugeridos para descrever a redução linear de T_c próximo a concentração crítica[78, 79].

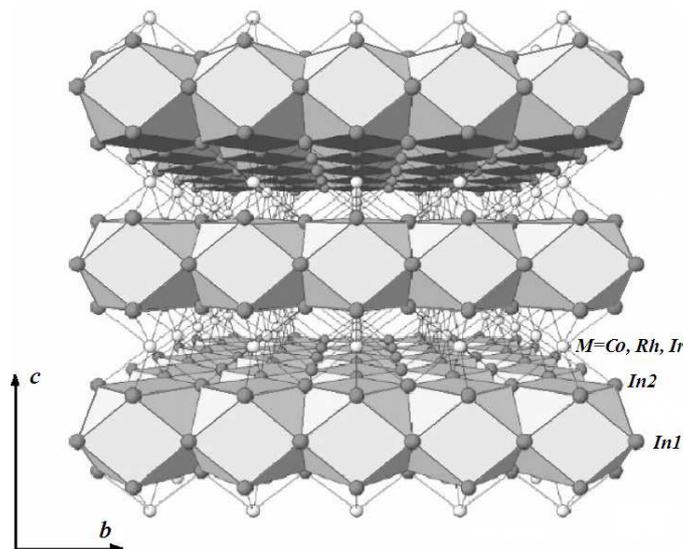


Figura 5.1: Estrutura cristalina quase 2D do $CeMIn_5$.

No trabalho experimental desenvolvido por S. Ramos *et al.*[82], foi investigado a supressão da supercondutividade no composto $CeCoIn_5$ via combinação de dopagem por Sn e pressão externa. A supressão da temperatura crítica pela dopagem de Sn , leva ao desaparecimento completo da supercondutividade quando é atingida a concentração crítica $x_c \sim 0.18$ [78, 83]. Foi observado que essa dopagem de Sn aumenta a hibridização entre os momentos f do Ce^{3+} e os elétrons de condução devido ao elétron extra do estanho em relação ao In . Esse aumento na hibridização induzida pela dopagem (ou substituição) por Sn foi observada também no composto $CeIn_3$ [84]. A dopagem introduz uma desordem nas camadas supercondutoras já que a substituição ocorre no $In(1)$, que é um sítio que faz parte da camada de $CeIn_3$ [79, 85]. Com isso, em princípio ambos efeitos, desordem e

hibridização podem contribuir para uma drástica redução de T_c e levar o sistema para o estado normal. Devido a esse fato, são estudados os efeitos do aumento da hibridização através da pressão ou dopagem em detrimento de T_c .

Medidas de resistividade foram realizadas em cristais do composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$, com $0.03 \leq x \leq 0.18$. Na Figura (5.2) são apresentadas as curvas da resistividade para diferentes concentrações x e pressão ambiente. No quadro à esquerda, são mostradas as curvas que exibem o comportamento da resistividade em altas temperaturas onde as mesmas apresentam um máximo, que é deslocado para maiores temperaturas na medida em que se aumenta a concentração de Sn .

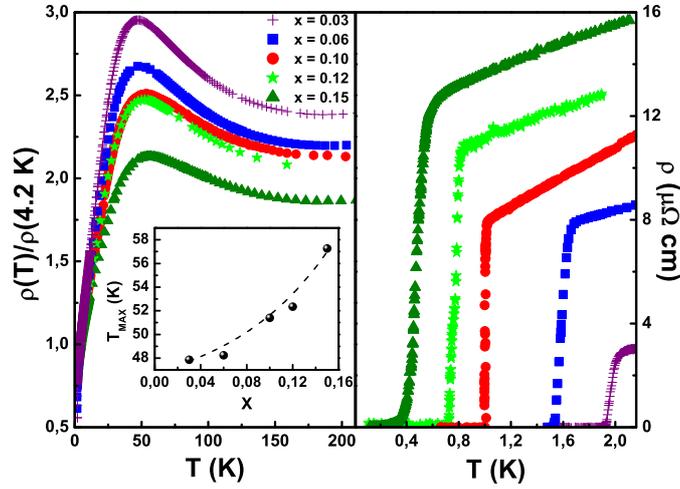


Figura 5.2: Comportamento em altas e baixas temperaturas da resistividade no composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ em pressão ambiente, onde no quadro da direita são observadas as transições supercondutoras para $\rho(T) = 0$ [82].

Esse deslocamento é devido ao aumento da hibridização com a substituição por Sn , pois o mesmo aumenta a temperatura de Kondo que é uma escala de temperatura relevante do sistema no regime de altas temperaturas. Ainda sobre o gráfico da Figura (5.2), o quadro da direita apresenta os resultados para diferentes concentrações do comportamento das diferentes amostras em baixas temperaturas, exibindo as transições supercondutoras. É visto que na medida em que se aumenta a concentração de estanho, a temperatura crítica diminui. Outra característica relevante sobre o composto férmion pesado em estudo, é que para concentrações de Sn $x < x_c$, as curvas de resistividade logo acima da transição supercondutora, se comportam como um não-líquido de Fermi por ter uma de-

pendência com a temperatura da forma T^n com $n < 1$. Esse regime sub-linear se estende no mínimo, ao dobro da temperatura crítica para todas as concentrações. Comportamento semelhante é visto no composto $CeRhIn_5$, e tem sido atribuído ao espalhamento eletrônico por coexistir flutuações críticas quânticas carga e de spin[47]. Quando $x \rightarrow x_c$, a dependência entre a resistividade e a temperatura volta a ser linear, ou seja, $n = 1$. A temperatura crítica decresce aproximadamente de forma linear quando se aumenta a concentração de Sn desaparecendo em x_c . Quando que o sistema é dirigido para além do PCQS por meio de pressão mecânica externa, o regime líquido de Fermi é atingido para temperaturas abaixo da linha de coerência T_{coh} , ou seja, a relação entre a resistividade e a temperatura é dada pela lei de potência $\rho \propto T^2$. Esse tipo de comportamento é observado no composto puro $CeCoIn_5$, próximo da transição SC/N, mediada por campos magnéticos externos[86].

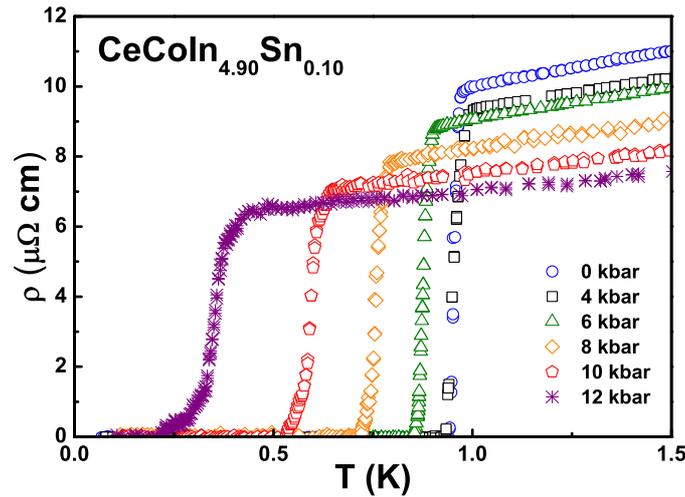


Figura 5.3: Comportamento em baixas temperaturas da resistividade no composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ para diferentes intensidades da pressão, onde foi fixada a concentração de Sn em $x = 0.10$. Note que ainda são observadas as transições supercondutoras para $\rho(T) = 0$ [82].

Quando é estudado o somente efeito da pressão sobre as temperaturas de transição supercondutoras nas amostras dopadas por Sn , é visto que para todas as diferentes dopagens, a pressão sempre destrói a supercondutividade. Isso pode ser observado na Figura (5.3). No gráfico é visto o comportamento da resistividade elétrica em baixas tempe-

raturas para a concentração de Sn fixa em $x = 0.10$. Para diferentes concentrações, foram medidos os valores de T_c variando a pressão[87], e os resultados estão na Figura(5.4).

