

Lucas Cesar Gomes Squillante

Trabalho de Conclusão de Curso

Curso de Graduação em Física

***Estudos das Propriedades Físicas de
Materiais Supercondutores***

Rio Claro - SP, Brasil

Lucas Cesar Gomes Squillante

Trabalho de Conclusão de Curso

Curso de Graduação em Física

***Estudos das Propriedades Físicas de
Materiais Supercondutores***

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Câmpus de Rio Claro, da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau de Bacharel em Física, sob o título “Estudos das Propriedades Físicas de Materiais Supercondutores”

Orientador:

Prof. Dr. Ricardo Paupitz B. dos Santos

UNESP - UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA - DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Rio Claro - SP, Brasil

537.623 Squillante, Lucas Cesar Gomes
S773e Estudo das propriedades físicas de materiais
supercondutores / Lucas Cesar Gomes Squillante. - Rio Claro,
2015
51 f. : il., figs., gráfs., tabs.

Trabalho de conclusão de curso (bacharelado - Física) -
Universidade Estadual Paulista, Instituto de Geociências e
Ciências Exatas

Orientador: Ricardo Paupitz B. dos Santos

1. Supercondutividade. 2. Efeito Meissner. 3. Efeito
Josephson. 4. Propriedades elétricas dos sólidos. I. Título.

Lucas Cesar Gomes Squillante

Estudo das Propriedades de Materiais Supercondutores

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Câmpus de Rio Claro, da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau de Bacharel em Física, sob título Estudo das Propriedades de Materiais Supercondutores.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Ricardo Paupitz B. dos Santos (orientador)

Prof. Tit. Roberto E. Lagos Monaco

Prof. Dr. Francisco José dos Santos

Rio Claro, 26 de fevereiro de 2015.


Assinatura do(a) aluno(a):


Assinatura do(a) orientador(a):

Sumário

	Resumo	
	Abstract	
1	INTRODUÇÃO	6
2	REVISÃO DE FÍSICA MODERNA	8
2.1	Equação de Schrödinger, funções de onda e auto-energia.	8
2.2	O poço de potencial e a quantização da energia	10
2.3	A função de onda do elétron livre - Gás de elétrons.	12
2.4	Parâmetros de Fermi	14
3	PROPRIEDADES ELÉTRICAS DOS SÓLIDOS	17
3.1	Condutividade elétrica em metais	17
3.2	Lei de Matthiessen	21
3.3	Teoria de bandas	21
4	PROPRIEDADES DE SUPERCONDUTORES	24
4.1	Materiais supercondutores	24
4.2	Resistividade zero	25
4.3	O efeito Meissner-Ochsenfeld	27
4.4	Diamagnetismo perfeito	28
4.5	Supercondutores Tipo I e II	30
4.6	Pares de Cooper	31
4.7	Equações de London	32
4.8	Teoria BCS	34
4.9	Efeito Josephson D.C. e A.C.	35
5	REVISÃO DA LITERATURA - FeSe_{1-x}	40
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	44
7	REFERÊNCIAS	45
8	BIBLIOGRAFIA	47
9	Eventos científicos e premiações	48
10	Agradecimentos	49

Resumo

O fenômeno da supercondutividade foi descoberto pelo físico holandês Heike Kamerlingh Onnes (1853 – 1926) utilizando ^4He liquefeito para monitorar o comportamento da resistência elétrica de uma amostra de mercúrio (Hg) resfriada até a temperatura de $\sim 4\text{ K}$, observando que a resistência elétrica do Hg tornava-se zero abaixo de uma temperatura crítica. O objetivo principal deste trabalho de conclusão de curso é fazer uma breve revisão de Física Moderna, discutir algumas propriedades dos materiais supercondutores e realizar uma breve discussão sobre a teoria BCS e suas predições. Adicionalmente foi realizada uma revisão da literatura sobre a liga binária FeSe_{1-x} com a finalidade de explorar as fases da mesma, uma vez que uma delas é supercondutora abaixo de $8,5\text{ K}$.

Abstract

Superconductivity was discovered by the dutch physicist Heike Kamerlingh Onnes (1853 – 1926) employing liquefied ^4He to investigate the behavior of the electrical resistance of a mercury (Hg) sample cooled until $\sim 4\text{ K}$, noticing that the electrical resistance became zero below a certain critical temperature. The main goal of this bachelor work is to review some concepts of modern Physics, discuss some properties of superconducting materials and perform a brief discussion about the BCS theory and its predictions. Furthermore, a literature review of the binary alloy FeSe_{1-x} was made to explore phases, since one of them superconducts below 8.5 K .

“Este trabalho de conclusão de curso (TCC) foi realizado pelo aluno Lucas Cesar Gomes Squillante sob orientação direta do Prof. Dr. Valdeci Pereira Mariano de Souza. Ocorre que para a realização de um estágio de pós-doutorado na Universidade Johannes Kepler - Austria (com bolsa daquela instituição) foi necessário que Prof. Mariano pedisse suspensão temporária do seu contrato de trabalho na Unesp. Assim, embora toda a orientação deste trabalho tenha sido feita pelo Prof. Mariano, o Prof. Dr. Ricardo Paupitz gentilmente assumiu a responsabilidade formal/burocrática da orientação. Por esta razão, o nome Prof. Dr. Mariano de Souza não aparece explicitamente como orientador deste trabalho”

1 INTRODUÇÃO

O fenômeno da supercondutividade foi descoberto pelo físico holandês Heike Kamerlingh Onnes, motivado por seu trabalho na liquefação do ^4He (ONNES, 1909). A supercondutividade foi pela primeira vez observada enquanto Onnes investigava o comportamento do mercúrio quando resfriado até a temperatura de aproximadamente 4 K (ONNES, 1911), conforme a Figura 1.

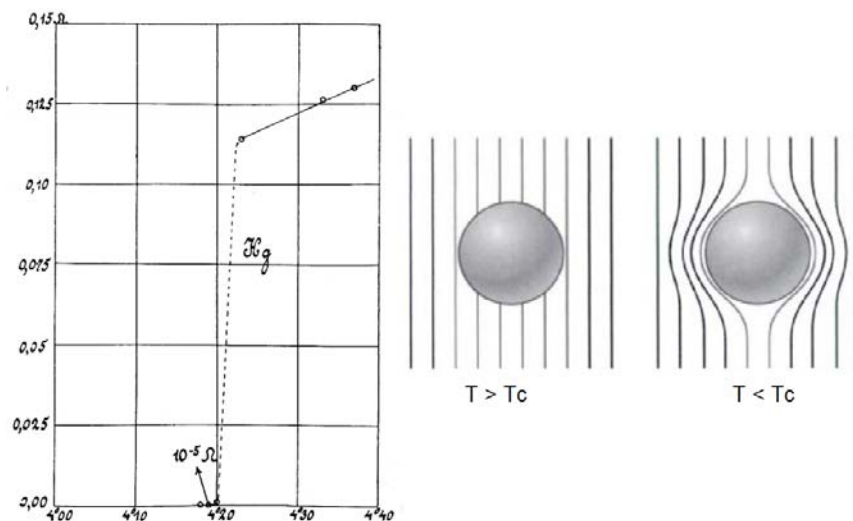


Figura 1: (a) Resistência elétrica do Hg atinge um valor muito próximo de zero abaixo de T_c (ONNES; 1911); (b) Acima de T_c o campo magnético penetra totalmente o interior do material e na fase supercondutora, ou seja, abaixo da temperatura crítica, o campo magnético é expulso do interior do mesmo (KITTEL, 2005).

