

**MATHEUS BRAGA PEIXOTO**

**MODELO PARA TEMPERATURA CRÍTICA  
SUPERCONDUTORA EM CUPRATOS LEVANDO  
EM CONTA ORDERNAMENTO DE CARGA EM  
FORMA DE LISTRAS**

Niterói  
2019

**MATHEUS BRAGA PEIXOTO**

**MODELO PARA TEMPERATURA CRÍTICA  
SUPERCONDUTORA EM CUPRATOS LEVANDO  
EM CONTA ORDERNAMENTO DE CARGA EM  
FORMA DE LISTRAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Física.

Niterói  
2019

Ficha catalográfica automática - SDC/BIF  
Gerada com informações fornecidas pelo autor

P377m Peixoto, Matheus Braga  
MODELO PARA TEMPERATURA CRÍTICA SUPERCONDUTORA EM CUPRATOS  
LEVANDO EM CONTA ORDERNAMENTO DE CARGA EM FORMA DE LISTRAS /  
Matheus Braga Peixoto ; Evandro Mello, orientador. Niterói,  
2019.  
63 f. : il.

Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,  
Niterói, 2019.

DOI: <http://dx.doi.org/10.22409/PPGF.2019.m.13264203723>

1. Supercondutividade. 2. Ordenamento de Carga. 3. Listras.  
4. Energia Coulomb. 5. Produção intelectual. I. Mello,  
Evandro, orientador. II. Universidade Federal Fluminense.  
Instituto de Física. III. Título.

CDD -

**MATHEUS BRAGA PEIXOTO**

**MODELO PARA TEMPERATURA CRÍTICA  
SUPERCONDUTORA EM CUPRATOS LEVANDO  
EM CONTA ORDERNAMENTO DE CARGA EM  
FORMA DE LISTRAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Física.

Orientador:

Evandro Vidor de Mello

Niterói  
2019

---

Prof. Dr. Evandro Vidor Lins de Mello  
Orientador  
Instituto de Física - UFF

---

---

*Ao Senhor, que criou os céus através da sua palavra e todos os corpos celestes pelo sopro de sua boca.*

# AGRADECIMENTOS

Ao meu Senhor, que em breve voltará.

Aos meus pais, Israel e Aparecida, esse trabalho não seria possível sem o suporte e apoio de vocês.

A minha irmã Paula, obrigado pelo incentivo e por ceder sua mesa.

A Talita minha amada, obrigado pelas correções no texto e sua paciência comigo.

A Comunidade Extrema Devoção, vocês são incríveis, obrigado pelo cuidado.

Ao meu orientador Evandro, sempre paciente e solícito.

Ao CNPq, por toda ajuda financeira.

# RESUMO

Introduzimos um modelo para os supercondutores de altas temperaturas críticas para explicar o digrama de fase  $T_c \times p$ , principalmente em torno da região  $1/8$  onde são observadas as maiores variações nas densidades de carga nos compostos  $\text{YBa}_2\text{Cu}_2\text{O}_{4-x}$  (YBCO) e  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  (LBCO). Nosso modelo está baseado numa teoria que descreve a separação eletrônica que forma listras (ou faixas) de altas e baixas densidades de buracos. Para descrever a supercondutividade nesses sistemas utilizamos a teoria de Bogoliubov-deGennes, que é própria para lidar com sistemas de densidades não-uniformes. Nessas condições experimentos indicam que esses compostos podem ser analisados como supercondutores granulares com um parâmetro de ordem complexo  $(\Delta_i, \theta_i)$  em cada listra. As listras podem ser ligadas por acoplamento Josephson, sendo o sistema modelado por uma rede de junções Josephson e a transição supercondutora ocorre através da coerência de longo alcance das fases  $\theta_i$ . Um ponto novo desta dissertação é a introdução do efeito da energia Coulomb, onde modelamos as distribuições de carga do tipo listras como capacitores paralelos e mostramos que esse efeito provoca uma diminuição em  $T_c$ . Nosso modelo provê uma explicação para a queda acentuada de  $T_c$  para o LBCO em comparação com a queda no sistema YBCO em torno da dopagem de buracos  $p = 1/8$ .

**Palavras-Chave** – Supercondutividade, BdG, Josephson, Coulomb.

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Panorama Histórico</b>	<b>8</b>
1.0.1	Efeito Meissner . . . . .	9
1.0.2	Teoria BCS . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Os Cupratos</b>	<b>14</b>
2.1	Estrutura dos cupratos . . . . .	15
2.2	Dopagem . . . . .	16
2.3	Pseudogap . . . . .	18
2.3.1	Evidências de pseudogap por ARPES . . . . .	19
2.4	Distribuição eletrônica inomogênea . . . . .	20
2.4.1	Difração por Nêutron . . . . .	21
2.4.2	Escaneamento microscópico de tunelamento (STM) . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Objetivo</b>	<b>24</b>
3.0.1	Dimensões das listras . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Método Auto-Consistente</b>	<b>29</b>
4.0.1	Simplificando o Hamiltoniano $\mathcal{H}_2$ . . . . .	30
4.0.2	Simplificando o Hamiltoniano $\mathcal{H}_1$ . . . . .	31
4.0.3	Escrevendo o Hamiltoniano efetivo $\mathcal{H}_e$ . . . . .	31
4.0.4	Equações de Bogoliubov . . . . .	32
4.0.5	Os gaps e densidade eletrônica . . . . .	34
4.1	Cálculos Bogoliubov-deGennes . . . . .	35
4.1.1	Sistema Quase Homogêneo . . . . .	37
4.1.2	Sistema Inomogêneo . . . . .	38

<b>5</b>	<b>Ordem de Longo Alcance</b>	<b>40</b>
5.0.1	Parâmetro de Ordem . . . . .	40
5.0.2	Supercondutores Granulares . . . . .	41
5.1	Cálculos Energia Josephson . . . . .	42
5.1.1	Sistema Quase Homogêneo . . . . .	42
5.1.2	Sistema Inomogêneo . . . . .	44
<b>6</b>	<b>Energia Coulomb</b>	<b>47</b>
6.0.1	Cálculo de $E_C$ . . . . .	50
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>55</b>
	<b>Referências</b>	<b>56</b>

# 1 PANORAMA HISTÓRICO

Ao estudar a variação de resistência elétrica de uma amostra de mercúrio em função da temperatura, Heike K. Onnes observou em 1911 que a resistência subitamente desaparecia quando a temperatura era próximo de  $4.2K$  (ver Fig. 1) [1].

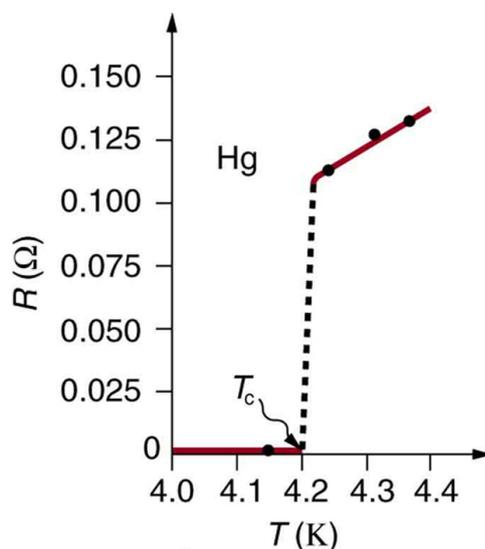


Figura 1: Resistência em função da temperatura do mercúrio (Hg), medida por Onnes.

Onnes interpretou esse fenômeno como uma transição de fase, onde o mercúrio passa de um estado resistivo normal para um novo estado onde a resistividade é nula, chamado supercondutor. De fato, a variação abrupta da resistência elétrica numa temperatura bem definida, denominada temperatura crítica ( $T_c$ ), indica a ocorrência de um fenômeno de transição de fase onde as propriedades eletrônicas do metal são alteradas.

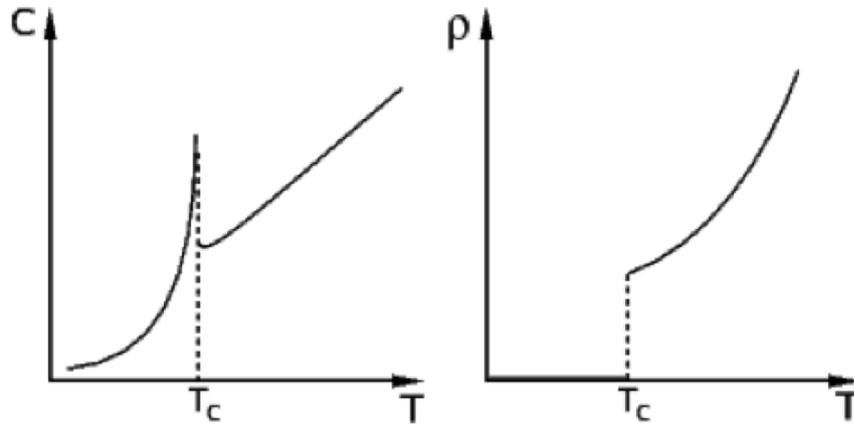


Figura 2: À esquerda gráfico do calor específico em função da temperatura, mostrando o efeito do gap que fornece uma queda exponencial para o calor específico e à direita gráfico da resistividade também em função da temperatura, para o mesmo material. Em  $T_c$  há transição de fase, para ( $T < T_c$ ) o sistema está na fase supercondutora, enquanto que para ( $T > T_c$ ) numa fase “normal”.

### 1.0.1 Efeito Meissner

Estudando algumas amostras de estanho em função da temperatura e do campo magnético, Walther Meissner e Robert Ochsenfeld em 1933 descobriram um dos efeitos mais importante e característico do estado supercondutor: se aplicarmos um campo magnético fraco a um sistema supercondutor quando este se encontra no estado normal ( $T > T_c$ ) e o resfriarmos na presença do campo, observaremos uma expulsão abrupta do fluxo magnético do interior do material quando este transita para o estado supercondutor em  $T = T_c$ . Esse fenômeno é conhecido como efeito Meissner.

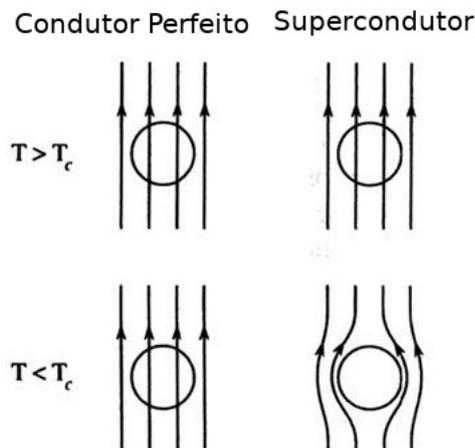


Figura 3: Comportamento de um condutor normal que obedece a lei de indução de Faraday comparado ao efeito Meissner num supercondutor

Este fenômeno mostra que a transição supercondutora ocorrendo na presença de um campo magnético, supercorrentes superficiais serão induzidas na amostra afim de cancelar exatamente a indução magnética no seu interior.

O efeito Meissner é observado em todos os supercondutores, entretanto a resposta do supercondutor a aplicação de um campo magnético externo levou a separar os supercondutores em dois tipos, I e II.

- Tipo I

Os supercondutores do tipo I possuem apenas os estados Meissner e normal, ou seja, se o campo magnético aplicado for menor que o valor crítico ( $H < H_c$ ), então não haverá penetração de fluxo magnético.

- Tipo II

Os supercondutores do tipo II apresentam dois valores críticos para o campo magnético. O estado Meissner com exclusão total do fluxo magnético persiste até valor crítico  $H_{c1}$ , acima desse valor o fluxo magnético penetra parcialmente na amostra, embora a supercondutividade se mantenha até o valor de  $H_{c2}$ .

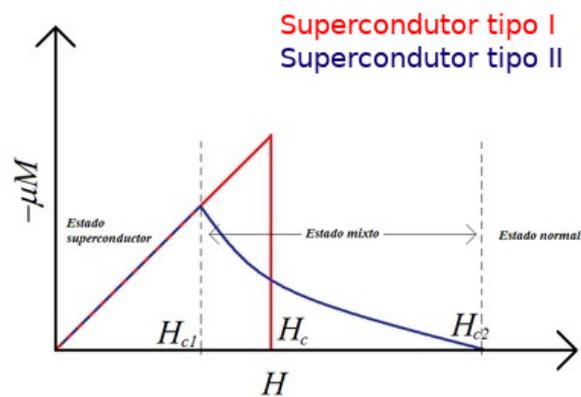


Figura 4: Comportamento da magnetização e função do campo magnético  $H$

## 1.0.2 Teoria BCS

Somente quase 50 anos depois da descoberta de Onnes é que surgiu uma teoria bem sucedida do fenômeno da supercondutividade. Em 1957, os físicos John Bardeen, Leon Cooper (o mesmo dos pares) e Robert Srieffer apresentaram um modelo teórico que concordava muito bem com as observações experimentais nos supercondutores. Esse modelo ficou conhecido por Teoria BCS e lhes rendeu o Prêmio Nobel de Física de 1972.

A teoria BCS diz que elétrons viajam em pares, interagindo entre eles através de vibrações de rede, ou fônons: um elétron com spin  $\uparrow$  e momento  $\mathbf{k}$  emparelha com um elétron spin  $\downarrow$  viajando na direção oposta com momento  $-\mathbf{k}$ , isso é chamado pareamento de Cooper.

Termodinamicamente a supercondutividade ocorre porque a distribuição normal do mar de Fermi é instável em um gás de elétron via esse mecanismo de pareamento e para uma pequena interação atrativa a distribuição de elétrons gera um estado de menor energia. Denotando pelo subscrito  $k$  os fatores associados com o par de momento  $k$ , a distribuição supercondutora é parecida com a distribuição de Fermi convencional:

$$f_k = \frac{1}{\exp(E_k/k_B T) + 1}, \quad (1.1)$$

onde o “zero” de energia coincide com o nível de Fermi e:

$$E_k^2 = e_k^2 + \Delta(T)^2, \quad (1.2)$$

isto é, o espectro de energia contém um gap e a largura do mesmo varia com a temperatura. O valor de  $e_k$  é a energia de único elétron com respeito a superfície de Fermi no estado normal e  $\Delta_k(T)$  é a energia de gap.

Com o aumento da temperatura eventualmente a energia térmica sobrepõe-se a interação dos pares e então com o gap indo à zero, a supercondutividade desaparece.

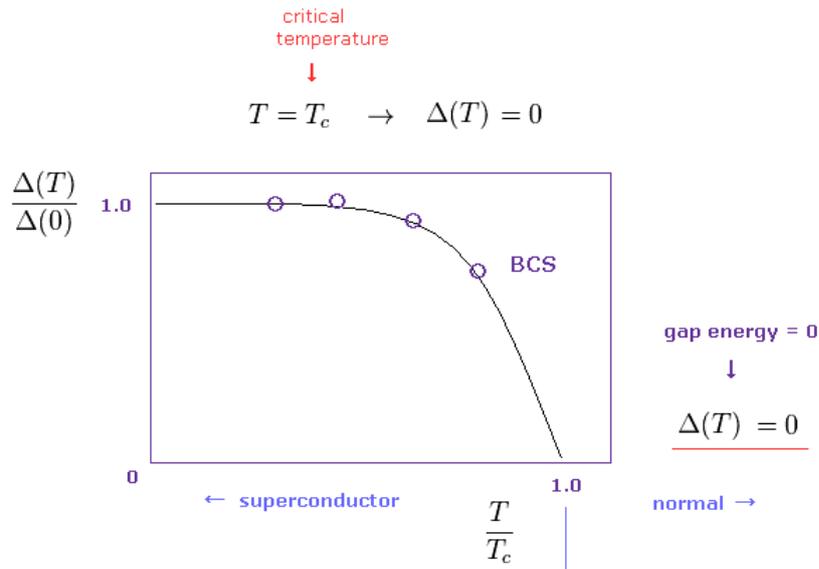


Figura 5: Gap supercondutor em função da temperatura previsto pela teoria BCS. O gap diminui com aumento da temperatura e se anula em  $T_c$ .

### Consequências das equações BCS

A teoria BCS começa com a hipótese de que a interação dos pares de Cooper através do acoplamento elétron-fônon, a minimização da energia livre que gera uma equação integral não-linear para o gap  $\Delta_k(T)$ :

$$\Delta_k(T) = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}(T)}{E_{k'}} \tanh \frac{E_{k'}}{2k_B T}. \quad (1.3)$$

A interação  $V_{kk'}$  inclui a repulsão Coulombiana entre os elétrons e a interação elétron-fônon. Desejando obter soluções analíticas para a equação 1.3, a teoria ignora completamente a interação Coulombiana e aproxima a interação elétron-fônon a uma forma extremamente simples:

$$\begin{aligned} V_{kk'} &= -V, \text{ para } |e_k| \text{ e } |e_{k'}| < \hbar\omega_c, \\ V_{kk'} &= 0, \end{aligned}$$

onde  $V$  é uma constante maior que 0.

Convertendo a soma em uma integral, a equação 1.3 então aparece da seguinte forma:

$$\Delta(T) = \frac{N_0 V}{2} \int_{-\hbar\omega_c}^{\hbar\omega_c} de \frac{\tanh(E_k/2k_B T)}{[e^2 + \Delta^2(T)]^{1/2}} \Delta(T), \quad (1.4)$$

onde  $N_0$  é a densidade de estados constante.

Como gap  $\Delta$  é uma função da temperatura podemos tirá-lo da integral, outra simplificação usada por BCS:

$$\frac{1}{N_0V} = \int_0^{\hbar\omega_c} \frac{\exp(E/k_B T) - 1}{\exp(E/k_B T) + 1} \frac{de}{E}, \quad (1.5)$$

onde  $E^2 = e^2 + \Delta(T)^2$ , como antes. Por fim, para  $T = 0K$  por simplificação temos:

$$\frac{\Delta_0}{\hbar\omega_c} = \frac{1}{\sinh(1/N_0V)} \approx 2 \exp(-1/N_0V). \quad (1.6)$$

Para outra temperatura extrema ( $T_c$ ) o gap  $\Delta$  desaparece, assim simplificando novamente equação 1.5 temos:

$$\frac{k_B T_c}{\hbar\omega_c} = 1.14 \exp(-1/N_0V). \quad (1.7)$$

Combinado as equações 1.6 e 1.7 obtemos a razão BCS:

$$\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = 3.53 \quad (1.8)$$

Esse é o número “mágico” que recebeu muita ênfase como padrão de um supercondutor BCS ideal.

