

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

SUPERCONDUTIVIDADE *BCS* NA REDE TABULEIRO DE XADREZ¹

Edgar Gonzaga Souza dos Santos

Dissertação realizada sob a orientação do
Prof. Miguel A. C. Gusmão e apresentada ao
Instituto de Física da UFRGS em preenchi-
mento parcial dos requisitos para a obtenção
do título de Mestre em Física.

Porto Alegre

2008

¹Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Este trabalho é dedicado

à minha mãe, Marli,
e ao meu avô, Basílio.

Agradecimentos

★ Ao Prof. Miguel A. C. Gusmão, pela orientação.

★ Ao meu amigo Luciano Martins, pelas dicas computacionais.

★ À minha família, pelo incentivo.

★ Aos professores e funcionários do IF-UFRGS, que de alguma forma contribuíram para a minha formação e para a realização deste trabalho.

Muito Obrigado

Resumo

Tendo por motivação as propriedades supercondutoras do óxido metálico $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, cuja estrutura cristalina é do tipo pirocloro, propomos um modelo eletrônico em uma rede do tipo *tabuleiro de xadrez*, que pode ser vista como um análogo bidimensional da rede piroclórica. Incluindo somente graus de liberdade de carga, tratamos o modelo através de uma aproximação BCS, realizando o desacoplamento dos termos de interação no espaço real. A passagem ao espaço recíproco dá origem a um modelo BCS de duas bandas acopladas, sendo uma delas não dispersiva. Nosso estudo da fase supercondutora se baseia na minimização numérica da energia livre. Propriedades características, como o quociente entre o parâmetro de ordem e a temperatura crítica ou o salto do calor específico na transição de fase, são obtidas e comparadas com os valores universais previstos pela teoria BCS para um sistema de uma única banda no limite de acoplamento fraco. Também discutimos as propriedades de simetria do *gap* supercondutor no espaço de vetores de onda.

Abstract

Motivated by the superconducting properties of the metallic oxide $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, whose crystal structure is of the pyrochlore type, we propose an electronic model on a *checkerboard lattice*, which can be viewed as a two-dimensional analog of the pyrochlore lattice. Including only charge degrees of freedom, we treat the model via a BCS approximation, decoupling the interaction terms in real space. Going over to reciprocal space yields a BCS model with two coupled bands, one of them being non-dispersive. Our study of the superconducting phase is based on numerical minimization of the free energy. Characteristic properties, like the ratio between order parameter and critical temperature or the specific-heat jump at the phase transition, are obtained and compared with universal values predicted by the BCS theory for a single-band system in the weak-coupling limit. We also discuss the symmetry properties of the superconducting gap in wave-vector space.

Sumário

Sumário	V
Lista de Figuras	VII
1 Introdução	2
2 Modelo	9
2.1 O hamiltoniano	9
2.2 Estrutura de bandas na ausência de interação	13
2.3 Termos de interação	17
2.3.1 Desacoplamento BCS	18
2.4 Hamiltoniano BCS de duas bandas acopladas	20
2.5 Diagonalização do hamiltoniano	24
2.6 Autoconsistência através da energia livre	26
3 Resultados e discussão	28
3.1 Transição supercondutora	31

SUMÁRIO	VI
3.2 Gap em função da temperatura	31
3.3 Calor específico	35
3.4 Simetria do gap no espaço- \mathbf{k}	36
3.5 Acoplamento restrito	41
4 Conclusões	44
A Revisão BCS: sistema de uma banda	47
A.1 Aproximação de campo médio	48
A.2 Diagonalização	50
A.3 A condição de autoconsistência para temperatura finita	52
Bibliografia	55

Lista de Figuras

1.1	Estrutura do $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, incluindo os octaedros $\text{Re}(\text{O}1)_6$. O cádmio e os outros oxigênios ($\text{O}2$) são representados por esferas escuras e claras, respectivamente. [4]	3
1.2	Rede tetraédrica de íons Re na estrutura piroclórica. [11]	3
1.3	Resistividade elétrica d.c. em função da temperatura, medida em um monocristal de $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$. O <i>inset</i> é uma ampliação abaixo de 1.2 K mostrando uma transição supercondutora em $T_c \approx 1$ K. [4] . .	5
1.4	Calor específico eletrônico de um monocristal de $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, mostrando a transição supercondutora em 0.97 K. A linha pontilhada abaixo de 0.5 K é um ajuste com base na teoria BCS de uma banda. [4]	6
1.5	A rede tabuleiro de xadrez. As “casas pretas” podem ser vistas como tetraedros achatados, como mostrado esquematicamente à direita. Essa estrutura reproduz localmente a conectividade dos átomos de tipo B na estrutura piroclórica (tridimensional) $A_2B_2O_7$	7

- 2.1 A estrutura do sistema no modelo. A e B representam átomos idênticos associados ao mesmo sítio da rede quadrada; \mathbf{a} e \mathbf{b} são vetores primitivos dessa rede; t_1, V_1 e J_1 representam, respectivamente, os valores assumidos pelo *hopping*, interação coulombiana direta e interação coulombiana de troca ao longo dos lados dos quadrados menores (“casas do tabuleiro”), enquanto t_2, V_2 e J_2 representam os valores dessas quantidades ao longo das diagonais de quadrados alternados. 11
- 2.2 Esquerda: estrutura de bandas de energia na ausência de interação, com a superfície inferior representando a banda dispersiva, b , e o plano superior representando a banda não dispersiva, a . Direita: densidade de estados correspondente. 15
- 3.1 Energia livre em função dos parâmetros de *gap* para $T \rightarrow 0$, $n = 1.0$ e $V = 0.6$. No plano $\Delta_1\Delta_2$, são mostrados alguns dos contornos da energia livre, sendo os mais internos correspondentes a valores menores de energia. 29
- 3.2 Evolução do mínimo da energia livre no espaço dos parâmetros de *gap*, para $n = 1.0$ e $V = 0.6$ e temperaturas próximas à transição supercondutora. 30
- 3.3 Parâmetros de *gap* em função da temperatura para $V = 0.6$ e $n = 1.0$. 32
- 3.4 Parâmetros de *gap* em função da temperatura para $V = 0.6$ e $n = 1.2$ 33

3.5	Calor específico, c_e , em função da temperatura, T , para $V = 0.6$, nos casos $n = 1.0$ (em cima) e $n = 1.2$ (embaixo).	37
3.6	$E_1(\mathbf{k})$ na primeira zona de Brillouin, mostrando a simetria do <i>gap</i> de energias no espaço \mathbf{k} , para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e $T \rightarrow 0$	38
3.7	$E_1(\mathbf{k})$ na primeira zona de Brillouin, mostrando a simetria do <i>gap</i> de energias no espaço \mathbf{k} para $V = 0.6$, $n = 1.2$ e $T \rightarrow 0$	39
3.8	Modulação do <i>gap</i> de energias ao longo de um dos lados da linha de Fermi no espaço \mathbf{k} , para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e $T \rightarrow 0$	40
3.9	Modulação do <i>gap</i> de energias ao longo de um dos “lados” da linha de Fermi no espaço \mathbf{k} , para $V = 0.6$, $n = 1.2$ e $T \rightarrow 0$	41
3.10	Parâmetros de <i>gap</i> em função da temperatura para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e acoplamento restrito a uma faixa de energias igual a $1/4$ da largura de banda.	42
3.11	Calor específico, c_e , em função da temperatura, T , para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e acoplamento restrito a uma faixa de energias igual a $1/4$ da largura de banda.	43
3.12	Simetria do <i>gap</i> de energias no espaço \mathbf{k} com $V = 0.6$, $n = 1.0$, $T \rightarrow 0$ e acoplamento restrito a uma faixa de energias igual a $1/4$ da largura de banda.	43

Capítulo 1

Introdução

A motivação experimental deste trabalho vem das propriedades supercondutoras do óxido metálico $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$. Esse composto, extensivamente estudado a partir do início desta década [1–9], apresenta uma estrutura cristalina do tipo pirocloro, mostrada na Fig. 1.1. A física do $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ é dominada pelos íons de rênio, pois os demais íons apresentam camadas fechadas. Os íons Re colocam-se nos vértices de um arranjo tridimensional (3D) de tetraedros conectados pelo compartilhamento de vértices, como mostra a Fig. 1.2, ocupando as posições B na estrutura piroclórica genérica $A_2B_2O_7$.

A rede piroclórica 3D faz parte de uma classe de redes conhecidas como *redes geometricamente frustradas* [10–13]. A frustração geométrica desempenha um papel especialmente importante em sistemas magnéticos, onde a competição de interações de magnitudes similares conduz à frustração magnética, com uma alta degenerescência do estado fundamental.

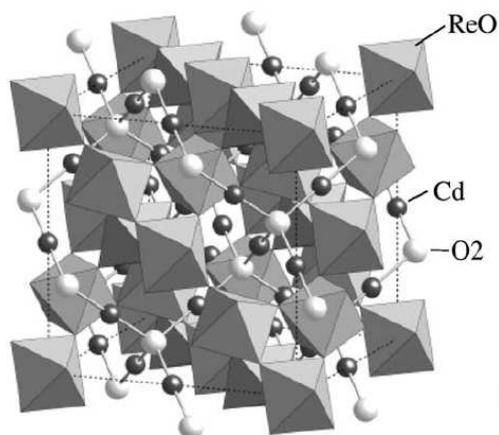


Figura 1.1: Estrutura do $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, incluindo os octaedros $\text{Re}(\text{O}1)_6$. O cádmio e os outros oxigênios ($\text{O}2$) são representados por esferas escuras e claras, respectivamente. [4]

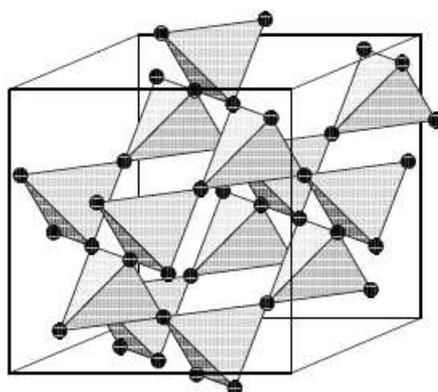


Figura 1.2: Rede tetraédrica de íons Re na estrutura piroclórica. [11]

O $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ foi reportado como o primeiro composto na família dos óxidos piroclóricos a apresentar supercondutividade [1–3]. Isso o torna potencialmente interessante para o estudo de uma possível coexistência de frustração magnética e supercondutividade.

As evidências usuais de ocorrência de supercondutividade, isto é, uma queda abrupta na resistividade e um salto no calor específico, foram observados em $T \approx 1\text{K}$ [4], conforme ilustrado nas Figs. 1.3 e 1.4. Os dados de calor específico indicam que se trata de um supercondutor do tipo BCS, ou seja, descrito pela teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer [14–16], no limite de acoplamento fraco. Esses resultados são confirmados por experimentos de ressonância magnética nuclear (RMN) [5, 6], os quais, adicionalmente, apontam a ausência de qualquer ordem magnética a baixas temperaturas.

A descoberta de supercondutividade no $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ intensificou o interesse pela física de sistemas geometricamente frustrados, levando à descoberta de outros compostos supercondutores na família dos óxidos piroclóricos. Por exemplo, KOs_2O_6 ($T_c \approx 9.6\text{ K}$) [17], RbOs_2O_6 ($T_c \approx 6.3\text{ K}$) [18, 19], e CsOs_2O_6 ($T_c \approx 3.3\text{ K}$) [20]. A natureza do mecanismo de pareamento nesses óxidos piroclóricos ainda é uma questão em aberto. Em particular, Koda *et al.* [21] apontam para um mecanismo supercondutor não convencional (flutuações de spin) no KOs_2O_6 , sugerido por um *gap* com zeros. Já no caso do $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, cálculos de estrutura de bandas indicam a presença de uma banda fortemente hibridizada, composta por estados $5d$ do Re e $2p$ do O, com uma largura total da ordem de 3 eV [7, 8]. Devido a essa banda rela-

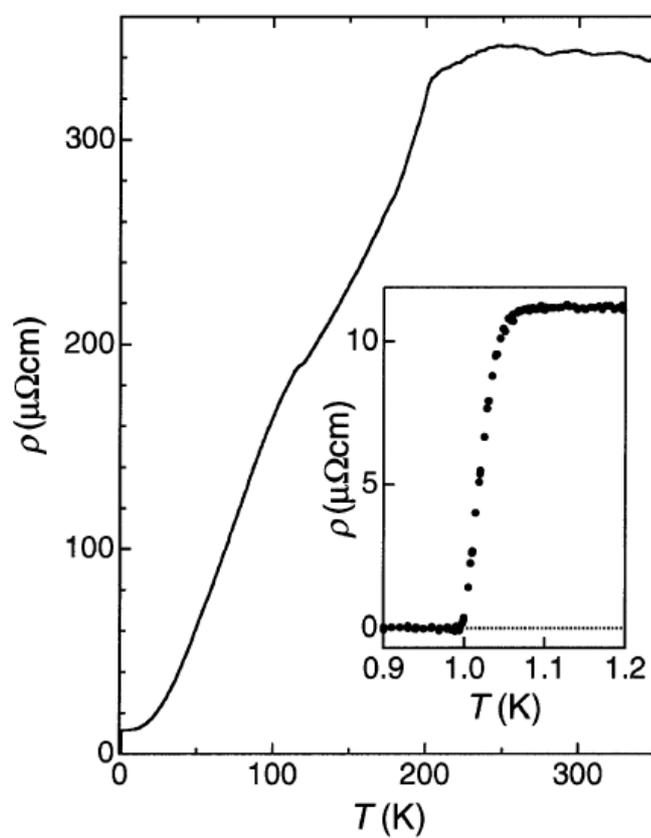


Figura 1.3: Resistividade elétrica d.c. em função da temperatura, medida em um monocristal de $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$. O *inset* é uma ampliação abaixo de 1.2 K mostrando uma transição supercondutora em $T_c \approx 1$ K. [4]