Na década de 80 foi sintetizado o sistema $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ (BEDNORZ; MUELLER, 1986) o qual apresenta uma temperatura crítica (T_c) de 30 K. Posteriormente, outros supercondutores de alta temperatura crítica foram descobertos, um exemplo, é o material cerâmico $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (YBCO) com $T_c \approx 92 \text{ K}$ (WU *et al.*, 1987), conforme a Figura 2. Tais sólidos pertencem à família dos cupratos (por apresentarem cobre e oxigênio em sua composição) e constituem a primeira classe de supercondutores de alta T_c reportados na literatura.

Uma vez que um material supercondutor não perde energia pelo efeito Joule, que

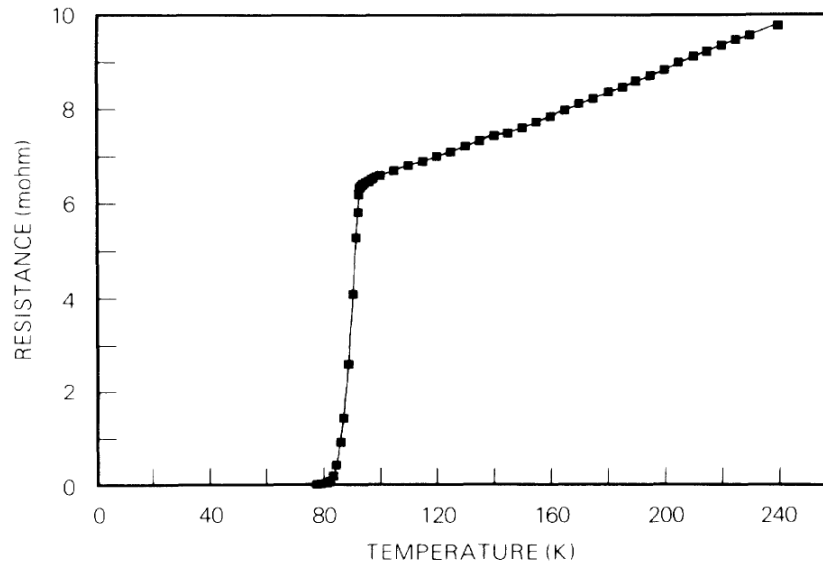


Figura 2: Resistência elétrica do composto $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ em função da temperatura (WU *et al.*, 1987).

é a dissipação de energia na forma de calor, existe um grande interesse pela busca de combinações de elementos que apresentem T_c cada vez mais próximas da temperatura ambiente, conforme a Figura 3, para que o material possa ser utilizado em aplicações tecnológicas mais abrangentes.

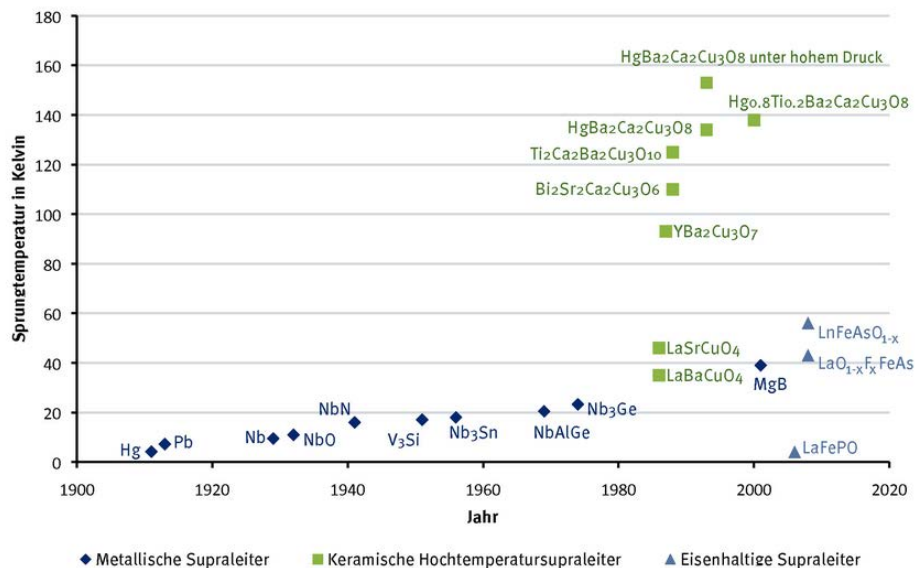


Figura 3: Temperaturas críticas de diversos materiais que apresentam supercondutividade em função dos anos. Observa-se o aumento expressivo da temperatura crítica após a sintetização dos cupratos. Legenda: \blacklozenge – Metais que se tornam supercondutores, \blacksquare – Materiais cerâmicos supercondutores de altas temperaturas e \blacktriangle – Supercondutores à base de ferro (WELT, 2011).

Vale a pena ressaltar que já existem materiais supercondutores sendo utilizados no mundo, um exemplo são os trens Maglev no Japão (YOSHIO, 2003).

2 REVISÃO DE FÍSICA MODERNA

Neste capítulo é apresentada uma revisão de alguns conceitos fundamentais da Mecânica Quântica que servem de base para o entendimento dos fenômenos relacionados à supercondutividade. Tais fenômenos serão discutidos em capítulos posteriores.

2.1 Equação de Schrödinger, funções de onda e auto-energia

Em Mecânica Clássica, se uma força atua sobre uma partícula então é possível escrever a seguinte equação de movimento em uma dimensão:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}(r, v, t) \quad (2.1)$$

Tal equação é a bem conhecida 2ª Lei de Newton, em que $\vec{p} = m\vec{v}$. Se tomarmos o exemplo da força elétrica F que age sobre um elétron de carga $e = -1,60217657 \times 10^{-19}$ C e massa $m = 9,10938291 \times 10^{-22}$ μg , pode-se obter a seguinte expressão:

$$\vec{F} = q\vec{E} = -e\vec{E} \quad (2.2)$$

considerando um campo elétrico aplicado somente na direção \vec{x} . Outra maneira de representar a equação anterior é pela forma:

$$dp_x = -eEdt \quad (2.3)$$

$$\frac{dp_y}{dt} = \frac{dp_z}{dt} = 0 \quad (2.4)$$

Calculando a integral da equação 2.3 e considerando que $v_x(0) = v_y(0) = v_z(0) = 0$,

obtêm-se:

$$\int dp_x = \int -eEdt \quad (2.5)$$

$$p_x = -eEt \quad (2.6)$$

$$v_x = -\frac{e}{m}Et \quad (2.7)$$

A equação 2.7 demonstra que a velocidade (v_x) do elétron aumenta linearmente com o tempo.

Já na Mecânica Quântica, não é possível conhecer exatamente o valor de p e x simultaneamente devido o chamado *Princípio da Incerteza de Heisenberg*, sendo possível obter as médias destes valores.

Cada partícula tem uma função de onda $\psi(r)$ associada e para calcular o valor médio das observáveis empregamos a seguinte expressão:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r)|^2 d^3r = 1 \quad (2.8)$$

Tal expressão representa a probabilidade de encontrarmos uma certa partícula entre \vec{x} e $\vec{x} + d\vec{x}$. Podemos chamar esta expressão de função densidade de probabilidades que é chamada de condição de normalização da função de onda.

Além disso, é possível definir a chamada constante de Planck $h = (6,62 \times 10^{-34} \text{ J.s})$ que é uma das constantes fundamentais da Física que aparece sempre no estudo de fenômenos relacionados à Mecânica Quântica. Adicionalmente é comum se utilizar a relação $\hbar = h/2\pi$.