## 2 OS CUPRATOS

O primeiro supercondutor de alta  $T_c$  com uma temperatura de transição em torno de 30K,  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , foi descoberto em 1986 por pesquisadores da IBM, Georg Bednorz e K. Alex Müller [2]. Em 1987, Chu *et. al.* sintetizou um novo cuprato  $\text{YBa}_2\text{Cu}_2\text{O}_{4-x}$  que possui uma temperatura crítica de 94K [3], foi o primeiro supercondutor a superar a barreira do nitrogênio líquido (77K) desde então, o composto  $\text{YBa}_2\text{Cu}_2\text{O}_{4-x}$  obteve imensa atenção devido as implicações tecnológicas.

Diversas famílias de cupratos tem sido descobertas, todas caracterizadas por planos de cristal de óxido de cobre ( $\text{CuO}_2$ ), ver Fig. 6.

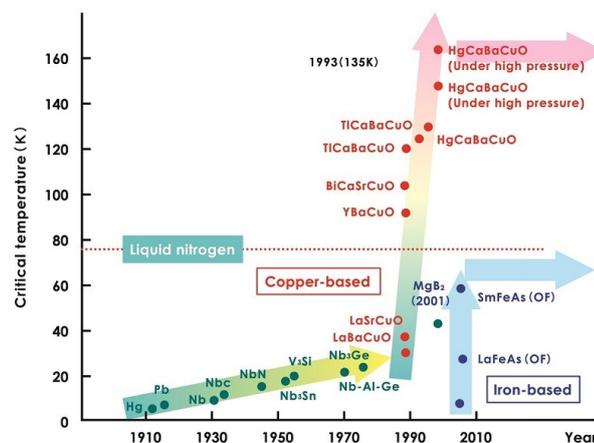


Figura 6: Evolução da temperatura crítica dos supercondutores

Entretanto, diferente dos supercondutores metálicos convencionais onde a fase normal é descrita em termos das propriedades do líquido de Fermi, os cupratos apresentam uma fase normal com novas propriedades que se tornaram um desafio. Propriedades como: calor específico, suscetibilidade magnética, resistividade elétrica; diferentes de um metal.

Contudo, ainda assim podemos afirmar algumas características sobre a natureza seja do estado normal e/ou do supercondutor [4]:

- A supercondutividade dos cupratos é devida a formação dos pares de Cooper;
- A supercondutividade nos cupratos ocorre principalmente nos planos de  $\text{CuO}_2$ ;
- O parâmetro de ordem é composto por uma amplitude e fase;
- A simetria orbital do parâmetro de ordem é  $d_{x^2-y^2}$ ;
- O mecanismo da formação dos pares de Cooper ainda é assunto de debate.

## 2.1 Estrutura dos cupratos

Todos os supercondutores de cuprato têm a estrutura em camadas. O fluxo da supercorrente ocorre nas de condução, as camadas de ligação apoiam e mantêm juntas as camadas de condução. As camadas de condução contêm planos de  $\text{CuO}$ , cada íon de cobre ( $\text{Cu}^{2+}$ ) é circundado por quatro íons de oxigênio ( $\text{O}^{2-}$ ).

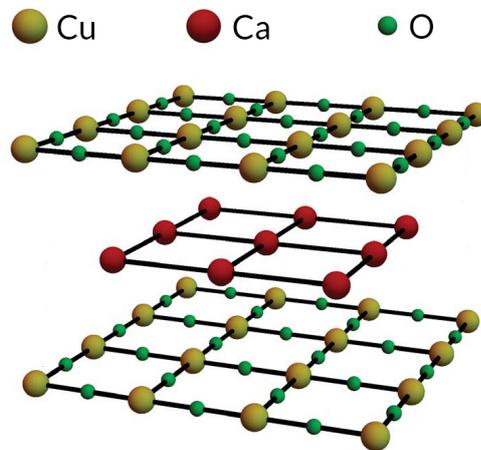


Figura 7: Esquema da estrutura dos cupratos, observamos as camadas de condução e a de ligação.

## 2.2 Dopagem

Os cupratos são dopados mudando a composição química das camadas de condução, os elétrons são removidos (dopagem por buracos) ou adicionados (dopagem por elétrons) no plano de CuO. Para nossos propósitos vamos discutir sobre sistemas dopados por buracos. Para ver como isso acontece, considere o  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  como um composto puramente iônico formado de dois íons  $\text{La}^{3+}$ , um íon de  $\text{Cu}^{2+}$  e quatro íons de  $\text{O}^{2-}$ . Se 10% do trivalente  $\text{La}^{3+}$  for substituído por divalente  $\text{Sr}^{2+}$  para formar o composto  $(\text{La}_{0,9}, \text{Sr}_{0,1})_2\text{CuO}_{4-x}$ , há duas forma de alcançar a neutralidade elétrica, ou seja, equilibrar as cargas positivas e cargas negativas no composto.

A primeira é deixar todo o cobre permanecer como  $\text{Cu}^{2+}$  e reduzir a quantidade de oxigênio, fazendo obtemos o composto  $(\text{La}_{0,9}, \text{Sr}_{0,1})_2\text{CuO}_{3,9}$ . Os planos de CuO não são alterados por esse processo, uma vez que todo o cobre ainda se encontra no estado  $\text{Cu}^{2+}$ . Outra forma de dopagem é manter o teor de oxigênio correspondendo a fórmula  $(\text{La}_{0,9}, \text{Sr}_{0,1})_2\text{CuO}_4$  e atingir a neutralidade de carga, convertendo 20% dos íons divalentes  $\text{Cu}^{2+}$  em trivalentes  $\text{Cu}^{3+}$ . O resultado são planos de CuO com muitos buracos decorrentes da presença de muitos íons  $\text{Cu}^{3+}$ .

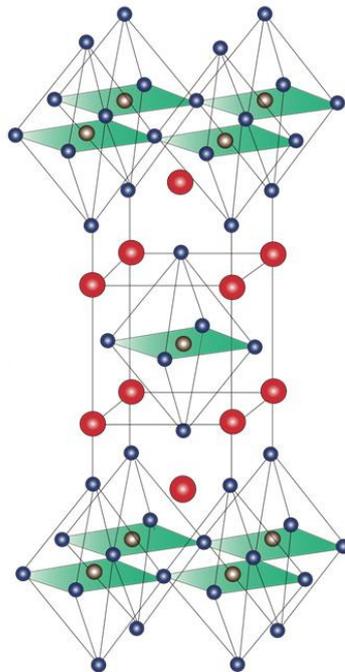


Figura 8: A estrutura do cristal do  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  dopado. Quando íons  $\text{La}^{3+}$  são substituídos por  $\text{Sr}^{2+}$ . Esferas vermelhas, marrons e azuis, representam La(Sr), Cu e O íons respectivamente. Em verde estão os planos de CuO.

Na prática, ambos os processos podem ocorrer: pode haver alguma diminuição de oxigênio e alguma conversão para íons  $\text{Cu}^{3+}$ . A concentração de buracos nos planos de  $\text{CuO}$  pode ser calculada quando o parâmetro  $x$  na fórmula  $(\text{La}_{0,9}, \text{Sr}_{0,1})_2\text{CuO}_{4-x}$  é conhecido.

A figura 9 [5] mostra que a supercondutividade ocorre apenas sobre uma certa faixa de concentração de buracos. Ela surge em uma dopagem crítica  $p_{\min}$ , há uma transição de temperatura que cresce até seu valor máximo em  $p_{ot}$  e então diminui com o aumento da dopagem e desaparece em  $p_{\max}$ . Também vemos que a temperatura de formação do ordenamento de carga  $T_C$  é mais alta em torno de  $p = 0.125$ , isso é um indicativo que as variações de carga são mais fortes. Materiais com  $p < p_{ot}$  são classificados como *underdoped* e aqueles com  $p > p_{ot}$  são classificados como *overdoped*.

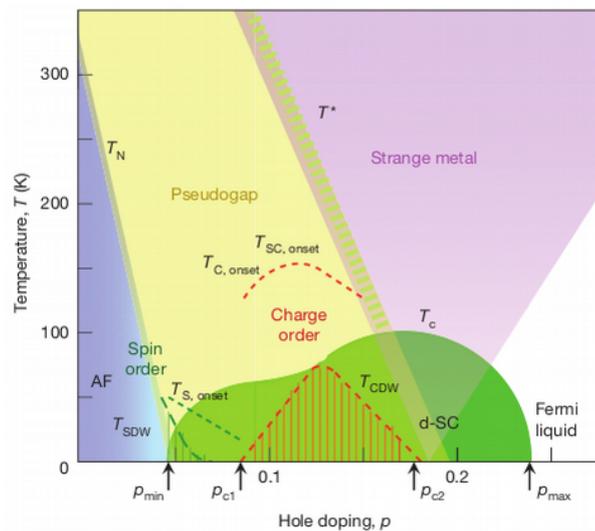


Figura 9: Temperatura versus dopagem para cupratos, indicando onde várias fases ocorrem. O subscrito *onset* marca a temperatura que as flutuações de ordem se tornam aparentes.  $T_{S,onset}$  (linha verde pontilhada),  $T_{C,onset}$  e  $T_{SC,onset}$  (linha vermelha pontilhada), se referem as temperaturas *onset* de flutuação de spin, carga e supercondutor, enquanto  $T^*$  indica a temperatura onde ocorre o crossover para o regime de pseudogap. Note que o máximo do ordenamento de carga ocorre em torno de  $p = 0.125$ . [5]

## 2.3 Pseudogap

Diferente dos supercondutores convencionais onde o gap é uma propriedade exclusiva da fase supercondutora da matéria, os supercondutores de alta  $T_c$  apresentam um gap acima da temperatura crítica conhecido como pseudogap, ou seja, é observado na fase normal dos cupratos um gap  $\Delta$  para ( $T > T_c$ ) [6]. Ainda não há um consenso sobre sua natureza se é devido as flutuações supercondutoras ou a supercondutividade em ilhas [7], contudo há uma temperatura característica denotada por  $T^*$  onde a região do pseudogap se inicia e essa temperatura estende por cima de  $T_c(p)$ , figura 10.

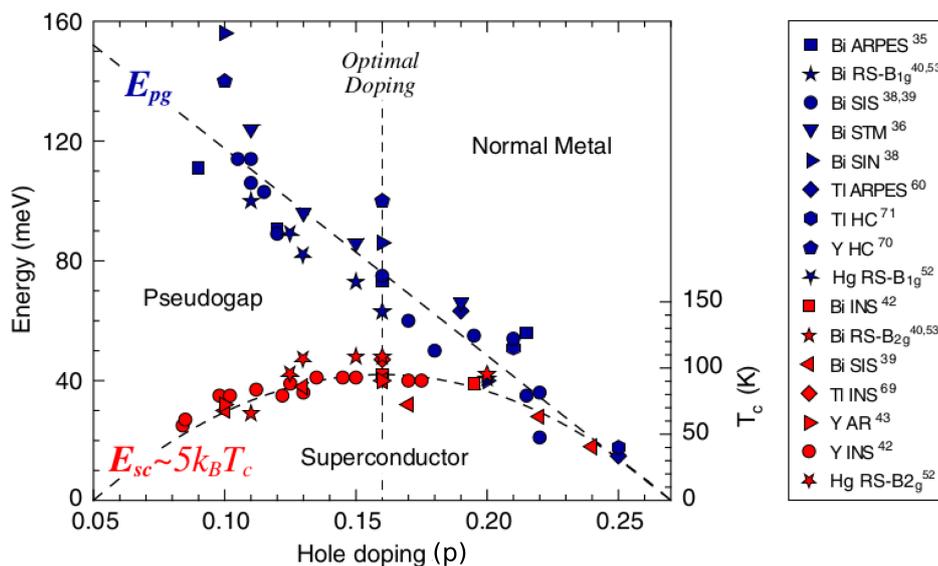


Figura 10: Escalas de energia de pseudogap ( $E_{pg} = 2\Delta_{pg}$ ) e supercondutividade ( $E_{SC} \sim 5k_B T_c$ ) para um número de HTSCs com  $T_c^{\max} \sim 95\text{K}$ . Os dados são obtidos como uma função da dopagem  $p$ , por ARPES, STM, Andreev reflection (AR), Raman scattering (RS) e heat conductivity (HC). [8]

A existência do pseudogap foi comprovada de forma experimental por muitos experimentos como: ARPES, STM, Nuclear Magnetic Resonance (NMR), Raman Scattering (RS), Magnetic Neutron Scattering (MNS). Como não temos espaço para tratar todos os métodos vamos apenas discutir os resultados de ARPES, mas uma explicação detalhada de outros métodos pode ser encontrada em Timusk *et al.* [6].

### 2.3.1 Evidências de pseudogap por ARPES

Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy (ARPES) é uma técnica experimental que permite acesso direto ao espectro de um elétron removido de um sistema de muitos corpos, isso permite medir a dependência do momento do valor absoluto da amplitude de pareamento  $2\Delta$  via a excitação do gap  $\Delta$  do único elétron removido [8]. Essa técnica tem se mostrado muito útil para estudar os cupratos porque ela produz a energia e o momento dos estados eletrônicos preenchidos abaixo da superfície Fermi, tornando possível analisar os planos de CuO dos cupratos que são os principais locais de supercondutividade.

A figura 11 mostra várias medidas realizadas ao longo da linha vermelha na zona de Brillouin que viola a superfície de Fermi como visto em (c). Os gráficos da referência [9] mostram a energia para se extrair um elétron. O gap de energia definido pela diferença da energia de Fermi, tomada como a origem, pode ser facilmente visto.

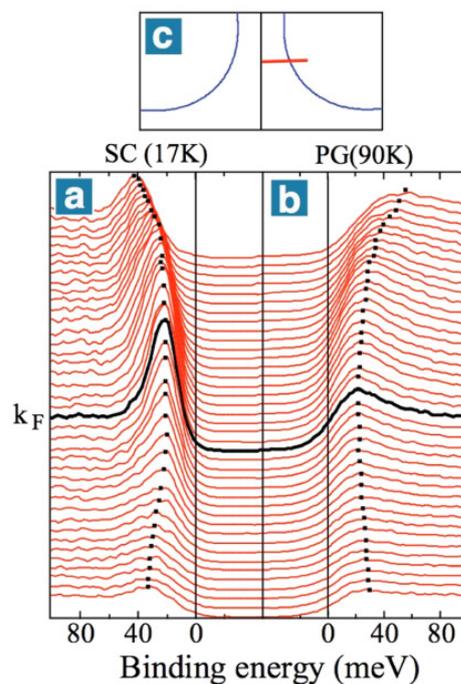


Figura 11: Medidas de ARPES através da superfície de Fermi (c) de um filme de Bi2212 com  $T_c = 80K$ , onde os gaps supercondutores são definido pelos pontos pretos em (a) e (b). Nesse caso o gap medido a  $90K$  associado a supercondutividade é bem acima de  $T_c = 80K$  do material. [9]

## 2.4 Distribuição eletrônica inhomogênea

Após uma década da origem da supercondutividade de alta  $T_c$ , foi descoberta as listras de diferentes densidades de cargas por Tranquada [10] em 1995. Isso gerou um alvoroço para explicar a participação das listras na supercondutividade, se elas seriam a causa ou não. Contudo, fica claro que qualquer teoria da supercondutividade nesses materiais precisam levar em conta essa desordem. Nosso modelo baseia-se essencialmente na distribuição de carga eletrônica nos planos de CuO dos cupratos. A distribuição inhomogênea de carga foi medida por diversos experimentos que indicam que as densidades locais dos supercondutores de alta  $T_c$  são desordenadas [11, 12], isto varia radicalmente de um metal no estado normal, onde a distribuição de carga é homogênea.

Há um aumento crescente de evidências sugerindo que a inhomogeneidade é intrínseca aos cupratos e não é relacionada com as impurezas [10, 13–23] ou defeitos de cristalografias. Abaixo descrevo dois experimentos em diferentes materiais que dão suporte a existência intrínseca das inhomogeneidades:

- Difração por Nêutron [10, 14];
- Escaneamento microscópico de tunelamento (STM) [16, 18, 20, 24].

### 2.4.1 Difração por Nêutron

Esta técnica experimental é uma aplicação do espalhamento de nêutron para determinar as estruturas atômicas e magnéticas do material. A amostra a ser analisada é colocada em um feixe de nêutrons para obter um padrão de difração que fornece informações sobre a estrutura cristalina do material. É uma técnica similar a difração por raio-x.

Assim foram detectadas pequenas variações nos sinais da difração que foram interpretados como pequenas variações nas distribuições de cargas em torno dos íons no plano de CuO de  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO). Bozin [11] relatou a evidência estrutural local que suporta o fato que as distribuições de cargas são inhomogêneas nas regiões pouco dopadas (*underdoped*) e otimamente dopadas do diagrama de fase do LSCO.

Nesse contexto, foi descoberta por Tranquada [10] no LBCO a configuração de listras que são segmentos lineares que possuem densidades alternadas de buracos. Nas regiões com alta densidade de buracos a ordem anti-ferromagnética é destruída e essas distintas regiões são separadas por barreiras que são espaçadas periodicamente.

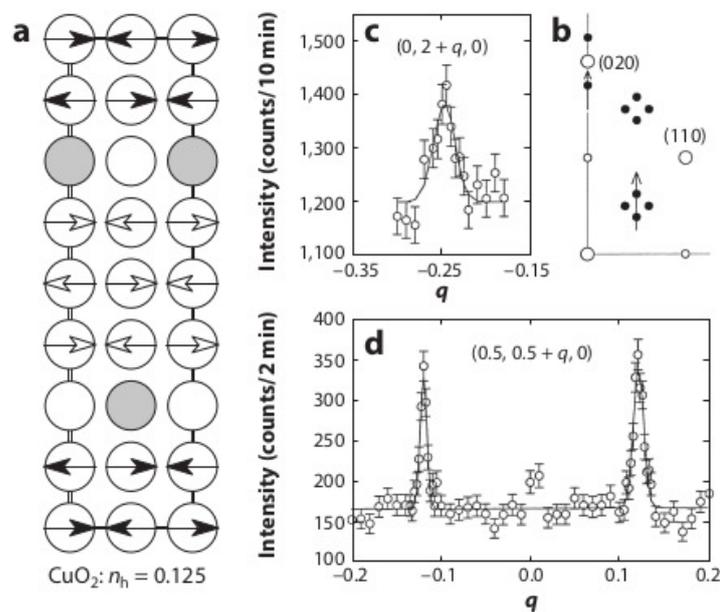


Figura 12: Descoberta da fase listra por espalhamento de nêutron em  $\text{La}_{1.6-x}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{Cu}_2\text{O}_4$  com 12% de dopagem. (a) Representação esquemática do padrão de listras: círculos representam os sítios de Cu no plano de  $\text{CuO}_2$ , com setas denotando os spins de Cu e os círculos cinzas indicam a localização dos buracos dopados. (b)  $(\text{HK}0)$  projeção do espaço recíproco mostrando a localização da carga medida e spin satellites (círculos pretos) ao longo das direções  $(010)$  e  $(110)$ , respectivamente; círculos brancos representam as reflexões de Bragg. (c,d) Espalhamento elástico de nêutron medição de (c) pico de ordem de ordem  $(0, 1.75, 0)$  e (d) picos magnéticos em  $(0.5, 0.375, 0)$  e  $(0.5, 0.625, 0)$ , com scans ao longo das setas marcadas no painel b. [10]

## 2.4.2 Escaneamento microscópico de tunelamento (STM)

O STM produz imagens com precisão atômica, algo em torno de 0.1nm, o que significa que átomos individuais podem ser mapeados e manipulados. O princípio básico usado pelo microscópio é o tunelamento quântico, o que permite mapear a densidade local dos estados de uma amostra supercondutora. Essas imagens indicam que a inomogeneidade eletrônica microscópica é distribuída nos planos, o que é uma característica fundamental para o problema da supercondutividade de alta  $T_c$ . Posteriormente McElroy [18] mostrou como a distribuição eletrônica evolui com a dopagem.