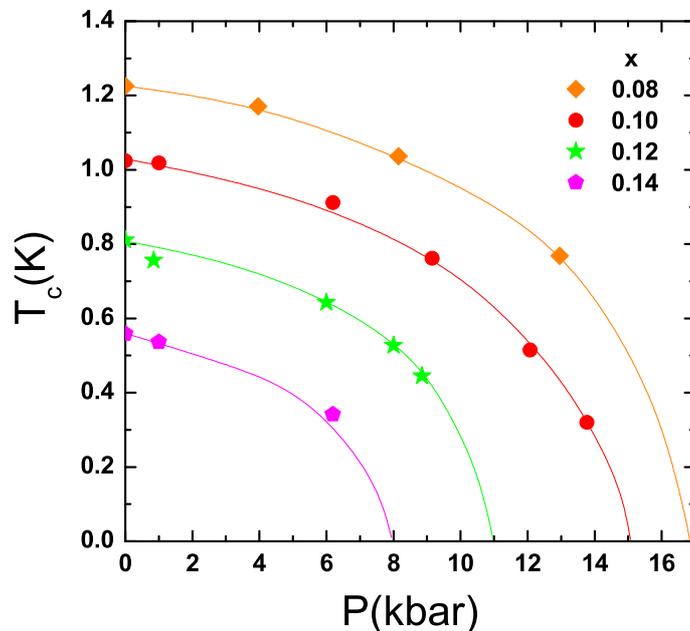


Figura 5.4: Dados experimentais de T_c para diferentes concentrações de Sn no composto $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ variando a intensidade da pressão[87]. As linhas para cada concentração são “guias para os olhos”.

Note que quando se aumenta a pressão nos cristais para as diferentes concentrações de Sn , a temperatura crítica tende a diminuir gradativamente, indicando que o sistema pode ser dirigido ao PQCS por meio da pressão para as concentrações abaixo da concentração crítica $x_c = 0.18$. Com essas medidas apresentadas para a variação da temperatura crítica como função da pressão, discutiremos na próxima seção serão os aspectos teóricos para descrever o composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$.

5.2 Modelagem do sistema

Para ser feita uma abordagem teórica sobre o $CeCoIn_{5-x}Sn_x$, adotaremos o modelo de duas bandas, composto por uma banda estreita associada aos elétrons f , e por outra representando a banda de condução (banda larga) similar aos adotados nos capítulos anteriores. Note que já estaremos levando em consideração implicitamente, o fato do

potencial repulsivo local \mathcal{U} estar renormalizando a banda estreita, como foi discutido no capítulo anterior. É conhecido que no caso da terra rara Ce , o potencial Coulombiano na camada f incompleta é da ordem de 10 eV , assim se enquadrando na condição de renormalização das bandas obtida para o regime de $\mathcal{U}/E_F \gg 1$. O termo de atração não-local entre elétrons da banda estreita será responsável pela supercondutividade com simetria d . Essa atração poderia ser mediada por um suposto ponto crítico quântico antiferromagnético (PCQAF) ocultado pelo estado supercondutor. No caso do $CeCoIn_5$, foi sugerido que esse PCQAF estaria sob o ponto máximo no domo de T_c [88]. Com essas discussões, damos seguimento no estudo do férmion pesado em questão. O estudo teórico será feito através do Hamiltoniano que segue

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} t_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k},\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) - \sum_{ij\sigma} G_{ij} n_{i\sigma}^f n_{j-\sigma}^f, \quad (5.1)$$

com V sendo a hibridização entre a banda de condução com dispersão $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ e a banda estreita dos elétrons f com dispersão $t_{\mathbf{k}}$. Será considerado que a interação atrativa G_{ij} age somente sobre as *quasi*-partículas da banda estreita. Com o desacoplamento tipo campo médio BCS nos termos de interação atrativa e usando o método das equações de movimento, é possível obter as funções de Green do sistema. A função de Green anômala para os elétrons f da banda estreita é a mesma calculada nos capítulos 3 e 4 para o caso intra-banda, e é dada por

$$\ll f_{-k-\sigma}^\dagger; f_{k\sigma}^\dagger \gg = -\Delta_k \frac{(\omega^2 - \varepsilon_k^2)}{2\pi P(\omega)}, \quad (5.2)$$

com

$$P(\omega) = \omega^4 - [\varepsilon_k^2 + t_k^2 + 2V^2 + \Delta_k^2] \omega^2 + [(\varepsilon_k t_k - V^2)^2 + \Delta_k^2 \varepsilon_k^2], \quad (5.3)$$

sendo Δ_k o parâmetro de ordem supercondutor, definido como

$$\Delta_k = \sum_{k'} G_{kk'} \langle f_{k'\sigma}^\dagger f_{-k'-\sigma}^\dagger \rangle. \quad (5.4)$$

Como já foi dito, as raízes do polinômio $P(\omega)$ determinam as energias das excitações do sistema, dadas por $\omega_{1,2k} = \sqrt{A(k) \pm \sqrt{B(k)}}$, com $A(k) = (\varepsilon_k^2 + t_k^2 + 2V^2 + \Delta_k^2)/2$ e

$$B(k) = \left[\frac{\Delta_k^2 - (\varepsilon_k^2 - t_k^2)}{2} \right]^2 + V^2 [(\varepsilon_k + t_k)^2 + \Delta_k^2].$$

No que segue, assumimos que as bandas são homotéticas ($t_k = \alpha \varepsilon_k$), e $\varepsilon_k = k^2/2m - \mu$ sendo a forma da relação de dispersão da banda larga de condução, com $\alpha = m/m_f$ sendo m a massa dos elétrons de condução e m_f a massa dos elétrons f . Com isso, a relação entre as larguras das bandas assume uma forma similar, com $D = \alpha W$, sendo D a largura da banda estreita e W a largura da banda de condução, com $\alpha \ll 1$ para o caso dos férmions pesados, pois $m_f \gg m$. Nessa abordagem teórica, consideramos a simetria tipo d do parâmetro de ordem supercondutor sendo descrita por uma representação contínua. Utilizaremos para a interação intra-banda, uma forma apropriada para um supercondutor bidimensional, adotando um potencial separável da forma que segue

$$G_{kk'} = G_0 \frac{(k/k_1)^2 (k'/k_1)^2}{(1 + k/k_0)^{\frac{5}{2}} (1 + k'/k_0)^{\frac{5}{2}}} \cos^2(2\varphi), \quad (5.5)$$

tendo nessa abordagem o parâmetro de ordem supercondutor escrito como sendo

$$\Delta_k = \Delta_0 \frac{(k/k_1)^2}{(1 + k/k_0)^{\frac{5}{2}}} \cos(2\varphi). \quad (5.6)$$

A descrição mais detalhada sobre a forma do parâmetro de ordem e do potencial atrativo para simetria d no espaço bidimensional está no Apêndice C. A função de correlação $\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle$ para o caso intra-banda já foi calculada no capítulo 3 na equação (3.33),

$$\langle f_{k\sigma}^\dagger f_{-k-\sigma}^\dagger \rangle = \frac{\Delta_k}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)} \left[\frac{(\omega_{1k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{1k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1k}}{2}\right) - \frac{(\omega_{2k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{2k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2k}}{2}\right) \right].$$

Com essa descrição, é reescrita a equação do parâmetro de ordem em (5.4), que após algumas manipulações resulta em

$$\frac{1}{G_0} = \sum_k \frac{(k/k_1)^4}{2(\omega_{1k}^2 - \omega_{2k}^2)(1 + k/k_0)^5} \left[\frac{(\omega_{1k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{1k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1k}}{2}\right) - \frac{(\omega_{2k}^2 - \varepsilon_k^{s2})}{\omega_{2k}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2k}}{2}\right) \right] \cos^2(2\varphi). \quad (5.7)$$

Passamos da forma discreta para contínua por meio da relação $\sum_k = 1/(2\pi)^2 \int d^2k$, com $d^2k = kdkd\varphi$ para o caso 2D. Fazendo algumas manipulações e uma mudança de variável com respeito ao k similar a feita no capítulo 3, a equação do *gap* é reescrita na forma

integral como segue

$$\bar{f} = \int_0^{2\pi} \int_{-\bar{\omega}_D}^{\bar{\omega}_D} \frac{[(\xi + \bar{\mu})/\bar{E}_1]^2 \cos^2(2\varphi)}{(\bar{\omega}_{1\xi}^2 - \bar{\omega}_{2\xi}^2) \left[1 + \sqrt{\frac{(\xi + \bar{\mu})}{\bar{E}_0}}\right]^5} \left[\frac{(\bar{\omega}_{1\xi}^2 - \xi^2)}{\bar{\omega}_{1\xi}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{1\xi}}{2}\right) - \frac{(\bar{\omega}_{2\xi}^2 - \xi^2)}{\bar{\omega}_{2\xi}} \tanh\left(\frac{\beta\omega_{2\xi}}{2}\right) \right] d\xi d\varphi, \quad (5.8)$$

considerando que G_0 e a amplitude do *gap* superconductor intra-banda Δ_0 são constantes, e $\bar{f}(\bar{\Delta}_0, \bar{T}, \bar{V}) = 1/G_0 \varrho_0$ é a função de *gap* do sistema obtida no limite de acoplamentos fracos. A energia ω_D é a energia de corte próximo ao nível de Fermi, onde a densidade de estados ϱ_0 é constante. A variável de integração ξ é adimensional. As energias características \bar{E}_0 e \bar{E}_1 são relacionadas com os momentos \bar{k}_0 e \bar{k}_1 respectivamente por $\bar{E}_i = (k_i/k_F)^2$. Observe que a sobre-barras representa na notação adotada neste trabalho a normalização da grandeza pela energia de Fermi E_F .