É relevante também definir os chamados operadores quânticos que estão associados com as grandezas E e p . Um operador matemático é uma expressão que atua sobre uma função para produzir uma outra função. Tal definição pode ser expressa da seguinte forma:

$$\mathbf{A}f(x) = F(x) \quad (2.9)$$

em que \mathbf{A} é o operador matemático e pode ser expresso de várias formas, tais como: d/dx , d^2/dx^2 , x^2 ... A Equação de Schrödinger em uma dimensão dependente do tempo é escrita da forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t)\psi(x, t) \quad (2.10)$$

Comparando a equação 2.10 com a equação clássica:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) \quad (2.11)$$

É possível associar a energia E e o momento linear p aos seguintes operadores diferenciais:

$$p \longleftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad E \longleftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.12)$$

Os valores médios de p e x podem ser calculados a partir das expressões:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi d^3x \quad (2.13)$$

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi d^3x \quad (2.14)$$

em que $\hbar \nabla / i$ é a representação do operador p . A energia média do sistema também pode ser calculada, uma vez que representa o valor esperado do Hamiltoniano H do sistema (soma da energia cinética e potencial do mesmo) da seguinte forma:

$$E = \langle H \rangle = \int \psi^* H \psi d^3r \quad (2.15)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi = H\psi \quad (2.16)$$

Desta forma, alguns aspectos podem ser concluídos:

- O movimento de uma partícula quântica é governado pela equação de Schrödinger.
- Os valores de E que satisfazem a Equação de Schrödinger são chamados de autovalores (ou autoenergias) e podem ser obtidos se a função de onda ψ da partícula for conhecida.

2.2 O poço de potencial e a quantização da energia

Considerando uma partícula que move-se em um poço de potencial infinito, que é definido por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } -a/2 < x < a/2 \\ \infty & \text{se } -a/2 \geq x \geq a/2 \end{cases} \quad (2.17)$$

A função de onda da partícula deve se anular em $x = -a/2$ e $x = a/2$, uma vez que as paredes do poço são consideradas impenetráveis. Desta forma:

$$\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0 \quad (2.18)$$

A solução geral da equação de Schrödinger a partir das condições de contorno definidas, é dada pela forma:

$$\psi(x) = A.\cos(kx) + B.\sen(kx), \quad -a/2 < x < a/2 \quad (2.19)$$

Determinando as constantes A e B a partir das condições de contorno da equação 2.18, vem:

$$A.\cos\left(\frac{ka}{2}\right) + B.\sen\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (2.20)$$

$$A.\cos\left(\frac{ka}{2}\right) - B.\sen\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (2.21)$$

e utilizando o fato de que $\cos(-x) = \cos(x)$ e $\sen(-x) = -\sen(x)$, é obtido:

$$A.\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (2.22)$$

$$B.\sen\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (2.23)$$

Como A e B não podem ser simultaneamente nulas, as possíveis soluções serão da forma:

$$B = 0; \quad \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (2.24)$$

$$A = 0; \quad \sen\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (2.25)$$

No primeiro caso, as soluções serão da forma:

$$\psi(x) = A.\cos(kx) \quad (2.26)$$

em que k deve satisfazer $\cos(ka/2) = 0$. Desta forma, os possíveis valores de k são aqueles para os quais ka é um múltiplo ímpar de π , da forma:

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.27)$$

As funções de onda associadas a cada valor de k_n , $\psi(x) = A_n\cos(k_nx)$, são normalizadas da forma:

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (2.28)$$

$$|A_n|^2 \overbrace{\int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx}^{a/2} = 1 \quad (2.29)$$

De onde é obtido:

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (2.30)$$

Sendo a forma geral de ψ_n para este caso, dada por:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.31)$$

Analogamente, encontra-se a segunda classe de soluções para $A = 0$, da forma:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.32)$$

Como as auto-energias são dadas pela equação:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (2.33)$$

As auto-energias serão dadas da forma:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.34)$$

Com isso, a interpretação da equação 2.34 é que as autoenergias são quantizadas, ou seja, possuem valores discretos. Além disso, a energia associada a $n = 1$ é a chamada energia do estado fundamental. Toma-se como exemplo o cálculo da energia estimada do estado fundamental de um elétron em um poço de potencial infinito (IVAN; VITOR, 2011). Desta forma, a ordem de grandeza da autoenergia do elétron em seu estado fundamental é calculada a partir da expressão 2.34. Substituindo a largura do poço $a = 10^{-14}$ m (tamanho médio de um núcleo), a massa do elétron $m \approx 10^{-31}$ kg, $n = 1$ e $\hbar \approx 10^{-34}$ m²kg/s:

$$E = \frac{(10^{-34} \text{m}^2 \text{kg/s})^2}{2 \cdot 10^{-30} \text{kg} (10^{-14} \text{m})^2} = 10^{-10} \text{ J} \quad \text{ou} \quad 10^3 \text{ MeV} \quad (2.35)$$

2.3 A função de onda do elétron livre - Gás de elétrons

O modelo quântico do gás de elétrons considera que as partículas livres (elétrons) estão confinadas em uma caixa de volume V onde não há nenhum tipo de espalhamento.

Para o cálculo da função de onda ψ associada ao elétron livre utiliza-se a Equação de Schrödinger em três dimensões:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (2.36)$$

Para a resolução do problema considera-se que o gás está confinado em uma caixa de volume $V = L^3$ e a função de onda deve satisfazer a condição de contorno em que a caixa é repetida periodicamente nas três direções cartesianas, simulando um sistema infinito e impondo-se que a função de onda deve ter a mesma periodicidade. Tal condição de contorno é da forma:

$$\begin{cases} \psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z) \end{cases}$$

Caso ψ se anulasse nas faces do cubo, como no caso do potencial infinito, os autoestados seriam estacionários e J seria nulo.

Para resolver a equação 2.36 e encontrar ψ , é assumido que a solução seja proporcional a $e^{\lambda x}$, em que λ é constante.

Assumindo que $\psi(x) = Ae^{ikx}$, utiliza-se da condição de normalização para determinar a constante A :

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.37)$$

$$\int_0^L Ae^{-ikx} Ae^{ikx} dx = 1 \quad (2.38)$$

$$A^2 L = 1 \longrightarrow A = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (2.39)$$

Desta forma:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad (2.40)$$

Analogamente, o mesmo é feito para as coordenadas y e z da forma:

$$\psi(y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{iky} \quad (2.41)$$

$$\psi(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikz} \quad (2.42)$$

Assim, a solução em três dimensões é dada por:

$$\psi(r) = \psi(x)\psi(y)\psi(z) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2.43)$$

Substituindo 2.43 na equação de Schrödinger, vem:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \right) = E \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr}; \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \right) = -\frac{k^2}{\sqrt{V}} e^{ikr} \quad (2.44)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{e^{ikr}}{\sqrt{V}} \right) = E \left(\frac{e^{ikr}}{\sqrt{V}} \right) \quad (2.45)$$

Desta forma, as auto-energias são:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2.46)$$

A partir da equação de Schrödinger, é possível demonstrar que quando um elétron está confinado em uma região limitada do espaço, esse pode ocupar apenas estados discretos de energia, em outras palavras, podemos dizer que os elétrons têm energia quantizada.

2.4 Parâmetros de Fermi

É possível estimar quantos pontos no espaço- k existem dentro de um certo volume V , contando não só o número de estados mas também o número de elétrons dentro de V . Substituindo 2.43 nas condições de contorno:

$$\begin{cases} \psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z) \end{cases}$$

Obtêm-se as condições de contorno para as componentes do vetor de onda k :

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 \quad (2.47)$$

Implicando nas condições:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L} \quad (2.48)$$

em que n_x , n_y e n_z são números inteiros. Conclui-se que os valores são discretos e quantizados e possuem um valor mínimo não nulo de $2\pi/L$ ($n = 1$).