Os experimentos de STM podem ser atribuídos a presença de inomogeneidade eletrônica que é manifestada como variações espaciais na densidade local e na amplitude do gap supercondutor, mostram ainda que a inomogeneidade medida não é devido a erro de cristalografia ou impureza, mas indica um comportamento universal dos cupratos. Outros experimentos de STM confirmaram também a ordem de carga tipo tabuleiro de xadrez (*check-board*) em supercondutor fortemente correlacionado  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  [16, 18, 25].

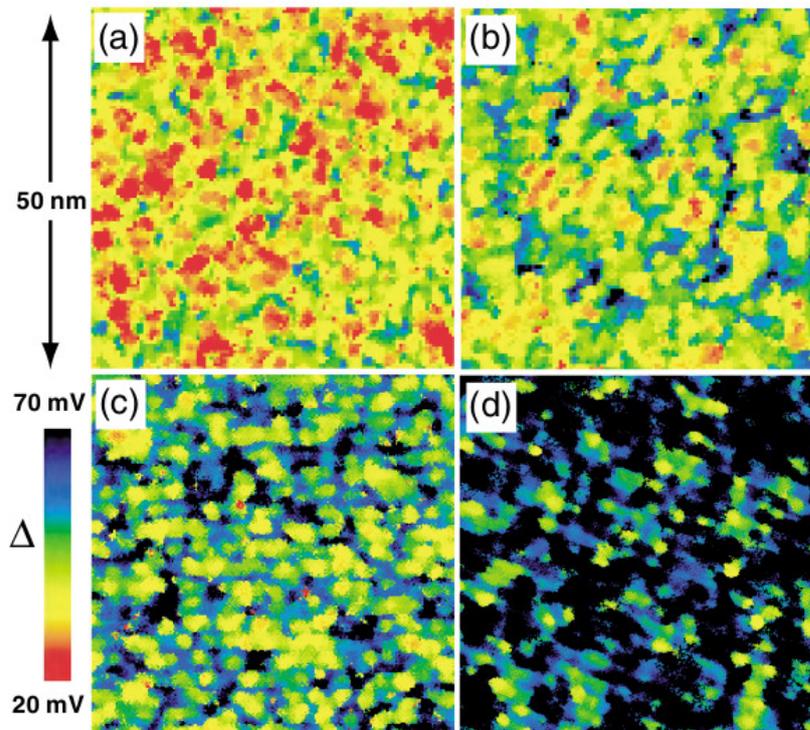


Figura 13: Medida de  $\Delta(\vec{r})$ , mapas de gaps, de quatro diferente dopagens. (a) 89 K com  $p = 0.19$ , (b) 79 K com  $p = 0.15$ , (c) 75 K com  $p = 0.13$ , (d) 65 K com  $p = 0.11$ . [18]

Então, após descoberta das listras de cargas por Tranquada *et al.* [10] e da confirmação por Fujita *et al.* [26] no LBCO e Chang *et al.* [27] no YBCO, em nossos cálculos vamos tratar as inhomogeneidades desses dois sistemas como formadas por listras de cargas *estáticas* como observado por Thampy *et al.* [28], ver figura 14.

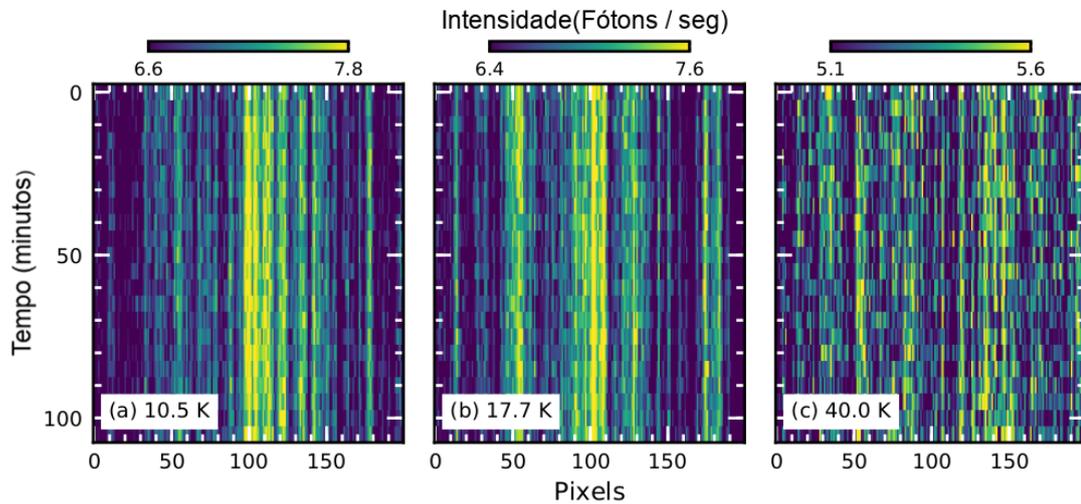


Figura 14: Gráficos mostrando a evolução da CDW em função do tempo em (a) 10.5 K, (b) 17.7 K, e (c) 40.0 K. Listras verticais são indicativas de domínios CDW estáticos entre 10.5 K e 40.0 K. [28]

Essa seção mostrou que a desordem na distribuição de carga, seja através de ilhas como na figura 13 ou de listras como nas figuras 12 e 14 é uma característica intrínseca dos cupratos. E portanto é uma propriedade bem diferente dos supercondutores metálicos, logo é necessário um modelo bem diferente para descrever a supercondutividade nos cupratos.

### 3 OBJETIVO

Portanto, vimos que a desordem eletrônica, o pseudogap e efeitos da supercondutividade acima de  $T_c$  implicam numa teoria nova para os supercondutores de alta  $T_c$ . Nesta dissertação vamos introduzir um modelo que leva em conta a variação das cargas no plano de CuO para descrever  $T_c$  em torno da anomalia  $p = 1/8$  e que explica os valores de  $T_c(p)$  que decai bastante no composto  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  (LBCO) e de forma mais suave o  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  (YBCO), como podemos ver na figura abaixo.

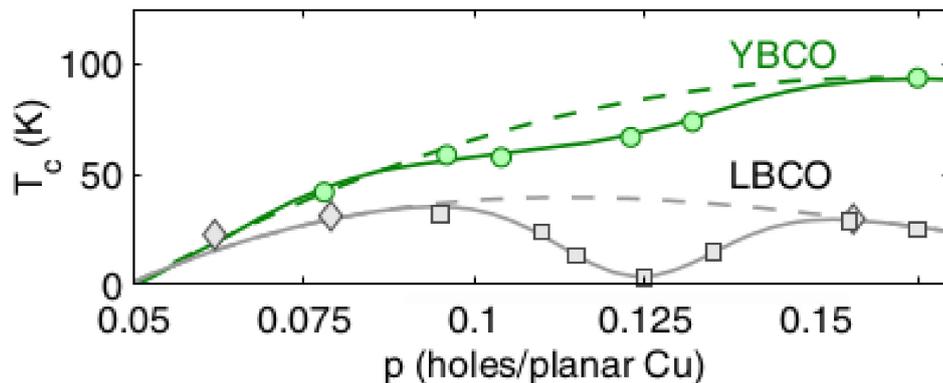


Figura 15: Gráfico  $T_c \times p$ , vemos que a queda de  $T_c$  é maior em torno de  $p = 0.125$  principalmente para o LBCO. [29]

Conforme mostrado nas figuras 17 e 16 a temperatura de formação do ordenamento de carga é mais alta justamente onde há a maior queda de  $T_c$  e conseqüentemente isso é um indicativo que o ordenamento de carga é mais forte nessa região. Nós vamos tratar nessa dissertação as variáveis de cargas quantitativamente e explicar os dados de  $T_c(p)$  para esses materiais.

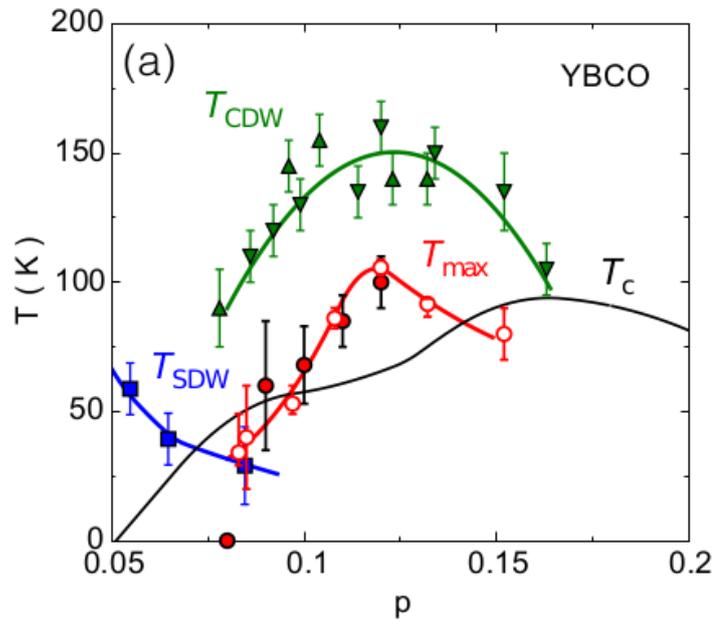


Figura 16: Gráfico  $T_c \times p$  vemos que em torno de  $p = 0.125$  há de  $T_c$  enquanto apresenta maiores valor de ordenamento de carga  $T_{CDW}$ . [30]

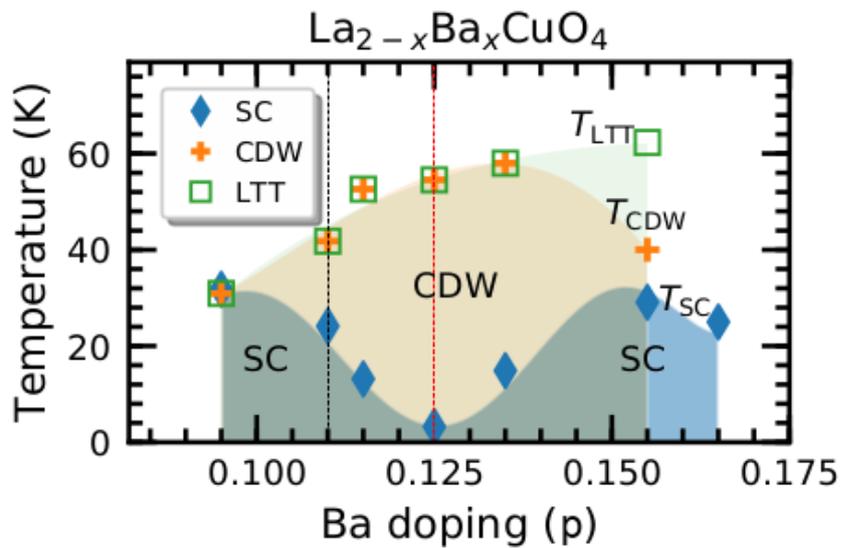


Figura 17: Gráfico  $T_c \times p$  vemos que em torno de  $p = 0.125$  há queda abrupta de  $T_c$  enquanto apresenta maiores valor de ordenamento de carga  $T_{CDW}$ . [28]

### 3.0.1 Dimensões das listras

Depois da descoberta da ordem do tipo listra nos cupratos a base de Lantânio, instabilidades no ordenamento de cargas foram observadas em todas as famílias dos cupratos. Entretanto, provou-se difícil distinguir entre cargas de ordem unidimensionais (listras) e bidimensionais (xadrez) em materiais a base de Ítrio e Bismuto.

A natureza das ordens de cargas no composto pouco dopado  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$  por espalhamento de raio-X verificou que a ordem de carga no composto é de natureza unidirecional [31], que pôde explicar aspectos comuns no YBCO e em compostos de base  $La$ .

Por isso em nosso modelo consideramos ambos os compostos, YBCO e LBCO, como formados por listras paralelas, podemos observar a figura 18:

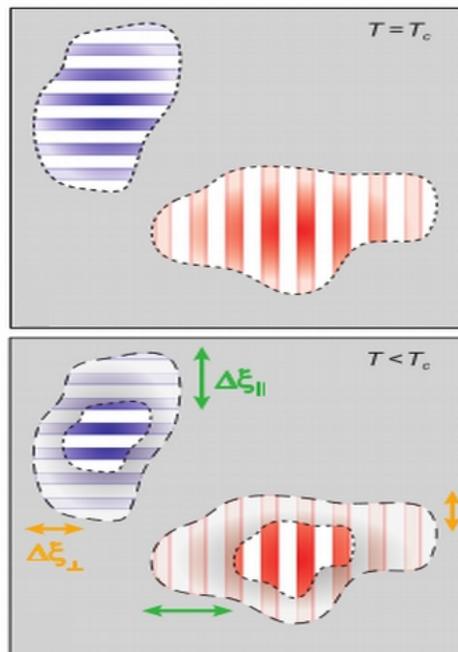


Figura 18: Esquema representando a evolução dos nanodomínios de listras igual a  $T_c$  (topo) e abaixo de  $T_c$  (baixo), ilustrando como as correlações sofrem uma supressão maior na presença da ordem supercondutora. [31]

Através dos experimentos de raio-x (RXS) foi verificado que o domínio das listras ocorrem em ilhas finitas com um comprimento de correlação  $\xi_0$ .

O tamanho dessas ilhas está associado ao comprimento de correlação  $\xi_0$  que é derivado a partir da largura do pico demonstrando que essas regiões são limitadas. A figura 19 mostra que os compostos onde a área do pico é maior tem maior  $\xi_0$ .

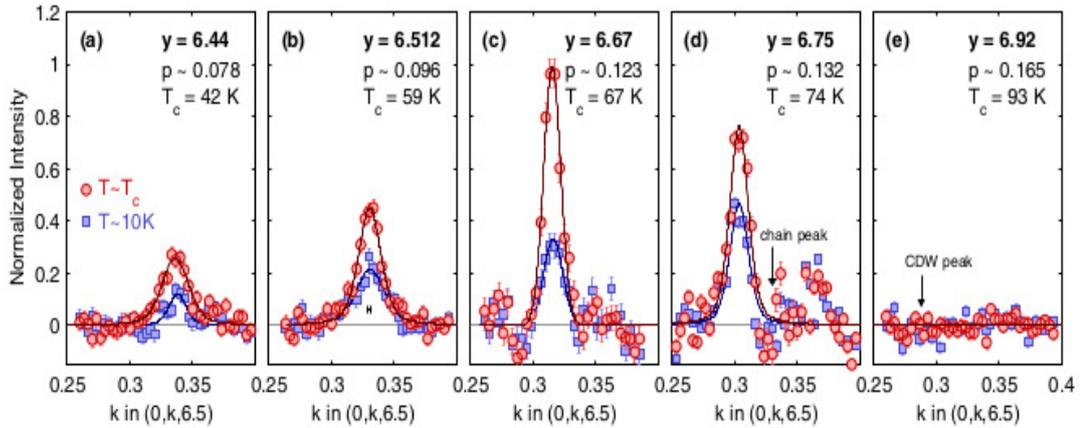


Figura 19: Intensidade dos picos que medem a formação de CDW no YBCO em função de  $k$  para diferentes dopagens com campo magnético nulo. (a)–(e) a  $T \sim T_c(y)$  (círculos) e  $T \sim 10K$  (quadrados) para as concentrações de oxigênio  $y = 6.44, 6.512, 6.67, 6.75, \text{ e } 6.92$ . [29]

Os comprimentos de correlação  $\xi_0$  que são usados nos cálculos do capítulo 6 mostrados na figura 20:

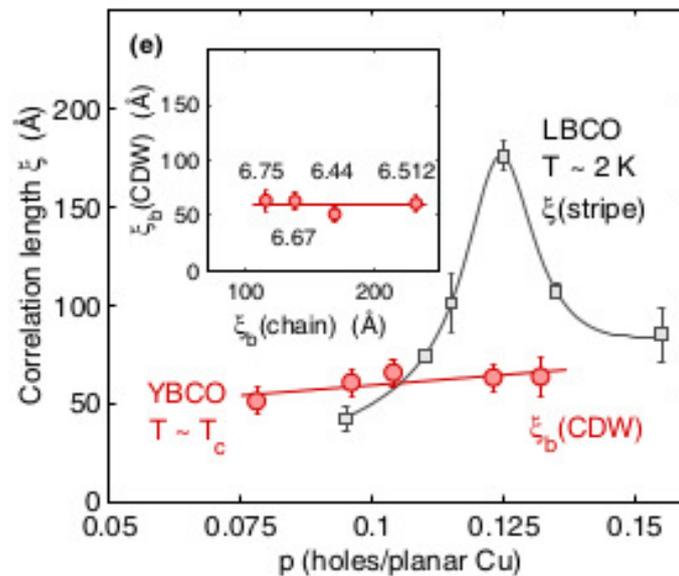


Figura 20: Comprimento de correlação em função da dopagem utilizado como comprimento das listras perto de  $T_c$ . [29]

Para larguras das listras usamos o valores retirados da figura 21, visto que o vetor de onda é uma medida da periodicidade das listras [32].