5.3 Teoria e experimento: Resultados obtidos

Na seção passada, discutimos o modelo para descrever o composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ e obtivemos a função de *gap* do sistema, que propicia a análise de como o parâmetro de ordem superconductor varia com a temperatura e com a hibridização. Para obter a linha crítica do diagrama de fases, é feito o parâmetro de ordem igual a zero, e com isso a equação (5.8) nos leva a obter as temperaturas críticas T_c/T_F , como função da hibridização (pressão) V/E_F , fixando os outros parâmetros que descrevem o sistema. Um modelo microscópico de um superconductor férmion pesado com simetria d tem necessariamente um número grande de parâmetros independentes, cujas ordens de magnitude são bem conhecidos. Aqui adotaremos a razão entre as massas $\alpha = 10^{-3}$ e a energia de corte $\omega_D/E_F = 5 \times 10^{-3}$. Foi adotado para as energias características $E_0/E_F = (E_1/E_F)^2 = 50$. Essa escolha leva a obter $k_0/k_F \sim 7$, ressaltando que k_0 é relacionado com a região de interação $R_0 = 1/k_0$ e k_1 define a escala para pequenos vetores de onda k . Com essas considerações, a região de interação é da ordem do espaçamento interpartículas. Com esses valores numéricos impostos para os parâmetros, plotamos as curvas para a função de *gap*, fazendo o parâmetro de ordem nulo. As linhas obtidas são vistas na Figura (5.5), onde é possível ver as soluções para as isotermas variando a intensidade da hibridização.

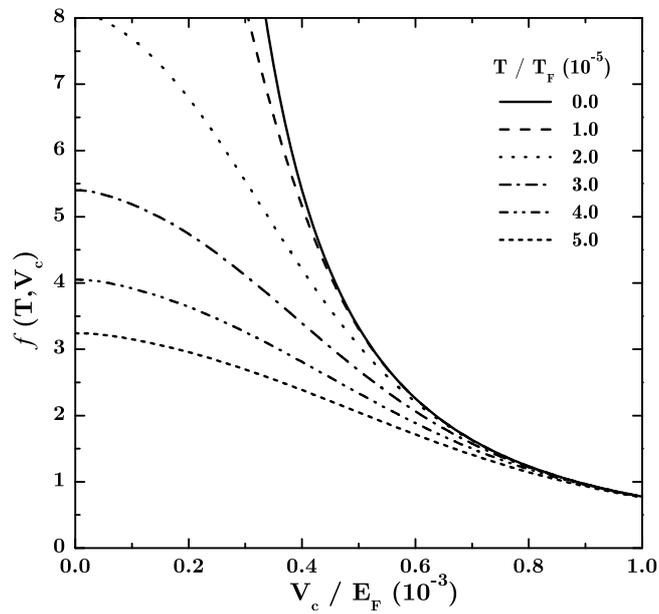


Figura 5.5: Gráfico com soluções para a equação do *gap* como função de V_c , submetido a diferentes temperaturas.

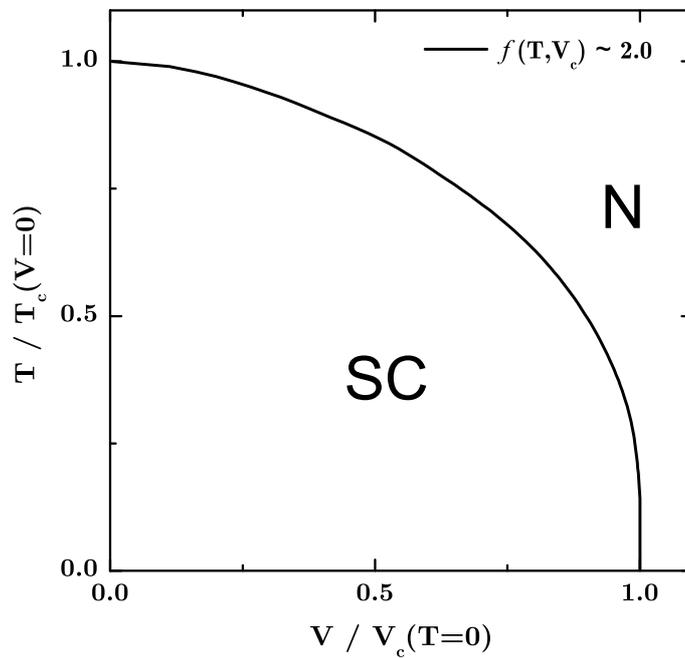


Figura 5.6: O diagrama de fases $T/T_c \times V/V_c$ teórico, obtido através da equação do *gap*, para uma solução fixa de $f(\bar{T}, \bar{V}_c) \sim 2.0$.

No limite de acoplamentos fracos, foi fixado $G_0\rho_0 = 0.4$, o que leva a solução de $f(\bar{T}, \bar{V}_c) = 2.5$. Dentro desse limite é conhecido que o potencial químico $\mu/E_F = 1.0$. Nessas condições, é obtido que $T_c/T_F \simeq 7 \times 10^{-5}$, onde $k_B T_F = E_F$ corresponde a temperatura de Fermi da banda larga. Com isso, temos temperaturas da ordem de $T_c \sim 1 \text{ K}$ para $V/E_F = 0$, que é um valor de temperatura crítica dentro das ordens de magnitude típicas de alguns sistemas férmions pesados supercondutores. Para a hibridização crítica $V_c(T_c = 0)$, é encontrado $V_c/E_F \sim 10^{-3}$. Com essas condições colocadas, é possível plotar o diagrama de fases SC/N, como é visto na Figura (5.6). A partir de agora, será feita a união dos dados experimentais obtidos no gráfico em (5.4) com a teoria, fitando os pontos do plano de temperaturas críticas *versus* pressão com a linha teórica obtida na Fig. (5.6).

Na Figura (5.7) mostramos os ajustes dos dados experimentais, adotando os parâmetros já escritos anteriormente. O caso onde $V = 0$ ou $P = 0$ corresponde a situação onde as duas bandas cruzam o nível de Fermi. Para uma dada concentração x de Sn , a temperatura de Fermi $T_F(x)$ é ajustada para alcançar $T_c(x)$ em $P = V = 0$ mantendo todos os outros parâmetros fixos.

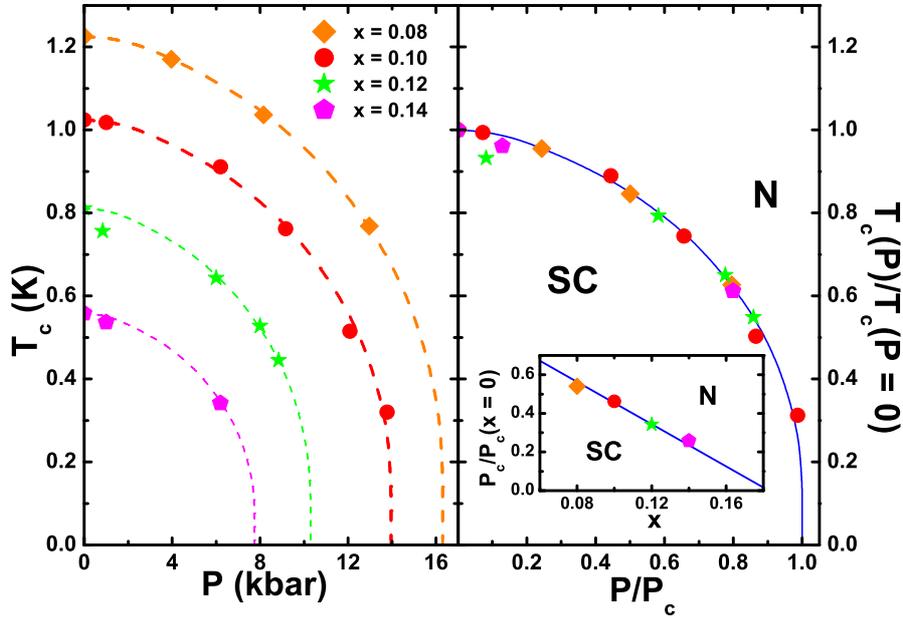


Figura 5.7: O diagrama de fases $T_c \times P$ experimental para o composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$ para diferentes concentrações de estanho Sn superpostos as curvas obtidas teoricamente usando o modelo descrito na equação (5.1)[82].