Desta forma, o conjunto de pontos representados na Figura 4 apresenta um volume elementar cujo valor é:

$$\Delta V_k = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{8\pi^3}{V} \quad (2.49)$$

É possível estimar quantos pontos no espaço- k existem dentro de um certo volume Ω contando não só o número de elétrons dentro de Ω mas também o número de estados. Como o número de elétrons em um metal é da ordem de 10^{23} por cm^3 , o volume no espaço- k necessário para acomodar tais elétrons é muito maior do que o volume elementar ΔV_k .

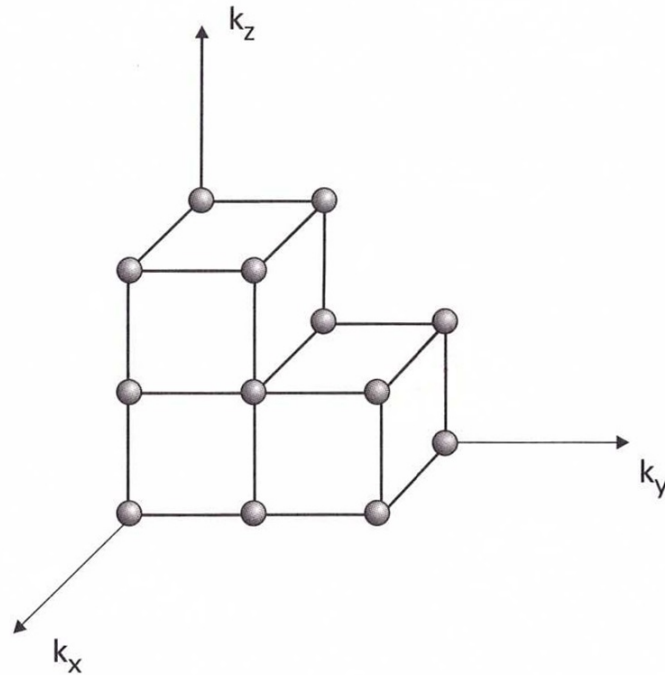


Figura 4: Construção realizada no espaço dos momentos k (IVAN; VITOR, 2011).

O número de estados dentro do volume Ω pode ser aproximado por:

$$\frac{\Omega}{\Delta V_k} = \frac{\Omega V}{8\pi^3} \quad (2.50)$$

Pelo princípio da exclusão de Pauli, no máximo dois elétrons com *spins* opostos podem ocupar um determinado estado eletrônico e cada ponto no espaço dos momentos, ou seja, cada conjunto de três números $(k_x, k_y, k_z) = 2\pi/L(n_x, n_y, n_z)$, representa um estado eletrônico possível. Desta forma, o número de elétrons dentro de Ω será igual a duas vezes a expressão 2.50.

O estado fundamental do gás de férmions (estado de menor energia) é obtido distribuindo-se todos os N elétrons em todos os estados k , em ordem ascendente de energia. O valor de k que corresponde ao mais alto valor de energia é chamado de vetor de onda de Fermi (k_F). Tal vetor define o raio de uma esfera no espaço dos momentos denominada esfera de Fermi, cujo volume é dado por:

$$\frac{4}{3}\pi k_f^3 \quad (2.51)$$

Desta forma, o número total de elétrons no sistema será igual ao volume da esfera de Fermi dividido pelo volume elementar ΔV_k multiplicado por 2, da forma:

$$N = 2 \times \frac{4}{3}\pi k_F^3 \times \frac{V}{8\pi^3} = \frac{k_f^3}{3\pi^2} V \quad (2.52)$$

E conseqüentemente:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad n = N/V \quad (2.53)$$

em que n é a chamada densidade eletrônica. A partir do vetor de Fermi é possível definir outros parâmetros, como por exemplo:

A energia de Fermi:

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad p = \hbar k \quad (2.54)$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (2.55)$$

A velocidade de Fermi:

$$v_f = \frac{\hbar k_F}{m} \quad (2.56)$$

e a temperatura de Fermi:

$$E = k_B T \quad (2.57)$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \quad (2.58)$$

É possível estimar as ordens de grandeza dos parâmetros anteriormente discutidos para um metal convencional. Tomando como exemplo o Fe ($n = 5,56 \times 10^{28}$ elétrons/m³), é preciso calcular primeiramente:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (2.59)$$

Substituindo o n para o Fe na equação 2.59:

$$k_F = (3\pi^2 \times 5,56 \times 10^{28}) \text{ elétrons/m}^3 = 1,18 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \quad (2.60)$$

A partir daí, calcula-se a velocidade de Fermi:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} \approx 3,6 \times 10^{-4} n^{1/3} \approx 1,37 \times 10^6 \text{ m/s} \quad (2.61)$$

a energia de Fermi:

$$E_F = \frac{(\hbar k_F)^2}{2m} \approx 3,6 \times 10^{-19} n^{2/3} \approx 5,24 \text{ eV} \quad (2.62)$$

e a temperatura de Fermi:

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \approx 4,2 \times 10^{-15} n^{2/3} \approx 6,12 \times 10^4 \text{ K} \quad (2.63)$$

3 PROPRIEDADES ELÉTRICAS DOS SÓLIDOS

Neste capítulo serão discutidas algumas das propriedades elétricas de um sólido com o tratamento matemático apropriado para que os tópicos sejam bem definidos.

3.1 Condutividade elétrica em metais

Os sólidos podem ser classificados em função de sua condutividade elétrica, ou seja, a capacidade que os mesmos apresentam para conduzir corrente elétrica. Uma vez que a corrente elétrica pode ser definida como o movimento ordenado dos elétrons quando submetidos a um campo elétrico, metais como o cobre e o ouro são bons condutores de eletricidade. Por outro lado, os materiais isolantes, como o plástico e a borracha, possuem uma baixa condutividade elétrica. Entre estes dois extremos, existem os materiais chamados semicondutores que apresentam condutividade elétrica intermediária entre condutores e isolantes. De uma maneira geral, o número de portadores de carga presentes em um metal é da ordem de 10^{23} e para os isolantes, da ordem de 10^{15} (TIPLER; MOSCA, 2011).

A intensidade da corrente elétrica I é definida matematicamente como a razão entre o módulo da quantidade de carga ΔQ que atravessa certa secção transversal (corte feito ao longo da menor dimensão de um corpo) do condutor em um intervalo de tempo Δt (REITZ; MILFORD; CHRISTY, 1982) e é expressa por:

$$I = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\Delta Q|}{\Delta t} = \frac{dQ}{dt} \quad (3.1)$$

Quando um campo elétrico é aplicado em um condutor, os elétrons se movem ordenadamente na direção oposta ao campo elétrico aplicado (TIPLER; MOSCA, 2011). A corrente elétrica I também pode ser expressa por:

$$I = N \frac{e}{\Delta t} \quad (3.2)$$

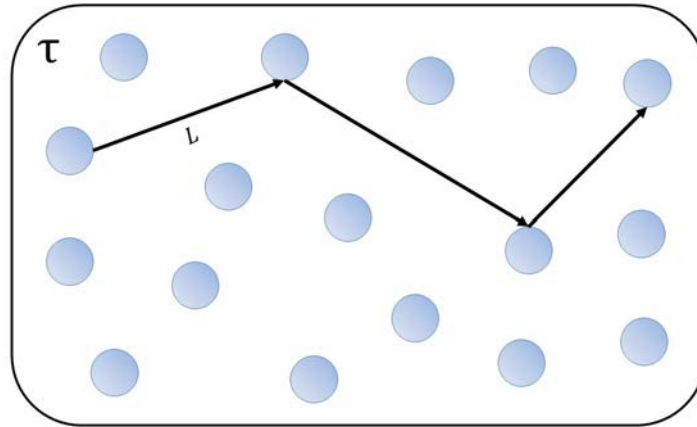


Figura 5: Esquema dos elétrons em um metal de acordo com o modelo de Drude em que os elétrons movem-se livremente chocando-se com os íons a uma taxa de $1/\tau$. L representa a distância média entre duas partículas e é chamado de comprimento de correlação (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

em que N é o número de elétrons, e a carga do elétron¹ ($1,6 \times 10^{-19}$ C) e Δt é o intervalo de tempo para N portadores de carga atravessarem uma determinada secção transversal em um fio.