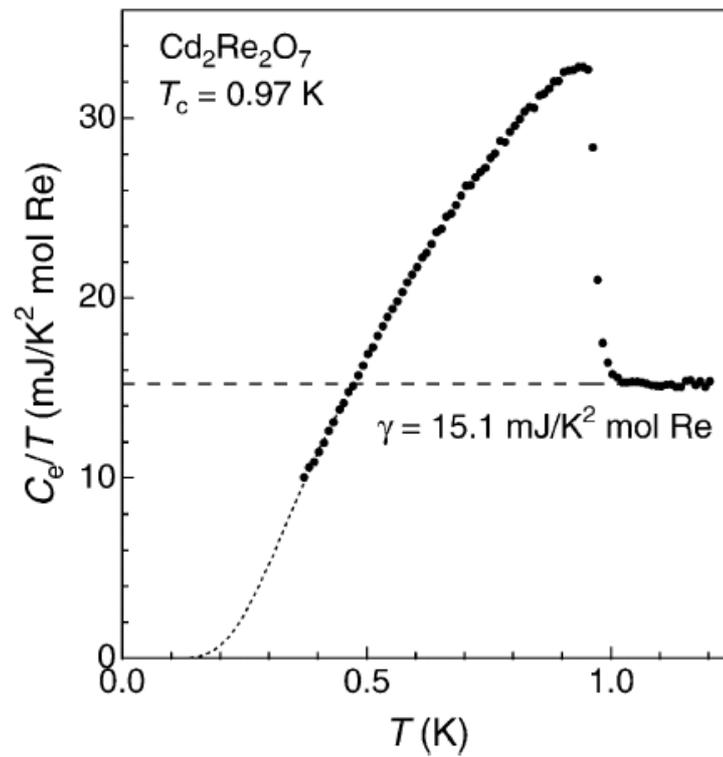


Figura 1.4: Calor específico eletrônico de um monocristal de $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, mostrando a transição supercondutora em 0.97 K. A linha pontilhada abaixo de 0.5 K é um ajuste com base na teoria BCS de uma banda. [4]

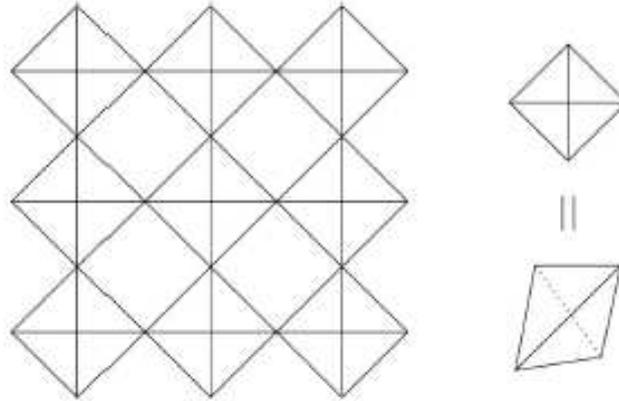


Figura 1.5: A rede tabuleiro de xadrez. As “casas pretas” podem ser vistas como tetraedros achatados, como mostrado esquematicamente à direita. Essa estrutura reproduz localmente a conectividade dos átomos de tipo B na estrutura piroclórica (tridimensional) $A_2B_2O_7$.

tivamente larga, argumenta-se que esse composto não pode ser classificado como um sistema de elétrons fortemente correlacionados [9], o que sugere que o mecanismo de pareamento supercondutor no $Cd_2Re_2O_7$ seja do tipo convencional.

As considerações anteriores nos motivam a propor um modelo fermiônico (não fortemente correlacionado), tratado através de uma aproximação BCS de campo médio, para estudar a supercondutividade numa rede geometricamente frustrada. Entretanto, como a rede piroclórica é muito complexa, faremos uso do seu “análogo bidimensional”, a rede do tipo *tabuleiro de xadrez*,¹ cuja representação esquemática é mostrada na Fig. 1.5. Essa rede reproduz localmente a conectividade da rede piroclórica, podendo-se visualizar as conexões entre segundos vizinhos como

¹Em inglês, é mais usual a denominação *checkerboard* (tabuleiro de damas).

originadas pelo “achatamento” dos tetraedros da rede 3D. Alguns trabalhos envolvendo modelos de spins têm usado essa rede para estudar, de forma simplificada, o papel desempenhado pela frustração magnética na física de compostos piroclóricos [12, 13]. Também existem trabalhos envolvendo férmions nessa rede, mas geralmente com foco em sistemas fortemente correlacionados [22–25].

No que concerne à simetria do *gap* supercondutor, faremos o desacoplamento BCS dos termos de interação no espaço real [26, 27], isto é, partindo de um hamiltoniano na representação de Wannier. Com esse procedimento, a transformada de Fourier dá diretamente a simetria do *gap* no espaço- \mathbf{k} , não havendo necessidade de fazer qualquer hipótese nesse sentido.

Os capítulos subseqüentes deste trabalho estão organizados como segue. No Capítulo 2, apresentamos o hamiltoniano-modelo e seu tratamento dentro do esquema BCS de campo médio, o que gera um sistema de duas bandas acopladas, para o qual obtemos as equações relevantes para o cálculo das propriedades físicas de interesse. O Capítulo 3 é devotado ao estudo numérico da fase supercondutora: são obtidos parâmetros de *gap* e calor específico em função da temperatura, e é estudada a dependência em \mathbf{k} do *gap* físico, sendo discutidos os resultados. As conclusões são apresentadas no Capítulo 4. No intuito de tornar este trabalho mais completo, o Apêndice A apresenta uma revisão da teoria BCS de uma única banda.

Capítulo 2

Modelo

2.1 O hamiltoniano

Tendo por motivação a supercondutividade do pirocloro $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, e tomando como ponto de partida o *toy model* bidimensional da rede piroclórica comentado no capítulo anterior, construímos um modelo **eletrônico** na estrutura *tabuleiro de xadrez*.

O modelo apresenta dois átomos idênticos (A e B) associados a cada sítio de uma rede quadrada (duas subredes interpenetrantes), conforme mostrado na Fig. 2.1, com um orbital por átomo. Usamos uma formulação *tight-binding*, na qual os elétrons podem “saltar” entre esses orbitais. Além do salto (*hopping*), levamos em conta interações coulombianas locais e não locais. Assumimos que o *hopping* e as interações não locais ocorrem somente entre cada átomo e seus quatro vizinhos não equivalentes e entre átomos equivalentes mais próximos ao longo de **uma** das

diagonais (definida pelo vetor \mathbf{a} para a subrede A e pelo vetor \mathbf{b} para a subrede B – ver Fig. 2.1), caracterizando a estrutura tabuleiro de xadrez.

O hamiltoniano do sistema, no formalismo de segunda quantização e representação de Wannier, é expresso por

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{i,\delta} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\sigma} t_{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i+\delta,\beta\sigma} + \sum_i \sum_{\alpha} U_{\alpha} n_{i\uparrow}^{\alpha} n_{i\downarrow}^{\alpha} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{\alpha\beta} n_{i\sigma}^{\alpha} n_{i+\delta,\sigma'}^{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} \sum_{\alpha,\beta} J_{\alpha\beta} \mathbf{S}_i^{\alpha} \cdot \mathbf{S}_{i+\delta}^{\beta}, \quad (2.1)
 \end{aligned}$$

onde, $\alpha, \beta = A, B$ e i e $i + \delta$ indicam, respectivamente, um sítio genérico da rede e os sítios a ele conectados por *hopping*. $c_{i\alpha\sigma}^{\dagger}(c_{i\alpha\sigma})$ é o operador que cria (aniquila) um elétron de spin σ no átomo (orbital) α associado ao sítio i da rede; $n_{i\sigma}^{\alpha} = c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i\alpha\sigma}$ é o operador número de elétrons; \mathbf{S}_i^{α} é um operador vetorial de spin; $t_{\alpha\beta}$ é o hopping de um elétron entre os átomos α e β ; U_{α} é a repulsão coulombiana entre os elétrons no átomo α ; $V_{\alpha\beta}$ e $J_{\alpha\beta}$ são as interações coulombianas direta e de troca, respectivamente, entre os elétrons dos átomos α e β .

Os índices de posição devem ser compreendidos como notação compacta para indicar os correspondentes vetores. Assim, denotando por \mathbf{R}_i o vetor de rede que especifica a posição do sítio i , as posições $i + \delta$ correspondem aos vetores $\mathbf{R}_i + \boldsymbol{\delta}$, onde

$$\boldsymbol{\delta} = \begin{cases} \pm \mathbf{a}, & \text{dois átomos A;} \\ \pm \mathbf{b}, & \text{dois átomos B;} \\ \mathbf{0}, \pm \mathbf{a}, \pm \mathbf{b}, \pm(\mathbf{a} + \mathbf{b}), & \text{átomos A e B.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Podemos separar, no hamiltoniano, os termos de elétrons independentes (ha-

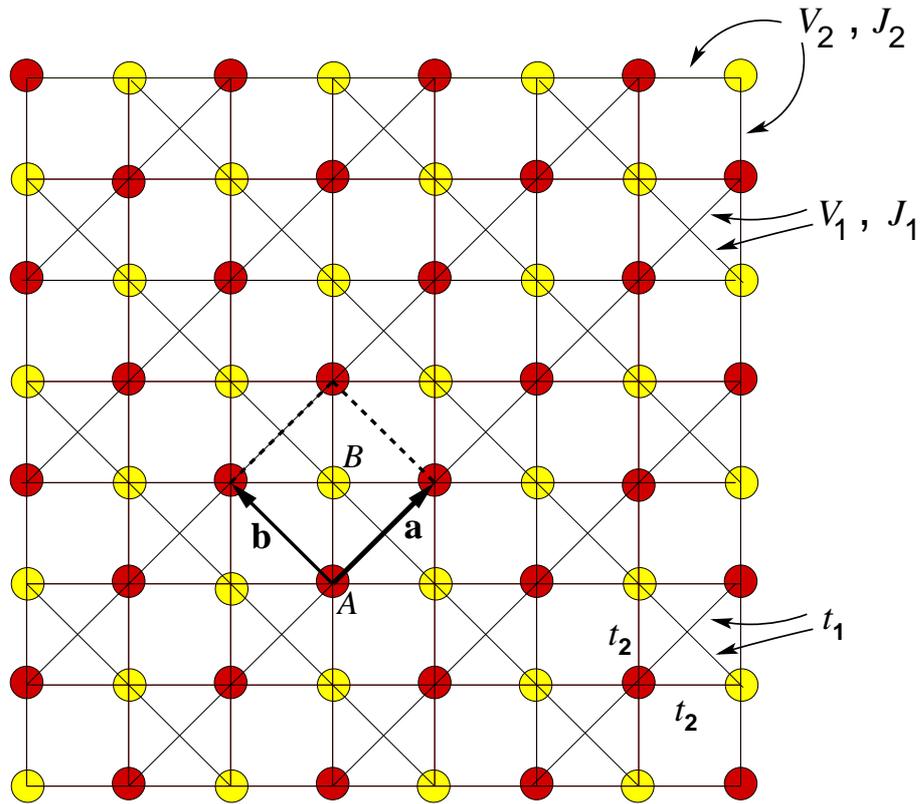


Figura 2.1: A estrutura do sistema no modelo. A e B representam átomos idênticos associados ao mesmo sítio da rede quadrada; \mathbf{a} e \mathbf{b} são vetores primitivos dessa rede; t_1 , V_1 e J_1 representam, respectivamente, os valores assumidos pelo *hopping*, interação coulombiana direta e interação coulombiana de troca ao longo dos lados dos quadrados menores (“casas do tabuleiro”), enquanto t_2 , V_2 e J_2 representam os valores dessas quantidades ao longo das diagonais de quadrados alternados.

miltoniano *tight-binding*) e de interação,

$$H = H_t + H_{int} . \quad (2.3)$$

O hamiltoniano de interação, por sua vez, pode ser separado em três partes,

$$H_{int} = H_U + H_V + H_J, \quad (2.4)$$

onde H_U representa a repulsão coulombiana local e os demais termos são não-locais, com H_V representando as interações coulombianas diretas e H_J as interações de troca.

Pelas simetrias da estrutura [ver Fig. 2.1], podemos ainda fazer a seguinte escolha de parâmetros:

$$t_{AA} = t_{BB} \equiv t_1, \quad t_{AB} = t_{BA} \equiv t_2, \quad (2.5)$$

$$U_A = U_B \equiv U, \quad (2.6)$$

$$V_{AA} = V_{BB} \equiv V_1, \quad V_{AB} = V_{BA} \equiv V_2, \quad (2.7)$$

$$J_{AA} = J_{BB} \equiv J_1, \quad J_{AB} = J_{BA} \equiv J_2, \quad (2.8)$$

onde essas escolhas se justificam pela consideração de que A e B são átomos idênticos.

2.2 Estrutura de bandas na ausência de interação

Inicialmente, vamos analisar apenas o termo de *hopping*, H_t , o qual, com a notação acima, assume a forma

$$H_t = -t_1 \sum_i \sum_\sigma \left[\sum_\delta c_{Ai\sigma}^\dagger c_{A,i+\delta,\sigma} + \sum_\delta c_{Bi\sigma}^\dagger c_{B,i+\delta,\sigma} \right] - t_2 \sum_i \sum_\sigma \left[\sum_\delta c_{Ai\sigma}^\dagger c_{B,i+\delta,\sigma} + \sum_\delta c_{Bi\sigma}^\dagger c_{A,i+\delta,\sigma} \right]. \quad (2.9)$$

Introduzimos a transformada de Fourier dos operadores criação e aniquilação,

$$c_{\alpha i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i+\mathbf{r}_\alpha)} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \quad c_{\alpha i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i+\mathbf{r}_\alpha)} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.10)$$

onde N representa o número total de sítios da rede, a soma sobre \mathbf{k} é restrita à primeira zona de Brillouin, e

$$\mathbf{r}_\alpha = \begin{cases} \mathbf{0}, & \alpha = A; \\ \frac{\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}, & \alpha = B. \end{cases} \quad (2.11)$$

Utilizando a identidade

$$\sum_i e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} = N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (2.12)$$

e relações trigonométricas, podemos reescrever o hamiltoniano *tight-binding*, Eq.(2.9),

no espaço- \mathbf{k} :

$$H_t = -2t_1 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[2 \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}}{2}\right) \right] \left[c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} + c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} \right] - 2t_2 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}) c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} + \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}) c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} \right]. \quad (2.13)$$

Esse hamiltoniano pode ser diagonalizado exatamente, resolvendo a equação

$$\begin{vmatrix} -2t_2 \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}) - \varepsilon & -2t_1 \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}}{2}\right) \\ -2t_1 \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}}{2}\right) & -2t_2 \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}) - \varepsilon \end{vmatrix} = 0. \quad (2.14)$$

Obtêm-se, assim, duas bandas de energia,

$$\varepsilon_{a(b)}(\mathbf{k}) = -t_2 \left[F_0(\mathbf{k}) + (-) 2 \sqrt{1 + \frac{1}{4} F_0^2(\mathbf{k}) + \frac{t_1^2}{t_2^2} F_0(\mathbf{k}) + \left(\frac{t_1^2 - t_2^2}{t_2^2} \right) W_0(\mathbf{k})} \right] \quad (2.15)$$

onde definimos

$$F_0(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}), \quad (2.16)$$

$$W_0(\mathbf{k}) = \cos^2 \left[\mathbf{k} \cdot \left(\frac{\mathbf{a} + \mathbf{b}}{2} \right) \right] + \cos^2 \left[\mathbf{k} \cdot \left(\frac{\mathbf{a} - \mathbf{b}}{2} \right) \right]. \quad (2.17)$$

Considerando que as conexões diagonais (entre segundos vizinhos) correspondem, na rede piroclórica (3D), a distâncias entre íons iguais àquelas entre primeiros vizinhos, escolhemos

$$t_1 = t_2 \equiv t. \quad (2.18)$$

Nessa forma mais simples, a expressão para as bandas de energia, Eq.(2.15), torna-se

$$\varepsilon_a = 2t, \quad (2.19)$$

$$\varepsilon_b(\mathbf{k}) = -2t[1 + F_0(\mathbf{k})], \quad (2.20)$$

com $F_0(\mathbf{k})$ dado pela Eq.(2.16). Neste caso, temos uma banda plana, a , com energia ε_a , e uma banda dispersiva, b , com energia $\varepsilon_b(\mathbf{k})$, ambas mostradas na Fig. 2.2, com a respectiva densidade de estados. Note que existe uma singularidade (logaritmica) de van Hove no centro da banda dispersiva. Isto é uma peculiaridade do modelo bidimensional, e seus possíveis efeitos físicos não terão contrapartida na rede piroclórica.