Após isso, a hibridização é ligada com a pressão externa por meio da relação $V/k_B T_F = \kappa P$, onde $\kappa = (3.43 \pm 0.16) \times 10^{-3} \text{ GPa}^{-1}$ é a constante de compressibilidade do CeCoIn_5 [89]. É importante enfatizar que esses ajustes não dependem criticamente de nenhum dos outros parâmetros. Ainda na Figura (5.7), é possível ver que a teoria proporcionou uma descrição geral muito boa à respeito da dependência das temperaturas críticas com a pressão para diferentes concentrações. No quadro à direita, a linha de temperaturas críticas normalizadas $T_c(P, x)/T_c(P = 0, x)$ é plotada em função de $P/P_c(x)$ para todas as concentrações medidas limitadas em $x < x_c$. Como pode ser visto, todos os dados convergem para uma única linha universal. No “inset” é mostrado as pressões críticas normalizadas obtidas pelos ajustes em função das diferentes concentrações. Os pontos obtidos para pressão caem numa linha reta que quando é extrapolada para $P/P_c(x) = 0$ atinge o mesmo valor da concentração crítica $x_c = 0.18$ obtida para T_c . Note que, tanto o comportamento universal das linhas críticas, quanto o comportamento linear de $P_c(x)$ observado numa larga faixa de concentrações, podem ser reproduzidas pela teoria fazendo $\bar{f}[0, T_c/T_F(x), V/k_B T_F(x)] = \text{cte}$ (ver na Eq. (5.8)) e a dependência de T_F (ou V) com a concentração, que é o único parâmetro de ajuste fixando os demais que especificam a simetria d do emparelhamento.

5.4 Considerações finais

O comportamento universal visto na curva de $T_c(P, x)/T_c(P = 0, x) \times P/P_c(x)$ sugere fortemente que um único mecanismo, isto é, o aumento da hibridização, age no sistema para reprimir a supercondutividade, sob dopagem ou pressão. Os ajustes obtidos através da teoria de campo médio obtiveram um comportamento linear para $P_c(x)$ não somente próximo de x_c . Então, esse fato e o já comentado sobre T_c em função da concentração, não poderiam estar relacionados com a obtenção de um PCQS induzido por desordem. Deve ser feita uma investigação para concentrações muito mais próximas do valor crítico $x_c = 0.18$, e estudar o comportamento crítico quântico associado à um PCQS. Para um PCQS induzido por pressão, o tratamento via campo médio para o modelo adotado leva a uma queda parabólica de $T_c(x)$ próximo de $P_c(x)$, isto é, $T_c \propto \sqrt{P_c - P}$ para diferentes concentrações x .

Dessa forma, nesse capítulo foi discutido com o modelo de duas bandas pode au-

xiliar na compreensão e na investigação da forma que a supercondutividade é destruída no férmion pesado quase bidimensional com simetria de emparelhamento tipo d , o $CeCoIn_{5-x}Sn_x$, mediado por dopagem e por pressão. A partir dos dados experimentais obtidos através de medidas de resistividade elétrica, foram obtidas as temperaturas críticas, com os parâmetros de controle sendo ajustados até o PCQS. Além desse ponto onde a supercondutividade é suprimida, tanto por dopagem, quanto por pressão, o sistema é metálico e exhibe o comportamento tipo líquido de Fermi para temperaturas abaixo da linha de temperatura de coerência T_{coh} . Foi visto que o diagrama de fases para diferentes concentrações e pressões obtido exibiu um comportamento universal quando é devidamente escalado. Esses resultados dão suporte para o fato de que o ponto no diagrama de fases o qual $T_c(x, P)$ torna-se nulo é um genuíno PCQS. Para descrever a transição de fase induzida por pressão foi adotado o modelo de duas bandas com o termo de hibridização entre elas, além do parâmetro de ordem supercondutor com simetria d . O aumento da hibridização, que é controlada pela pressão externa (também pela dopagem) leva T_c para zero atingindo o PCQS. Embora o modelo seja tratado em uma aproximação de campo médio, que não inclui flutuações, este dá uma boa descrição global dos dados e seu comportamento universal.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho analisamos um sistema supercondutor descrito por um modelo multi-bandas, contendo interações atrativas, repulsivas e um termo que gera a hibridização entre as bandas. As interações atrativas podem ser da forma intra e inter-banda, propiciando a formação de pares que podem se emparelhar com simetria tipo onda s ou d . Obtivemos pelo método das funções de Green as excitações do sistema e as funções de *gap* associadas aos diferentes parâmetros de ordem. Estudamos o *crossover* entre os limites fracos (BCS) e fortes (BEC) da supercondutividade, os efeitos do potencial repulsivo local em conjunto com a hibridização na fase supercondutora, e por fim o sistema férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$. A seguir, indicamos os principais resultados obtidos em cada capítulo.

No capítulo 3, consideramos o estado fundamental de um sistema supercondutor descrito por um modelo de duas bandas com massas efetivas diferentes. As bandas são acopladas por uma hibridização efetiva (V), que pode ser ajustada diretamente pela pressão externa. O objetivo foi estudar as propriedades dos modelos multi-bandas no regime de acoplamento forte, que ocasionalmente gera um condensado tipo BEC dos pares fortemente ligados[40]. Consideramos a supercondutividade onda s associada aos elétrons na banda estreita (intra-banda) e também ao emparelhamento inter-bandas. Introduzimos o comprimento de espalhamento das ondas s , a_s , para mediar as interações. Com isso, adotados a aproximação de campo médio para obter os parâmetros de ordem supercondutores intra-banda (Δ_k), inter-banda (Δ_{cf}) e o potencial químico (μ) como função da magnitude da interação $1/k_F a_s$. O limite BCS é atingido quando $1/k_F a_s \rightarrow -\infty$, e o BEC quando $1/k_F a_s \rightarrow +\infty$. Vimos o comportamento do sistema através do *crossover*

BCS-BEC entre acoplamento fraco e forte para $T = 0$ e $V > 0$. As energias de excitação exibiram a forma típica da abertura do *gap* no limite BCS, e parabólica tipo partícula livre no limite BEC, associada aos pares ligados, sendo observadas as energias de ligação do par. A amplitude intra-banda apresentou uma mudança de comportamento suave entre ambos os limites, indo de uma dependência exponencial no limite BCS para outra em lei de potência no limite BEC mesmo para $V > 0$, onde todas as soluções convergem para mesma linha. Além disso, ainda no caso intra-banda, vemos que a região do *crossover* é deslocada para região de $1/k_F a_s > 0$ à medida em que é acrescido V . A convergência das soluções para diferentes intensidades de V no limite BEC, indica que nesse limite a amplitude do *gap* intra-banda tende a ser independente da hibridização. No caso inter-banda, foram observadas descontinuidades em Δ_{cf} para $V > 0$, mesmo no limite BEC, indicando que nesse caso podem ser encontradas transições de 1ª ordem entre o estado superconductor e normal para todos os regimes de interação. Além disso, é discutido o diagrama de fases do modelo como função da hibridização crítica V_c que destrói a supercondutividade. Vimos a necessidade de se impor um limite na região de integração da equação do *gap* para obter o comportamento correto de V_c .

Posteriormente, no capítulo 4 estudamos somente o caso intra-banda, e inserimos um termo relativo ao potencial repulsivo local \mathcal{U} [69]. Inicialmente vimos o efeito de \mathcal{U} no *crossover* BCS-BEC utilizando o desacoplamento tipo campo médio usual. Vimos que para intensidades de \mathcal{U} fracas, é observada uma separação na região BEC das soluções para diferentes intensidades de V , não sendo observada a convergência das soluções como no caso $\mathcal{U} = 0$. Quando passamos para o regime onde a repulsão local é forte, adotamos a aproximação Hubbard I nas equações para tratar os casos onde $\mathcal{U}/E_F \gg 1$ tanto para simetria onda s quanto para onda d . Encontramos um ramo a mais nas soluções das energias de excitação em comparação ao campo médio usual, diretamente proporcional ao \mathcal{U} . Quando $\mathcal{U}/E_F \gg 1$, esse novo ramo renormaliza a banda estreita onde ocorre o emparelhamento por um fator proporcional ao número de ocupação n_f . Assim, existe uma nova contribuição para a descrição da banda estreita além da razão entre as massas dos elétrons das bandas α . Nos diagramas de fases para onda s , é visto que para $\mathcal{U}/E_F \leq 0.1$, a repulsão age diretamente em detrimento da supercondutividade em conjunto com V . Porém, para $\mathcal{U}/E_F \gg 1$ é observado uma saturação no efeito destrutivo, sendo encontrado os valores de interações atrativas críticas $(G_0)_c$. Para o caso onda d os resultados

foram similares, porém para o regime de interações atrativas G_0^d fortes, foram observados domos no plano $\mathcal{U} \times V_c$, que não eram observados para onda s .