A densidade de corrente elétrica é definida pela lei de Ohm:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (3.3)$$

Onde \vec{J} é a densidade de corrente elétrica que flui em resposta a um campo elétrico externo \vec{E} . A resistividade elétrica se relaciona com o campo elétrico \vec{E} e a densidade de corrente \vec{J} pela expressão:

$$\vec{E} = \rho \vec{J} \quad (3.4)$$

e portanto ρ é simplesmente o inverso da condutividade elétrica:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad (3.5)$$

Onde ρ é a resistividade elétrica e σ é a condutividade elétrica do material.

De acordo com o Modelo de Drude (DRUDE, 1900), considera-se um metal como sendo um gás de elétrons livres em uma caixa considerando somente o espalhamento elétron-íon, em que os “choques” acontecem a uma taxa de $1/\tau$ (em que τ é o tempo médio entre duas colisões sucessivas).

¹Experiência da gota de óleo - Robert Andrews Millikan, 1909 (R. A. Millikan, 1911).

Supondo um campo elétrico E aplicado apenas na direção x de um metal, se não forem consideradas as colisões entre os elétrons e os íons, a seguinte expressão pode ser utilizada:

$$\frac{dp_x}{dt} = -eE \quad (3.6)$$

Desta forma, para calcularmos o momento total do sistema seria preciso multiplicar o fator p pela densidade total de elétrons no metal. Integrando 3.6, obtém-se:

$$p_x = -eEt \quad (3.7)$$

A corrente elétrica J_x , depende da densidade eletrônica n , relaciona-se com o momento pela expressão:

$$J_x = -\frac{nep_x}{m} \quad (3.8)$$

Substituindo a equação 3.7 em 3.8, temos:

$$J_x(t) = -\frac{ne}{m}(-eEt) = \left(\frac{ne^2}{m}\right)t \quad (3.9)$$

A interpretação física da equação 3.9 é que ao aplicar um campo elétrico E em um metal, a corrente elétrica J cresce indefinidamente com o tempo. Tal fenômeno não é observado experimentalmente, uma vez que em um metal existe a chamada corrente estacionária.

Drude utilizou-se do conceito de tempo de relaxação para resolver tal inconsistência física apenas introduzindo o termo $-p/\tau$ na equação 3.6. Desta forma, a equação do momento é dada por:

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{p_x}{\tau} - eE \quad (3.10)$$

Integrando 3.10:

$$\int \frac{dp}{p + eE\tau} = \int -\frac{dt}{\tau} \quad (3.11)$$

Considerando $u = p + eE\tau$ e $du = dp$, vem:

$$\int_{u_0}^u \frac{du}{u} = -\frac{dt}{\tau} \quad (3.12)$$

$$\ln\left(\frac{u}{u_0}\right) = -\frac{t}{\tau}; \quad u_0 = eE\tau \quad (3.13)$$

$$p + eE\tau = eE\tau e^{-t/\tau} \quad (3.14)$$

E com isso, p_x é dado por:

$$p_x = -eE\tau(1 - e^{-t/\tau}) \quad (3.15)$$

Substituindo 3.15 em 3.8:

$$J_x = \left(-\frac{ne}{m}\right) - eE\tau(1 - e^{-t/\tau}) \quad (3.16)$$

É observado que quando $t \rightarrow \infty$, J_x permanece finita e igual a:

$$J_x(\infty) = \left(\frac{ne^2\tau}{m}E\right) = \sigma_0 E; \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (3.17)$$

em que σ_0 é a condutividade elétrica do metal. O resultado obtido na equação 3.17 de fato é observado experimentalmente, bem conhecido pela Lei de Ohm. Desta forma, Drude foi capaz de relacionar o fenômeno macroscópico condutividade elétrica σ_0 com os parâmetros microscópicos m , e e τ . Além disso, é possível realizar uma estimativa da ordem de grandeza do tempo τ entre duas colisões sucessivas entre o íon e o elétron. Isolando τ na equação da condutividade elétrica σ_0 e utilizando os valores de m , e e σ_0 :

$$\tau = \frac{\sigma_0 m}{ne^2} = 10^{-14} \text{ s} \quad (3.18)$$

Já para o caso A.C.(corrente alternada), considera-se a mesma equação 3.10 com um campo elétrico E oscilatório da forma:

$$E(t) = \text{Re}(E(\omega)e^{-i\omega t}) \quad (3.19)$$

Se o campo elétrico é oscilatório a solução em p da equação 3.10 também será oscilatória, de forma:

$$p_x(t) = \text{Re}(p(\omega)e^{-i\omega t}) \quad (3.20)$$

Desta forma, é possível escrever:

$$\frac{dp_x(t)}{dt} = -i\omega p(\omega)e^{-i\omega t} \quad (3.21)$$

Substituindo 3.19, 3.20 e 3.21 em 3.10:

$$-p(\omega)i\omega e^{-i\omega t} = -\frac{p(\omega)e^{-i\omega t}}{\tau} - eE(\omega)e^{-i\omega t} \quad (3.22)$$

Resolvendo para $p(\omega)$:

$$p(\omega) = \frac{eE(\omega)}{(i\omega - 1/\tau)} \quad (3.23)$$

Assim, substituindo 3.23 em 3.8:

$$J_x = -\frac{ne}{m} \left[\frac{eE(\omega)}{(i\omega - 1/\tau)} \right] \quad (3.24)$$

A equação 3.24 também pode ser escrita da forma:

$$J(\omega) = \sigma(\omega)E(\omega); \quad \sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{(1 - i\omega\tau)}; \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (3.25)$$

A interpretação física da equação 3.25 vem do fato de que quando ω é zero a expressão torna-se o próprio caso D.C.(corrente contínua) da condutividade elétrica descrito anteriormente na equação 3.17.

3.2 Lei de Matthiessen

De acordo com a lei de Matthiessen, a resistividade elétrica apresenta duas componentes principais, uma delas oriunda do espalhamento dos elétrons com as impurezas presentes na estrutura do sólido e o espalhamento dos elétrons pelos fônons da rede (KITTEL, 2005).

Para materiais que apresentam efeitos de correlação eletrônica ainda é necessário considerar a interação entre elétrons. Deste modo, a resistividade total em um sólido é dada por:

$$\rho_{Total} = \rho_{ef} + \rho_{ei} + \rho_{ee} + \rho_{mag} \quad (3.26)$$

Onde ρ_{ef} é a componente da resistividade elétrica devida ao espalhamento elétron-fônon, ρ_{ei} é o espalhamento devido às impurezas no material, ρ_{ee} é a componente que leva em conta o espalhamento entre os elétrons e ρ_{mag} é a contribuição magnética do espalhamento devido aos *spins* dos elétrons.