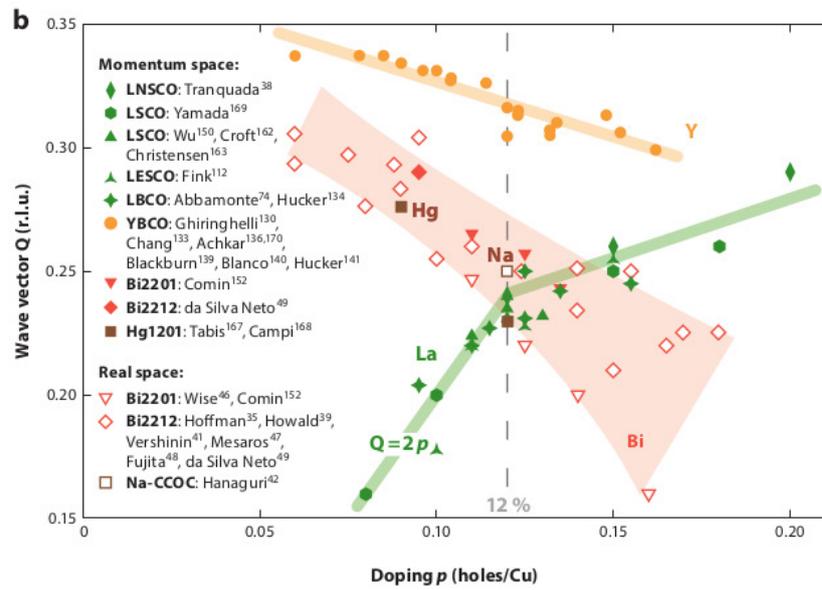


Figura 21: Vetor de onda  $Q = 1/\lambda$  em função da dopagem, dos vários compostos com onda de densidade de carga (CDW) que variam com a dopagem. No caso dos compostos com listras,  $\lambda$  representa o tamanho de uma com baixa junto com uma de alta dopagem. [32]

## 4 MÉTODO AUTO-CONSISTENTE

Nosso modelo como vimos é baseado na inomogeneidade de cargas e a teoria BCS é válida apenas para problemas de densidades uniformes. Portanto, precisamos generalizar a teoria microscópica (BCS) para lidar com problemas não-uniformes.

Usaremos aqui, o método de campo auto-consistente de Bogoliubov (Bogoliubov, Tolmachev e Shirkov, 1959) e nosso tratamento será similar ao de deGennes (1966). Nosso objetivo é determinar a dopagem local  $p$  nos planos de CuO e com essa abordagem é possível calcular os gaps locais em sistemas inomogêneos.

Podemos escrever o hamiltoniano do sistema da seguinte forma:

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \sum_{\langle i\sigma \rangle} \mu_i n_{i\sigma} + \overbrace{V_0 \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}^{\mathcal{H}_1} + \underbrace{\frac{V_1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}}_{\mathcal{H}_2} \quad (4.1)$$

O termo  $H^2$  provê a interação  $V_1$  das cargas entre os primeiros vizinhos denotados por  $\langle i, j \rangle$ , o potencial químico  $\mu_i$  regula a densidade local e  $V_0$  é a repulsão coulombiana de um sítio. Se fizermos  $V_1 = 0$  e  $V_0 < 0$ , os gaps são do tipo *onda-s*. Aqui temos  $V_1 < 0$  e  $V_0 > 0$  onde também obtemos gaps do tipo *onda-d*.

Na esperança de uma solução relativamente simples do modelo, vamos realizar simplificações em cada termo da equação 4.1, começando por  $H_2$ .

### 4.0.1 Simplificando o Hamiltoniano $\mathcal{H}_2$

Somando  $\mathcal{H}_2$  sobre os spins  $\sigma$  e  $\sigma'$  e fazendo  $j = i + \delta$  onde  $\delta$  é são os vizinhos temos:

$$\frac{V_1}{2} \sum_{\langle i\delta \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{i+\delta,\sigma'} =$$

$$\frac{V_1}{2} \sum_{\langle i\delta \rangle} \left[ c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i+\delta\uparrow}^\dagger c_{i+\delta\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i+\delta\downarrow}^\dagger c_{i+\delta\downarrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i+\delta\downarrow}^\dagger c_{i+\delta\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i+\delta\uparrow}^\dagger c_{i+\delta\uparrow} \right]. \quad (4.2)$$

Apenas os dois últimos termos devem possuir contribuição física, assim como ambos possuem a mesma estrutura vamos tomar a média térmica dos pares de operadores, isso será suficiente para considerar que apenas o último termo é essencial para física.

$$\mathcal{H}_2 = \frac{V_1}{2} \sum_{\langle i,\delta \rangle} c_{i+\delta\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i+\delta\uparrow}. \quad (4.3)$$

O produto de quatro operadores não é muito fácil de se fazer, por isso aplicamos aproximação de campo médio com médias térmicas a (4.3), o que gera:

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{\langle i\delta \rangle} \left[ \overbrace{\frac{V_1}{2} \langle c_{i+\delta\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle}^{\Delta_\delta^*(\vec{r}_i)} c_{i\downarrow} c_{i+\delta\uparrow} + \overbrace{\frac{V_1}{2} \langle c_{i\downarrow} c_{i+\delta\uparrow} \rangle}^{\Delta_\delta(\vec{r}_i)} c_{i+\delta\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right], \quad (4.4)$$

onde definimos a amplitude  $\Delta_\delta(\vec{r}_i)$  que no futuro será o parâmetro de gap da *onda-d* e devido a simetria da ordem  $d_{x^2-y^2}$  nos cupratos será utilizados em nossos cálculos.

## 4.0.2 Simplificando o Hamiltoniano $\mathcal{H}_1$

Para simplificar o termo responsável pela repulsão de um sítio, vamos utilizar a aproximação de Hartree-Fock Bogoliubov. Assim, temos:

$$\mathcal{H}_1 = \frac{V_0}{3} \sum_i \left[ \langle n_\uparrow \rangle n_\downarrow + \langle n_\downarrow \rangle n_\uparrow + 2 \langle c_\downarrow c_\uparrow \rangle c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger + 2 \langle c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger \rangle c_\downarrow c_\uparrow \right]. \quad (4.5)$$

Como o argumento é o mesmo para todos os operadores, o mesmo foi omitido. Se não há campo eletromagnético externo, então  $\langle n_\uparrow \rangle = \langle n_\downarrow \rangle$ , isso nos permite usar a seguinte notação  $n = n_\uparrow + n_\downarrow + \sum_\sigma n_\sigma$ . Com essas considerações podemos reescrever (4.5) definindo novas amplitudes:

$$\mathcal{H}_1 = \sum_i \left[ \frac{V_0}{6} \langle n \rangle n + \frac{2V_0}{3} \overbrace{\langle c_\downarrow c_\uparrow \rangle}^{\Delta_U(\vec{r}_i)} c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger + \frac{2V_0}{3} \overbrace{\langle c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger \rangle}^{\Delta_U^*(\vec{r}_i)} c_\downarrow c_\uparrow \right]. \quad (4.6)$$

Naturalmente o gap surge com dimensão de energia. Se  $U < 0$  e  $V_1 = 0$ , então  $\Delta_U(\vec{r}_i)$  será simplesmente gap isotrópico de *onda-s*, semelhante ao gap supercondutor metálico descrito pela teoria BCS.

## 4.0.3 Escrevendo o Hamiltoniano efetivo $\mathcal{H}_e$

Podemos combinar o termo  $\sum_i \frac{V_0}{6} \langle n \rangle n$  de (4.6) com  $-\sum_{i,\sigma} \mu_i n_{i\sigma}$  da (4.1) para dar  $\sum_i \bar{\mu}_i n$ , onde:

$$\bar{\mu}_i = \mu_i - \frac{V_0}{6} \langle n \rangle n, \quad (4.7)$$

esse potencial químico contém o Hartree-Shift  $\frac{V_0}{6} \langle n \rangle n$  e será usado para uma distribuição de carga inhomogênea  $p(i)$ . Com isso em mente, substituímos as equações (4.4) e (4.6) de volta em (4.1), obtendo agora o nosso Hamiltoniano efetivo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_e &= t \sum_{\langle i\delta \rangle} \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta\sigma} - \sum_i \bar{\mu}_i n_i \\ &+ \sum_{\langle i\delta \rangle} \left[ \Delta_\delta(\vec{r}_i) c_{i+\delta\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \Delta_\delta^*(\vec{r}_i) c_{i\downarrow} c_{i+\delta\uparrow} \right] \\ &+ \sum_i \left[ \Delta_U(\vec{r}_i) c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger + \Delta_U^*(\vec{r}_i) c_\downarrow c_\uparrow \right]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Na próxima seção iremos diagonalizar o Hamiltoniano usando as transformações de Bogoliubov. Iremos obter os autovalores e autovetores do Hamiltoniano.

#### 4.0.4 Equações de Bogoliubov

O Hamiltoniano efetivo (4.8) agora é quadrático nos operadores. Vamos utilizar a transformação generalizada de Bogoliubov:

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow} &= \sum_n \left[ u_n(\vec{r}_i) \gamma_{n\uparrow} - v_n^*(\vec{r}_i) \gamma_{n\downarrow}^\dagger \right], \\ c_{i\downarrow} &= \sum_n \left[ u_n(\vec{r}_i) \gamma_{n\downarrow} + v_n^*(\vec{r}_i) \gamma_{n\uparrow}^\dagger \right], \\ c_{i+\delta\uparrow} &= \sum_n \left[ u_n(\vec{r}_i + \vec{\delta}) \gamma_{n\uparrow} - v_n^*(\vec{r}_i + \vec{\delta}) \gamma_{n\downarrow}^\dagger \right], \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde os  $\gamma_{n\sigma}$ 's são operadores de quase-partículas e  $u_n(\vec{r}_i)$  e  $v_n(\vec{r}_i)$  são amplitudes de probabilidades a serem determinadas. O spins  $\sigma$  possui duas possibilidades: para cima  $\uparrow$  com sinal positivo e para baixo  $\downarrow$  com sinal negativo. A equação (4.9) diagonaliza (4.8) em:

$$\mathcal{H}_e^F = \sum_{n\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}, \quad (4.10)$$

onde o autovalor de  $\mathcal{H}_e^F$  é medido a partir do estado fundamental. Nosso próximo passo é estabelecer uma conexão apropriada entre as equações (4.8) e (4.9) que devem ser iguais, para isso calculamos os comutadores  $[c_{i\downarrow}, \mathcal{H}_e]$  e  $[c_{i\downarrow}, \mathcal{H}_e^F]$ , aplicamos a transformação de Bogoliubov e os igualamos, isso irá nos dar as equações de Bogoliubov que estamos procurando.

Durante esse cálculos, comutadores como  $[\gamma_{n\sigma}, \mathcal{H}_e^F]$  irão aparecer, portanto calculamos esses dois comutadores usando (4.10) e  $\{\gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{m\sigma'}\} = \delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'}$ , antecipando temos:

$$[\gamma_{n\sigma}, \mathcal{H}_e^F] = E_n \gamma_{n\sigma}, \quad (4.11a)$$

$$[\gamma_{n\sigma}^\dagger, \mathcal{H}_e^F] = -E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger. \quad (4.11b)$$

Escolhendo por nenhuma razão especial  $\sigma = \downarrow$ , vamos calcular  $[c_{i\downarrow}, \mathcal{H}_e^F]$ , usando a forma diagonal do Hamiltoniano efetivo (4.10) com (4.9) e (4.11) temos:

$$[c_{i\downarrow}, \mathcal{H}_e^F] = \sum_n E_n \left( u_n(\vec{r}_i) \gamma_{n\downarrow} - v_n^*(\vec{r}_i) \gamma_{n\uparrow}^\dagger \right), \quad (4.12)$$

teríamos o mesmo resultado  $[c_{i\uparrow}^\dagger, \mathcal{H}_e^F]$ . Da mesma maneira calculamos  $[c_{i\downarrow}, \mathcal{H}_e]$  usando (4.8) e depois de algumas manipulações obtemos:

$$[c_{i\downarrow}, \mathcal{H}_e] = t \sum_\delta c_{i+\delta\downarrow} - \bar{\mu}_i c_{i\downarrow} - \sum_\delta \Delta_\delta(\vec{r}_i) c_{i+\delta\uparrow}^\dagger - \Delta_U(\vec{r}_i) c_{i\uparrow}^\dagger. \quad (4.13)$$

Comparando as equações (4.13) e (4.12) é possível obter a transformação de Bogoliubov da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
[c_{i\downarrow}, \mathcal{H}_e] &= \tag{4.14} \\
\sum_n &\left( t \sum_{\delta} u_n(\vec{r}_i + \delta) - \bar{\mu}_i u_n(\vec{r}_i) + \sum_{\delta} v_n(\vec{r}_i + \delta) \Delta_{\delta}(\vec{r}_i) + v_n(\vec{r}_i) \Delta_U(\vec{r}_i) \right) \gamma_{n\downarrow} + \\
\sum_n &\left( t \sum_{\delta} v_n^*(\vec{r}_i + \delta) - \bar{\mu}_i v_n^*(\vec{r}_i) - \sum_{\delta} u_n^*(\vec{r}_i + \delta) \Delta_{\delta}(\vec{r}_i) - u_n^*(\vec{r}_i) \Delta_U(\vec{r}_i) \right) \gamma_{n\uparrow}^{\dagger}.
\end{aligned}$$

Assim, obtivemos a comunicação que desejávamos comparando os coeficientes  $\gamma_{n\downarrow}$  e  $\gamma_{n\uparrow}^{\dagger}$  nas equações (4.12) e (4.14) obtendo:

$$E_n u_n(\vec{r}_i) = t \sum_{\delta} u_n(\vec{r}_i + \delta) - \bar{\mu}_i u_n(\vec{r}_i) + \sum_{\delta} v_n(\vec{r}_i + \delta) \Delta_{\delta}(\vec{r}_i) + v_n(\vec{r}_i) \Delta_U(\vec{r}_i) \tag{4.15}$$

e

$$-E_n v_n^*(\vec{r}_i) = t \sum_{\delta} v_n^*(\vec{r}_i + \delta) - \bar{\mu}_i v_n^*(\vec{r}_i) - \sum_{\delta} u_n^*(\vec{r}_i + \delta) \Delta_{\delta}(\vec{r}_i) - u_n^*(\vec{r}_i) \Delta_U(\vec{r}_i). \tag{4.16}$$

Essas duas equações são as equações de Bogoliubov do nosso problema, podemos escrevê-las da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \zeta & \Delta \\ \Delta^* & -\zeta \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_n(\vec{r}_i) \\ v_n(\vec{r}_i) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_n(\vec{r}_i) \\ v_n(\vec{r}_i) \end{pmatrix} \tag{4.17}$$

Por definição  $E_n \geq 0$ , as equações (4.17) fornecem os autovalores  $\{E_n\}$  e também determinam os autovetores constituídos das amplitudes das quase-partículas,

$$\begin{pmatrix} u_n(\vec{r}_i) \\ v_n(\vec{r}_i) \end{pmatrix} \tag{4.18}$$

Isso é feito com cálculo computacional. Uma vez conhecido  $E_n$  e (4.18), podemos escrever  $\Delta_U$ ,  $\Delta_{\delta}$ ,  $p(i)$  e  $\langle p(i) \rangle$  em termos dessas quantidades.

## 4.0.5 Os gaps e densidade eletrônica

**Cálculo da amplitude de  $\Delta_U(\vec{r}_i, T)$**

$$\Delta_U(\vec{r}_i, T) = V_U \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \quad (4.19)$$

Obtendo:

$$\Delta_U(\vec{r}_i, T) = V_0 \sum_n u_n(\vec{r}_i) v_n^*(\vec{r}_i) \tanh\left(\frac{\beta E_n}{2}\right), \quad (4.20)$$

**Cálculo da amplitude de  $\Delta_\delta(\vec{r}_i)$**

Continuamos calculando  $\Delta_\delta = \frac{V_1}{2} \langle c_{\downarrow}(\vec{r}_i) c_{\uparrow}(\vec{r}_i) \rangle$ . Usando a transformação de Bogoliubov e as propriedades de média térmica,  $\langle \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{m\sigma'} \rangle = \delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'} f_n$ , obtemos:

$$\Delta_\delta(\vec{r}_i, T) = \frac{V_1}{2} \sum_n \left[ u_n(\vec{r}_i + \vec{\delta}) v_n^*(\vec{r}_i) f_n - v_n^*(\vec{r}_i + \vec{\delta}) u_n(\vec{r}_i) (1 - f_n) \right], \quad (4.21)$$

onde

$$f_n = \frac{1}{e^{(E_n - \mu_i)/k_B T} + 1}$$

**Cálculo da densidade  $p(\vec{r}_i, T)$**

Sabendo que:

$$p(\vec{r}_i, T) = \sum_\sigma \langle n_{i\sigma} \rangle = \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \quad (4.22)$$

o que nos gera:

$$p(\vec{r}_i, T) = 1 - 2 \sum_n \left[ |u_n(\vec{r}_i)|^2 f_n + |v_n(\vec{r}_i)|^2 (1 - f_n) \right] \quad (4.23)$$

O gap da *onda-d*  $\Delta_\delta(\vec{r}_i, T) \equiv \Delta_d(\vec{r}_i, T)$  e a densidade  $p(\vec{r}_i, T)$  são determinados e comparados auto-consistentemente através das equações 4.21 e 4.23. Atribuímos valores iniciais para os gaps locais  $\Delta_d(\vec{r}_i)$ , para as densidades  $p(\vec{r}_i)$  e para o potencial químico  $\bar{\mu}_i$ . Os valores de  $p(\vec{r}_i)$  são mantidos fixos para que a distribuição das cargas em forma de listra seja mantida constante e o programa é executado variando apenas o potencial químico. Quando há uma convergência dos valores de  $p(\vec{r}_i)$  previamente selecionados, nos dando novos valores para  $\Delta_d(\vec{r}_i, T)$  o programa se encerra.

Como  $\Delta_d(\vec{r}_i, T)$  varia com a posição e os resultados experimentais de ARPES e STM são medidos sobre uma região finita, iremos apresentar nossos resultados através da média espacial  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle = \sum_i^N \Delta_d(r_i, p, T)/N$ . Na próxima seção iremos calcular de fato os valores de  $\Delta_d(\vec{r}_i, T)$  para os sistemas em interesse.

## 4.1 Cálculos Bogoliubov-deGennes

Há ao menos três gaps claramente identificados nos cupratos que tem sido extensivamente discutidos [8, 33, 34]: o pseudogap  $\Delta^* = \Delta_{max}^*(0.27 - p)/0.22$ , um gap que é correlacionado com  $T_c(p)$   $\Delta_c \sim 5\kappa_B T_c(p)$  e o terceiro é aproximadamente constante para diferentes dopagens  $\Delta_0(p)$  segundo medidas de ARPES [34, 35] e STM [36].