No capítulo 5, estudamos o composto férmion pesado $CeCoIn_{5-x}Sn_x$, que apresenta supercondutividade com simetria tipo onda d . Utilizamos o modelo de duas bandas para estudar esse sistema em temperaturas finitas no regime de acoplamentos fracos BCS[82]. Com isso, pudemos avaliar a eficiência do modelo, obtendo uma linha crítica no diagrama $T/T_c \times V/V_c$ no limite BCS, ajustando os parâmetros do modelo condizentes com os sistemas férmions pesados. Após isso, relacionamos a hibridização diretamente com a pressão (P), e ajustamos os dados experimentais do diagrama de $T_c \times P$ sob diferentes concentrações x de Sn com a linha teórica. A teoria propiciou uma descrição geral muito boa no que diz respeito à dependência das temperaturas críticas com a pressão para diferentes concentrações. Encontramos um comportamento universal na curva de $T_c(P, x)/T_c(P = 0, x) \times P/P_c(x)$ sugerindo fortemente que um único mecanismo, o aumento da hibridização, age no sistema para suprimir a supercondutividade, sob dopagem ou pressão.

Temos como perspectiva futura, calcular o comprimento de coerência ξ_0 dos pares de Cooper ao longo do *crossover* BCS-BEC utilizando o modelo de duas bandas. Uma forma elegante de tratar o problema é adotando as equações de Bogoliubov-de Gennes (BdG) para um sistema com dois tipos distintos de férmions, como feito por Sacramento *et al.*[90]

$$c_{k\sigma} = \sum_n [u_n^c(k, \sigma)\gamma_n - \sigma v_n^c(k, \sigma)\gamma_n^\dagger]$$

e

$$f_{k\sigma} = \sum_n [u_n^f(k, \sigma)\gamma_n - \sigma v_n^f(k, \sigma)\gamma_n^\dagger]$$

sendo $\gamma^\dagger(\gamma)$ os operadores que criam (aniquilam) uma *quasi*-partícula, e as funções $u_n^{c,f}(k, \sigma)$ e $v_n^{c,f}(k, \sigma)$ são as amplitudes relacionadas com a função de onda do estado fundamental BCS. Com isso, esperamos ver como a hibridização e o potencial repulsivo afetam ξ_0 , para as diferentes simetrias de emparelhamento, s e d . Inicialmente, esse estudo será feito para o caso intra-banda, porém, pode ser estendido para o caso das interações inter-banda para ter uma melhor compreensão dos mecanismos de emparelhamento nessa forma não usual de pares de Cooper.

Apêndice A

Método das Funções de Green

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

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

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

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

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

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

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

sendo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Agora, iremos obter as funções de correlação entre os operadores A e B . Na referência [91], é visto que a média $\langle B(t')A(t) \rangle$ pode ser calculada da forma

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

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

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

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

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

e utilizando a relação

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

simplificamos a equação (A.11) para

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

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

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

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

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

sendo

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

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

Apêndice B

Renormalização das equações do *gap* supercondutor pelo comprimento de espalhamento a_s

Neste apêndice, será abordada a técnica da renormalização das equações do *gap* pelo comprimento de espalhamento das ondas s (em inglês *scattering length*) a_s . Será seguido os trabalhos de Randeria *et al.*[61] e Carter *et al.*[92], partindo da equação do *gap* supercondutor para o caso tridimensional.

A equação do *gap* supercondutor em temperatura nula é dada por

$$\Delta_k = - \sum_{k'} g_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}}, \quad (\text{B.1})$$

sendo $g_{kk'}$ o potencial atrativo entre os elétrons, $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$, com $\xi_k = \varepsilon_k - \mu$, $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, m a massa dos elétrons e \hbar a constante de Planck. Para lidar com possíveis problemas com o comportamento do potencial $g_{kk'}$ ou com divergências na soma em k , a equação do *gap* é renormalizada introduzindo um corte “ Λ ” no espaço dos momentos. O corte é considerado tal que $\Lambda > \mathcal{O}(R_0^{-1})$, sendo R_0 a região de atuação do potencial. O resultado final torna-se independente deste corte fazendo $\Lambda \rightarrow \infty$ ao final das contas. No caso de momentos $k > \Lambda$, é feito $E_k \approx \varepsilon_k$, pois nesse limite de grandes vetores de onda, as outras grandezas são praticamente desprezíveis. Assim a equação do *gap* é reescrita como segue

$$\Delta_k = -\sum_{k'}^< \Gamma_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}}, \quad (\text{B.2})$$

sendo $< (>)$ a indicação que a soma é feita para $k < \Lambda (k > \Lambda)$, e o pseudopotencial $\Gamma_{kk'}$ é definido pela equação

$$\Gamma_{kk'} = g_{kk'} - \sum_{k''}^> g_{kk''} \frac{1}{2\varepsilon_{k''}} \Gamma_{kk''}. \quad (\text{B.3})$$

O objetivo dessa manipulação é eliminar o potencial g , e substituí-lo pela matriz de espalhamento (matriz T) do problema de dois corpos para um canal l

$$T_{kk'}^{(l)}(2\omega) = g_{kk'} + \sum_{k''} g_{kk''} \mathcal{G}_0(2\omega)_{k''k''} T_{k''k'}^{(l)}(2\omega), \quad (\text{B.4})$$

sendo $\mathcal{G}_0(2\omega)_{kk'} = [2(\omega - \varepsilon_k + i\eta)]^{-1} \delta_{kk'}$ a função de Green livre do problema de dois corpos, $2\omega = \hbar^2 q^2 / 2m_o$ sendo a energia associada ao momento relativo q e $m_o = m/2$ a massa reduzida do sistema de dois corpos. Manipulando a equação (B.3), introduzindo os operadores projeção $P^> = \sum_k^> |k \rangle \langle k|$ e $P^< = 1 - P^>$, é encontrado em uma notação mais compacta, que

$$\Gamma = g + g \mathcal{G}_0(0) P^> \Gamma. \quad (\text{B.5})$$

Por meio da razão entre as equações (B.4) e (B.5), é possível eliminar a dependência explícita das equações com o potencial g , e assim é obtido que

$$\Gamma = T(2\omega) - T(2\omega) [\mathcal{G}_0(2\omega) - \mathcal{G}_0(0) P^>] \Gamma. \quad (\text{B.6})$$

Evidenciando a função $\mathcal{G}_0(2\omega)$ em (B.6), encontra-se a relação

$$\frac{\mathcal{G}_0(0)}{\mathcal{G}_0(2\omega)} = -\frac{\hbar^2 q^2 / 2m - \varepsilon_k + i\eta}{\varepsilon_k + i\eta} \simeq 1, \quad (\text{B.7})$$

pois ε_k domina em $k > \Lambda$, e no limite de baixas energias $qR \ll 1$. Assim, é encontrado que

$$\Gamma = T(2\omega) - T(2\omega) \mathcal{G}_0(2\omega) P^< \Gamma, \quad (\text{B.8})$$

sendo já adotada a relação $P^< = 1 - P^>$. Dessa forma, a expressão para o pseudopotencial escrito em função da matriz T é obtida no limite de baixas energias. Para um canal “ l ” a equação é dada por

$$\Gamma_{kk'}^{(l)} = T_{kk'}^{(l)}(2\omega) - \sum_{k''}^{<} T_{kk''}^{(l)}(2\omega) \mathcal{G}_0(2\omega)_{k''k'} \Gamma_{k''k'}^{(l)}. \quad (\text{B.9})$$

Para o emparelhamento no canal s ($l = 0$), a função do *gap* não possui dependência angular, assim $\Delta_k \simeq \Delta$. Introduzindo a forma de baixas energias para matriz T da onda s , $T_{kk'}^{(0)}(2\omega) \approx \tau_0(2\omega)$, é obtido após manipulações que

$$\Gamma_{kk'}^{(0)} \simeq \tau_0(2\omega) \left(1 + \tau_0(2\omega) \sum_k^{<} \mathcal{G}_0(2\omega) \right)^{-1}. \quad (\text{B.10})$$

Substituindo (B.10) na equação do *gap* em (B.2), encontra-se

$$\frac{1}{\tau_0(2\omega)} = \sum_k^{<} \left(\frac{1}{2(\varepsilon_k - \omega - i\eta)} - \frac{1}{2E_k} \right). \quad (\text{B.11})$$