3.3 Teoria de bandas

As propriedades elétricas dos materiais podem ser explicadas pela maneira em que os elétrons estão dispostos dentro de determinados níveis de energia permitidos.

Os elétrons de cada átomo do sólido interagem com os átomos “vizinhos”. Aproximando um grande número de átomos, um grande número de níveis de energia serão sobrepostos uns aos outros, formando uma “banda de energia” no lugar dos discretos níveis de energia que os átomos teriam individualmente.

A partir da equação de Schrödinger, é possível demonstrar que quando um elétron está confinado em uma região limitada do espaço, esse pode ocupar apenas níveis discretos

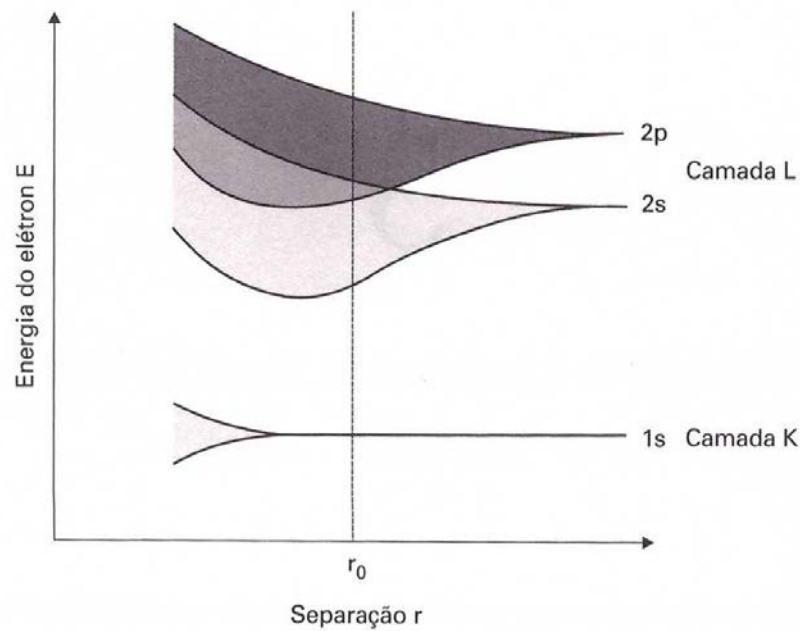


Figura 6: Alargamento dos níveis de energia e formação de bandas de um número muito grande de átomos idênticos em função da separação entre eles. Níveis internos, como a camada K, permanecem localizados (IVAN; VITOR, 2011).

de energia, em outras palavras, podemos dizer que os elétrons têm energia quantizada. Se aproximarmos um grande número de átomos, será observado um grande número de níveis de energia próximos uns aos outros, formando a chamada banda no lugar dos discretos níveis de energia que os átomos teriam individualmente. Em cada banda “cabem” apenas dois elétrons e os mesmos devem apresentar números quânticos distintos, de acordo com o princípio da exclusão de Pauli (KITTEL, 2005).

Pode-se concluir que os níveis mais externos do átomo terão um grau de superposição maior do que os mais internos, formando então bandas mais largas.

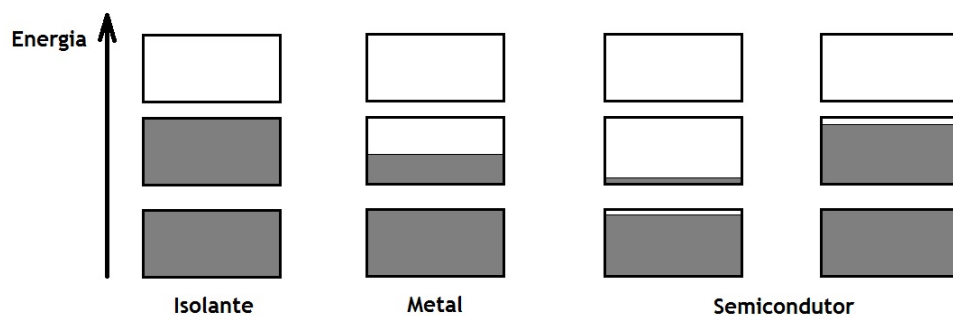


Figura 7: Bandas preenchidas ou parcialmente preenchidas, classificando os materiais como isolantes, metais ou semicondutores (KITTEL, 2005).

Quando as bandas de energia do sólido estão completamente preenchidas ou vazias,

o material se comporta como um isolante. Comporta-se como condutor quando uma ou mais bandas estiverem parcialmente preenchidas. Se uma banda estiver ligeiramente preenchida ou ligeiramente vazia o material é um semiconductor (KITTEL, 2005), conforme apresentado na Figura 7.

Esta faixa de energia não disponível aos elétrons se chama comumente de “*gap* de energia”. Abaixo deste *gap* encontra-se a banda de valência do semiconductor e acima temos a chamada banda de condução. Em baixas temperaturas todos os elétrons de um semiconductor ideal populam a banda de valência e nenhum elétron ocupa a banda de condução. É possível estimar o *gap* de energia de um semiconductor da forma (VARSHNI, 1967):

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (3.27)$$

Utilizando como exemplo o Silício (Si) em que $E_g(0) = 1,166 \text{ eV}$, $\alpha = 0,473 \text{ meV/K}$ e $\beta = 636 \text{ K}$, é possível estimar o *gap* de energia do Si à temperatura ambiente (300 K) substituindo os parâmetros E_g , α e β para o Si na equação 3.27 determinada experimentalmente, da forma:

$$E_g(300 \text{ K}) = 1,166 \text{ eV} - \frac{0,473 \times 10^{-3} \text{ eV/K} \times (300 \text{ K})^2}{300 \text{ K} + 636 \text{ K}} = 1,12 \text{ eV} \quad (3.28)$$

A interpretação da equação 3.28 é de que o elétron precisa de no mínimo 1,12 eV de energia para deslocar-se entre uma banda de energia e outra.

4 *PROPRIEDADES DE SUPERCONDUTORES*

Neste capítulo serão apresentados tópicos fundamentais para o entendimento das propriedades dos supercondutores. Serão discutidas algumas características dos materiais em questão como condução elétrica, temperatura crítica e resistividade zero, apresentando o tratamento matemático apropriado para que as questões físicas envolvidas possam ser discutidas de forma bem definida.

4.1 Materiais supercondutores

Muitos elementos da tabela periódica se tornam supercondutores em baixas temperaturas, conforme a Figura 8. Dentre eles, o nióbio (Nb) apresenta a maior temperatura crítica (9,3 K) a pressão atmosférica (D. K. FINNEMORE *et al.*, 1966). Vale ressaltar que, enquanto alguns metais convencionais tornam-se supercondutores, outros metais que apresentam boa condutividade elétrica (cobre, prata e ouro) não apresentam evidências de supercondutividade. Ainda é questão de debate se os mesmos tornariam-se supercondutores se apresentassem altos índices de pureza e resfriados até temperaturas suficientemente baixas (KITTEL, 2005).