Apenas para valores aproximadamente constantes de  $\Delta_0 = \langle \Delta_d(p, 0) \rangle$  foi possível reproduzir  $T_c(p)$  ( $0.09 \leq p \leq 0.16$ ), outros argumentos a favor de  $\Delta_0$  é a simetria em *onda-d* [34]. Baseando-se nos artigos [8, 29] assumimos o valor médio do gap para cada composto aproximadamente constantes de  $\Delta_0(p, 0)$  para as diferentes dopagens. E desses valores obtemos  $V(p, 0)$

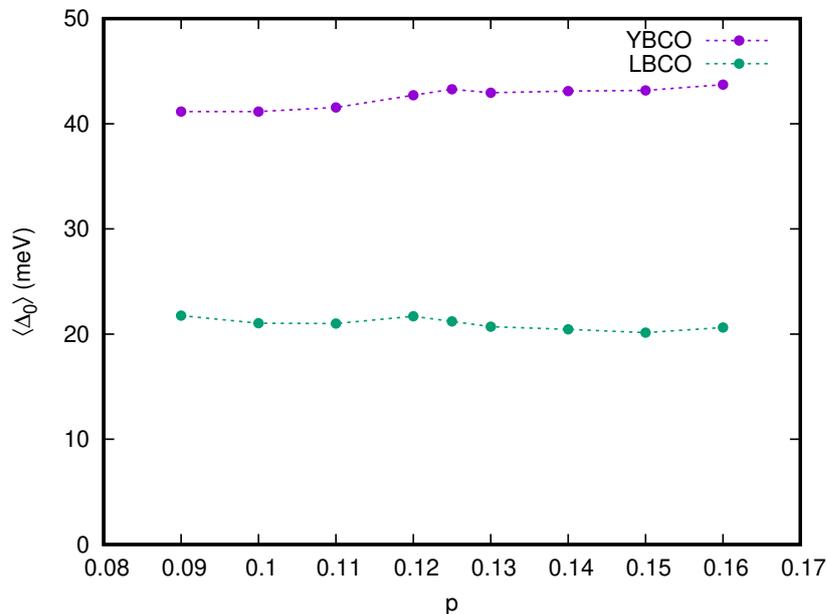


Figura 22: Valor de  $\Delta_0(p)$  para diferentes dopagem, em YBCO e LBCO respectivamente. Tais valores  $\sim 40\text{meV}$  para YBCO e para LBCO  $\sim 20\text{meV}$ .

As equações (4.21) e (4.23) foram calculadas numericamente de maneira auto-consistente usando linguagem de programação Fortran sobre uma rede quadrada que representa uma seção do plano de CuO. Para os cálculos de BdG, utilizamos os seguintes resultados de ARPES [37] como parâmetros: o termo de hopping entre os sítios  $t = 0.15\text{meV}$ ,  $t_2 = -0.50t$  e  $t_3 = 0.16t$ .

Os cálculos das equações de BdG incluem um potencial que segrega as cargas dando origem as listras com diferentes dopagens e portanto confina alternadamente as cargas em alta e baixa densidade de grãos com a mesma energia mínima e modulação  $\lambda$ .

Fazemos  $V_{GL}(p) \approx \langle V(0, p) \rangle$  e devido a indicações [38] que a temperatura  $T_{PS}(p)$ , temperatura de separação de fase, é correlacionada com a temperatura de pseudogap  $T^*(p)$  assumimos nos cálculos que são iguais.

$$V(p, T) = V(p, 0)[1 - T/T_{PS}(p)]^2 \quad (4.24)$$

### 4.1.1 Sistema Quase Homogêneo

Com os valores de  $\Delta_0(p)$  obtidos por Yoshida *et al.* como os valores iniciais à  $T = 0$ , agora podemos utilizar as equações de BdG para calcular os valores de  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  em diferentes  $p$  e  $T$ . Primeiro vamos estudar as equações de Bogoliubov-deGennes para listras com densidades que são praticamente uniformes, onde  $\Delta p$  é da ordem de  $10^{-4}$ .

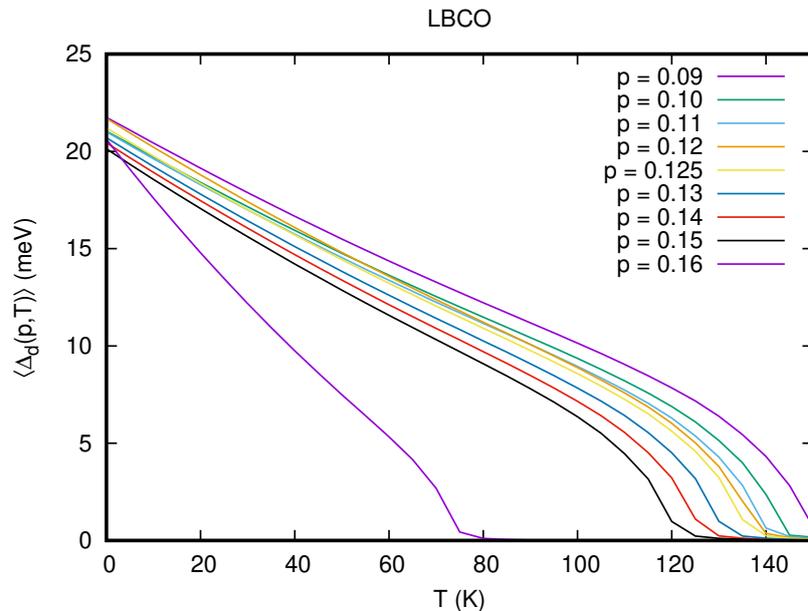
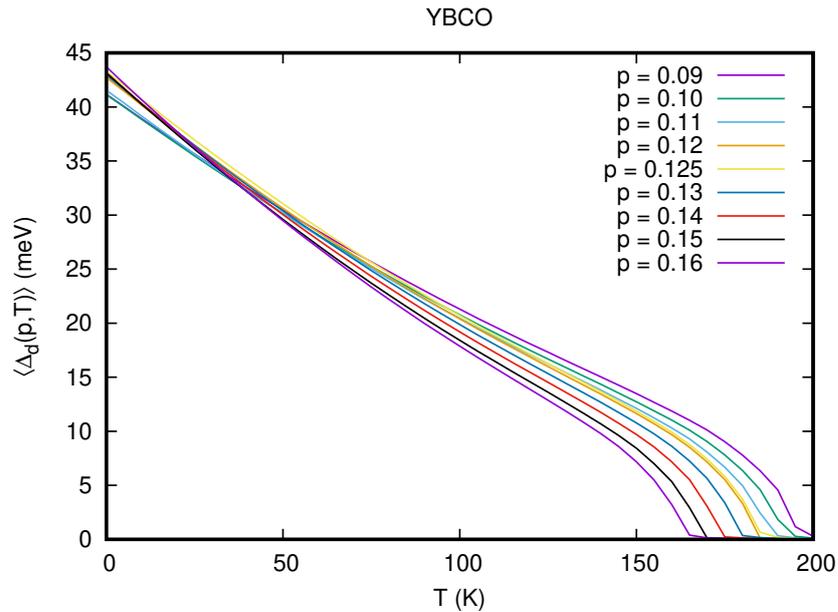


Figura 23: Valores médios calculados de  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  a partir das equações de BdG, para nove diferentes dopagens médias de  $p$ . Os valores serão usados nos cálculos de  $\langle E_J(p, T) \rangle / k_B$ . (a) YBCO e (b) LBCO.

### 4.1.2 Sistema Inomogêneo

Como o objetivo deste trabalho é obter  $T_c$  através do modelo de listras, vamos mostrar que aumentando a diferença entre as densidades de buracos entre as listras, ver Fig. 24, os valores de  $\Delta_0(p)$  e  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  diminuem e conseqüentemente  $T_c$ .

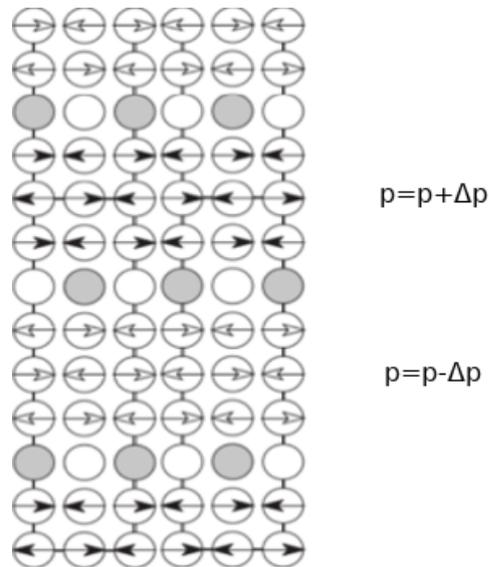


Figura 24: Representação das listras supercondutoras para diferentes dopagens.

Para demonstrar utilizamos como exemplo o composto YBCO com  $p = 0.09$ :

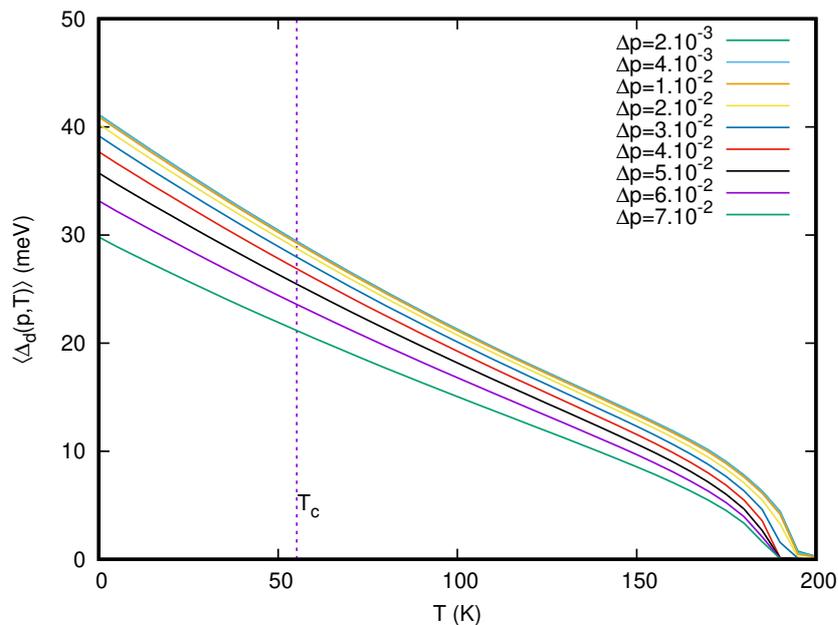


Figura 25: Estudo das variações de dopagem nas listras para  $p = 0.09$  no composto de YBCO.

(a) Fica evidente a queda de  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  conforme a diferença de dopagem aumenta entre as listras. Note também que  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  é não nulo à temperaturas bem acima de  $T_c$ .

Em nossos cálculos de BdG junto com a equação 4.24, o valor de  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  diminui com o aumento da temperatura, mas permanece finito em muitas regiões do sistema para uma significativa quantidade de temperaturas acima de  $T_c(p)$ . Isso é consistente com resultados experimentais nos cupratos que sugere efeitos de supercondutividade acima de  $T_c(p)$  [16, 39–44], como diamagnetismo [45, 46] e efeito Nernst [47, 48] mostrado na figura 26.

Como vimos na Fig. 25 as amplitudes do supercondutor permanecem acima de  $T_c$ . Como então determinar  $T_c$ ?

Na próxima seção iremos ver que a razão de  $T_c$  ser muito abaixo do valor onde a amplitude vai a zero, é devido a inhomogeneidade das cargas que faz com que esses supercondutores tenham uma estrutura granular. Ou seja, a amplitude permanece acima de  $T_c$ , mas a ordem de longo alcance é obtida pelo efeito Josephson.

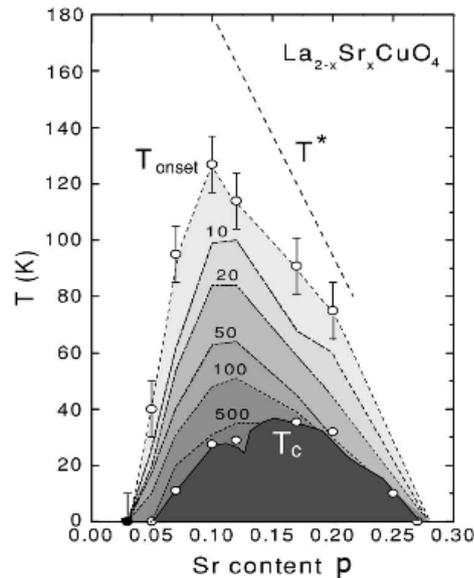


Figura 26: O diagrama de fase do LSCO demonstrando a região do efeito Nernst entre  $T_c$  e  $T_{onset}$  (os números nos contornos das curvas indicam o valor do coeficiente de Nernst  $\nu$ ). Como o efeito Nernst ocorre apenas em supercondutores, fica claro que há a existência de amplitude supercondutora isolada. [48]

## 5 ORDEM DE LONGO ALCANCE

### 5.0.1 Parâmetro de Ordem

A transição para o estado supercondutor pertence a uma classe geral de transições de fase de segunda ordem, o parâmetro de ordem envolvido nessa transição, postulado por Landau deve ser uma função complexa  $\psi = |\psi|e^{i\theta}$ , portanto, possui dois componentes: uma amplitude que é associado ao gap ( $\Delta(r_i)$ ) e uma fase  $\theta_i$ .

A partir de experimentos que fornecem evidências da existência de flutuações supercondutoras acima de  $T_c$  [16, 23, 39, 44, 48–50], Emery e Kivelson [51] sugeriram que para os cupratos supercondutores com  $p < 0.15$  o valor de  $T_c$  é determinado predominantemente pelas flutuações de fase e para  $p > 0.15$  é determinado pela temperatura de campo médio  $T^{MF}$  onde a amplitude vai a zero. A figura 27 mostra um diagrama de fase esquemático para supercondutores de alta temperatura encontrado por eles [51].

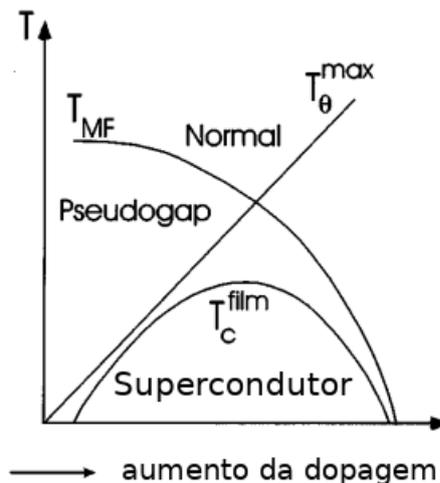


Figura 27: Diagrama de modelo de fase para os supercondutores de alta  $T_c$  como uma função da dopagem.  $T_\theta$  é a temperatura que limita a coerência de fase, acima de  $T_\theta$  as flutuações de fase são grandes.  $T_{MF}$  é temperatura de campo médio onde a amplitude vai a zero, em nosso caso seria em torno de  $200K$  figura 25. [51]

A fase supercondutora é delimitada por  $T_{\theta}^{\max}$  (que é linear para pequenos valores de  $p$ ) e  $T^{MF}$  (que decai a zero para um valor crítico de  $p$ ). Podemos ver que  $T_c$  fica abaixo de  $T_{\theta}^{\max}$  na região pouco dopada devido as flutuações quânticas e na região otimamente dopada devido as flutuações quânticas e a proximidade de  $T^{MF}$ .

Para uma temperatura  $T_c < T < T^{MF}$ , os efeitos de pareamentos se manifestam como uma supressão da intensidade das excitações de baixa energia (isso é, como um pseudogap). Essa observação provê uma explicação natural para uma variedade de medidas, incluindo NMR e condutividade óptica em supercondutores de alta  $T_c$  pouco dopados (como  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ ,  $T_c = 80\text{K}$ ), que mostras um pseudogap próximo  $160\text{K}$ .

## 5.0.2 Supercondutores Granulares

Devido a forma funcional de  $V(p, T)$  na equação (4.24), o  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  decai sistematicamente com  $p$ . Conforme a temperatura diminui abaixo de  $T^*(p)$  os grãos se tornam supercondutores, deste modo a supercondutividade ocorre quando grãos microscópicos são separados pelas regiões não supercondutoras e o tunelamento Josephson entre esses grãos estabelece o estado supercondutor macroscópico [52, 53]. Então, a estrutura eletrônica dos grãos supercondutores dos cupratos a baixa temperatura pode ser considerada como que formada por numerosas junções  $S_i - S - S_j$ .

Consequentemente nós aplicamos a teoria dos supercondutores granulares [54] a esses pequenos grãos eletrônicos e como explicado por Mello *et al.* [55] para supercondutores de *onda-d* usamos a expressão do acoplamento Josephson a esta junção  $S - I - S$  dada por [54]:

$$\langle E_J(p, T) \rangle = \frac{\pi \hbar \langle \Delta_d(p, T) \rangle}{4e^2 R_n} \tanh \frac{\langle \Delta_d(p, T) \rangle}{2k_B T}, \quad (5.1)$$

A transição de resistividade zero ocorre quando o acoplamento Josephson,  $E_J$ , entre esses minúsculos sítio é suficientemente grande para superar as flutuações térmicas [56], ou seja,  $E_J(p, T = T_c) \sim k_B T_c(p)$ , o que leva ao travamento e coerência de fase de longo alcance.

Consequentemente, a transição supercondutora em cupratos ocorre em duas etapas, semelhante a um material supercondutor embutido em uma matriz não supercondutora: a temperatura diminui então o parâmetro de ordem supercondutor se desenvolve em cada sítio a uma temperatura  $T_{c0}$ , mas devido a energia térmica ser maior que a energia de acoplamento Josephson entre os grãos,  $E_J$ , as fases do parâmetro de ordem não são correlacionadas devido as flutuações térmicas. Apenas a uma temperatura mais baixa, de ordem  $k_B T_c \sim E_J$  ocorrerá a coerência de fase e fazendo a resistividade ir a zero.

## 5.1 Cálculos Energia Josephson

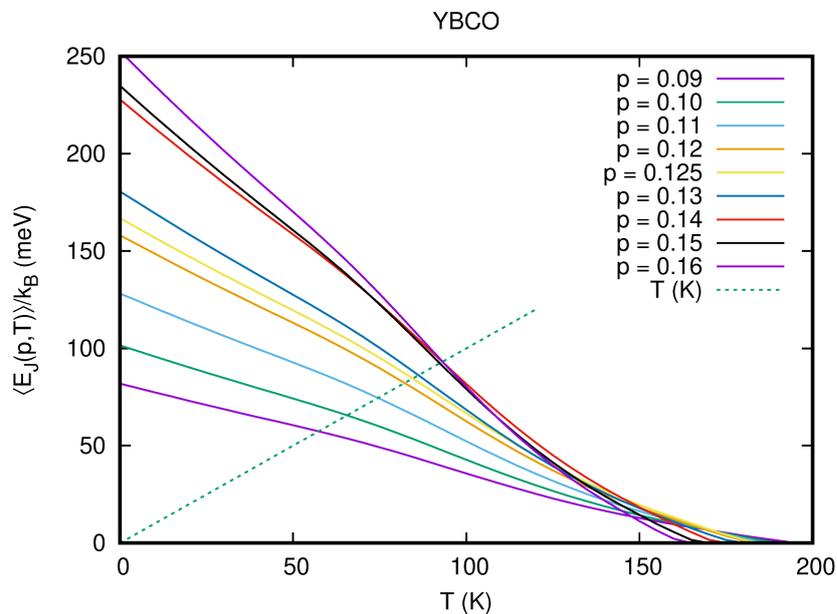
Quando não há coerência na fase supercondutora entre os grãos, as junções formam uma resistência de túnel média,  $R_n(p)$  que é proporcional a resistência de estado normal  $\rho_{ab}(p)$ ,  $R_n(p) \propto \rho_{ab}(p)$ , imediatamente acima de  $T_c(p)$ . Neste trabalho usamos valores experimentais de resistividade no eixo-b  $\rho_b$ .