Nesse ponto toma-se $\Lambda \rightarrow \infty$, e é reescrito $\tau_0(2\omega)$ como função do comprimento de espalhamento das ondas s a_s

$$\frac{1}{\tau_0(2\omega)} = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \left(\frac{1}{a_s} + iq \right), \quad (\text{B.12})$$

com isso, a equação do *gap* renormalizada independente do momento relativo q é dada por

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a_s} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2\varepsilon_k} - \frac{1}{2E_k} \right). \quad (\text{B.13})$$

Note que a segunda parcela dentro da soma em k é diretamente relacionada com a equação do *gap* usual obtida através do parâmetro de ordem supercondutor BCS. Assim, para um potencial atrativo $g_{kk'} = -g$ constante, é possível reescrever a equação renormalizada para $\hbar \equiv 1$ como sendo

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{g} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m}{k^2}. \quad (\text{B.14})$$

Note que a segunda parcela de (B.14) é o resultado dos esforços para renormalização da função do *gap*. Note ainda que para ser obtida essa parcela, bastaria ser tomado o limite de grandes vetores de onda ($k \rightarrow \infty$) na função de *gap* obtida pela equação autoconsistente do parâmetro de ordem. Assim, para renormalizar as equações do *gap* supercondutor como função de a_s , consideramos que equação (3.52) do caso intra-banda é reescrita por

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{G_0} + \frac{1}{G_0}(k \rightarrow \infty), \quad (\text{B.15})$$

e a inter-banda (3.62) por

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{U} + \frac{1}{U}(k \rightarrow \infty). \quad (\text{B.16})$$

Nesse limite de grandes vetores de onda, adotamos a aproximação para as energias de excitação como feito anteriormente ($E_k \approx \varepsilon_k$), sendo que no caso de duas bandas, foi feito

$$\omega_{1k} \approx \varepsilon_k^s = \frac{k^2}{2m}, \quad (\text{B.17})$$

e

$$\omega_{2k} \approx \varepsilon_k^f = \alpha \varepsilon_k^s, \quad (\text{B.18})$$

com todos os outros parâmetros (Δ_k , Δ_{cf} , μ e V) sendo desprezíveis. Assim, para o caso intra-banda descrito pela equação (3.52) é encontrado

$$\frac{1}{G_0}(k \rightarrow \infty) = \sum_k \frac{\gamma(k)^2}{2(\varepsilon_k^{s2} - \alpha^2 \varepsilon_k^{s2})} \left[\frac{(\varepsilon_k^{s2} - \varepsilon_k^{s2})}{\varepsilon_k^s} - \frac{(\alpha^2 \varepsilon_k^{s2} - \varepsilon_k^{s2})}{\alpha \varepsilon_k^s} \right], \quad (\text{B.19})$$

e simplificando resulta em

$$\frac{1}{G_0}(k \rightarrow \infty) = \sum_k \frac{\gamma(k)^2}{2\alpha \varepsilon_k^s} = \sum_k \gamma(k)^2 \frac{m}{\alpha k^2}, \quad (\text{B.20})$$

com $\gamma(k)$ definido em (3.49). Dessa forma, é obtida a equação do *gap* intra-banda renormalizada em função de a_s

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{G_0} + \sum_k \gamma(k)^2 \frac{m}{\alpha k^2}. \quad (\text{B.21})$$

Para a equação do *gap* inter-banda descrita pela equação (3.62), é feito de forma similar. Assim, é obtido

$$\frac{1}{U}(k \rightarrow \infty) = \sum_k \frac{1}{2(\varepsilon_k^{s2} - \alpha^2 \varepsilon_k^{s2})} \left[\frac{(\varepsilon_k^{s2} - \alpha \varepsilon_k^{s2})}{\varepsilon_k^s} - \frac{(\alpha^2 \varepsilon_k^{s2} - \alpha \varepsilon_k^{s2})}{\alpha \varepsilon_k^s} \right], \quad (\text{B.22})$$

e simplificando encontra-se

$$\frac{1}{U}(k \rightarrow \infty) = \sum_k \frac{(1 - \alpha)}{\varepsilon_k^s (1 - \alpha^2)} = \sum_k \frac{2m}{(1 + \alpha)k^2}. \quad (\text{B.23})$$

Dessa forma, a equação do *gap* supercondutor inter-banda renormalizada por a_s é dada por

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{U} + \sum_k \frac{2m}{(1 + \alpha)k^2}. \quad (\text{B.24})$$

De posse das equações (B.21) e (B.24) é estudada a evolução da amplitude do *gap* supercondutor e a influência da hibridização nas mesmas ao longo do *crossover* BCS-BEC. Em ambos os casos, intra e inter-banda, é necessário o auxílio da equação do número em (3.42) para também analisar a evolução do potencial químico μ , como pode ser visto nos Capítulos 3 e 4.

Apêndice C

Potencial atrativo entre elétrons no caso 2D

Nesta parte será feito o desenvolvimento dos cálculos para obter uma expressão aproximada para a interação elétron-elétron, seguindo os trabalhos de Duncan *et al.*[18], Randeria *et al.*[60, 61, 93] e Botelho *et al.*[94]. O ponto de partida é a expansão do potencial de interação $G_{\vec{k}\vec{k}'}$ nas componentes do momento angular. Assim

$$G_{\vec{k}\vec{k}'} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} G_{kk'}^{(l)} e^{il\varphi_{kk'}}, \quad (\text{C.1})$$

onde $\varphi_{kk'} = \cos^{-1}(\hat{k} \cdot \hat{k}')$ é o ângulo entre os vetores \vec{k} e \vec{k}' . Os coeficientes com dependência em k , $G_{kk'}^{(l)}$, são relacionados com o potencial no espaço real $G(r)$ através da transformada de Bessel

$$G_{kk'}^{(l)} = 2\pi \int_0^{\infty} G(r) J_l(kr) J_l(k'r) r dr. \quad (\text{C.2})$$

O índice “ l ” discrimina os estados do momento angular em duas dimensões, com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ que correspondem aos canais s, p, d, \dots respectivamente.

É interessante analisar o comportamento de $G_{kk'}^{(l)}$ nos limites de grandes e pequenos momentos k . No limite de grandes comprimentos de onda ($k \rightarrow 0$), é visto que a dependência do potencial em k e k' se torna exatamente separável. De fato, para $kr \ll 1$ e $k'r \ll 1$, as funções de Bessel nesse limite assintótico apresenta o comportamento[95]

$$J_{\nu}(x) \rightarrow \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu}, \quad x \ll 1. \quad (\text{C.3})$$

Como a função Gamma $\Gamma(n) = (n - 1)!$, temos que $\Gamma(n + 1) = n!$, assim

$$J_\nu(x) \rightarrow \frac{1}{\nu!} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu, \quad x \ll 1. \quad (\text{C.4})$$

Com esse resultado, temos que

$$J_l(kr)J_l(k'r) = \frac{r^{2l}}{(2^l l!)^2} k^l k'^l, \quad (\text{C.5})$$

e com isso

$$G_{kk'}^{(l)} = \frac{2\pi}{(2^l l!)^2} k^l k'^l \int_0^\infty G(r) r^{2l+1} dr. \quad (\text{C.6})$$

Dessa maneira, é visto que $G_{kk'}^{(l)} = \mathcal{C}_l k^l k'^l$ é separável em k, k' com o coeficiente \mathcal{C}_l só dependendo da escolha do potencial no espaço real $G(r)$.