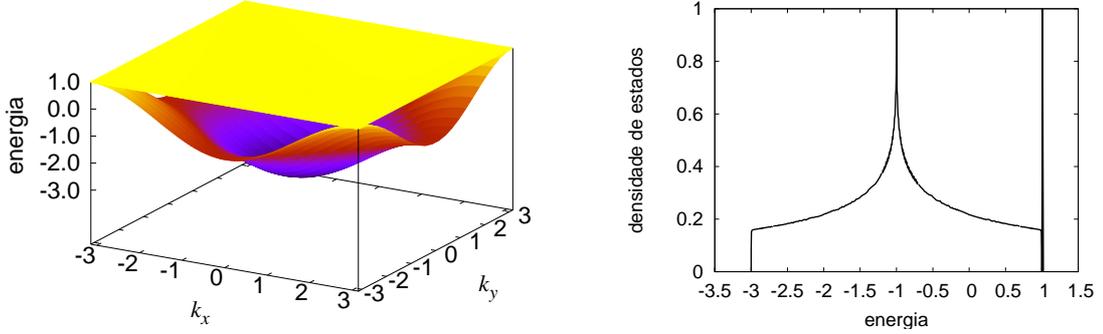


Figura 2.2: Esquerda: estrutura de bandas de energia na ausência de interação, com a superfície inferior representando a banda dispersiva, b , e o plano superior representando a banda não dispersiva, a . Direita: densidade de estados correspondente.

A partir das expressões para ε_a e $\varepsilon_b(\mathbf{k})$, Eq.(2.19) e Eq.(2.20), respectivamente, podemos escrever o hamiltoniano de *hopping*, Eq.(2.13), em sua forma diagonal,

$$H_t = \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon_a n_{\mathbf{k}\sigma}^a + \varepsilon_b(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}\sigma}^b \right], \quad (2.21)$$

onde $n_{\mathbf{k}\sigma}^a = a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$ é o operador que representa o número de partículas com vetor de onda \mathbf{k} e spin σ na banda a , enquanto $n_{\mathbf{k}\sigma}^b = b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma}$ é o operador correspondente na banda b .

As relações entre os novos operadores $\{a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{k}\sigma}, b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, b_{\mathbf{k}\sigma}\}$ e os operadores originais $\{c_{A\mathbf{k}\sigma}, c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{B\mathbf{k}\sigma}, c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger\}$ são obtidas a seguir. Adotando a escolha (2.18), podemos reescrever o hamiltoniano (2.13) em forma matricial:

$$H_t = -2t \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{bmatrix} c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger & c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger \end{bmatrix} \cdot M_{\mathbf{k}} \cdot \begin{bmatrix} c_{A\mathbf{k}\sigma} \\ c_{B\mathbf{k}\sigma} \end{bmatrix}, \quad (2.22)$$

onde

$$M_{\mathbf{k}} \equiv \begin{bmatrix} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) & 2 \cos(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}) \cos(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}) \\ 2 \cos(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}) \cos(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}) & \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \end{bmatrix}. \quad (2.23)$$

Pelas equações (2.19), (2.20) e (2.22), vemos que a forma diagonal de $M_{\mathbf{k}}$ é

$$M_{\mathbf{k}}^D \equiv \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & \gamma_{\mathbf{k}} \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

onde

$$\gamma_{\mathbf{k}} \equiv [1 + F_0(\mathbf{k})]. \quad (2.25)$$

Portanto, existe uma matriz de transformação $S_{\mathbf{k}}$ com as seguintes propriedades:

$$S_{\mathbf{k}} M_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}^\dagger = M_{\mathbf{k}}^D, \quad (2.26)$$

$$S_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}^\dagger = I, \quad (2.27)$$

onde I é a matriz identidade. Da solução do problema de autovalores e autovetores do hamiltoniano, Eq.(2.13), obtemos

$$S_{\mathbf{k}} = \frac{1}{r_{\mathbf{k}}} \begin{bmatrix} C_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}) & -C_{\mathbf{k}}(\mathbf{a}) \\ C_{\mathbf{k}}(\mathbf{a}) & C_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}) \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

onde definimos,

$$C_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}/2), \quad (2.29)$$

$$r_{\mathbf{k}}^2 = C_{\mathbf{k}}^2(\mathbf{a}) + C_{\mathbf{k}}^2(\mathbf{b}). \quad (2.30)$$

Portanto, usando

$$\begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{bmatrix} = S_{\mathbf{k}} \cdot \begin{bmatrix} c_{A\mathbf{k}\sigma} \\ c_{B\mathbf{k}\sigma} \end{bmatrix}, \quad (2.31)$$

obtemos

$$a_{\mathbf{k}\sigma} \equiv \frac{1}{r_{\mathbf{k}}} (C_{\mathbf{k}}(\mathbf{b})c_{\mathbf{k}A\sigma} - C_{\mathbf{k}}(\mathbf{a})c_{\mathbf{k}B\sigma}), \quad (2.32)$$

$$b_{\mathbf{k}\sigma} \equiv \frac{1}{r_{\mathbf{k}}} (C_{\mathbf{k}}(\mathbf{a})c_{\mathbf{k}A\sigma} + C_{\mathbf{k}}(\mathbf{b})c_{\mathbf{k}B\sigma}). \quad (2.33)$$

Conseqüentemente, por conjugação complexa,

$$a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \equiv \frac{1}{r_{\mathbf{k}}} (C_{\mathbf{k}}(\mathbf{b})c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger - C_{\mathbf{k}}(\mathbf{a})c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger), \quad (2.34)$$

$$b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \equiv \frac{1}{r_{\mathbf{k}}} (C_{\mathbf{k}}(\mathbf{a})c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger + C_{\mathbf{k}}(\mathbf{b})c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger). \quad (2.35)$$

2.3 Termos de interação

Passamos, agora, à análise dos termos de interação do hamiltoniano (2.1),

$$H_{int} = \sum_i \sum_\alpha U_\alpha n_{i\uparrow}^\alpha n_{i\downarrow}^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{\alpha\beta} n_{i\sigma}^\alpha n_{i+\delta,\sigma'}^\beta + \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} \sum_{\alpha,\beta} J_{\alpha\beta} \mathbf{S}_i^\alpha \cdot \mathbf{S}_{i+\delta}^\beta. \quad (2.36)$$

No presente trabalho, deixaremos de lado as interações de troca, associadas ao magnetismo do sistema, pois estamos interessados no estudo da fase supercondutora. Omitindo, portanto, o termo de troca, podemos representar o hamiltoniano de interação por

$$H_{int} = H_U + H_V = U \sum_{i\alpha} n_{i\uparrow}^\alpha n_{i\downarrow}^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\alpha\beta} \sum_{i\delta} V_{\alpha\beta} n_{i\sigma}^\alpha n_{i+\delta,\sigma'}^\beta. \quad (2.37)$$

Até aqui, os parâmetros U e $V_{\alpha\beta}$ podem ser vistos como puramente coulombianos. Entretanto, para que exista uma solução supercondutora eles devem ser modificados (por exemplo, por interações elétron-fônon), tornando-se interações atrativas. Vamos considerar que essas são não locais ($V_{\alpha\beta} < 0$) e deixar de lado

a interação local, considerando que a repulsão coulombiana impediria, localmente, uma interação efetiva atrativa. Isto implica em manter somente H_V no hamiltoniano de interação, $V_{\alpha\beta} < 0$. Com essas hipóteses, podemos realizar o desacoplamento BCS dos termos de interação.

2.3.1 Desacoplamento BCS

A teoria BCS de campo médio usual para um sistema de uma banda (um único orbital por sítio da rede) é apresentada, como subsídio, no Apêndice A. Nosso procedimento é análogo, exceto, como já comentado, por realizarmos o desacoplamento no espaço real, fazendo a passagem para o espaço- \mathbf{k} posteriormente.

A representação explícita dos produtos de números de ocupação que aparecem no hamiltoniano H_V em termos dos operadores criação e aniquilação é

$$n_{i\sigma}^\alpha n_{i+\delta,\sigma'}^\beta = c_{\alpha i\sigma}^\dagger c_{\alpha i\sigma} c_{\beta,i+\delta,\sigma'}^\dagger c_{\beta,i+\delta,\sigma'}. \quad (2.38)$$

Utilizando a forma usual do desacoplamento BCS, temos

$$\begin{aligned} c_{\alpha i\sigma}^\dagger c_{\alpha i\sigma} c_{\beta,i+\delta,\sigma'}^\dagger c_{\beta,i+\delta,\sigma'} &= \langle c_{\alpha i\sigma}^\dagger c_{\beta,i+\delta,\sigma'}^\dagger \rangle c_{\beta,i+\delta,\sigma'} c_{\alpha i\sigma} \\ &+ \langle c_{\beta,i+\delta,\sigma'} c_{\alpha i\sigma} \rangle c_{\alpha i\sigma}^\dagger c_{\beta,i+\delta,\sigma'}^\dagger \\ &- \langle c_{\alpha i\sigma}^\dagger c_{\beta,i+\delta,\sigma'}^\dagger \rangle \langle c_{\beta,i+\delta,\sigma'} c_{\alpha i\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Vamos escolher

$$\langle c_{\beta,i+\delta,\sigma'} c_{\alpha i\sigma} \rangle \equiv \Delta_{\alpha\beta}, \quad (2.40)$$

ou seja, $\Delta_{\alpha\beta}$ é uma quantidade independente de posição, por simetria, e estamos nos restringindo ao caso, onde o pareamento é do tipo singlete ($\bar{\sigma} = -\sigma$).

Utilizando o desacoplamento (2.39) com a notação (2.40), a Eq.(2.38) assume a forma

$$n_{i\sigma}^{\alpha} n_{i+\delta, \sigma'}^{\beta} = \left\{ \left[\Delta_{\alpha\beta} c_{\alpha i \sigma}^{\dagger} c_{\beta, i+\delta, \bar{\sigma}}^{\dagger} + h.c. \right] - |\Delta_{\alpha\beta}|^2 \right\} \delta_{\sigma' \bar{\sigma}}, \quad (2.41)$$

onde *h.c.* representa o conjugado hermitiano do(s) termo(s) anterior(es).

O termo $|\Delta_{\alpha\beta}|^2$ contribui apenas aditivamente para a energia e será, inicialmente, deixado de lado.

Completando a notação que será adotada no que segue, e levando em conta todos os possíveis pares distintos na definição de $\Delta_{\alpha\beta}$, Eq. (2.40), definimos

$$\Delta_{AA} = \Delta_{BB} \equiv \Delta_1/|V_1|, \quad (2.42)$$

$$\Delta_{AB} = \Delta_{BA} \equiv \Delta_2/|V_2|. \quad (2.43)$$

Conforme comentamos anteriormente, fica implícito que $V_1, V_2 < 0$, para garantir que os termos de interação resultem num estado supercondutor. As quantidades Δ_1 e Δ_2 podem ser vistas como “parâmetros de gap”, pois correspondem ao parâmetro Δ da teoria usual de uma banda (ver Apêndice A).