A constante de proporcionalidade  $\mathcal{C}$  entre  $R_n$  e  $\rho_b$ , onde  $R_n = \mathcal{C}\rho_b$ , é encontrada correspondendo  $T_c$  para uma dada dopagem  $p_0$ , uma vez encontrado o valor de  $\mathcal{C}$  este será usado para todas as dopagens do composto.

No YBCO temos que para  $p = 0.16$  a temperatura crítica é  $T_c = 93K$ , assim  $\mathcal{C}$  é ajustado em  $R_n(0.16)$  até obtermos  $T_c = 93K$  e para LBCO  $\mathcal{C}$  é ajustado com  $p = 0.09$  até obtermos  $T_c = 32K$ .

### 5.1.1 Sistema Quase Homogêneo

Vamos calcular as energias Josephson para listras com densidades praticamente uniformes, onde  $\Delta p$  é da ordem de  $10^{-4}$ . Para isso utilizamos os valores de  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  da figura 23 (a) e (b), obtendo:



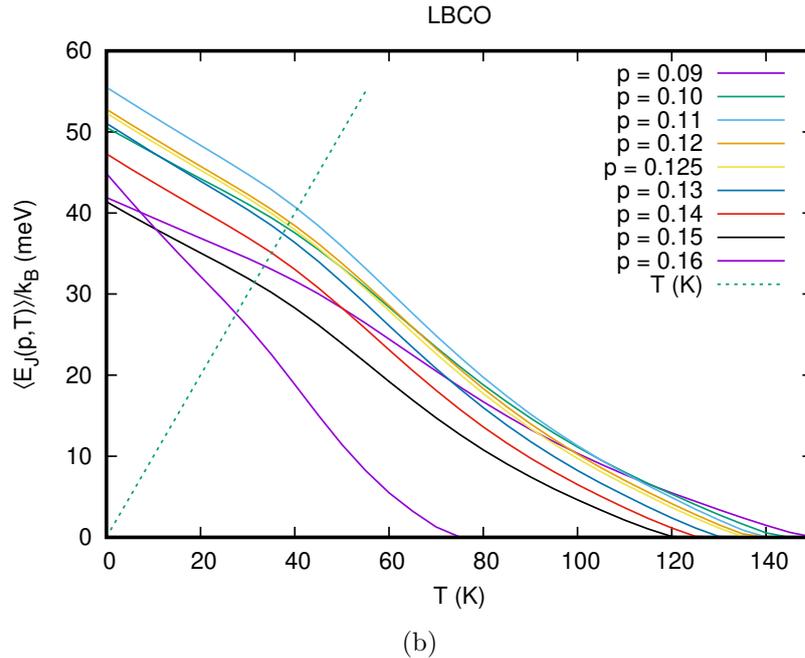


Figura 28: Valores calculados da temperatura de transição supercondutora. (a),(b) Energia média de acoplamento Josephson em função da temperatura  $\langle E_J(p, T) \rangle$  (dividida pela constante de Boltzmann  $k_B$ ) para YBCO e LBCO, respectivamente. Os valores de  $T_c$  correspondem as interseções da linha pontilhada  $\langle E_J(p, T) \rangle / k_B = T$ .

Para obtermos valores de  $T_c(p)$  próximos aos verificados experimentalmente [29] a figura 28 (b) difere do comportamento esperado como veremos na tabela abaixo, pois no composto LBCO  $T_c$  é maior para  $p = 0.11$  e não para 0.16 como usualmente.

Com esses dados montamos a seguinte tabela, na primeira linha temos a resistividade normal  $\rho_b$  um pouco abaixo de  $T_c$ , para YBCO retirado da referência [57] e para LBCO [58], os valores calculado de  $\Delta_0$  e de  $T_c$  e por último os valores de  $T^*$  são estimados a partir da extrapolação linear dos dados na referência [59]:

<b>YBCO</b>	<b>0.09</b>	<b>0.10</b>	<b>0.11</b>	<b>0.12</b>	<b>0.125</b>	<b>0.13</b>	<b>0.14</b>	<b>0.15</b>	<b>0.16</b>
$\rho_b(\mu\Omega cm)$ [57]	93	75	60	50	48	44	35	34	32
$\Delta_0(p)$ (meV)	41.1	41.1	41.5	42.7	43.8	42.9	43.0	43.1	43.7
$T_c(K)=E_J/k_B$	57.3	65.6	74.4	83.0	86.0	87.5	90.2	92.3	93.2
$T^*(p)(K)$	480	464	449	432	432	417	401	385	370
<b>LBCO</b>									
$\rho_b(m\Omega cm)$ [58]	0.180	0.137	0.130	0.117	0.113	0.11	0.09	0.08	0.03
$\Delta_0(p)$ (meV)	21.7	21.0	21.0	21.6	21.2	20.7	20.4	20.1	20.6
$T_c(K)=E_J/k_B$	33.4	38.1	40.4	38.9	38.5	37.4	35.1	31.4	27.6
$T^*(p)(K)$	480	464	449	432	432	417	401	385	370

Tabela 1: Valores calculados para **YBCO** e **LBCO**, para sistema quase homogêneo com  $\Delta p \sim 10^{-4}$ .

### 5.1.2 Sistema Inomogêneo

Para exemplificar o cálculo feito para o sistema inomogêneo,  $\Delta p > 10^{-4}$ , utilizamos  $p = 0.09$  assim os valores de  $\langle \Delta_d(p, T) \rangle$  são obtidos da figura 25, ficando claro que o valor de  $T_c$  diminui conforme a variação de dopagem aumenta.

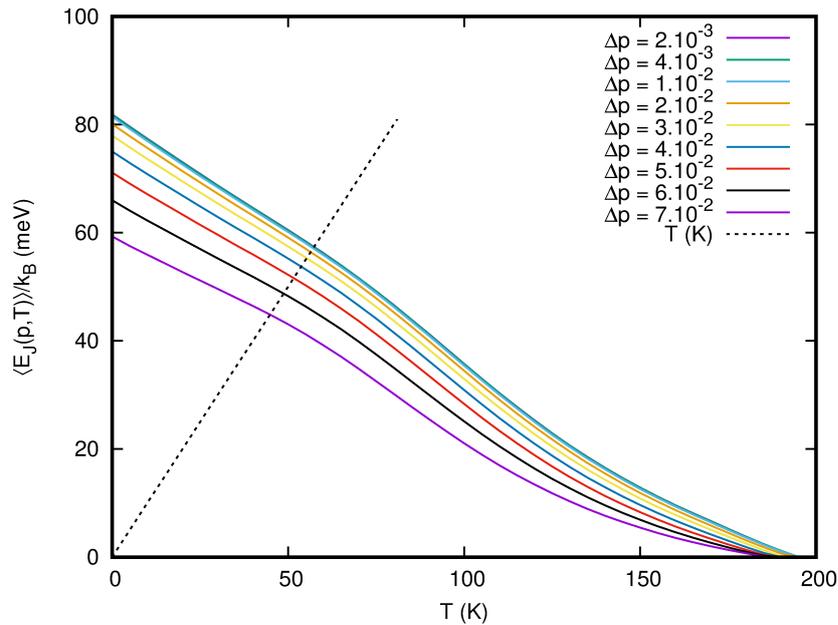


Figura 29: Estudo das variações das cargas nas listras para  $p = 0.09$  no composto de YBCO, demonstrando a queda de  $T_c$  conforme a diferença de dopagem aumenta entre as listras.

<b>0.09</b>		
$\Delta p$	$\Delta_0$ (meV)	$T_c$ (K)
$2.10^{-3}$	41.1	57.3
$4.10^{-3}$	41.1	57.3
$1.10^{-2}$	40.9	57.1
$2.10^{-2}$	40.2	56.4
$3.10^{-2}$	39.2	55.3
$4.10^{-2}$	37.7	53.6
$5.10^{-2}$	35.7	51.5
$6.10^{-2}$	33.1	48.7
$7.10^{-2}$	29.8	44.9

Tabela 2: Tabela contendo diferenças de dopagem nas listras para  $p = 0.09$  no composto YBCO, podemos ver que  $\Delta_0$  e  $T_c$  são inversamente proporcionais a diferença de dopagem entre as listras.

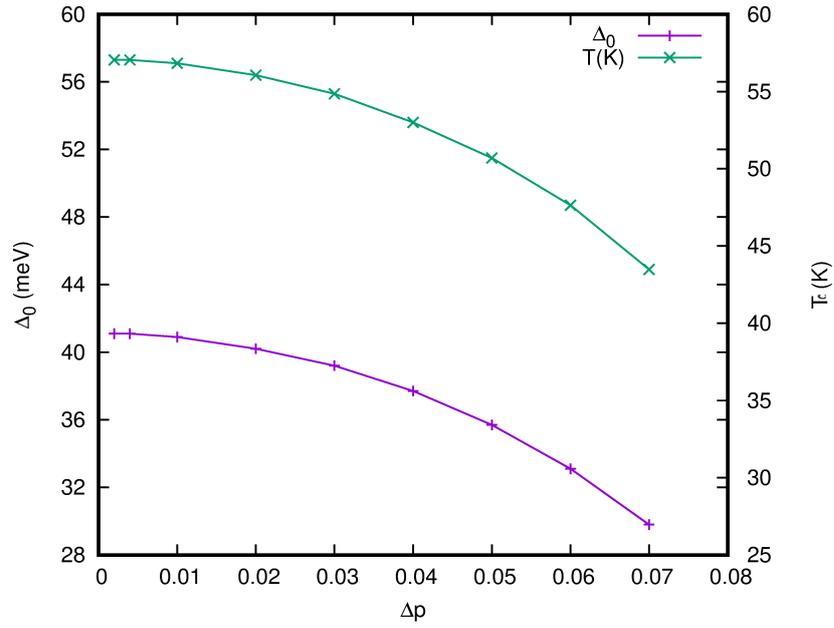


Figura 30: Gráfico demonstrando a queda de  $\Delta_0$  e de  $T_c$  em função da diferença de dopagem entre as listras, para  $p = 0.09$  no YBCO.

O estudo da diferença de dopagem entre as listras foi realizado para outros valores de  $p$ , nos compostos YBCO e LBCO como pode ser visto nas tabelas 3 e 4. Para o YBCO obtivemos valores de  $T_c$  próximos aos experimentais contudo é necessário  $\Delta p \sim 10^{-2}$ , o que não condiz com o que temos encontrado na literatura onde  $\Delta p \sim 10^{-3}$  [60]. A situação é pior para LBCO, visto que em algumas dopagens, como  $p = 0.125$ , os valores calculados de  $T_c$  não se aproximam dos experimentais mesmo com  $\Delta p \sim 10^{-2}$ .

<b>YBCO</b>	<b>0.09</b>	<b>0.10</b>	<b>0.11</b>	<b>0.12</b>	<b>0.125</b>	<b>0.13</b>	<b>0.14</b>	<b>0.15</b>	<b>0.16</b>
$T_c$ (K) Calculado	55.2	58.1	61.9	65.6	69.0	73.7	84.2	90.2	93.2
$T_c$ (K) Experimental [61]	55.0	57.8	61.5	65.0	66.0	73.5	82.5	90.8	93.2
$\Delta p$	0.03	0.06	0.08	0.095	0.04	0.10	0.08	0.04	0.0

Tabela 3: Valores calculados para YBCO levando em consideração a inomogeneidade nas equações de BdG, vemos que é necessário um grande variação da dopagem para obtermos valores experimentais de  $T_c$ .

<b>LBCO</b>	<b>0.09</b>	<b>0.10</b>	<b>0.11</b>	<b>0.12</b>	<b>0.125</b>	<b>0.13</b>	<b>0.14</b>	<b>0.15</b>	<b>0.16</b>
$T_c$ (K) Calculado	31.5	32.9	28.3	27.2	26.7	27.8	23.5	28.3	27.6
$T_c$ (K) Experimental [29]	32.0	32.8	21.9	6.10	2.80	5.30	19.7	28.1	27.6
$\Delta p$	0.02	0.06	0.09	0.10	0.105	0.11	0.12	0.06	0.0

Tabela 4: Valores calculados para LBCO levando em consideração a inomogeneidade nas equações de BdG, vemos que é necessário um grande variação de carga para provocar uma variação de temperatura, contudo ainda assim está muito longe do resultado experimental.

Nesta seção vimos que para obter os valores experimentais de  $T_c \times p$  em ambos os compostos foi necessário  $\Delta p$  maior que o verificado experimentalmente [60,62]. Entretanto para o LBCO mesmo com  $\Delta p$  maiores que o medido não foi possível obter  $T_c(p)$  em torno de  $p = 1/8$ . Por isso na próxima seção iremos adicionar o efeito da energia Coulomb, característico de sistemas granulares [63, 64], que para valores de  $\Delta p$  encontrados na literatura devemos encontrar  $T_c$  próximos aos experimentais.

## 6 ENERGIA COULOMB

Como vimos na seção anterior os valores de  $\Delta p$  usado nos cálculos de BdG são maiores que os encontrados na literatura e mesmo assim para o composto LBCO não foi possível encontrar  $T_c$  próximo as experimental. Então iremos introduzir o efeito da energia de Coulomb, pois como veremos  $T_c$  decai a medida que  $E_C$  cresce [65].

A existência da energia de Coulomb tem um profundo efeito no acoplamento superconductor entre os grãos e resulta do fato de que cada grão possui uma pequena capacitância, então para que um elétron seja transferido entre eles uma energia é requerida.

Para derivar um Hamiltoniano efetivo para um sistema granular, seguindo Anderson, primeiro examinamos a energia para uma única junção Josephson, incluindo a energia de carga de Coulomb e usando a relação de Josephson  $\dot{\Phi} = 2e\mathcal{V}/\hbar$ , temos:

$$H = \frac{1}{2}C\mathcal{V}^2 + V(\Phi) = \frac{\hbar^2}{8e^2}C\dot{\Phi}^2 + E_J(1 - \cos\Phi), \quad (6.1)$$

onde  $C$  é a capacitância da junção,  $\mathcal{V}$  é o potencial elétrico e  $V(\Phi)$  é a barreira de energia Josephson. Definindo momento canônico  $p$  como:

$$p = \frac{\hbar^2}{4e^2}C\dot{\Phi},$$

a equação 6.1 pode ser quantizada definindo:

$$[\Phi, p] = i\hbar,$$

ou equivalente a:

$$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\Phi}.$$

Definindo  $n \equiv p/\hbar$  podemos então reescrever a equação 6.1 na forma de operador:

$$H = -2Un^2 + E_J(1 - \cos\Phi), \quad (6.2)$$

onde  $U \equiv e^2/C$  é a energia de carga de um único elétron. O hamiltoniano da equação 6.2 descreve uma junção de Josephson quântica, onde  $n$  é visto como a variável conjugada a

fase, que mede o número de pares de Cooper que são transferidos através da junção.

A energia da carga, leva para o ponto zero flutuações de fase que tendem destruir a ordem supercondutora de longo alcance. Em contraste com a junção clássica, a junção quântica se comporta como um isolante. Assim, se não considerarmos a interação Coulombiana entre os grãos vizinhos, podemos estender a equação 6.2 em três dimensões:

$$H = -2U \sum_i n_i^2 + \sum_{ij} E_{ij} [1 - \cos(\Phi_i - \Phi_j)], \quad (6.3)$$

onde  $n_i = -i(\partial/\partial\Phi_i)$  é o operador que descreve o desvio no número médio dos pares de Cooper no  $i$ -ésimo grão e  $E_{ij} = E_J \Delta_{i,i\pm 1}$  consideramos apenas a ligação com os vizinhos mais próximos, visto que a ligação de longo alcance é efetivamente cortada pelo forte efeito da blindagem. Para a dependência na temperatura temos:

$$E_J = \frac{\pi \hbar \Delta(T)}{4e^2 R_n} \tanh \frac{\Delta(T)}{2k_B T},$$

onde  $R_n$  é a resistência da junção no estado normal e assumimos que os grãos individuais são largos o suficiente para sustentar uma amplitude supercondutora. A temperatura de transição que calculamos anteriormente  $T_c$ , é da ordem de  $ZE_J$  somente no limite clássico  $E_C \ll ZE_J$ , onde  $Z$  é o numero de primeiros vizinhos. Quando  $E_C$  passa a ser da ordem de  $E_J$  há uma diminuição da temperatura de transição devido ao efeito Coulomb e a temperatura resultante do sistema vamos chamar de  $T_c^C$  uma vez que a desigualdade acima não é mais satisfeita. Então quando  $ZE_J/(E_C) \rightarrow 1$ , o efeito Coulomb irá destruir o acoplamento Josephson fazendo com que  $T_c^C \rightarrow 0$  [63, 64, 66, 67].

Para calcular a temperatura de transição  $T_c^C$ , usamos aproximação de campo médio que substitui o segundo termo da equação 6.2 por  $-2ZE_J \langle \cos \Phi \rangle \sum_i \cos \Phi_i$  [68] para obter:

$$H_{MF} = 2U \sum_i n_i^2 - 2ZE_J \langle \cos \Phi \rangle \sum_i \cos \Phi_i, \quad (6.4)$$

onde  $Z$  é o número de primeiros vizinhos na matriz e  $\langle \cos \Phi \rangle$  é o parâmetro de ordem da matriz dado por:

$$\langle \cos \Phi \rangle = \frac{\sum_n e^{-E_n/k_B T_c^C} \langle \Psi_n | \cos \Phi | \Psi_n \rangle}{\sum_n e^{-E_n/k_B T_c^C}}, \quad (6.5)$$

onde  $\Psi_n$  e  $E_n$  são autofunções e autovalores da seguinte equação de Schrodinger:

$$\left[ 2U \frac{d^2}{d\Phi^2} + 2zE_J \langle \cos \Phi \rangle \cos \Phi \right] \Psi_n(\Phi) = -E_n \Psi_n(\Phi), \quad (6.6)$$

fazendo  $y = \Phi/2$  e os autovalores  $a_n = 2E_n/U$  e  $q = -2ZE_J \langle \cos \Phi \rangle /U$ , a equação 6.6 pode ser tratada como equação de Mathieu's:

$$d^2\Psi_n/dy^2 + [a_n - 2q \cos(2y)] \Psi_n = 0, \quad (6.7)$$

perto da temperatura de transição  $T_c^C$ ,  $q$  é um parâmetro pequeno, assim as autofunções e autovalores podem ser expandidos em série de  $q$ . Em termos dos parâmetros da equação 6.5,  $x \equiv U/2k_B T_c^C$  e  $\alpha \equiv ZE_J/U$ , a temperatura de transição global é determinada pela seguinte equação:

$$\alpha \frac{1 - 2 \sum_n e^{\frac{-xn^2}{4n^2-1}}}{1 + 2 \sum_n e^{-xn^2}} = 1, \quad (6.8)$$

onde  $n$  é um inteiro.  $T_c^C/T_c$  como uma função de  $\alpha$ , obtido numericamente a partir da equação (6.8) é mostrado na figura 31.