No outro limite, o caso de pequenos comprimentos de ondas ($k \gg 1$), tem-se a condição de $kr \gg 1$ e $k'r \gg 1$, e assim o potencial não é separável como no caso anterior. Para ver isso, analisa-se o comportamento das funções de Bessel no outro limite assintótico, também encontrado na referência [95]

$$J_\nu(x) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad x \gg 1. \quad (\text{C.7})$$

Com isso, de forma direta obtém-se

$$G_{kk'}^{(l)} = \frac{4}{\sqrt{kk'}} \int_0^\infty G(r) \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(k'r - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) dr, \quad (\text{C.8})$$

que não é separável. De fato $G_{kk'}^{(l)}$ mistura diferentes valores de k e k' e mostra um comportamento oscilatório dependente da forma de $G(r)$, porém com uma função envoltória que é sempre proporcional à $k^{(-1/2)}k'^{(-1/2)}$. Sob essas condições não é possível encontrar uma forma para o potencial se tornar separável no espaço dos momentos, e no limite de pequenos comprimentos de onda. Entretanto é possível escolher uma forma separável do potencial $G_{\vec{k}\vec{k}'}$ que atenda grande parte dos requisitos e reproduza boa parte dos comportamentos previamente discutidos nos limites de grandes e pequenos comprimentos de onda. Assim é introduzida a forma para o potencial separável

$$G_{\vec{k}\vec{k}'} = G_0 \gamma_l(\vec{k}) \gamma_l(\vec{k}') \quad (\text{C.9})$$

inspirada pelo trabalho de Nozières[13], onde G_0 é a constante de acoplamento e a função $\gamma_l(\vec{k}) = f_l(k)g_l(\hat{k})$. A função $f(k)$ só depende da magnitude do vetor de onda $k = |\vec{k}|$ e é dada por

$$f(k) = \frac{(k/k_1)^l}{(1 + k/k_0)^{l+1/2}}. \quad (\text{C.10})$$

Essa função controla a região de interação R_0 com o parâmetro $k_0 \sim 1/R_0$ e k_1 define a escala no regime de pequenos momentos. É importante observar que as constantes k_0 e k_1 não são “cutoffs” nos momentos, mas sim parâmetros que informam as escalas nos limites de curtos e longos comprimentos de onda. Tomando o limite para valores de $k \rightarrow 0$ para a função $f(k)$ é obtido

$$f(k) \rightarrow \left(\frac{k}{k_1}\right)^l \quad (\text{C.11})$$

o que garante e preserva o comportamento já discutido anteriormente de $G_{kk'}^{(l)} \sim k^l k'^l$ no limite de grandes comprimentos de onda.

No outro limite, quando $k \gg 1$

$$f(k) \sim \left(\frac{k}{k_0}\right)^{-1/2}, \quad (\text{C.12})$$

e assim tem-se que para o regime de pequenos comprimentos de onda é reproduzida a função envoltória que rege esse limite obtida previamente dada por $G_{kk'}^{(l)} \sim k^{(-1/2)} k'^{(-1/2)}$.

A função $g_l(\hat{k})$ depende somente da direção do vetor de onda \vec{k} , caracterizando a dependência angular da interação. Ela é dada por

$$g_l(\hat{k}) = \cos(l\varphi) \quad (\text{C.13})$$

onde φ é a coordenada polar angular no espaço dos momentos. Com isso, é possível obter diretamente expressões para o potencial atrativo entre elétrons no sistema bidimensional para qualquer simetria (ou canal) bastando especificar “ l ”. Para onda tipo s ($l = 0$), tem-se que resultado para o caso $2D$ é dado por

$$G_{kk'}^{(l=0)} = \frac{G_0^s}{(1 + \frac{k}{k_0})^{\frac{1}{2}}(1 + \frac{k'}{k_0})^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{C.14})$$

No caso $3D$ com simetria tipo s visto nos capítulos 3 e 4, a razão k/k_0 era elevada ao quadrado. Naqueles casos, a exigência do raio do estado ligado ir a zero quando $G_0 \rightarrow \infty$

e a garantia de importantes correlações do problema impõem $(k/k_0)^2$ [57]. Para o outro caso de interesse nesse trabalho, a simetria tipo d é obtida fazendo $l = 2$, e assim

$$\gamma_d(\vec{k}) = \frac{(k/k_1)^2}{(1 + k/k_0)^{\frac{5}{2}}} \cos(2\varphi). \quad (\text{C.15})$$

A amplitude do parâmetro de ordem é dada por $\Delta_k = \Delta_0 \gamma_d(k)$, ou seja,

$$\Delta_k = \Delta_0 \frac{(k/k_1)^2}{(1 + k/k_0)^{\frac{5}{2}}} \cos(2\varphi) \quad (\text{C.16})$$

exibindo a simetria $d_{x^2-y^2}$ vista nos cupratos HTSC[10] e em alguns sistemas férmions pesados[70].

Assim, o potencial para a simetria tipo d é dado por

$$G_{kk'}^{(l=2)} = G_0^d \frac{(k/k_1)^2 (k'/k_1)^2}{(1 + k/k_0)^{\frac{5}{2}} (1 + k'/k_0)^{\frac{5}{2}}} \cos^2(2\varphi). \quad (\text{C.17})$$

O formalismo discutido aqui e que se encontra nas referências já citadas, se mostra ser vantajoso por não ser necessário introduzir o comprimento de espalhamento como parâmetro relevante para acessar os limites de grandes e pequenos momentos k , como feito nesse trabalho para simetria tipo s . Além disso, esse formalismo possibilita a obtenção do potencial para os diferentes canais, ou simetrias, para um sistema de férmions interagentes no espaço bidimensional.

Referências Bibliográficas

- [1] B. B. Goodman, *Rep. Prog. Phys.*, **29** 445 (1966).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [3] H. K. Onnes, *Commun. Phys. Lab.* **12**, 120 (1911).
- [4] E. Maxwell, *Phys. Rev.* **78**, 477 (1950).
- [5] A. Bill, V. Z. Kresin and S. A. Wolf arXiv:cond-mat/9801222v1 (1998).
- [6] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [7] S. E. Barrett, J. A. Martindale, D. J. Durand, C. H. Pennington, C. P. Slichter, T. A. Friedmann, J. P. Rice, and D. M. Ginsberg, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 108 (1991).
- [8] N. E. Bickers, D. J. Scalapino and S. R. White, *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 961 (1989).
- [9] P. Monthoux, A. V. Balatsky and D. Pines, *Phys. Rev. B* **46**, 14803 (1992); T. Moriya, Y. Takahashi, and K. Ueda, *J. Phys. Jpn.* **59**, 2905 (1990); K. Ueda, T. Moriya, and Y. Takahashi, *J. Phys. Chem. Solids* **53**, 1515 (1992).
- [10] D. J. Van Harlingen *Rev. Mod. Phys.* **67**, 515 (1995).
- [11] D. M. Eagles, *Phys. Rev.* **186** 456 (1969).
- [12] A. J. Leggett, in *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter* (Springer-Verlag,1980), p.13; *J. Phys. (Paris)***41**, C7-19 (1980).
- [13] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, *J. Low Temp. Phys.* **59**,195 (1985).

- [14] Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, and H. Yamochi, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2665 (1991); *Nature* (London) **352**, 605 (1991).
- [15] V. J. Emery, S. A. Kivelson, *Nature* **374** 434 (1995); *Phys. Rev. Lett* **74** 3253 (1995).
- [16] C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria, and J.R. Engelbrecht, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3202 (1993).
- [17] E. Babaev, *Phys. Rev. B*, **63**, 184514 (2001).
- [18] R. D. Duncan and C. A. R. Sá de Melo, *Phys. Rev. B* **62**, 9675 (2000).
- [19] D. E. Sheehy and L. Radzihovsky, *Annals of Physics* **322**, 1790 (2007).
- [20] Q. Chen, J. Stajic, S. Tan and K. Levin, *Phys. Rep.* **412**, 1 (2005).
- [21] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press (1997).
- [22] R. Jullien, J. N. Fields and S. Doniach, *Phys. Rev. B* **16**, 4889 (1977).
- [23] Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta and K. Yamada, *Phys. Rep.* **387**, 1 (2003).
- [24] Ver capítulo 10 da referência [21].
- [25] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company (1994).
- [26] J. R. Engelbrecht, M. Randeria, C. A. R. Sá de Melo, *Phys. Rev. B* **55**, 15153 (1997).
- [27] M. Marini, F. Pistolesi, and G. C. Strinati, *Eur. Phys. J. B* **1**, 151 (1998).
- [28] H. Suhl, B. T. Matthias and L. R. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
- [29] M. Iskin and C. A. R. Sá de Melo, *Phys. Rev. B* **74**, 144517 (2006).
- [30] W. V. Liu, F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047002 (2003).

- [31] P. F. Bedaque, H. Caldas and G. Rupak, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 247002 (2003); H. Caldas, *Phys. Rev. A* **69**, 063602 (2004).
- [32] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- [33] M. A. Ruderman and C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954); T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956); K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
- [34] J. R. Iglesias, C. Lacroix, and B. Coqblin, *Phys. Rev. B* **56**, 11820 (1997); B. Coqblin, C. Lacroix, M. A. Gusmão and J. R. Iglesias, *Phys. Rev. B* **67**, 064417 (2003).
- [35] P. Coleman and N. Andrei, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 4057 (1989).
- [36] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [37] J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [38] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
- [39] M. Franz, C. Kallin, and A. J. Berlinsky *Phys. Rev. B* **54**, 6897 (1996).
- [40] F. Dinóla Neto, M. A. Continentino and C. Lacroix, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 075701 (2010).
- [41] H. Takahashi, K. Igawa, K. Arii, Y. Kamihara, M. Hirano, and H. Hosono, *Nature* **453**, 376 (2008).
- [42] F. J. Ohkawa, arXiv:0803.4217v1.
- [43] F. Lopez-Aguillar and S. Lopez-Bara, *Phys. Rev. B* **73**, 184501 (2006).
- [44] J. C. Xavier and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 146403 (2008).
- [45] J. Merino and R. H. McKenzie, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 237002 (2001).
- [46] T. Moriya, *Proc. Jpn. Acad. B* **82**, 1 (2006).
- [47] T. Park, V. A. Sidorov, F. Ronning, J.-X. Zhu, Y. Tokiwa, H. Lee, E. D. Bauer, R. Movshovich, J. L. Sarrao, and J. D. Thompson, *Nature (London)* **456**, 366 (2008); C. Pépin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206401 (2007).