Outra descoberta importante no campo da Física da matéria condensada, é que alguns outros elementos tornam-se supercondutores quando são sujeitos a pressões extremamente altas. O ferro, por exemplo, torna-se supercondutor em alta pressão ($15 \text{ GPa} < P < 30 \text{ GPa}$) (K. SHIMIZU *et al.*, 2001). Sob pressão ambiente o Fe apresenta propriedades magnéticas e o magnetismo presente impede que a supercondutividade ocorra, uma vez que um campo magnético \vec{B} aplicado em um supercondutor destrói o acoplamento entre os pares de Cooper e conseqüentemente, o estado supercondutor. Entretanto, quando aplicada uma pressão suficientemente alta uma fase não-magnética pode ser encontrada, e a mesma torna-se supercondutora.

substance	T_c (K)	
Al	1.2	
Hg	4.1	first superconductor, discovered 1911
Nb	9.3	highest T_c of an element at normal pressure
Pb	7.2	
Sn	3.7	
Ti	0.39	
Tl	2.4	
V	5.3	
W	0.01	
Zn	0.88	
Zr	0.65	
Fe	2	high pressure
H	300	predicted, under high pressure
O	30	high pressure, maximum T_c of any element
S	10	high pressure
Nb ₃ Ge	23	A15 structure, highest known T_c before 1986
Ba _{1-x} Pb _x BiO ₃	12	first perovskite oxide structure
La _{2-x} Sr _x CuO ₄	35	first high T_c superconductor
YBa ₂ Cu ₃ O _{7-δ}	92	first superconductor above 77K
HgBa ₂ Ca ₂ Cu ₃ O _{8+δ}	135-165	highest T_c ever recorded
K ₃ C ₆₀	30	fullerene molecules
YNi ₂ B ₂ C	17	borocarbide superconductor
MgB ₂	38	discovery announced in January 2001
Sr ₂ RuO ₄	1.5	possible p-wave superconductor
UPt ₃	0.5	“heavy fermion” exotic superconductor
(TMTSF) ₂ ClO ₄	1.2	organic molecular superconductor
ET-BEDT	12	organic molecular superconductor

Figura 8: Temperatura crítica de alguns elementos e compostos (ANETTE, 2003).

4.2 Resistividade zero

Nos supercondutores, a resistividade ρ é extremamente baixa (muito próxima de zero) abaixo de T_c e o campo elétrico tem que sempre ser igual a zero ($\vec{E} = 0$) em todos os pontos no interior de um material supercondutor. Desta forma, a densidade de corrente \vec{J} será finita e há fluxo de corrente elétrica sem campo elétrico aplicado. A mudança de resistividade nos supercondutores ocorre de maneira abrupta e representa uma transição de fase termodinâmica (ANNETT, 2003).

A evidência mais convincente de que supercondutores realmente apresentam resistividade nula é a observação das chamadas correntes persistentes. Se tomarmos um anel

supercondutor como mostrado na Figura 9, é possível a observação de uma corrente I circulando no mesmo.

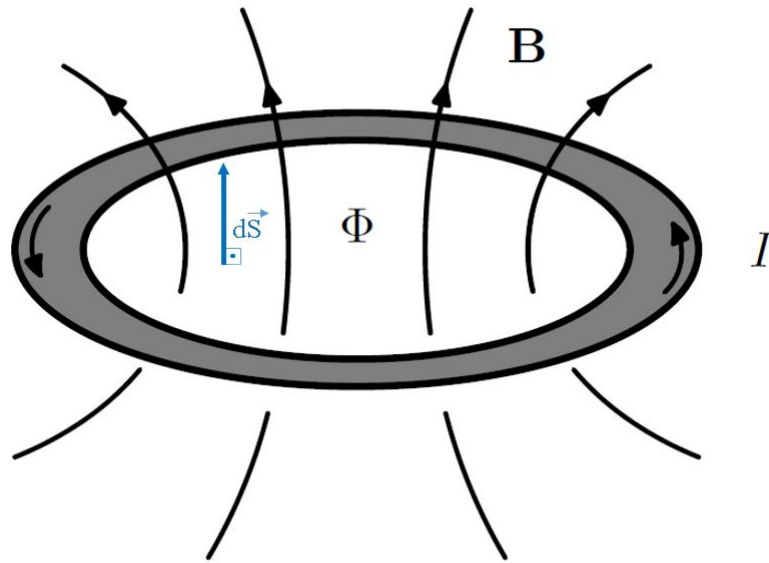


Figura 9: Corrente persistente I em torno de um anel supercondutor, que flui em resposta à um campo magnético B mantendo o fluxo magnético Φ constante. $d\vec{S}$ é um vetor perpendicular ao plano do anel e seu módulo é um elemento infinitesimal de área incluso no próprio anel (ANETT, 2003).

O fluxo magnético através do centro do anel supercondutor é definido pela integral de superfície:

$$\Phi = \int \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (4.1)$$

Utilizando a equação de Maxwell

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4.2)$$

e o Teorema de Stokes:

$$\int (\nabla \times \vec{E}) d\vec{S} = \oint \vec{E} \cdot d\vec{r} \quad (4.3)$$

a expressão final é:

$$-\frac{d\Phi}{dt} = \oint \vec{E} \cdot d\vec{r} \quad (4.4)$$

em que a integral de linha é tomada ao redor do caminho fechado em torno do interior do anel. Este cálculo pode ser feito considerando que dentro do anel supercondutor o campo elétrico é nulo. Assim, temos

$$\frac{d\Phi}{dt} = 0 \quad (4.5)$$

e, desta forma, o fluxo magnético através do anel será constante no tempo. É possível utilizar esta propriedade para gerar uma corrente persistente num anel supercondutor. Suponha que o anel está acima de T_c , ou seja, em seu estado normal e um campo magnético

externo \vec{B}_{ext} é aplicado atravessando facilmente o material. Posteriormente, a temperatura é diminuída até abaixo de T_c e há a observação de um fluxo magnético no anel supercondutor, cuja expressão é:

$$\Phi = \int \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{S} \quad (4.6)$$

mas o fluxo magnético permanece sempre constante como visto na equação 4.5. Mesmo que o campo externo seja desligado o fluxo permanece constante. A única maneira de um supercondutor manter o fluxo magnético constante é gerando seu próprio campo magnético \vec{B} através do centro do anel, que aparece devido à corrente elétrica que circula em torno do anel. O valor da corrente elétrica I será exatamente o necessário para induzir um fluxo magnético igual a Φ dentro do anel. Em outras palavras, se o fluxo Φ é constante, a corrente I também é constante.

4.3 O efeito Meissner-Ochsenfeld

Uma maneira direta de confirmar a supercondutividade em um determinado material é a demonstração do efeito Meissner-Ochsenfeld.