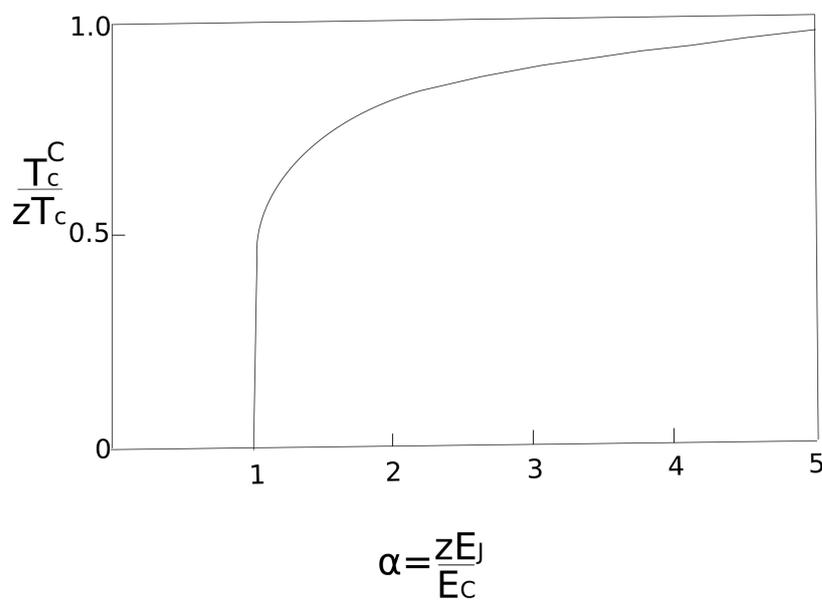


Figura 31:  $T_c^C/zT_c$  como uma função de  $\alpha = zE_J/E_C$  da equação 6.8. Note que se  $T_c^C/T_c \rightarrow 1$  com  $\alpha \rightarrow \infty$  e  $T_c^C/T_c \rightarrow 0$  com  $\alpha \rightarrow 1$ . Ver Imry e Strongin (1981). [69]

Podemos notar que o limite clássico,  $k_B T_c = ZE_J$  é obtido corretamente quando  $\alpha \rightarrow \infty$ . Logo, com o aumento de  $E_C$ ,  $T_c^C/T_c$  diminui para um valor  $\alpha$  finito e desaparece quando  $\alpha \rightarrow 1$ . Agora então desenvolveremos um modelo que calcule  $E_C$ , para que possamos obter o valor de  $T_c^C$ .

### 6.0.1 Cálculo de $E_C$

Para o cálculo da energia de Coulomb e de  $T_c^C$ , fizemos uma simples aproximação onde modelamos as listras de cargas como capacitores de placas paralelas para estimar a diferença de energia quando um carga está se movendo de uma região de baixa para uma de alta densidade. Deste modo adaptaremos o cálculo da energia de Coulomb, fazendo  $Z = 2$ . Utilizamos então a expressão já conhecida:

$$E_C = \frac{ed(q_1 - q_2)}{2\kappa\epsilon_0 A} \quad (6.9)$$

onde,  $e$  é a carga de um elétron,  $d$  distância entre as listras,  $\kappa$  é a constante dielétrica, para  $\epsilon_0$  que é a permissividade elétrica do vácuo, usamos  $\epsilon_0 = 8.8541 \times 10^{-12} \text{F/m}$ .  $q_1$  e  $q_2$  são as cargas das listras e  $A$  é área da listra.

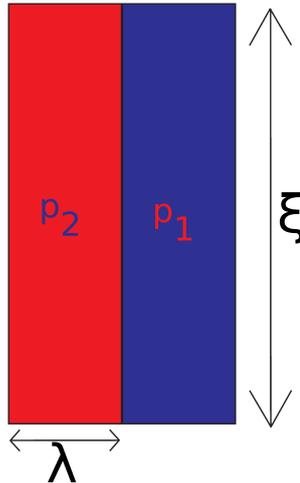


Figura 32: Esquema de listras supercondutoras como capacitores, onde  $\Delta p = p_2 - p_1$ .

Dimensões das listras para algumas dopagens:

<b>p</b>	$\xi(\text{\AA})$ <b>YBCO</b>	$\lambda(\text{\AA})$ <b>YBCO</b>	$\xi(\text{\AA})$ <b>LBCO</b>	$\lambda(\text{\AA})$ <b>LBCO</b>
<b>0.09</b>	11.3	60.4	18.8	34.7
<b>0.10</b>	11.4	66.0	18.3	48.4
<b>0.11</b>	11.7	61.0	17.3	71.9
<b>0.12</b>	11.9	63.0	17.3	140.6
<b>0.125</b>	12.2	63.0	16.4	180.0
<b>0.13</b>	12.4	64.0	16.7	135.9
<b>0.14</b>	12.3	67.5	16.1	92.2
<b>0.15</b>	12.4	69.0	15.7	79.7
<b>0.16</b>	12.7	72.0	15.1	79.6

Tabela 5: Tabela com as dimensões das listras de cargas formadas nos compostos YBCO e LBCO, a partir das figuras 20 e 21.

Com as dimensões das listras de acordo com resultados experimentais mencionados na tabela 5, podemos então calcular  $E_C$  para cada dopagem, como nosso interesse é calcular o efeito da energia de Coulomb em  $T_c$ , fazemos  $E_C/k_B$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Para demonstrar os cálculos vamos usar como exemplo a dopagem  $p = 0.125$  analisada nos compostos YBCO e LBCO.

- **Para YBCO:**

Primeiro vamos calcular a carga em cada listra, portanto fazemos a seguinte conta:

$$q = ne \quad (6.10)$$

onde  $n$  é o número de elétrons por listra definido como,  $n = pA/A_{cel}$ .

$A_{cel}$  é área da célula unitária no plano de CuO,  $A_{cel}=(3.88\text{\AA})^2$  e  $A = \lambda/2 \times \xi$ . Para  $\lambda$  e  $\xi$  vamos usar os valores da tabela 5.

<b>p</b>	$\lambda/2$ (Å)	$\xi$ (Å)	Área da listra (Å <sup>2</sup> )	n	q
0.125	6.1	63.0	384.3	3.0	$5.12 \times 10^{-19}C$

Tabela 6: Valores utilizados para calcular carga na listra com  $p = 0.125$  para YBCO.

Inicialmente as listras possuindo a mesma dopagem  $p = 0.125$  a quantidade de carga em cada uma será igual a calculada da tabela 6 e de acordo com a equação 6.9 temos que  $E_C$  será zero.

Todavia, nosso objetivo é verificar como o efeito Coulombiano afeta  $T_c$  para isso iremos aumentar sistematicamente de  $6.0 \times 10^{-5}$  o  $\Delta p$  entre as listras e consequentemente a diferença de cargas  $\Delta q$  aumentará, onde  $\Delta q = q_2 - q_1 = 10^{-24}C$ . Desta forma, para cada nova configuração de  $q_1$  e  $q_2$  calculamos a energia de Coulomb correspondente, ver tabela 7.

Para o composto YBCO o valor da constante dielétrica compatível com a temperatura crítica que estamos interessados é  $\kappa \sim 70$  [70]. Com o valor calculado de  $E_C$  podemos determinar a razão  $\alpha = E_J/E_C$  onde  $E_J = k_B T_c$  foi o calculado para sistema quase homogêneo, assim com o valor de  $\alpha$  podemos através da figura 31 obter a razão  $T_c^C/T_c$ .

Encontramos na tabela 7 alguns valores calculados de  $E_C$  e seus respectivos  $\Delta p$ . Para  $\Delta p = 3.73 \times 10^{-3}$ , valor próximo ao encontrado na literatura [60], calculamos  $E_C/k_B = 45.33K$ . Com  $T_c = E_J/k_B = 86K$ , podemos então obter a razão  $\alpha = 1.89$  e com suporte do gráfico da figura 31 temos que para esse valor de  $\alpha$ , a razão  $T_c^C/T_c=0.78$ . Assim obtemos  $T_c^C = 67.0K$  que é mais próximo do valor observado

de 66K por Hucker *et al.* [29], que o valor de  $T_c = 69K$  encontrado pelo cálculo de BdG nas listras sem levar em conta o efeito Coulomb.

<b>0.125</b>				
$\Delta q$	$\Delta p$	$E_C/k_B$ (K)	$\alpha = E_J/E_C$	$T_c^C$ (K)
$9.00 \times 10^{-23}$	$2.20 \times 10^{-5}$	0.27	321.50	86.0
$9.30 \times 10^{-22}$	$2.27 \times 10^{-4}$	2.76	31.11	86.0
$4.97 \times 10^{-21}$	$1.21 \times 10^{-3}$	14.77	5.82	86.0
$6.97 \times 10^{-21}$	$1.70 \times 10^{-3}$	20.72	4.15	79.9
$9.50 \times 10^{-21}$	$2.32 \times 10^{-3}$	28.25	3.04	77.4
$1.24 \times 10^{-20}$	$3.04 \times 10^{-3}$	36.94	2.32	72.2
$1.52 \times 10^{-20}$	$3.73 \times 10^{-3}$	45.33	1.89	67.0

Tabela 7: Tabela para composto YBCO com alguns valores de  $\Delta p$  a partir do qual calculamos  $E_C$  para cada configuração. Vemos que para  $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $T_c^C$  converge para  $T_c$  e que para  $\alpha \rightarrow 1$   $T_c^C$  vai a zero.

- **Para LBCO:**

Como feito para o YBCO vamos calcular a quantidade de carga na listra para  $p = 0.125$ , entretanto  $A_{cel} = (3.78 \text{ \AA})^2$  e  $A = \lambda/2 \times \xi$ . Usamos os valores de  $\lambda$  e  $\xi$  já mencionados na tabela 5.

<b>p</b>	$\lambda/2$ (Å)	$\xi$ (Å)	Área da listra (Å <sup>2</sup> )	n	q
0.125	8.2	180.0	1476.0	13.0	$20.6 \times 10^{-19} \text{C}$

Tabela 8: Valores utilizados para calcular cargas na listra com  $p = 0.125$  para LBCO

Utilizando os mesmo valores de  $\Delta q$  e  $\Delta p$  do exemplo acima, realizamos o mesmo cálculo para  $E_C$ , a diferença é que para LBCO o valor da constante dielétrica de acordo com a temperatura é  $\kappa \sim 400$  [71] e para o cálculo de  $\alpha$  utilizamos  $E_J$  calculado para o sistema quase homogêneo,  $T_c = E_J/k_B = 38.5K$ .

Com o valor de  $\Delta p$  na mesma ordem de grandeza que o experimental [62], obtemos  $E_C/k_B = 37.60K$  resultando em  $\alpha = 1.03$ . Para esse valor de  $\alpha$ , temos  $T_c^C/T_c = 0.08$ .

Encontramos  $T_c^C = 3.08K$  que é próximo ao observado experimentalmente de  $2.80K$  [29] e corrige o valor de  $26.7K$  obtido através do cálculo de BdG visto na seção anterior.

	<b>0.125</b>			
$\Delta q$	$\Delta p$	$E_C/k_B$ (K)	$\alpha = E_J/E_C$	$T_c^C$ (K)
$3.90 \times 10^{-20}$	$2.36 \times 10^{-4}$	0.71	54.15	38.5
$1.57 \times 10^{-20}$	$9.51 \times 10^{-4}$	2.86	13.43	38.5
$3.94 \times 10^{-20}$	$2.38 \times 10^{-3}$	7.17	5.37	38.5
$7.87 \times 10^{-20}$	$4.75 \times 10^{-3}$	14.32	2.68	33.1
$9.45 \times 10^{-20}$	$5.71 \times 10^{-3}$	17.21	2.24	31.1
$1.25 \times 10^{-19}$	$7.89 \times 10^{-3}$	22.87	1.68	29.2
$2.06 \times 10^{-19}$	$1.24 \times 10^{-2}$	37.60	1.03	3.08
$2.11 \times 10^{-19}$	$1.28 \times 10^{-2}$	38.40	1.001	0.05

Tabela 9: Tabela para composto LBCO com alguns valores de  $\Delta p$  a partir do qual calculamos  $E_C$  para cada configuração. Vemos que para  $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $T_c^C$  converge para  $T_c$  e que para  $\alpha \rightarrow 1$   $T_c^C$  vai a zero.

Realizando o mesmo procedimento para algumas dopagens na região *underdoped* de YBCO e LBCO construímos a tabela 10, onde podemos comparar os valores calculados de  $T_c$  somente com a teoria de BdG e  $T_c^C$  obtida quando o efeito de Coulomb é levando em conta. Listamos também  $\Delta p$  utilizada nos cálculos de  $E_C$  e comparamos com os dois valores experimentais, em azul, observados por Kharkov *et. al.*  $\Delta p = 3.50 \times 10^{-3}$  [60] para YBCO e por Abbamonte *et. al.*  $\Delta p = 63.0 \times 10^{-3}$  [62].

Para YBCO com  $p = 0.11$  o valor utilizado de  $\Delta p$  é bem próximo ao experimental. Para LBCO em  $p = 0.125$  embora seja da mesma ordem de grandeza, o valor experimental é maior. o que atesta nosso modelo proposto de listras com diferentes densidades de cargas.

<b>YBCO</b>	<b>0.09</b>	<b>0.10</b>	<b>0.11</b>	<b>0.12</b>	<b>0.125</b>	<b>0.13</b>	<b>0.14</b>	<b>0.15</b>	<b>0.16</b>
$E_C$ (K)	12.50	28.11	32.41	42.44	45.33	36.37	24.25	20.18	19.90
$\alpha$	4.58	2.33	2.29	1.95	1.89	2.40	3.72	4.57	4.68
$T_c$ (K)	57.3	65.6	74.4	83.0	86.0	87.5	90.2	92.3	93.2
$T_c^C$ (K)	<b>53.3</b>	<b>55.1</b>	<b>61.7</b>	<b>65.6</b>	<b>67.0</b>	<b>73.5</b>	<b>82.9</b>	<b>89.5</b>	<b>93.2</b>
$\Delta p \times 10^{-3}$	1.11	2.46	2.75   <b>3.50</b>	3.56	3.73	2.93	1.98	1.63	1.57
<b>LBCO</b>									
$E_C$ (K)	7.03	14.92	35.36	36.63	37.60	35.40	31.90	11.10	5.89
$\alpha$	4.75	2.55	1.14	1.06	1.03	1.05	1.10	2.82	4.68
$T_c$ (K)	33.4	38.1	40.4	38.9	38.5	37.4	35.1	31.4	27.6
$T_c^C$ (K)	<b>32.0</b>	<b>32.8</b>	<b>21.8</b>	<b>5.8</b>	<b>3.08</b>	<b>5.2</b>	<b>19.6</b>	<b>27.9</b>	<b>27.6</b>
$\Delta p \times 10^{-3}$	2.03	4.44	11.1	11.5	12.4   <b>63.0</b>	11.5	10.7	3.86	2.12

Tabela 10: Tabela contendo os valores calculados de  $E_C$  para algumas dopagens. Podemos ver que próximo a região  $p = 1/8$  há uma maior diferença de dopagem.

Os resultados de  $T_c^C \times p$  (corrigidos pela introdução da energia de Coulomb) estão todos listados na tabela 10 e figura 33, onde os pontos são valores experimentais retirados da referência [29, 61] e [72], para YBCO e LBCO respectivamente. Vemos que em torno da região de  $p = 1/8$  ocorre a maior queda de  $T_c^C \times p$  e também existe a maior diferença de dopagem  $\Delta p$ , que é visto na figura ?? onde o efeito do ordenamento de carga é maior em torno de  $p = 1/8$ .

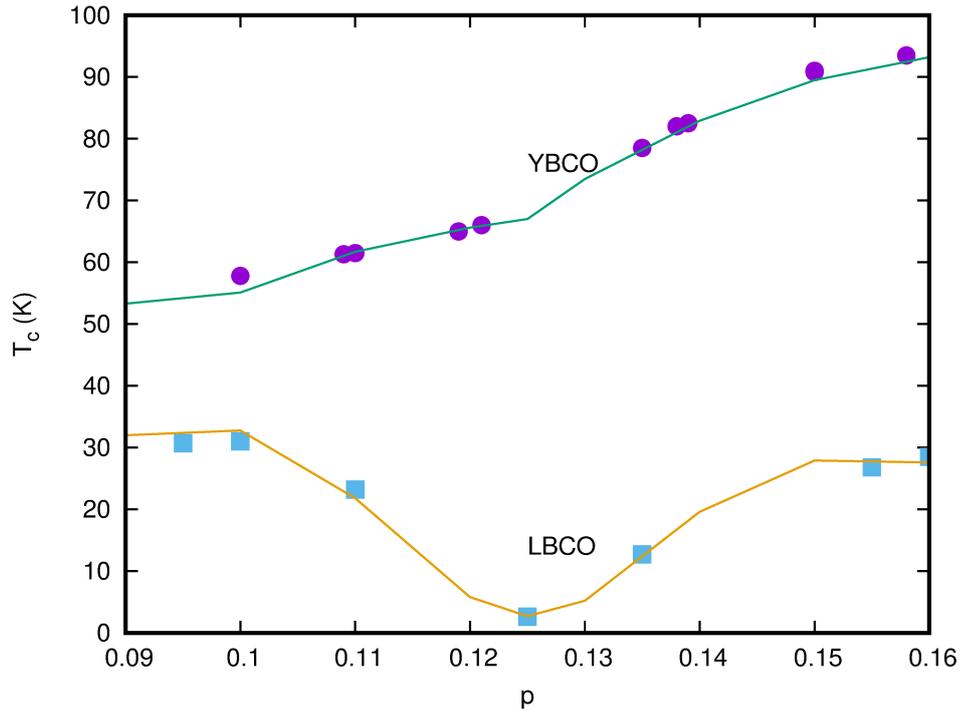


Figura 33: Valor calculado da temperatura de transição supercondutora em função da dopagem levando em conta a energia de Coulomb. Onde os pontos são valores experimentais e as linhas nossos cálculos.