2.4 Hamiltoniano BCS de duas bandas acopladas

A partir do desacoplamento realizado, o hamiltoniano de interação passa a ser escrito em termos de criação e aniquilação de **pares**, sendo expresso por

$$\begin{aligned}
H_{int}^{BCS} = & -\sum_{i\alpha} \sum_{\delta} \left(\Delta_1 c_{\alpha i \uparrow}^{\dagger} c_{\alpha, i+\delta, \downarrow}^{\dagger} + h.c. \right) \\
& -\sum_i \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha \neq \beta}} \sum_{\delta} \left(\Delta_2 c_{\alpha i \uparrow}^{\dagger} c_{\beta, i+\delta, \downarrow}^{\dagger} + h.c. \right). \tag{2.44}
\end{aligned}$$

Procedendo de maneira análoga à utilizada para reescrever o hamiltoniano *tight-binding* no espaço \mathbf{k} , Eq.(2.13), escrevemos a parte de interação, Eq.(2.44), como segue:

$$\begin{aligned}
H_{int}^{BCS} = & -2 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \Delta_1 \left[\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) c_{A, \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{A, -\mathbf{k} \downarrow}^{\dagger} + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) c_{B, \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{B, -\mathbf{k} \downarrow}^{\dagger} \right] \right. \\
& + 2\Delta_2 \left[\cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right) \left(c_{A, \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{B, -\mathbf{k} \downarrow}^{\dagger} + c_{B, \mathbf{k} \uparrow}^{\dagger} c_{A, -\mathbf{k} \downarrow}^{\dagger} \right) \right] \\
& \left. + h.c. \right\}. \tag{2.45}
\end{aligned}$$

Comparando esta expressão com o hamiltoniano de *hopping*, escrito na forma

$$H_t = -2t \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} (M_{\mathbf{k}})_{\alpha\beta} c_{\beta\mathbf{k}\sigma}, \tag{2.46}$$

onde a matriz $M_{\mathbf{k}}$ é dada pela Eq.(2.23), notamos que H_{int}^{BCS} assumiria a mesma forma, porém com -2Δ ao invés de $-2t$, caso tivéssemos a igualdade $\Delta_1 = \Delta_2 \equiv \Delta$. Levando em conta que Δ_1 aparece somente nos termos diagonais na Eq. (2.45) e Δ_2 somente nos não diagonais, é conveniente separar as partes diagonal e não diagonal de $M_{\mathbf{k}}$, Eq.(2.23), escrevendo

$$M_{\mathbf{k}} = D_{\mathbf{k}} + N_{\mathbf{k}}, \tag{2.47}$$

com

$$D_{\mathbf{k}} \equiv \begin{bmatrix} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) & 0 \\ 0 & \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

e

$$N_{\mathbf{k}} \equiv \begin{bmatrix} 0 & 2 \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right) \\ 2 \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right) & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.49)$$

Com essas definições, o hamiltoniano (2.45) pode ser escrito na forma

$$H_{int}^{BCS} = -2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \left\{ \left[\Delta_1 c_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger (D_{\mathbf{k}})_{\alpha\beta} c_{\beta-\mathbf{k}}^\dagger + \Delta_2 c_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger (N_{\mathbf{k}})_{\alpha\beta} c_{\beta-\mathbf{k}}^\dagger \right] + h.c. \right\} \quad (2.50)$$

ou ainda,

$$H_{int}^{BCS} = -2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \left\{ c_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger [\Delta_1 D_{\mathbf{k}} + \Delta_2 N_{\mathbf{k}}] c_{\beta-\mathbf{k}}^\dagger + h.c. \right\}. \quad (2.51)$$

Por conveniência, usamos a notação simplificada,

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k} \uparrow \rightarrow \mathbf{k} \\ -\mathbf{k} \downarrow \rightarrow -\mathbf{k}, \end{array} \right. \quad (2.52)$$

que será empregada daqui em diante.

Definindo

$$Q_{\mathbf{k}} = \Delta_1 D_{\mathbf{k}} + \Delta_2 N_{\mathbf{k}}, \quad (2.53)$$

temos

$$H_{int}^{BCS} = -2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \left[c_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger (Q_{\mathbf{k}})_{\alpha\beta} c_{\beta-\mathbf{k}}^\dagger + h.c. \right]. \quad (2.54)$$

Utilizando a transformação $S_{\mathbf{k}}$ que diagonaliza o hamiltoniano de *hopping*, a matriz $Q_{\mathbf{k}}$ transforma-se em

$$\begin{aligned}\bar{Q}_{\mathbf{k}} &\equiv S_{\mathbf{k}}Q_{\mathbf{k}}S_{\mathbf{k}}^\dagger \\ &= \Delta_1 S_{\mathbf{k}}M_{\mathbf{k}}S_{\mathbf{k}}^\dagger + \Delta_2 S_{\mathbf{k}}N_{\mathbf{k}}S_{\mathbf{k}}^\dagger \\ &= \Delta_1 \bar{D}_{\mathbf{k}} + \Delta_2 \bar{N}_{\mathbf{k}}.\end{aligned}\tag{2.55}$$

Lembrando que $S_{\mathbf{k}}$ leva o conjunto de operadores $\{c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}\}$ ao conjunto de operadores $\{a_{\mathbf{k}\sigma}, b_{\mathbf{k}\sigma}\}$, e através de uma algebra matricial simples, o hamiltoniano de interação assume a forma

$$\begin{aligned}H_{int}^{BCS} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [\Delta_2 + (\Delta_1 - \Delta_2) F_1(\mathbf{k})] a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right. \\ &\quad \left. - [\Delta_2 + \Delta_1 F_0(\mathbf{k}) - (\Delta_1 - \Delta_2) F_1(\mathbf{k})] b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right. \\ &\quad \left. - (\Delta_1 - \Delta_2) F_2(\mathbf{k}) [a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger] + h.c. \right\},\end{aligned}\tag{2.56}$$

sendo $F_0(\mathbf{k})$ dado pela Eq.(2.16) e definimos

$$F_1(\mathbf{k}) = [C_{\mathbf{k}}^2(\mathbf{b}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) + C_{\mathbf{k}}^2(\mathbf{a}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] / r_{\mathbf{k}}^2,\tag{2.57}$$

$$F_2(\mathbf{k}) = [C_{\mathbf{k}}(\mathbf{b})C_{\mathbf{k}}(\mathbf{a})(\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) - \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}))] / r_{\mathbf{k}}^2,\tag{2.58}$$

com $C_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ e $r_{\mathbf{k}}$ dados pelas Eqs. (2.29) e (2.30).

Para obter o hamiltoniano completo, reescrevemos o hamiltoniano de *hopping*, Eq.(2.21), utilizando a notação introduzida na Eq.(2.52):

$$H_t = \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon^a (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}) + \varepsilon_{\mathbf{k}}^b (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}) \right].\tag{2.59}$$

Definindo

$$\begin{aligned}
\Delta_{\mathbf{k}}^{aa} &= -2 [\Delta_2 - (\Delta_1 - \Delta_2)F_1(\mathbf{k})], \\
\Delta_{\mathbf{k}}^{bb} &= 2 [\Delta_2 + \Delta_1 F_0(\mathbf{k}) - (\Delta_1 - \Delta_2)F_1(\mathbf{k})], \\
\Delta_{\mathbf{k}}^{ab} &= 2(\Delta_1 - \Delta_2)F_2(\mathbf{k}),
\end{aligned} \tag{2.60}$$

e reunindo as equações (2.59) e (2.56), obtemos o hamiltoniano completo,

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon^a (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}) - \Delta_{\mathbf{k}}^{aa} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger - (\Delta_{\mathbf{k}}^{aa})^* a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \right] \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon^b (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}) - \Delta_{\mathbf{k}}^{bb} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger - (\Delta_{\mathbf{k}}^{bb})^* b_{-\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \right] \\
&- \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\mathbf{k}}^{ab} (a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger) + (\Delta_{\mathbf{k}}^{ab})^* (b_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}) \right], \tag{2.61}
\end{aligned}$$

o qual descreve um modelo BCS de duas bandas acopladas. Genericamente, a supercondutividade BCS em modelos de duas bandas foi estudada por diversos autores (ver, por exemplo, [28–31]). Aqui, vamos explorar os aspectos específicos do nosso modelo, associados às características topológicas do sistema e à definição dos parâmetros de acoplamento a partir do espaço real.

Como é bem conhecido na teoria BCS, nesse tipo de hamiltoniano o número de partículas não é conservado, ou seja, os auto-estados do sistema não têm um número de partículas definido. Portanto, em cálculos estatísticos é conveniente utilizar o ensemble gran-canônico, embora se imponha que o número **médio** total de elétrons tenha um valor definido. O procedimento usual, que adotamos aqui, consiste em substituir o hamiltoniano H por $\bar{H} = H - \mu N_e$, onde μ é o potencial químico e N_e é o número total de elétrons. \bar{H} terá a mesma forma de H se substituirmos as energias ε^a e $\varepsilon_{\mathbf{k}}^b$ por $\bar{\varepsilon}^a = \varepsilon^a - \mu$ e $\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^b = \varepsilon_{\mathbf{k}}^b - \mu$ respectivamente.

2.5 Diagonalização do hamiltoniano

Continuando com o procedimento usual, vamos proceder à diagonalização do hamiltoniano (2.61), no sentido de obter um sistema de partículas (formalmente) não interagentes, isto é, as excitações de partícula única do sistema, e suas energias.

Tendo em mente que os operadores $a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}$ e $b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}$ satisfazem relações de anticomutação fermiônicas e, portanto,

$$a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} = 1 - a_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad (2.62)$$

$$b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} = 1 - b_{-\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad (2.63)$$

podemos reescrever o hamiltoniano BCS como

$$\begin{aligned} \bar{H} = & \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\varepsilon}^a + \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^b) \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left[\bar{\varepsilon}^a (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger) - \Delta_{\mathbf{k}}^{aa} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger - (\Delta_{\mathbf{k}}^{aa})^* a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left[\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^b (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} - b_{-\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger) - \Delta_{\mathbf{k}}^{bb} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger - (\Delta_{\mathbf{k}}^{bb})^* b_{-\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\mathbf{k}}^{ab} (a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger) + (\Delta_{\mathbf{k}}^{ab})^* (b_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}) \right], \quad (2.64) \end{aligned}$$

o que permite expressar os três últimos termos em forma matricial:

$$\begin{aligned} \bar{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}}^\dagger & a_{-\mathbf{k}} & b_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{-\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}^a & -\Delta_{\mathbf{k}}^{aa} & 0 & -\Delta_{\mathbf{k}}^{ab} \\ -(\Delta_{\mathbf{k}}^{aa})^* & -\bar{\varepsilon}^a & -(\Delta_{\mathbf{k}}^{ab})^* & 0 \\ 0 & -\Delta_{\mathbf{k}}^{ab} & \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^b & -\Delta_{\mathbf{k}}^{bb} \\ -(\Delta_{\mathbf{k}}^{ab})^* & 0 & -(\Delta_{\mathbf{k}}^{bb})^* & -\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ a_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}} \\ b_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{bmatrix} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\varepsilon}^a + \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^b). \quad (2.65) \end{aligned}$$

Diagonalizando a matriz que aparece nessa equação, obtemos os autovalores de energia $E_1(\mathbf{k})$ e $E_2(\mathbf{k})$, os quais, em notação simplificada (sem explicitar a dependência em \mathbf{k}), são dados por

$$E_{1(2)}^2 = \frac{1}{2} \left[E_a^2 + E_b^2 + 2|\Delta_{ab}|^2 - (+)\sqrt{R_{ab}} \right], \quad (2.66)$$

onde

$$E_a^2 = \bar{\varepsilon}_a^2 + |\Delta_a|^2, \quad (2.67)$$

$$E_b^2 = \bar{\varepsilon}_b^2 + |\Delta_b|^2, \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} R_{ab} = & (E_a^2 - E_b^2)^2 + 4|\Delta_{ab}|^2(E_a^2 + E_b^2 - 2\bar{\varepsilon}_a\bar{\varepsilon}_b) \\ & + 4\Delta_a^*\Delta_b^*\Delta_{ab}^2 + 4\Delta_a\Delta_b(\Delta_{ab}^*)^2. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Cabe observar que, pela forma dos autovalores de energia, se impusermos $\Delta_{ab} = 0$ obtemos os autovalores correspondentes a duas bandas não acopladas, E_a e E_b .

Como acontece no modelo BCS de uma banda, as energias são duplamente degeneradas devendo ser associadas a dois tipos de “partículas” (excitações). Podemos, então, escrever

$$\begin{aligned} \bar{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \left[E_1(\mathbf{k}) (\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \beta_{1\mathbf{k}}^\dagger \beta_{1\mathbf{k}}) + E_2(\mathbf{k}) (\alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} + \beta_{2\mathbf{k}}^\dagger \beta_{2\mathbf{k}}) \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}} [(\bar{\varepsilon}_a + \bar{\varepsilon}_b(\mathbf{k})) - (E_1(\mathbf{k}) + E_2(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (2.70)$$

onde os operadores $\alpha_{1\mathbf{k}}, \beta_{1\mathbf{k}}, \alpha_{2\mathbf{k}}, \beta_{2\mathbf{k}}$ são combinações lineares dos operadores $a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{-\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{-\mathbf{k}}$. A forma explícita dessas combinações lineares pode ser obtida, tal como no caso do hamiltoniano *tight-binding*, construindo a matriz que leva o hamiltoniano (2.64) à forma diagonal (2.70). Isso deveria ser feito para podermos efetivar

a autoconsistência da solução, através da Eq.(2.40), o que nos obriga a expressar os operadores $\{c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}\}$ em termos dos operadores $\{\alpha_{i\mathbf{k}}, \beta_{i\mathbf{k}}\}$. A álgebra envolvida é simples, mas tediosa. Na próxima seção abordaremos uma forma alternativa de realizar a autoconsistência.

2.6 Autoconsistência através da energia livre

Ao invés de trabalhar com a matriz de transformação e obter as equações autoconsistentes, podemos escrever uma expressão para energia livre do sistema e minimizá-la em relação aos parâmetros de *gap* Δ_1 e Δ_2 para determinar os valores de equilíbrio dos mesmos, que satisfazem as condições de autoconsistência. Para isso, devemos reincorporar ao hamiltoniano as “constantes” aditivas, inicialmente, deixadas de lado na Eq.(2.41), pois estas dependem de Δ_1 e Δ_2 . Segue das Eqs. (2.37) e (2.41) que a soma dos termos do hamiltoniano que não envolvem operadores é dada por

$$\bar{E} = \sum_{\mathbf{k}} [\bar{\varepsilon}_a + \bar{\varepsilon}_b(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k}) - E_2(\mathbf{k})] + 2N \left(\frac{\Delta_1^2}{|V_1|} + \frac{\Delta_2^2}{|V_2|} \right). \quad (2.71)$$

Dessa forma, o hamiltoniano, Eq.(2.70), fica escrito na forma

$$\bar{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left[E_1(\mathbf{k}) (\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \beta_{1\mathbf{k}}^\dagger \beta_{1\mathbf{k}}) + E_2(\mathbf{k}) (\alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} + \beta_{2\mathbf{k}}^\dagger \beta_{2\mathbf{k}}) \right] + \bar{E}. \quad (2.72)$$

As excitações descritas pelos operadores $\{\alpha_{1\mathbf{k}}, \beta_{1\mathbf{k}}, \alpha_{2\mathbf{k}}, \beta_{2\mathbf{k}}\}$ são férmions não interagentes. Portanto, a energia interna do sistema é

$$U = 2 \sum_{\lambda\mathbf{k}} [f(E_{\lambda\mathbf{k}}) E_{\lambda\mathbf{k}}] + \bar{E} + \mu N_e, \quad (2.73)$$

onde $f(x) = [\exp(x) + 1]^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac e $\lambda = 1, 2$ é o índice que representa as bandas. O fator multiplicativo 2 na soma sobre bandas deve-se à degenerescência das energias, que são idênticas para excitações de tipo α ou β , como pode ser visto no hamiltoniano (2.72). O termo μN_e foi adicionado para compensar o fato de que as energias dos elétrons são medidas em relação ao potencial químico nos demais termos.