- [48] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and J. Ranninger, *Phys. Rev. B* **36**, 180 (1987).
- [49] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [50] L. G. Sarasua and M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **65**, 184503 (2002).
- [51] J. Zielinski and P. Zawadzki, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **72**, 261 (1988).
- [52] A. Hackl and M. Vojta, *New Journal of Physics* **11**, 055064 (2009).
- [53] K. Horigane, N. Takeshita, C. Lee, H. Hiraka and K. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 063705 (2009).
- [54] C. Bastide, C. Lacroix and A. da Rosa Simoes, *Physica C* **159**, 347 (1989).
- [55] L. P. Gorkov, *JETP Lett.*, **34** 735 (1958).
- [56] R. Kishore and S. K. Joshi, *Phys. Rev. B* **2**, 1411 (1970).
- [57] F. Pistolesi and G. C. Strinati, *Phys. Rev. B* **53**, 15168 (1996).
- [58] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
- [59] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn, and D. S. Jin, *Nature* **424**, 47 (2003); C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 083201 (2004).
- [60] M. Randeria, *Bose-Einstein Condensation*, editado por A. Griffin, D. W. Snoke, S. Stringari, (Cambridge Univ., Cambridge, UK) pg. 355 (1995).
- [61] M. Randeria, J. Duan, and L. Shieh, *Phys. Rev. B* **41**, 327 (1990).
- [62] P. Pieri and G. C. Strinati, *Phys. Rev. B* **61**, 15370 (2000).
- [63] M. A. Continentino, I. T. Padilha, *J. of Phys. Cond. Matter* **20**, 095216 (2008).
- [64] P. Fulde and R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964); A. I. Larkin and Yu N. Ovchinnikov, *Sov. Phys. JETP* **20**, 762 (1965).
- [65] I. T. Padilha, M. A. Continentino, *J. of Phys. Cond. Matter* **21**, 095603 (2009).
- [66] S. Takada, T. Izuyama, *Prog. Theor. Phys.* **41**, 635 (1969).

- [67] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz and H. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892 (1979).
- [68] N. D. Mathur, F. M. Grosche, S. R. Julian, I. R. Walker, D. M. Freye, R. K. W. Haselwimmer and G. G. Lonzarich, *Science* **394**, 39 (1998).
- [69] F. Dinóla Neto, M. A. Continentino and C. Lacroix, em preparação.
- [70] K. Izawa, H. Yamaguchi, Yuji Matsuda, H. Shishido, R. Settai, and Y. Onuki, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 057002 (2001).
- [71] E. S. Caixeiro and A. Troper, *Phys. Rev. B* **82**, 014502 (2010).
- [72] G. M. Japiassu, M. A. Continentino, A. Troper, *Phys. Rev. B* **45**, 2986 (1992).
- [73] J. D. Thompson, M. Nicklas, A. Bianchi, R. Movshovich, A. Llobet, W. Bao, A. Malinowski, M. F. Hundley, N. O. Moreno, P. G. Pagliuso, J. L. Sarrao, S. Nakatsuji, Z. Fisk, R. Borth, E. Lengyel, N. Oeschler, G. Sparn and F. Steglich, *Physica (Amsterdam)* **329B**, 446 (2003).
- [74] R. Settai, H. Shishido¹, S. Ikeda, Y. Murakawa, M. Nakashima, D. Aoki, Y. Haga, H. Harima and Y. Onuki, *J. Phys. Condens. Matter* **13**, L627 (2001).
- [75] H. Hegger, C. Petrovic, E. G. Moshopoulou, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, Z. Fisk, and J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4986 (2000).
- [76] C. Petrovic, P. G. Pagliuso, M. F. Hundley, R. Movshovich, J. L. Sarrao, J. D. Thompson, Z. Fisk, and P. Monthoux, *J. Phys. Condens. Matter* **13**, L337 (2001).
- [77] T. Park, F. Ronning, H. Q. Yuan, M. B. Salamon, R. Movshovich, J. L. Sarrao and J. D. Thompson, *Nature (London)*, **440**, 65 (2006).
- [78] E. D. Bauer, F. Ronning, C. Capan, M. J. Graf, D. Vandervelde, H. Q. Yuan, M. B. Salamon, D. J. Mixson, N. O. Moreno, S. R. Brown, J. D. Thompson, R. Movshovich, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, P. G. Pagliuso, and S. M. Kauzlarich, *Phys. Rev. B* **73**, 245109 (2006).
- [79] M. Daniel, E. D. Bauer, S.-W. Han, C. H. Booth, A. L. Cornelius, P. G. Pagliuso, and J. L. Sarrao, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 016406 (2005).

- [80] S. M. Ramos, M. B. Fontes, A. D. Alvarenga, E. Baggio-Saitovitch, P. G. Pagliuso, E. D. Bauer, J. D. Thompson, J. L. Sarrao and M. A. Continentino, *Phys. B: Cond. Matt.* **359-361**, 398 (2005).
- [81] R. Ramazashvili and P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3752 (1997); V. P. Mineev and M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **63**, 172504 (2001); V. Galitski, *Phys. Rev. Lett* **100**, 127001 (2008); N. Shah, A. V. Lopatin, *Phys. Rev. B* **76**, 094511 (2007).
- [82] S. M. Ramos, M. B. Fontes, E. N. Hering, M. A. Continentino, E. Baggio-Saitovich, F. Dinóla Neto, E. M. Bittar, P. G. Pagliuso, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, and J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 126401 (2010).
- [83] E. D. Bauer, C. Capan, F. Ronning, R. Movshovich, J. D. Thompson, and J. L. Sarrao, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047001 (2005).
- [84] P. Pedrazzini, M. Gómez Berisso, N. Caroca-Canales, M. Deppe, C. Geibel and J. G. Sereni, *Eur. Phys. J. B* **38**, 445 (2004).
- [85] E. D. Bauer, N. O. Moreno, D. J. Mixson, J. L. Sarrao, J. D. Thompson, M. F. Hundley, R. Movshovich and P. G. Pagliuso, *Phys. B: Cond. Matt.* **359-361**, 35 (2005).
- [86] J. Paglione, M. A. Tanatar, D. G. Hawthorn, F. Ronning, R. W. Hill, M. Sutherland, Louis Taillefer, and C. Petrovic, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 106606 (2006).
- [87] S. M. Ramos, *Diagrama de fases e ponto crítico quântico no $CeCoIn_{5-x}Sn_x$: efeitos de pressão e concentração*, Tese de doutorado não publicada, Universidade Federal Fluminense - UFF (2007).
- [88] V. A. Sidorov, M. Nicklas, P. G. Pagliuso, J. L. Sarrao, Y. Bang, A. V. Balatsky, and J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 157004 (2002).
- [89] J. G. Donath, F. Steglich, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, and P. Gegenwart, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136401 (2008); R. S. Kumar, A. L. Cornelius, and J. L. Sarrao, *Phys. Rev. B* **70**, 214526 (2004).
- [90] P. D. Sacramento, J. Aparício and G. S. Nunes, *J. Phys.: Cond. Matt.* **22** 065702 (2010).

- [91] D. N. Zubarev, *Usp. Fiz. Nauk* **71**, 320 (1960).
- [92] R. M. Carter, M. Casas, J. M. Getino, M. de Llano, A. Puente, H. Rubio and D. M. van der Walt, *Phys. Rev. B* **52**, 16149 (1995).
- [93] M. Randeria, J. Duan, and L. Shieh, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 981 (1989).
- [94] S. S. Botelho and C. A. R. Sá de Melo, *Phys. Rev. B*, **71** 134507 (2005); S. S. Botelho, *BCS-to-BEC quantum phase transition in High-Tc superconductors and fermionic atomic gases: a functional integral approach*, Tese de doutorado não publicada, Georgia Institute of Technology (2005).
- [95] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd ed., Wiley, New York (1998).