Nesta seção introduzimos o efeito Coulomb através de um modelo de capacitor e demonstramos que a inclusão desse efeito provoca a queda de  $T_c^C \times p$  obtendo valores próximos aos experimentais, verificamos também que em torno de  $p = 1/8$  a diferença de dopagem é maior o que é confirmado pelo diagrama de fase [5], demonstrando que a diferença de dopagem entre as listras tem papel importante no cálculo de  $T_c$ . Com essa correção obtivemos resultados de  $T_c^C \times p$  próximos aos experimentais com valores de  $\Delta p$  compatíveis com os poucos resultados disponíveis.

## 7 CONCLUSÃO

Nesta dissertação tratamos as famílias de supercondutores de alta  $T_c$  a base de Ítrio e Lantânio que possuem instabilidade nas cargas formando regiões de altas e baixas densidades, conhecidas como listras. Devido a inomogeneidade das listras de cargas calculamos as amplitudes supercondutoras que nessas regiões se desenvolvem localmente, através das equações de BdG. Assumimos que as listras são reproduzidas por um potencial de separação de carga que causa uma barreira entre elas. Portanto são conectadas pelo acoplamento Josephson e a transição supercondutora ocorre em duas etapas, primeiro localmente e então em todo sistema através da coerência de fase a uma temperatura mais baixa. Esse modelo mostra que  $T_c$  efetivamente diminuiu com o aumento da desordem ou variação de dopagem nas listras, mas não conseguiu obter os resultados de  $T_c \times p$  para as diferenças de dopagem  $\Delta p$  encontradas na literatura. Por isso introduzimos o efeito da energia Coulomb nos portadores de carga modelando as listras através de capacitores de placas paralelas. Concluímos que esses sistemas funcionam como supercondutores granulares e devido as diferenças locais de cargas o efeito da energia de Coulomb é bastante significativa causando a supressão em  $T_c(p)$  observada experimentalmente.

## REFERÊNCIAS

- [1] S. Pereira and M. G. Félix, “100 anos de supercondutividade e a teoria de Ginzburg-Landau,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*.
- [2] J. G. Bednorz and K. A. Müller, “Possible high- $T_c$  superconductivity in the  $Ba-La-Cu-O$  system,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 64, pp. 189–193, Jun 1986.
- [3] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, “Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase  $Y-Ba-Cu-O$  compound system at ambient pressure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, pp. 908–910, Mar 1987.
- [4] A. Leggett, “Quantum liquids bose condensation and cooper pairing in condensed-matter systems,” 2006.
- [5] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, “From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides,” *Nature*, vol. 518, no. 7538, p. 179, 2015.
- [6] T. Timusk and B. Statt, “The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 62, no. 1, p. 61, 1999.
- [7] G. Deutscher, “New superconductors: From granular to high  $T_c$ ,” 2006.
- [8] S. Hufner, M. A. Hossain, A. Damascelli, and G. A. Sawatzky, “Two gaps make a high-temperature superconductor?,” vol. 71, p. 062501, may 2008.
- [9] A. Kanigel, U. Chatterjee, M. Randeria, M. R. Norman, G. Koren, K. Kadowaki, and J. C. Campuzano, “Evidence for pairing above the transition temperature of cuprate superconductors from the electronic dispersion in the pseudogap phase,” *Phys. Rev. Lett.*
- [10] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, and S. Uchida, “Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors,” *Nature*, vol. 375, 1995.
- [11] E. S. Bozin, G. H. Kwei, H. Takagi, and S. J. L. Billinge, “Neutron diffraction evidence of microscopic charge inhomogeneities in the  $CuO_2$  plane of superconducting  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  ( $0 \leq x \leq 0.30$ ),” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, pp. 5856–5859, Jun 2000.
- [12] C. Howald, P. Fournier, and A. Kapitulnik, “Inherent inhomogeneities in tunneling spectra of  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8-x}$  crystals in the superconducting state,” *Phys. Rev. B*, vol. 64, p. 100504, Aug 2001.
- [13] M. Franz, C. Kallin, and A. J. Berlinsky, “Impurity scattering and localization in  $d$ -wave superconductors,” *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. R6897–R6900, 1996.

- [14] A. Bianconi, N. L. Saini, A. Lanzara, M. Missori, T. Rossetti, H. Oyanagi, H. Yamaguchi, K. Oka, and T. Ito, “Determination of the local lattice distortions in the  $\text{CuO}_2$  plane of  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, pp. 3412–3415, Apr 1996.
- [15] A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, “Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 75, pp. 473–541, Apr 2003.
- [16] K. K. Gomes, A. N. Pasupathy, A. Pushp, S. Ono, Y. Ando, and A. Yazdani, “Visualizing pair formation on the atomic scale in the high- $T_c$  superconductor  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Nature*, vol. 447, no. 7144, p. 569, 2007.
- [17] W. Guyard, A. Sacuto, M. Cazayous, Y. Gallais, M. Le Tacon, D. Colson, and A. Forget, “Temperature dependence of the gap size near the brillouin-zone nodes of  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  superconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 097003, Aug 2008.
- [18] K. McElroy, D.-H. Lee, J. E. Hoffman, K. M. Lang, J. Lee, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, “Coincidence of checkerboard charge order and antinodal state decoherence in strongly underdoped superconducting  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 197005, May 2005.
- [19] R. Ofer and A. Keren, “Nutation versus angular-dependent nqr spectroscopy and impact of underdoping on charge inhomogeneities in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ ,” *Phys. Rev. B*, vol. 80.
- [20] A. Pushp, C. V. Parker, A. N. Pasupathy, K. K. Gomes, S. Ono, J. Wen, Z. Xu, G. Gu, and A. Yazdani, “Extending universal nodal excitations optimizes superconductivity in  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” vol. 324, no. 5935, pp. 1689–1693, 2009.
- [21] P. M. Singer, A. W. Hunt, and T. Imai, “ $^{63}\text{Cu}$  NQR evidence for spatial variation of hole concentration in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, p. 047602, Jan 2002.
- [22] J. E. Sonier, M. Ilton, V. Pacradouni, C. V. Kaiser, S. A. Sabok-Sayr, Y. Ando, S. Komiya, W. N. Hardy, D. A. Bonn, R. Liang, and W. A. Atkinson, “Inhomogeneous magnetic-field response of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  and  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  persisting above the bulk superconducting transition temperature,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101.
- [23] A. Kanigel, U. Chatterjee, M. Randeria, M. R. Norman, S. Souma, M. Shi, Z. Z. Li, H. Raffy, and J. C. Campuzano, “Protected nodes and the collapse of fermi arcs in high- $T_c$  cuprate superconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, 2007.
- [24] M. Hamidian, S. D. Edkins, C. K. Kim, J. C. Davis, A. Mackenzie, H. Eisaki, S. Uchida, M. Lawler, E.-A. Kim, S. Sachdev, *et al.*, “Atomic-scale electronic structure of the cuprate  $d - \text{symmetry}$  form factor density wave state,” *Nature Physics*, vol. 12, no. 2, p. 150, 2016.
- [25] S. H. Pan, J. O’neal, R. Badzey, C. Chamon, H. Ding, J. Engelbrecht, Z. Wang, H. Eisaki, S. Uchida, A. Gupta, *et al.*, “Microscopic electronic inhomogeneity in the high- $t_c$  superconductor  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ ,” *Nature*, vol. 413, no. 6853, p. 282, 2001.
- [26] M. Fujita, H. Goka, K. Yamada, J. M. Tranquada, and L. P. Regnault, “Stripe order, depinning, and fluctuations in  $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.125}\text{CuO}_4$  and  $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.075}\text{Sr}_{0.050}\text{CuO}_4$ ,” *Phys. Rev. B*, vol. 70, p. 104517, Sep 2004.

- [27] J. Chang, E. Blackburn, A. Holmes, N. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, R. Liang, D. Bonn, W. Hardy, A. Watenphul, *et al.*, “Direct observation of competition between superconductivity and charge density wave order in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ ,” *Nature Physics*, vol. 8, no. 12, p. 871, 2012.
- [28] V. Thampy, X. M. Chen, Y. Cao, C. Mazzoli, A. Barbour, W. Hu, H. Miao, G. Fabbris, R. D. Zhong, G. D. Gu, J. Tranquada, I. K. Robinson, S. Wilkins, and M. Dean, “Static charge-density-wave order in the superconducting state of  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ ,” *Physical Review B*, vol. 95, 2017.
- [29] M. Hücker, N. B. Christensen, A. T. Holmes, E. Blackburn, E. M. Forgan, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, O. Gutowski, M. v. Zimmermann, S. M. Hayden, and J. Chang, “Competing charge, spin, and superconducting orders in underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ ,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 054514, Aug 2014.
- [30] S. Badoux, S. A. A. Afshar, B. Michon, A. Ouellet, S. Fortier, D. LeBoeuf, T. P. Croft, C. Lester, S. M. Hayden, H. Takagi, K. Yamada, D. Graf, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, “Critical doping for the onset of fermi-surface reconstruction by charge-density-wave order in the cuprate superconductor  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ,” *Phys. Rev. X*, vol. 6, p. 021004, Apr 2016.
- [31] R. Comin, R. Sutarto, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, F. He, G. A. Sawatzky, and A. Damascelli, “Broken translational and rotational symmetry via charge stripe order in underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ ,” *Science*, vol. 347, no. 6228, pp. 1335–1339, 2015.
- [32] R. Comin and A. Damascelli, “Resonant x-ray scattering studies of charge order in cuprates,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 7, no. 1, pp. 369–405, 2016.
- [33] E. Fradkin, S. A. Kivelson, and J. M. Tranquada, “Colloquium: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 87, 2015.
- [34] T. Yoshida, M. Hashimoto, I. M. Vishik, Z.-X. Shen, and A. Fujimori, “Pseudogap, superconducting gap, and fermi arc in high-Tc cuprates revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 81, no. 1, p. 011006, 2012.
- [35] M. Hashimoto, T. Yoshida, K. Tanaka, A. Fujimori, M. Okusawa, S. Wakimoto, K. Yamada, T. Kakeshita, H. Eisaki, and S. Uchida, “Distinct doping dependences of the pseudogap and superconducting gap of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  cuprate superconductors,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 140503, Apr 2007.
- [36] J. Alldredge, J. Lee, K. McElroy, M. Wang, K. Fujita, Y. Kohsaka, C. Taylor, H. Eisaki, S. Uchida, P. Hirschfeld, *et al.*, “Evolution of the electronic excitation spectrum with strongly diminishing hole density in superconducting  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Nature Physics*, vol. 4, no. 4, p. 319, 2008.
- [37] M. C. Schabel, C.-H. Park, A. Matsuura, Z.-X. Shen, D. A. Bonn, R. Liang, and W. N. Hardy, “Angle-resolved photoemission on untwinned  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ . i. electronic structure and dispersion relations of surface and bulk bands,” *Phys. Rev. B*, vol. 57, pp. 6090–6106, Mar 1998.

- [38] E. V. L. de Mello and J. E. Sonier, “Superconducting correlations induced by charge ordering in cuprate superconductors and fermi-arc formation,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, 2017.
- [39] J. Corson, R. Mallozzi, J. Orenstein, J. Eckstein, and I. Bozovic, “Vanishing of phase coherence in underdoped  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Nature*, vol. 398, no. 6724, p. 221, 1999.
- [40] Z. Xu, N. Ong, Y. Wang, T. Kakeshita, and S. Uchida, “Vortex-like excitations and the onset of superconducting phase fluctuation in underdoped  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ,” *Nature*, vol. 406, no. 6795, p. 486, 2000.
- [41] H.-B. Yang, J. Rameau, P. Johnson, T. Valla, A. Tsvelik, and G. Gu, “Emergence of preformed cooper pairs from the doped mott insulating state in  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Nature*, vol. 456, no. 7218, p. 77, 2008.
- [42] A. Dubroka, M. Rossle, K. W. Kim, V. K. Malik, D. Munzar, D. N. Basov, A. A. Schafgans, S. J. Moon, C. T. Lin, D. Haug, V. Hinkov, B. Keimer, T. Wolf, J. G. Storey, J. L. Tallon, and C. Bernhard, “Evidence of a precursor superconducting phase at temperatures as high as 180 K in  $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  (R=Y,Gd,Eu) superconducting crystals from infrared spectroscopy,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 047006, Jan 2011.
- [43] L. Li, Y. Wang, M. J. Naughton, S. Ono, Y. Ando, and N. P. Ong, “Strongly nonlinear magnetization above  $T_c$  in  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Europhysics Letters (EPL)*, vol. 72, pp. 451–457, nov 2005.
- [44] Y. Wang, L. Li, M. J. Naughton, G. D. Gu, S. Uchida, and N. P. Ong, “Field-enhanced diamagnetism in the pseudogap state of the cuprate  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 247002, Dec 2005.
- [45] J. L. González and E. V. L. d. Mello, “Theory of the diamagnetism above the critical temperature for cuprates,” *Phys. Rev. B*, vol. 69, p. 134510, Apr 2004.
- [46] L. Li, Y. Wang, S. Komiyama, S. Ono, Y. Ando, G. Gu, and N. Ong, “Diamagnetism and cooper pairing above  $T_c$  in cuprates,” *Physical Review B*, vol. 81, no. 5, p. 054510, 2010.
- [47] D. Podolsky, S. Raghu, and A. Vishwanath, “Nernst effect and diamagnetism in phase fluctuating superconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 117004, Sep 2007.
- [48] Y. Wang, L. Li, and N. P. Ong, “Nernst effect in high- $T_c$  superconductors,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 024510, Jan 2006.
- [49] L. Bilbro, R. V. Aguilar, G. Logvenov, O. Pelleg, I. Bozovic, and N. Armitage, “Temporal correlations of superconductivity above the transition temperature in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  probed by terahertz spectroscopy,” *Nature Physics*, vol. 7, no. 4, p. 298, 2011.
- [50] M. S. Grbic, M. Pozek, and Paar, “Temperature range of superconducting fluctuations above  $T_c$  in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  single crystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 83, p. 144508, Apr 2011.
- [51] V. Emery and S. Kivelson, “Importance of phase fluctuations in superconductors with small superfluid density,” *Nature*, vol. 374, no. 6521, pp. 434–437, 1995.

- [52] K. Lang, V. Madhavan, J. Hoffman, E. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, and J. Davis, “Imaging the granular structure of high- $T_c$  superconductivity in underdoped  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ,” *Nature*, vol. 415, no. 6870, p. 412, 2002.
- [53] E. Simánek *et al.*, *Inhomogeneous Superconductors: Granular and Quantum Effects*. Oxford University Press on Demand, 1994.
- [54] V. Ambegaokar and A. Baratoff, “Tunneling between superconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, pp. 486–489, Jun 1963.
- [55] E. V. L. de Mello and J. E. Sonier, “Charge segregation model for superconducting correlations in cuprates above  $T_c$ ,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 26, no. 49, p. 492201, 2014.
- [56] L. Merchant, J. Ostrick, R. P. Barber, and R. C. Dynes, “Crossover from phase fluctuation to amplitude-dominated superconductivity: A model system,” *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 134508, Mar 2001.
- [57] K. Segawa and Y. Ando, “Transport anomalies and the role of pseudogap in the  $60 - K$  phase of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, pp. 4907–4910, May 2001.
- [58] Y. Ando, S. Komiya, K. Segawa, S. Ono, and Y. Kurita, “Electronic phase diagram of high- $T_c$  cuprate superconductors from a mapping of the in-plane resistivity curvature,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 267001, Dec 2004.
- [59] S. Vig, A. Kogar, V. Mishra, L. Venema, M. S. Rak, A. A. Husain, P. D. Johnson, G. D. Gu, E. Fradkin, M. R. Norman, *et al.*, “Fluctuating charge order in the optimally doped high temperature superconductor  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ ,” 2016.
- [60] Y. A. Kharkov and O. P. Sushkov, “The amplitudes and the structure of the charge density wave in YBCO,” *Scientific reports*, vol. 6, p. 34551, 2016.
- [61] O. Cyr-Choinière, D. LeBoeuf, S. Badoux, S. Dufour-Beauséjour, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, D. Graf, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, “Sensitivity of  $T_c$  to pressure and magnetic field in the cuprate superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ : Evidence of charge-order suppression by pressure,” *Phys. Rev. B*, vol. 98, p. 064513, Aug 2018.
- [62] P. Abbamonte, A. Rusydi, S. Smadici, G. D. Gu, G. Sawatzky, and D. L. Feng, “Spatially modulated “mottness” in  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ ,” 11 2005.
- [63] P. ANDERSON, “Special effects in superconductivity,” pp. 113 – 135, 1964.
- [64] B. Abeles, “Effect of charging energy on superconductivity in granular metal films,” *Phys. Rev. B*, vol. 15, pp. 2828–2829, 1977.
- [65] J. B. Ketterson and S. N. Song, “Superconductivity,” 1999.
- [66] W. L. McLean and M. J. Stephen, “Stability of superconductivity in granular metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 19, pp. 5925–5927, Jun 1979.
- [67] A. Kawabata, “Effects of tunneling on the properties of metallic fine particles,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 43, no. 5, pp. 1491–1496, 1977.

- [68] E. Šimánek, “Effect of charging energy on transition temperature of granular superconductors,” *Solid State Communications*, vol. 31, no. 6, pp. 419 – 421, 1979.
- [69] Y. Imry and M. Strongin, “Destruction of superconductivity in granular and highly disordered metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 24, pp. 6353–6360, Dec 1981.
- [70] L. R. Testardi, W. G. Moulton, H. Mathias, H. K. Ng, and C. M. Rey, “Large static dielectric constant in the high-temperature phase of polycrystalline  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ ,” *Phys. Rev. B*, vol. 37, pp. 2324–2325, Feb 1988.
- [71] B. Park, B. Kang, S. Bu, T. Noh, J. Lee, and W. Jo, “Lanthanum-substituted bismuth titanate for use in non-volatile memories,” *Nature*, vol. 401, no. 6754, p. 682, 1999.
- [72] M. Hücker, M. v. Zimmermann, G. D. Gu, Z. J. Xu, J. S. Wen, G. Xu, H. J. Kang, A. Zheludev, and J. M. Tranquada, “Stripe order in superconducting  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  ( $0.095 \leq x \leq 0.155$ ),” *Phys. Rev. B*, vol. 83, p. 104506, Mar 2011.