A entropia do sistema será a soma das entropias de gases de Fermi ideais, correspondentes a cada banda, ou seja,

$$S = 2k_B [f(E_{\lambda\mathbf{k}}) \ln f(E_{\lambda\mathbf{k}}) + (1 - f(E_{\lambda\mathbf{k}})) \ln (1 - f(E_{\lambda\mathbf{k}}))]. \quad (2.74)$$

Reunindo as Eqs. (2.73), (2.74) e (2.72), e após uma álgebra simples, podemos expressar a energia livre do sistema por

$$\begin{aligned} F = & 2T \sum_{\mathbf{k}} \{ \ln [1 - f(E_{1\mathbf{k}})] + \ln [1 - f(E_{2\mathbf{k}})] \} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} [\bar{\epsilon}_a + \bar{\epsilon}_{b\mathbf{k}} - E_{1\mathbf{k}} - E_{2\mathbf{k}}] \\ & + 2N \left(\frac{\Delta_1^2}{|V_1|} + \frac{\Delta_2^2}{|V_2|} \right) + \mu N_e. \end{aligned} \quad (2.75)$$

A análise dos mínimos da energia livre não será feita de forma analítica. O estudo numérico das equações aqui obtidas será desenvolvido no próximo capítulo.

Capítulo 3

Resultados e discussão

O ponto de partida para análise da fase supercondutora do sistema é o estudo numérico sistemático da estrutura de mínimos da energia livre, Eq. (2.75), em termos dos parâmetros de *gap* (Δ_1 e Δ_2). Isso é feito tratando Δ_1 e Δ_2 como parâmetros livres, para uma dada temperatura T (fixa). O potencial químico é determinado, para essa temperatura, através da condição

$$2\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} [f(\bar{\epsilon}_a) + f(\bar{\epsilon}_b(\mathbf{k}))] = n \quad (3.1)$$

onde n é o número médio (escolhido) de elétrons por sítio. Assim, para T fixo, $F(T, \Delta_1, \Delta_2)$ define uma superfície no espaço $\Delta_1\Delta_2$. O(s) mínimo(s) dessa superfície determina(m) os valores de equilíbrio dos parâmetros de *gap*.

Por consistência, tendo em vista a argumentação usada para considerar idênticos os parâmetros de *hopping* [ver Eq. (2.18)], vamos escolher $V_1 = V_2 \equiv V$ no que segue.

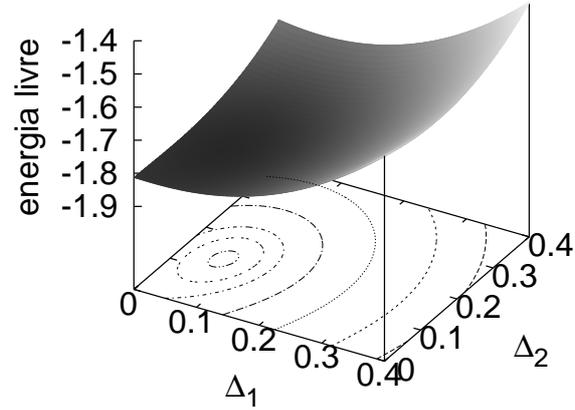


Figura 3.1: Energia livre em função dos parâmetros de *gap* para $T \rightarrow 0$, $n = 1.0$ e $V = 0.6$. No plano $\Delta_1\Delta_2$, são mostrados alguns dos contornos da energia livre, sendo os mais internos correspondentes a valores menores de energia.

A Fig. 3.1 mostra um gráfico típico da energia livre em função dos parâmetros de *gap*, com a projeção dos contornos de igual energia livre. Esses contornos indicam que neste caso, correspondente a $T \rightarrow 0$, $n = 1.0$ e $V = 0.6$, os valores de Δ_1 e Δ_2 correspondentes ao mínimo de F são ambos não nulos e, portanto, o sistema se encontra na fase supercondutora. Escolhemos um sistema de unidades onde energia é medida em unidades de $2t$ (t é a integral de *hopping*) e temperatura em unidades de $2t/k_B$ (k_B é a constante de Boltzmann).

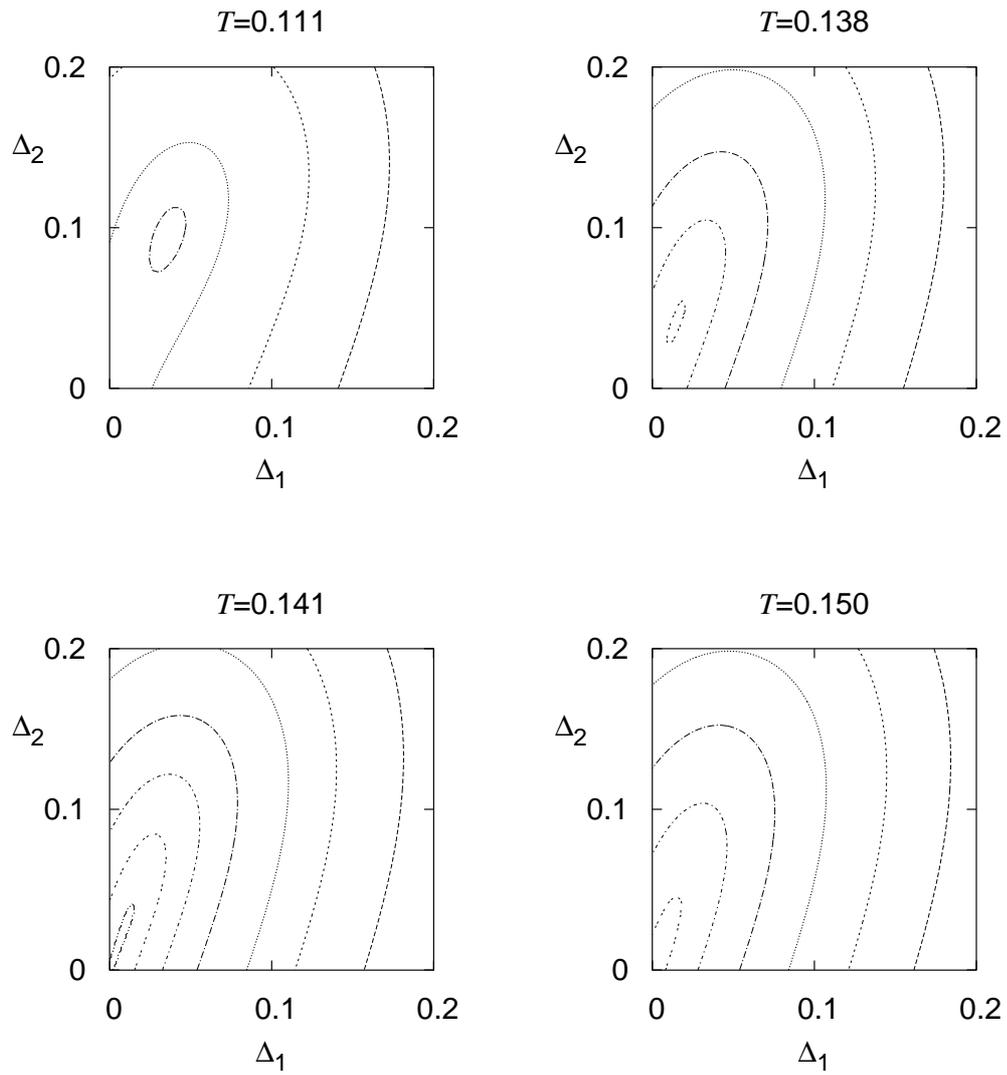


Figura 3.2: Evolução do mínimo da energia livre no espaço dos parâmetros de *gap*, para $n = 1.0$ e $V = 0.6$ e temperaturas próximas à transição supercondutora.

3.1 Transição supercondutora

Para melhor observar o panorama de evolução, em função da temperatura, dos valores de equilíbrio dos parâmetros de *gap* e, conseqüentemente, visualizar a transição entre as fases normal e supercondutora, plotamos os contornos da energia livre no plano $\Delta_1\Delta_2$ para várias temperaturas.

A Fig. 3.2 permite observar esse panorama de evolução para a seqüência de temperaturas $T = 0.111, 0.138, 0.141$ e 0.150 , mantendo fixos, $n = 1.0$ e $V = 0.6$. Nas duas figuras superiores, com a da esquerda correspondendo a $T = 0.111$ e a da direita a $T = 0.138$, nota-se, pelos contornos da energia livre, que os valores de equilíbrio dos parâmetros de *gap* são não nulos, o que indica que o sistema se encontra na fase supercondutora. À medida que a temperatura aumenta, os valores de equilíbrio de Δ_1 e Δ_2 tendem a zero, ou seja, o sistema se aproxima da transição de fase. As duas figuras inferiores correspondem a $T = T_c = 0.141$ (esquerda) e $T = 0.150 > T_c$ (direita), onde se percebe que os valores de equilíbrio dos parâmetros de *gap* são, agora, nulos.

3.2 Gap em função da temperatura

Em princípio, o método gráfico, descrito através da Fig. 3.2, permite obter, com o grau de precisão desejado, a temperatura crítica do sistema. Para melhor visualizar a transição, os valores de equilíbrio de Δ_1 e Δ_2 são determinados para várias temperaturas, sendo construídos gráficos $\Delta_\alpha \times T$. A Fig. 3.3 mostra a variação de

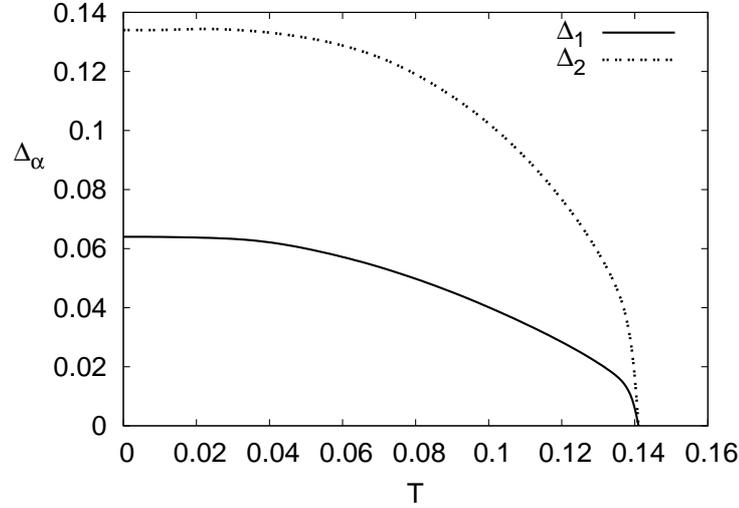


Figura 3.3: Parâmetros de *gap* em função da temperatura para $V = 0.6$ e $n = 1.0$.

Δ_1 e Δ_2 com a temperatura, para $V = 0.6$ e $n = 1.0$.

Na Fig. 3.3, nota-se claramente que, para esta escolha de n e V , a temperatura crítica do sistema é $T_c \approx 0.141$, conforme mencionamos anteriormente. Além disso, como os valores de Δ_1 e Δ_2 são distintos para praticamente todo $T < T_c$, percebe-se que existe um acoplamento efetivo entre as duas bandas do sistema. Conforme comentamos no capítulo anterior, as duas bandas se desacoplam exatamente no caso $\Delta_1 = \Delta_2$.

Analisaremos, agora, o efeito do aumento do número de elétrons para $n = 1.2$, mantendo fixa a intensidade das interações em $V = 0.6$. O resultado é apresentado na Fig. 3.4.

Pode-se ver, na Fig. 3.4, que a temperatura crítica do sistema é, agora, $T_c \approx 0.067$. Essa redução significativa de T_c em relação ao caso anterior ($n = 1.0$) é um efeito da dimensionalidade, refletindo uma grande mudança na densidade de estados

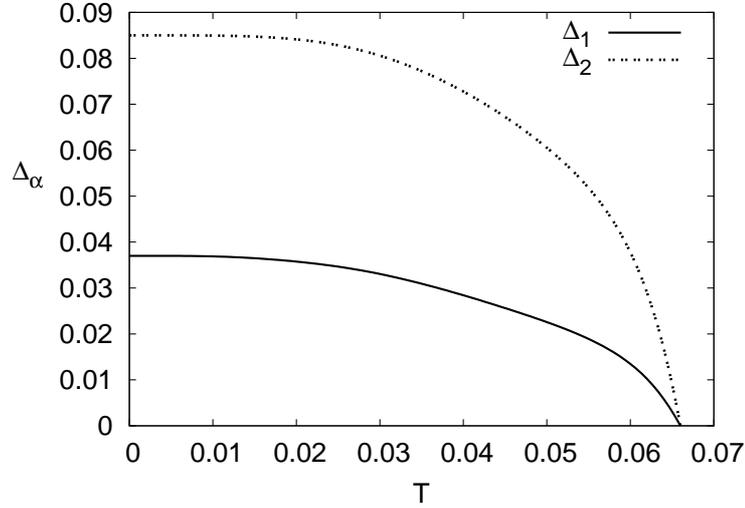


Figura 3.4: Parâmetros de *gap* em função da temperatura para $V = 0.6$ e $n = 1.2$ no nível de Fermi. Para $n = 1.2$ a energia de Fermi se afasta da singularidade de van Hove e, conseqüentemente, a densidade de estados nessa energia se reduz, ocasionando a redução da temperatura crítica.¹ A exemplo do caso anterior, os valores de equilíbrio dos parâmetros Δ_1 e Δ_2 diferem para todo $T < T_c$.

Pela forma das curvas mostradas nas Figs. 3.3 e 3.4, vemos que Δ_1 e Δ_2 têm o comportamento típico de **parâmetros de ordem**, sendo nulos na fase normal e não nulos na fase supercondutora. Entretanto, eles não são, diretamente, *gaps* físicos do sistema. $E_1(\mathbf{k})$ e $E_2(\mathbf{k})$, Eq.(2.66), representam energias associadas às excitações fermiônicas a partir do estado fundamental supercondutor, ou seja, são por definição, positivas. Segundo a Eq.(2.66), $E_1(\mathbf{k})$ corresponde às excitações de menores energias. Portanto, o mínimo de $E_1(\mathbf{k})$ é o verdadeiro *gap* físico do sistema.

¹A conexão entre T_c e a densidade de estados no nível de Fermi é mais evidente no tratamento analítico do problema de uma banda, apresentado no Apêndice A.

Conforme as Eqs. (2.60), (2.69), (2.67) e (2.68), o *gap* depende de combinações dos valores de equilíbrio dos parâmetros Δ_1 e Δ_2 , sendo, em geral, variável com \mathbf{k} . Mais adiante, faremos uma análise detalhada dessa dependência do *gap* com vetor de onda.

Na teoria BCS para um sistema de uma única banda e no limite de acoplamento fraco, o quociente entre o *gap* em temperatura nula e T_c é $\Delta(0)/k_B T_c = 1.76$. Essa razão numérica é universal, ou seja, é independente de qualquer parâmetro (exceto pela restrição de acoplamento fraco) e, portanto, constitui-se num excelente ponto de referência para qualquer teoria de supercondutividade. Vejamos como esse quociente se apresenta no sistema que estamos estudando.

Para o caso $n = 1.0$ e $V = 0.6$, Fig. 3.3, obtém-se o potencial químico $\mu(T \rightarrow 0) = -1$, coincidindo com o centro da banda b . Então, a superfície de Fermi é determinada pela condição $\bar{\epsilon}_b(\mathbf{k}) = 0$, o que, pela Eq. (2.20), é equivalente a $F_0(\mathbf{k}) = 0$. Por outro lado, os parâmetros de *gap* diferem para todo $T < T_c$ e, conseqüentemente, existe o acoplamento efetivo entre as duas bandas, e o *gap* depende de \mathbf{k} . Entretanto, segundo as equações (2.57), (2.60) e (2.66), nota-se que o *gap* tem seus valores máximo e mínimo iguais a $2\Delta_2$ e $2\Delta_1$, respectivamente. Isso nos permite obter uma estimativa da razão numérica $\Delta(0)/k_B T_c$ em termos do *gap* médio. Assim, $\Delta_{med}(T \rightarrow 0)/T_c = [\Delta_{max}(T \rightarrow 0) + \Delta_{min}(T \rightarrow 0)]/2T_c \approx 1.41$. Não é surpreendente que esse valor se afaste um pouco do resultado clássico 1.76.

Analogamente, para o caso de $n = 1.2$ e $V = 0.6$, Fig. 3.4, o *gap* é, também, dependente de vetor de onda. Tem-se, agora, $\mu(T \rightarrow 0) = -0.787$. Diferentemente

do caso anterior, isso resulta em $F_0(\mathbf{k}) \neq 0$, o que impede a determinação analítica dos limites máximo e mínimo do gap. Ainda assim, pode-se analisar numericamente o comportamento de $E_1(\mathbf{k})$ ao longo da linha de Fermi no espaço \mathbf{k} , obtendo o gap médio. Com esse procedimento, obtivemos $\Delta_{med}(T \rightarrow 0)/T_c = [\Delta_{max}(T \rightarrow 0) + \Delta_{min}(T \rightarrow 0)]/2T_c \approx 1.52$, não muito distante do valor obtido para $n = 1.0$ e um pouco mais próximo do valor de referência para acoplamento fraco. Isto pode ser interpretado, novamente, como um efeito da redução da densidade de estados no nível de Fermi, que se afasta da singularidade de van Hove.

3.3 Calor específico

O calor específico de um supercondutor, além de apresentar um decréscimo exponencial com a temperatura para $T \rightarrow 0$, evidenciando a existência do gap, apresenta uma descontinuidade em T_c , que é uma das evidências experimentais mais contundentes de um fenômeno de transição de fase nessa temperatura. A teoria BCS para um sistema de uma única banda no limite de acoplamento fraco obtém uma descontinuidade no calor específico em T_c que define uma nova razão numérica universal: $\Delta c_e/\gamma T_c = 1.43$.

Nesta seção, vamos calcular o calor específico do sistema que estamos estudando, comparando com o comportamento de referência comentado acima. Os procedimentos apresentados nas seções 3.1 e 3.2 permitem-nos obter $\mu(T)$, $\Delta_1(T)$ e $\Delta_2(T)$. Com isso, a Eq.(2.73) nos dá a energia interna como função da tempera-

tura, $U(T)$. Derivando numericamente $U(T)/N$ em relação a T , obtemos $c_e(T)$, o calor específico eletrônico (por partícula). A Fig.(3.5) mostra um gráfico de $c_e/\gamma T_c$ em função de T/T_c , para $V = 0.6$ e $n = 1.0$.

De forma geral o gráfico da Fig.(3.5), parte superior, mostra um comportamento similar ao de um supercondutor BCS de uma única banda no limite de acoplamento fraco. Entretanto, observa-se um pequeno desvio do comportamento linear acima de T_c , provavelmente devido à singularidade de van Hove no nível de Fermi. Por outro lado, o salto no calor específico é $\Delta c_e/\gamma T_c \approx 0.8$, mostrando um desvio significativo em relação ao valor de referência 1.43.

O comportamento de $c_e \times T$ sofre pequenas alterações se variarmos o preenchimento de bandas. Por exemplo, para o caso $n = 1.2$ e $V = 0.6$, obtemos a curva apresentada na parte inferior da Fig.(3.5). Nesse gráfico, notamos que não há mudanças qualitativas para $T \ll T_c$. Para $T > T_c$, o calor específico é uma função linear da temperatura, como esperado para um metal normal ($c_e = \gamma T$). Já o salto no calor específico é $\Delta c_e/\gamma T_c \approx 0.47$, ficando ainda mais distante do valor clássico da teoria BCS.

3.4 Simetria do gap no espaço-k

Um dos aspectos relevantes quando se estuda supercondutividade em uma rede é o tipo de simetria do *gap* no espaço-k. Em nosso modelo, o desacoplamento BCS é feito, inicialmente, no espaço real. Assim, a transformada de Fourier dá

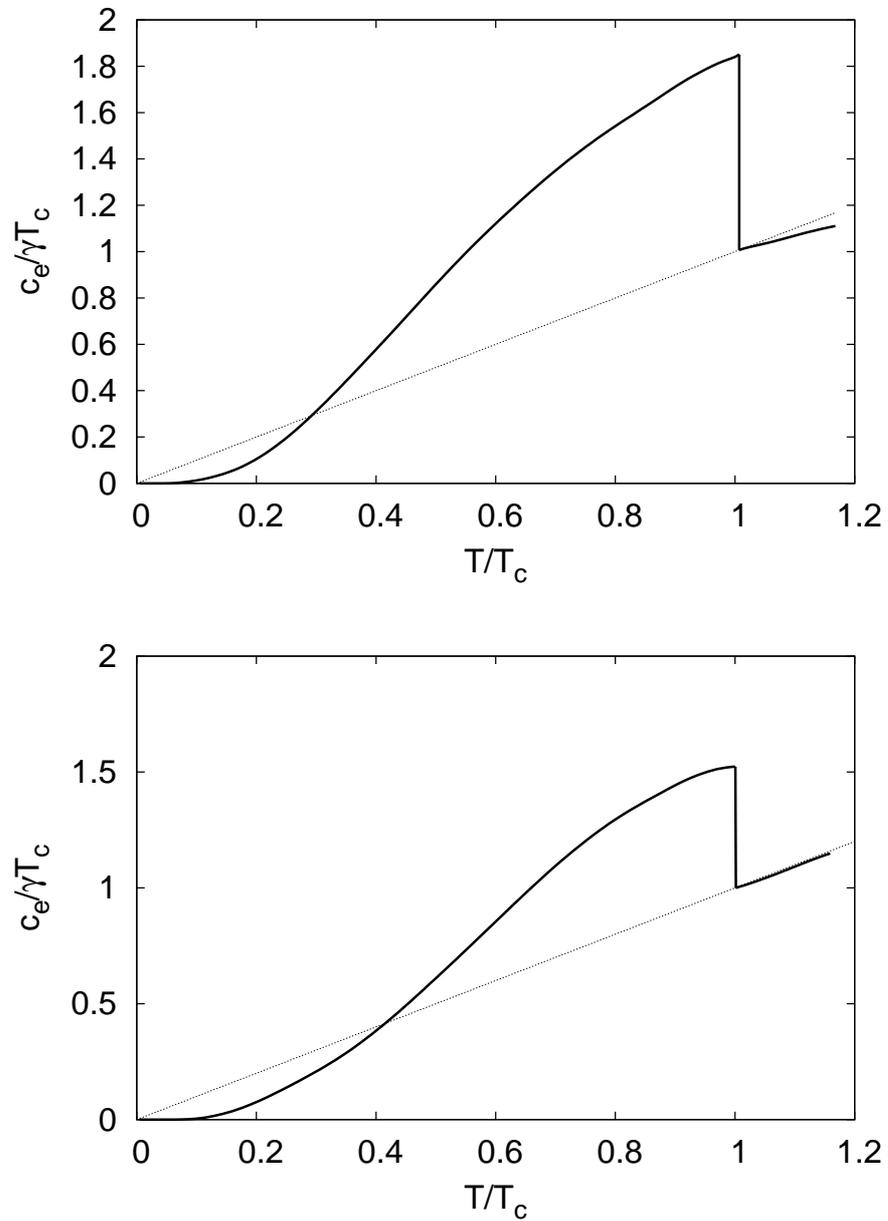


Figura 3.5: Calor específico, c_e , em função da temperatura, T , para $V = 0.6$, nos casos $n = 1.0$ (em cima) e $n = 1.2$ (embaixo). A linha tracejada indica o comportamento na ausência de supercondutividade, $c_e = \gamma T$.

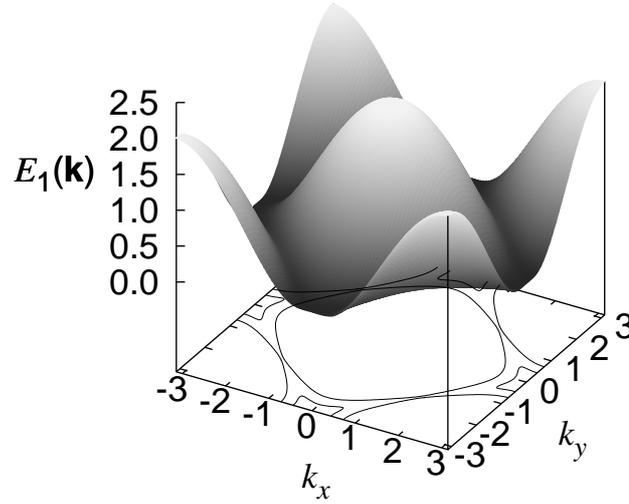


Figura 3.6: $E_1(\mathbf{k})$ na primeira zona de Brillouin, mostrando a simetria do *gap* de energias no espaço \mathbf{k} , para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e $T \rightarrow 0$.

diretamente a dependência em \mathbf{k} do *gap* físico. Então, para verificar que tipo de simetria é apresentada, fazemos um gráfico da energia mínima acessível às excitações fermiônicas do estado fundamental supercondutor, ou seja, de $E_1(\mathbf{k})$, em função de \mathbf{k} , para $T \rightarrow 0$.

A Fig.(3.6) mostra $E_1(\mathbf{k})$ para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e $T \rightarrow 0$. Nesse gráfico, notamos que o *gap* de energias não tem zeros, mas apresenta modulação em vetor de onda ao longo da linha de Fermi, isto é, o valor do *gap* não permanece constante ao longo da linha no espaço- \mathbf{k} que define a “superfície” de Fermi. Dessa forma, pode-se dizer que o *gap* apresenta uma simetria do tipo *s*-estendida.

A condição $F_0(\mathbf{k}) = 0$, que, conforme discutimos anteriormente, define a linha de Fermi neste caso, corresponde a um quadrado no plano $k_x k_y$, cujos vértices são localizados nos pontos $(0, -\pi)$, $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ e $(-\pi, 0)$. Pode-se ver, pelos contornos

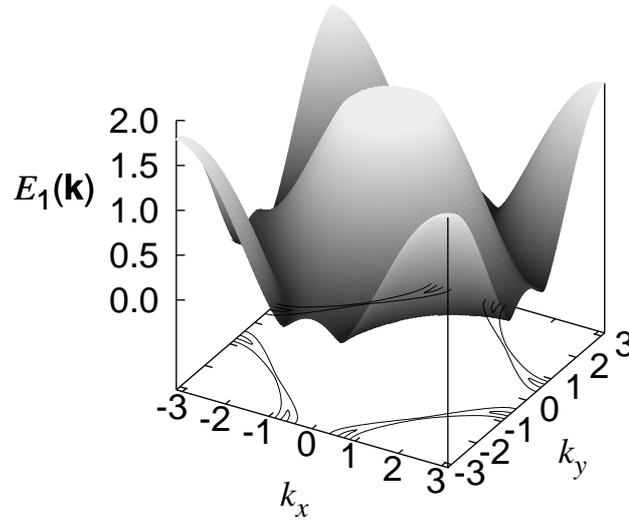


Figura 3.7: $E_1(\mathbf{k})$ na primeira zona de Brillouin, mostrando a simetria do *gap* de energias no espaço \mathbf{k} para $V = 0.6$, $n = 1.2$ e $T \rightarrow 0$.

de energia mostrados na Fig. 3.6, que os pontos de mínimo *gap*, $(2\Delta_1)$ situam-se nos vértices da linha de Fermi, enquanto os máximos $(2\Delta_2)$ localizam-se nos pontos médios dos lados desse quadrado.

Para se ter uma noção quantitativa mais clara da modulação em vetor de onda do *gap*, plotamos $E_1(\mathbf{k})$ ao longo de um dos lados da linha de Fermi. Esse gráfico é apresentado na Fig. 3.8, onde se podem ver claramente as posições e valores dos extremos do *gap*.

Mantendo a intensidade das interações e modificando um pouco a densidade eletrônica, não se notam alterações qualitativas na simetria do *gap*. O gráfico mostrado na Fig. 3.7 mostra $E_1(\mathbf{k})$ em função de \mathbf{k} para $n = 1.2$ e $V = 0.6$. Novamente, notamos que o *gap* apresenta simetria *s*-estendida. Entretanto, a amplitude da modulação em vetor de onda é menor que a observada no caso anterior.

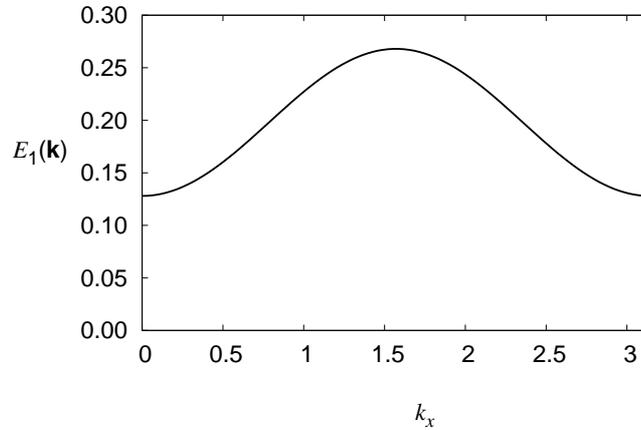


Figura 3.8: Modulação do *gap* de energias ao longo de um dos lados da linha de Fermi no espaço \mathbf{k} , para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e $T \rightarrow 0$.

Devido à mudança do potencial químico, a linha de Fermi não é mais um quadrado perfeito. Mesmo assim, é possível plotar $E_1(\mathbf{k})$ ao longo de um dos “lados” da linha de Fermi. Isto é feito tomando-se k_x como variável independente, a qual por exemplo pode assumir valores no intervalo $[0, \pi]$, e disso determinando-se k_y através da Eq. (2.16), com o valor de F_0 conhecido pela condição $\bar{\varepsilon}_b(\mathbf{k}) = 0$, no caso, $F_0 = -0.22$. O resultado está mostrado na Fig. 3.9, onde pode-se ver que o *gap* mínimo vale cerca de 0.057 e o máximo está próximo de 0.143. Relativamente ao caso anterior, a diferença entre os valores extremos é consideravelmente menor. Cabe, ainda, observar que, ao contrário do caso especial $n = 1.0$ (Fig. 3.8), o *gap* não está definido para todos os valores de k_x , pois uma parte desses valores não está contida na linha de Fermi.

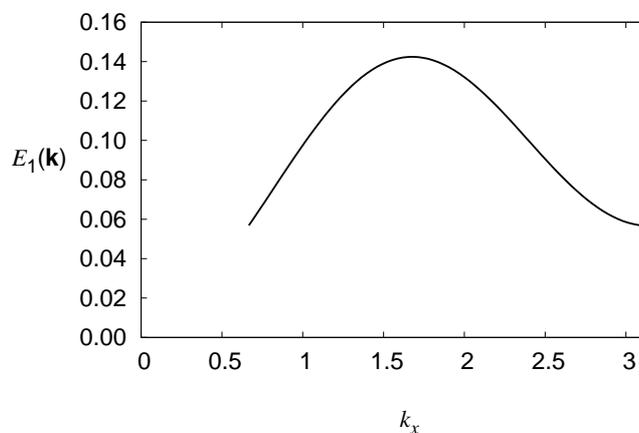


Figura 3.9: Modulação do *gap* de energias ao longo de um dos “lados” da linha de Fermi no espaço \mathbf{k} , para $V = 0.6$, $n = 1.2$ e $T \rightarrow 0$.

3.5 Acoplamento restrito

Como mencionamos anteriormente, estamos fazendo o desacoplamento supercondutor no espaço real e a transformada de Fourier dá diretamente a simetria do *gap* no espaço- \mathbf{k} . Se, por outro lado, a exemplo do que é feito usualmente na teoria BCS para um sistema de uma banda, restringirmos o acoplamento a uma faixa de energias em torno da “superfície” de Fermi, os resultados se aproximam muito daqueles obtidos para um supercondutor BCS de uma banda.

Para exemplificar, a Fig. 3.10 mostra a variação dos parâmetros Δ_1 e Δ_2 com T para o caso $V = 0.6$ e $n = 1.0$, onde restringimos o acoplamento a estados com energias próximas à energia de Fermi, numa faixa de largura igual a $1/4$ da largura da banda b . Nota-se que, com a restrição, os parâmetros Δ_1 e Δ_2 não diferem entre si para $T \rightarrow 0$. Dessa forma, como já discutido, desaparece o acoplamento efetivo entre as duas bandas ($\Delta_{ab} = 0$). Além disso, a razão numérica entre o *gap* físico e

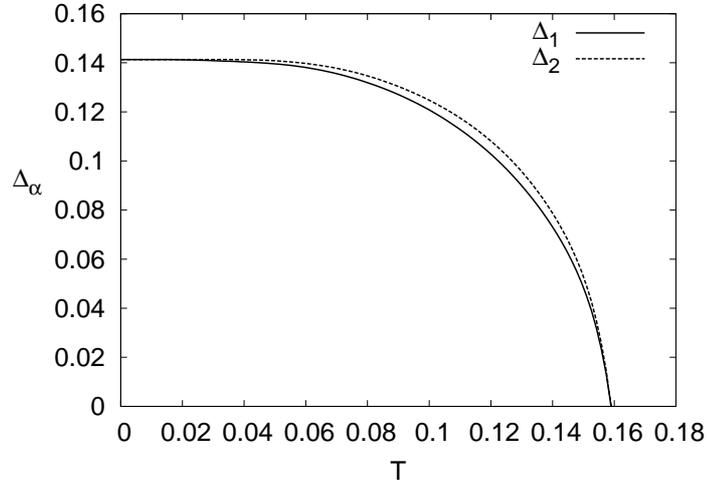


Figura 3.10: Parâmetros de *gap* em função da temperatura para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e acoplamento restrito a uma faixa de energias igual a $1/4$ da largura de banda.

T_c para $T \rightarrow 0$ é $\Delta(T \rightarrow 0)/k_B T_c \approx 1.75$, essencialmente reproduzindo o resultado clássico da teoria BCS de acoplamento fraco.

Já calor específico como pode ser visto na Fig.(3.11), de forma geral, mostra um comportamento similar ao de um supercondutor BCS de uma única banda no limite de acoplamento fraco. O salto na temperatura crítica é $\Delta c_e/\gamma T_c \approx 1.83$, mostrando ainda um certo desvio em relação ao valor universal 1.43, mas bastante mais próximo quando comparado com os casos em que não foi imposta restrição ao acoplamento.

Por último, o *gap* físico apresenta uma simetria do tipo *s*, como pode ser visto na Fig. 3.12. Isto ocorre, conforme comentamos anteriormente, pelo fato de termos $F_0(\mathbf{k}) = 0$ para $n = 1$ e porque a igualdade entre Δ_1 e Δ_2 elimina qualquer dependência do *gap* em vetor de onda [ver Eqs. (2.60)].

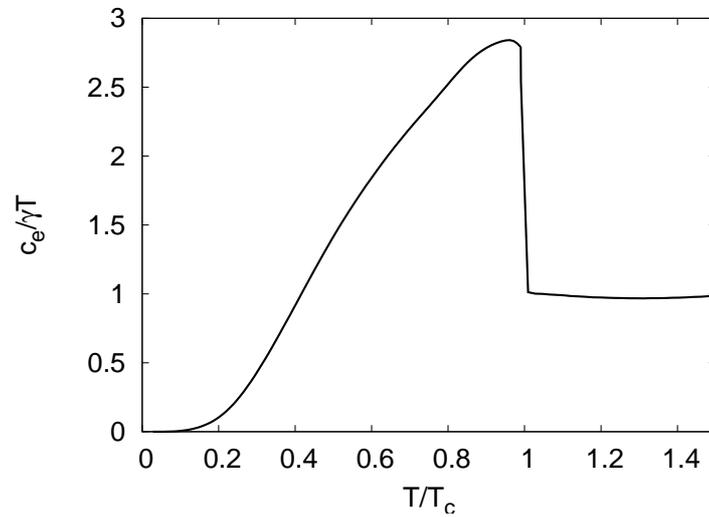


Figura 3.11: Calor específico, c_e , em função da temperatura, T , para $V = 0.6$, $n = 1.0$ e acoplamento restrito a uma faixa de energias igual a $1/4$ da largura de banda.

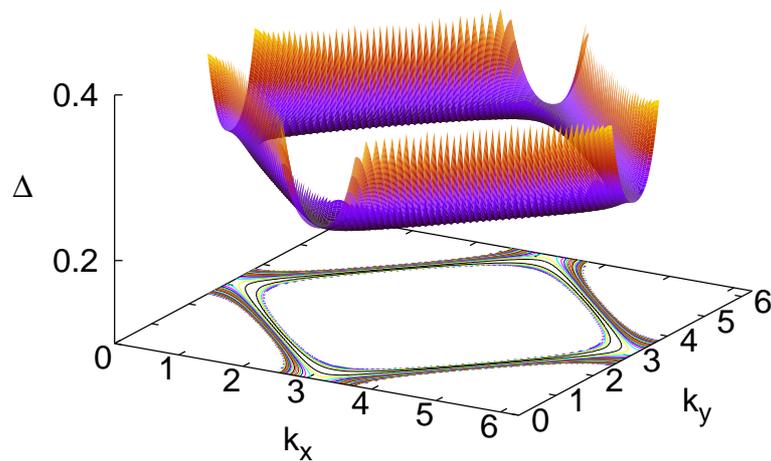


Figura 3.12: Simetria do *gap* de energias no espaço \mathbf{k} com $V = 0.6$, $n = 1.0$, $T \rightarrow 0$ e acoplamento restrito a uma faixa de energias igual a $1/4$ da largura de banda.

Capítulo 4

Conclusões

Neste trabalho, desenvolvemos um estudo detalhado da supercondutividade num modelo eletrônico, considerando somente graus de liberdade de carga, em uma estrutura bidimensional do tipo *tabuleiro de xadrez*. Isto foi motivado pela observação experimental de supercondutividade no óxido metálico $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, um pirocloro, e baseados na utilização da rede tabuleiro de xadrez como forma simplificada de reproduzir os aspectos locais de frustração geométrica na rede piroclórica. No modelo proposto, consideramos dois átomos idênticos associados a cada sítio de uma rede quadrada, com um orbital por átomo. Usamos uma formulação *tight-binding*, na qual os elétrons podem “saltar” entre esses orbitais. Além do salto (*hopping*), levamos em conta interações coulombianas diretas não locais. Assumimos que o *hopping* e as interações não locais ocorrem entre primeiros vizinhos e também segundos vizinhos, ao longo das diagonais de quadrados alternados.

O problema *tight-binding* sem interações foi diagonalizado exatamente, dando

origem a duas bandas de energia, sendo uma delas não dispersiva. Concentramos nossa atenção na obtenção de uma solução supercondutora, assumindo que os parâmetros de interação entre vizinhos são modificados para gerar interações atrativas. Para análise da supercondutividade, desenvolvemos formalmente o desacoplamento BCS dos termos de interação, obtendo, assim, um hamiltoniano BCS de duas bandas acopladas. A diagonalização desse hamiltoniano forneceu seus autovalores de energia, a partir dos quais construímos uma expressão para energia livre do sistema em termos dos parâmetros de *gap*. Minimizar numericamente a energia livre em relação a esses parâmetros de *gap* foi a forma que adotamos neste trabalho para efetivar a autoconsistência da solução supercondutora.

A análise da fase supercondutora do sistema foi realizada com base no estudo numérico e sistemático da estrutura de mínimos da energia livre em termos dos parâmetros de *gap*. Através dessa análise, vimos que os valores de equilíbrio dos parâmetros Δ_1 e Δ_2 têm o comportamento típico de **parâmetros de ordem**, sendo nulos na fase normal e não nulos na fase supercondutora; entretanto, eles não são, diretamente, *gaps* físicos do sistema.

O *gap* físico desse sistema depende de combinações dos valores de equilíbrio dos parâmetros Δ_1 e Δ_2 , sendo dependente de vetor de onda. Vimos que, para a faixa de parâmetros estudados, o *gap* físico não apresenta nós, caracterizado, assim, uma simetria do tipo *s* estendida. Além disso, estimativas da razão numérica $\frac{\Delta(0)}{k_B T_c}$ mostram desvios em relação ao comportamento de um supercondutor BCS de uma única banda no limite de acoplamento fraco. Em consistência com a ausência de

zeros no *gap*, o calor específico do sistema apresenta um decréscimo exponencial a baixas temperaturas.

Nosso estudo detalhado de supercondutividade na rede *tabuleiro de xadrez* foi motivado pelas propriedades supercondutoras do composto $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$, mas sem a pretensão de descrever especificamente esse óxido piroclórico. Em particular, a própria utilização da rede *tabuleiro de xadrez* e a faixa de parâmetros investigada neste trabalho afastam-se da realidade física experimental. Cabe salientar que os parâmetros do modelo podem ser investigados em uma faixa mais próxima da realidade experimental, exigindo, entretanto, um maior refinamento dos aspectos computacionais. Neste sentido, na continuidade deste trabalho (não incluída nesta dissertação) deveremos explorar diagramas de fases, variando n , V_1 e V_2 . Pretendemos, ainda, incluir explicitamente a repulsão coulombiana local, U , e, eventualmente, levar em conta os termos de troca (interações entre spins) para abordar a coexistência de supercondutividade e correlações magnéticas frustradas.

Apêndice A

Revisão BCS: sistema de uma banda

Neste apêndice faremos uma breve revisão da teoria BCS para um sistema de uma única banda. Para tal, vamos utilizar como bibliografia básica alguns livros textos, por exemplo [15, 16].

O ponto de partida é o hamiltoniano BCS,

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad (\text{A.1})$$

no qual o termo de interação pode ser visto como envolvendo a aniquilação de um par de elétrons com vetores de onda \mathbf{k} e $-\mathbf{k}$ e a criação de um par de elétrons com vetores de onda \mathbf{k}' e $-\mathbf{k}'$. Esses pares de elétrons com vetores de onda opostos são chamados *pares de Cooper*. É entre os dois elétrons de cada par que a interação atrativa $\mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ é significativa.

No que segue, vamos considerar que as energias de elétrons independentes, $\epsilon_{\mathbf{k}}$, são medidas em relação ao potencial químico, ou seja, em relação à superfície de

Fermi para temperaturas baixas. Isso significa que, rigorosamente, o que estamos chamando de “hamiltoniano” é, na verdade, $H - \mu N$. Isto é conveniente pois, como veremos adiante, vamos trabalhar com um sistema em que apenas o número **médio** de partículas é determinado.

A.1 Aproximação de campo médio

Vamos usar um desacoplamento do produto de quatro operadores que aparece no termo de interação. Genericamente, um produto de dois operadores quaisquer é desacoplado como segue:

$$AB \approx \langle A \rangle B + \langle B \rangle A - \langle A \rangle \langle B \rangle. \quad (\text{A.2})$$

No hamiltoniano BCS, interpreta-se o termo de interação como o produto de um operador de criação de um par de Cooper por um operador de aniquilação de um par de Cooper. O desacoplamento desse produto é feito, então, na forma

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} &= \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &+ c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ &- \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Ainda é conveniente definir

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv - \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = - \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (\text{A.4})$$

A escolha de $\Delta_{\mathbf{k}}$ **real** não é necessária, mas pode ser feita, pois leva a uma solução autoconsistente no caso de um sistema homogêneo.

Vamos considerar que o potencial efetivo $\mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ “existe” como potencial atrativo para uma faixa de energias dos elétrons de largura 2ξ em torno da superfície de Fermi (para caso em que essa interação é mediada por fônons, $\xi \sim \hbar\omega_D$, onde ω_D é a frequência de Debye). Além disso, vamos supor que, nessa região, o potencial é fracamente dependente de vetor de onda, podendo ser considerado aproximadamente constante e negativo, ou seja,

$$\mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \begin{cases} -\mathcal{V}/N, & \text{para } |\epsilon_{\mathbf{k}}|, |\epsilon_{\mathbf{k}'}| < \xi \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

o fator $1/N$ é necessário para que se tenha uma energia por partícula finita no limite $N \rightarrow \infty$. Note que $\Delta_{\mathbf{k}}$ só é não nulo para \mathbf{k} na região em que $\mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \neq 0$.

Assim, o hamiltoniano (A.1) fica

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + 1) - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Esse hamiltoniano é, agora, de partícula única. Também é interessante notar que os autoestados desse hamiltoniano não têm um número definido de partículas. Apenas o número **médio** pode ser fixado. A **igualdade** entre os valores médios dos operadores de criação e aniquilação de pares (ver a definição de $\Delta_{\mathbf{k}}$, Eq. (A.4)) garante a conservação desse número médio.

A.2 Diagonalização

O hamiltoniano obtido na aproximação de campo médio é *não diagonal*, no sentido de que não conserva o número de partículas e, portanto, não está escrito na forma de produto das energias das partículas pelos seus operadores número de ocupação. O processo de determinação das novas energias de uma partícula chama-se *diagonalização* do hamiltoniano.

O cálculo das energias é simplificado se escrevermos o hamiltoniano explicitamente numa forma matricial:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & -\epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle. \quad (\text{A.7})$$

A diagonalização corresponde ao cálculo do determinante

$$\begin{vmatrix} \lambda - \epsilon_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}} & \lambda + \epsilon_{\mathbf{k}} \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{A.8})$$

cuja solução é

$$\lambda = \pm \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \equiv \pm E_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A.9})$$

Estas energias $E_{\mathbf{k}}$ vão corresponder a novas “partículas”, descritas por operadores de criação e aniquilação que são combinações lineares dos operadores de elétrons. Tais operadores podem ser definidos pelas relações

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \beta_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

e seus hermitianos conjugados.

Os coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ podem ser determinados a partir de duas condições:

1. Os novos operadores, sendo combinações lineares de operadores fermiônicos, devem satisfazer as relações de anticomutação usuais para operadores de criação e aniquilação de férmions. Isto leva à condição

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (\text{A.11})$$

2. O hamiltoniano só deve conter termos *diagonais* nos novos operadores. Invertendo as relações de definição de $\alpha_{\mathbf{k}}$ e $\beta_{\mathbf{k}}$ e substituindo no hamiltoniano, deve-se impor que os coeficientes dos termos não diagonais sejam nulos. Daí resulta à condição

$$2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^2(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) = 0. \quad (\text{A.12})$$

Estas duas condições permitem parametrizar os coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ por um ângulo $\theta_{\mathbf{k}}$, tal que

$$u_{\mathbf{k}} = \cos\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2}\right), \quad v_{\mathbf{k}} = \sin\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2}\right). \quad (\text{A.13})$$

Então, a partir dessa parametrização e com uma álgebra simples obtém-se,

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right], \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right]. \quad (\text{A.14})$$

Levando tudo ao hamiltoniano (A.6), chega-se a

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}) + E_0 \quad (\text{A.15})$$

onde

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle). \quad (\text{A.16})$$

A característica básica deste hamiltoniano é que as excitações de uma partícula são fermiônicas, mas existe um *gap* de energias para essas excitações.

O *gap* é determinado pela relação de autoconsistência eq.(A.4), isto é, a própria definição de $\Delta_{\mathbf{k}}$.

A.3 A condição de autoconsistência para temperatura finita

Como mencionamos anteriormente, $E_{\mathbf{k}}$ deve ser interpretada como a energia de excitação de uma “partícula” no estado supercondutor. Como essa “partícula” tem caráter fermiônico, a probabilidade de que ocorra excitação em equilíbrio térmico é dada pela distribuição de Fermi-Dirac, ou seja,

$$f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{[\exp(\frac{E_{\mathbf{k}}}{k_B T}) + 1]}. \quad (\text{A.17})$$

Esta constatação nos permite obter a condição de autoconsistência BCS para temperatura finita. Partindo da Eq. (A.4), escrevendo os operadores de elétrons em termos dos novos operadores e tomando o valor médio, temos

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= - \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \\ &= - \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \langle 1 - \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} - \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \rangle \end{aligned}$$

$$= - \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} [1 - 2f(E_{\mathbf{k}})]. \quad (\text{A.18})$$

Usando a forma explícita da função de Fermi, Eq. (A.17), e as Eqs. (A.14) para $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$, obtemos

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T}\right). \quad (\text{A.19})$$

Esta equação admite a solução $\Delta_{\mathbf{k}} \neq 0$ na região onde o potencial é não nulo; dentro dessa região, $\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \Delta$, independente de \mathbf{k} , e a relação de autoconsistência é

$$1 = \frac{\mathcal{V}}{2N} \sum_{\mathbf{k}}' \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right), \quad (\text{A.20})$$

a qual determina a dependência em temperatura do *gap*, $\Delta(T)$, pois $E_{\mathbf{k}} = (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}$. A “linha” na soma indica que a mesma é restrita à região na qual o potencial é não nulo.

A condição de autoconsistência pode ser escrita sob a forma de uma integral em energia, resultando em

$$\frac{1}{\mathcal{V}D(\epsilon_f)} = \int_0^{\xi} \frac{\tanh[(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}/2k_B T]}{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}} d\epsilon; \quad (\text{A.21})$$

onde $D(\epsilon_f)$ é a densidade de estados no nível de Fermi. Esta equação não é tratável analiticamente, mas pode ser computada numericamente.

Na temperatura crítica, $\Delta(T_c) \rightarrow 0$. Assim, pode-se estimar T_c fazendo $\Delta = 0$ em (A.21). Para $k_B T_c \ll \xi$, obtemos

$$k_B T_c = 1.13\xi \exp\left(\frac{-1}{D(\epsilon_f)\mathcal{V}}\right). \quad (\text{A.22})$$

Calculando o *gap* em $T = 0$ no limite de acoplamento fraco, $D(\epsilon_f)\mathcal{V} \ll 1$, e comparando com a expressão para T_c , Eq. (A.22), obtemos a relação

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = 3.52. \quad (\text{A.23})$$

Este resultado, que relaciona a largura do *gap* em temperatura nula com T_c , é notável, pois independe de qualquer parâmetro, podendo ser usado como um teste para a teoria BCS no limite de acoplamento fraco.

Dois outros resultados interessantes vêm do cálculo do calor específico c_V . Primeiramente, obtém-se uma descontinuidade na temperatura crítica que, comparando com o calor específico de um metal paramagnético ($c_V = \gamma T$) em $T = T_c$, conduz a um resultado clássico da teoria BCS,

$$\frac{\Delta c_V}{\gamma T_c} = 1.43. \quad (\text{A.24})$$

Por outro lado, quando $T \ll T_c$, a teoria BCS prevê que o calor específico decresce exponencialmente com a temperatura, ou seja

$$c_s(T) \approx \exp\left[-\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c}\right], \quad (\text{A.25})$$

o que reproduz bem as observações experimentais.

Bibliografia

- [1] H. Sakai, K. Yoshimura, H. Ohno, H. Kato, S. Kambe, R. E. Walstedt, T.D. Matsuda, Y. Haga, and Y. Onuki, “Superconductivity in a pyrochlore oxide, $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ ”, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, L785 (2001).
- [2] R. Jin, J. He, S. McCall, C. Alexander, F. Drymiotis, and D. Mandrus, “Superconductivity in the correlated pyrochlore $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. B* **64**,180503 (2001).
- [3] M. Hanawa, Y. Muraoka, T. Tayama, T. Sakakibara, J. Yamaura, and Z. Hiroi, “Superconductivity at 1 K in $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 187001 (2001).
- [4] Z. Hiroi and M. Hanawa, “Superconducting properties of the pyrochlore oxide $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ ”, *J. Phys. Chem. Sol.* **63**, 1021 (2002).
- [5] O. Vyaselev, K. Kobayashi, K. Arai, J. Yamazaki, K. Kodama, M. Takigawa, M. Hanawa and Z. Hiroi, “Cd and Re NMR/NQR in pyrochlore compound $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ ”, *J. Phys. Chem. Solids* **63**, 1031 (2002).

-
- [6] O. Vyaselev, K. Arai, K. Kobayashi, K. Kodama, M. Takigawa, M. Hanawa and Z. Hiroi, “Superconductivity and Magnetic Fluctuations in $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ via Cd Nuclear Magnetic Resonance and Re Nuclear Quadrupole Resonance”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 017001 (2002).
- [7] H. Harina, “Electronic bandstructures on 5d-transition metal pyrochlore: $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ and $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ ”, *J. Phys. Chem. Solids* **63**, 1035 (2002).
- [8] D. J. Sing, P. Blaha, K. Schwarz, J. O. Sofo, “Electronic structure of the pyrochlore metals $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ and $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. B* **65**, 155109 (2002).
- [9] Zenji Hiroi, Jun-Ichi Yamaura, Shigeki Yonezawa, and Hisatomo Harima, “Chemical trends of superconducting properties in pyrochlore oxides”, *Phys. C: Superconductivity*, **460-462**, 20 (2007).
- [10] B. Canals and C. Lacroix, “Quantum spin liquid: The Heisenberg antiferromagnet on the three-dimensional pyrochlore lattice”, *Phys. Rev. B* **61**, 1149 (2000).
- [11] C. Pinettes, B. Canals and C. Lacroix, “Classical Heisenberg antiferromagnet away from the pyrochlore lattice limit: Entropic versus energetic selection”, *Phys. Rev. B* **66**, 024422 (2002).
- [12] B. Canals, “From the square lattice to the checkerboard lattice: Spin-wave and large- n limit analysis”, *Phys. Rev. B* **65**, 184408 (2002).

-
- [13] M. Elhajal, B. Canals, C. Lacroix, “Frustration in 2D and 3D tetrahedral-based lattices”, *J. Magn. Magn. Mater.* **226-230**, 379 (2001).
- [14] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, “Theory of Superconductivity”, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [15] de Gennes, P.G., *Superconductivity of Metals and Alloys*, Addison-Wesley Publishing Co., New York, USA, 1996.
- [16] Pureur P., *Supercondutividade e Supercondutores de Alta Temperatura Crítica*, Instituto de Física–UFRGS, Porto Alegre, Brasil, 2004.
- [17] S. Yonezawa, Y. Muraoka, Y. Matsushita, and Z. Hiroi, “Superconductivity in a pyrochlore-related oxide KOs_2O_6 ”, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, L9 (2004).
- [18] M. Brühwiler, S. M. Kazakov, N. D. Zhigadlo, J. Karpinski, and B. Batlogg, “Superconductivity in the geometrically frustrated pyrochlore RbOs_2O_6 ”, *Phys. Rev. B* **70**, 020503(R) (2004).
- [19] S. Yonezawa, Y. Muraoka, Y. Matsushita, and Z. Hiroi, “New Pyrochlore Oxide Superconductor RbOs_2O_6 ”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 819 (2004).
- [20] S. Yonezawa, Y. Muraoka, and Z. Hiroi, “New beta-Pyrochlore Oxide Superconductor CsOs_2O_6 ”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 1655 (2004).
- [21] A. Koda, W. Higemoto, K. Ohishi, S. R. Saha, R. Kadono, S. Yonezawa, Y. Muraoka, and Z. Hiroi, “Possible Anisotropic Order Parameter in Pyrochlore

- Superconductor KOs_2O_6 Probed by Muon Spin Rotation”, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1678 (2005).
- [22] T. Yoshioka, A. Koga and N. Kawakami, “Analysis of checkerboard electron system by path-integral renormalization group method”, Physica B **378-380**, 294 (2006).
- [23] F. Pollmann, J. J. Betouras, K. Shtengel, P. Fulde, “Correlated Fermions on a Checkerboard Lattice”, Phys. Rev. Lett. **97**, 170407 (2006).
- [24] C. Chen, “Nature of quasiparticles in itinerant correlated electron systems with geometrical frustration”, Phys. Letter A **303**, 81 (2002).
- [25] F. Pollmann, J. J. Betouras, E. Runge and P. Fulde, “Charge degrees in the quarter-filled checkerboard lattice”, J. Magn. Magn. Mater. **310**, 966 (2007).
- [26] Liliana Arrachea, A. A. Aligia, “Superconductivity in a generalized Hubbard model”, Phys. C **289**, 70 (1997).
- [27] Liliana Arrachea, A. A. Aligia, “ $d_{x^2-y^2}$ superconductivity in a generalized Hubbard model”, Phys. Rev. B **59**, 1333 (1999).
- [28] H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, “Bardeen-Cooper-Schrieffer Theory of Superconductivity in the Case of Overlapping Bands”, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).

-
- [29] R. E. Lagos and G. G. Cabrera, “A two band model for superconductivity: probing interband pair formation”, *Braz. J. Phys.* **33**, 713 (2003).
- [30] O. Entin-Wohlman and Y Imry, “Enhanced pairing interaction in a two-band model”, *J. Phys.:Condens. Matter* **1**, 9045 (1989).
- [31] P. Konsin and B Sorkin, “A generalized two-band model for the superconductivity in MgB₂”, *Supercond. Sci. Technol.* **17**, 1472 (2004).