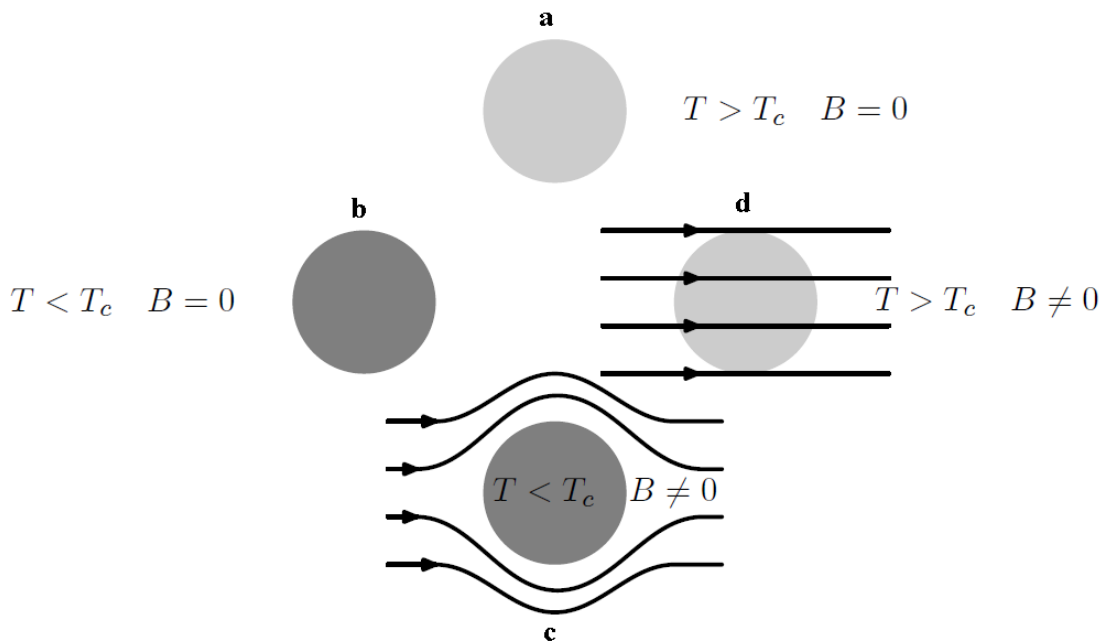


Figura 10: O efeito Meissner-Ochsenfeld em supercondutores. Se uma amostra inicialmente está a uma temperatura alta e sem um campo magnético aplicado (a) é inicialmente resfriada (b) e então colocada sob a ação de um campo magnético (c), e o campo não conseguirá penetrar o material. Caso o campo magnético seja aplicado primeiramente (d), quando o mesmo é resfriado abaixo de T_c o campo é expulso do interior do material (ANETTE, 2003).

Considerando a ilustração da Figura 10, suponhamos inicialmente que o material está em seu estado normal ($T > T_c$) e que o campo externo seja zero. A temperatura do material é reduzida até abaixo de T_c ainda com o campo externo nulo. Após o campo ser aplicado gradualmente, o valor do campo no interior do material permanece nulo em todos os pontos no interior do material supercondutor. Considerando que $\vec{E} = 0$ na expressão 4.2, é possível escrever:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (4.7)$$

Considerando uma ordem inversa, suponha-se que o campo seja aplicado na amostra quando a mesma está em uma temperatura acima de T_c . Neste caso, o campo magnético penetrará facilmente o material e o que ocorre quando o mesmo é resfriado até uma temperatura abaixo de T_c é que o campo magnético é expelido do interior do material. Este é o chamado Efeito Meissner-Ochsenfeld.

4.4 Diamagnetismo perfeito

Quando o campo magnético externo é aplicado, ocorre o aparecimento de uma corrente elétrica no supercondutor. Esta corrente elétrica por sua vez, gera um campo magnético exatamente de mesmo módulo do campo externo mas com sentido contrário. Desta forma a soma do campo magnético externo e interno é igual a zero, ou seja, o campo externo não penetra no material supercondutor.

Para descrever este efeito e o aparecimento desta corrente são utilizadas as equações de Maxwell. A corrente total é separada entre a corrente externa (por exemplo, uma bobina produzindo campo magnético externo), j_{ext} , e a corrente interna j_{int} , e a corrente elétrica total é dada pela equação:

$$\vec{j} = j_{ext} + j_{int} \quad (4.8)$$

As correntes presentes na amostra geram campo magnético que provoca a magnetização \vec{M} da mesma, uma vez que refere-se à magnetização por unidade de volume, definido por:

$$\nabla \times \vec{M} = j_{int} \quad (4.9)$$

É possível definir também um vetor magnetização \vec{H} que depende apenas das correntes externas:

$$\nabla \times \vec{H} = j_{ext} \quad (4.10)$$

Os três vetores \vec{M} , \vec{H} e \vec{B} são relacionados pela equação:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (4.11)$$

Aplicando a condição do efeito Meissner de que $\vec{B} = 0$ na equação 3.12, obtêm-se:

$$\vec{M} = -\vec{H} \quad (4.12)$$

A relação entre a susceptibilidade magnética com \vec{H} e \vec{M} é expressa por:

$$\vec{M} = \chi\vec{H} \quad (4.13)$$

e com isso encontra-se que para supercondutores:

$$\chi = -1 \quad (4.14)$$

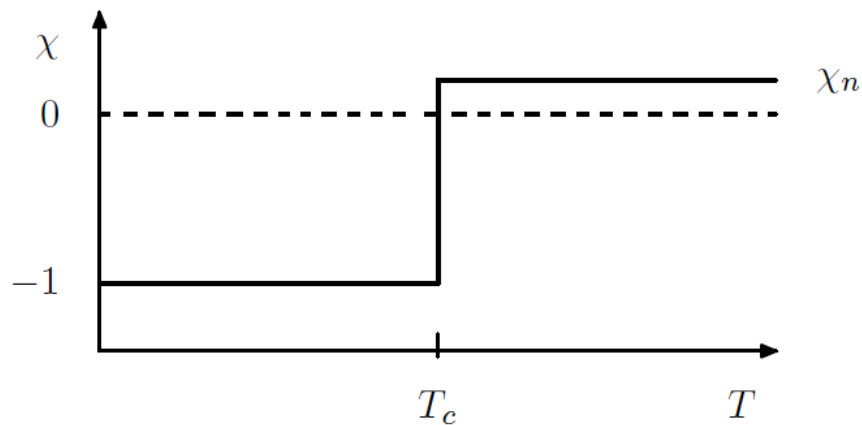


Figura 11: Susceptibilidade magnética χ de um supercondutor em função da temperatura. Acima de T_c a susceptibilidade é χ_n que é um valor pequeno e positivo (paramagnético). Abaixo de T_c a susceptibilidade é negativa de valor constante $\chi=-1$, caracterizando-se como um diamagneto perfeito (ANNETT, 2003).

Sólidos com valores negativos de susceptibilidade magnética são chamados de diamagnetos (em contraste com a susceptibilidade magnética positiva que são os chamados paramagnetos) e tornam-se magnetizados de maneira oposta ao campo externo, conforme a Figura 11. Desta forma, é possível dizer que os supercondutores são perfeitos diamagnetos.

4.5 Supercondutores Tipo I e II

A susceptibilidade χ é definida no limite de campos externos muito fracos pois, se o módulo do campo for suficientemente alto, a supercondutividade é destruída. Uma vez que o módulo do campo magnético aumenta, existem dois comportamentos distintos para os supercondutores Tipo I e II, conforme demonstra a Figura 12.

O primeiro caso, chamado de supercondutor tipo I, ocorre em que o campo magnético \vec{B} mantém-se zero no interior do supercondutor até o momento em que a supercondutividade é destruída. O campo magnético em que a destruição da supercondutividade ocorre é o chamado de campo magnético crítico \vec{H}_c . A magnetização obedece $\vec{M} = -\vec{H}$ para todos os campos magnéticos menores que \vec{H}_c , e então torna-se zero para campos acima de \vec{H}_c .

Muitos supercondutores, entretanto, comportam-se de maneira diferente. Em um supercondutor tipo II existem dois campos magnéticos críticos, denotados \vec{H}_{c1} , o campo crítico baixo, e \vec{H}_{c2} , o campo crítico alto. Para pequenos valores de campo \vec{H} aplicados, o efeito Meissner atinge novamente $\vec{M} = -\vec{H}$ e não há densidade de fluxo magnético no interior do supercondutor. Entretanto, em um supercondutor tipo II, uma vez que o campo excede \vec{H}_{c1} , o fluxo magnético no interior do sólido torna-se finito. Mediante o aumento do campo magnético, a densidade de fluxo magnético gradualmente aumenta até que finalmente em \vec{H}_{c2} a supercondutividade é destruída.

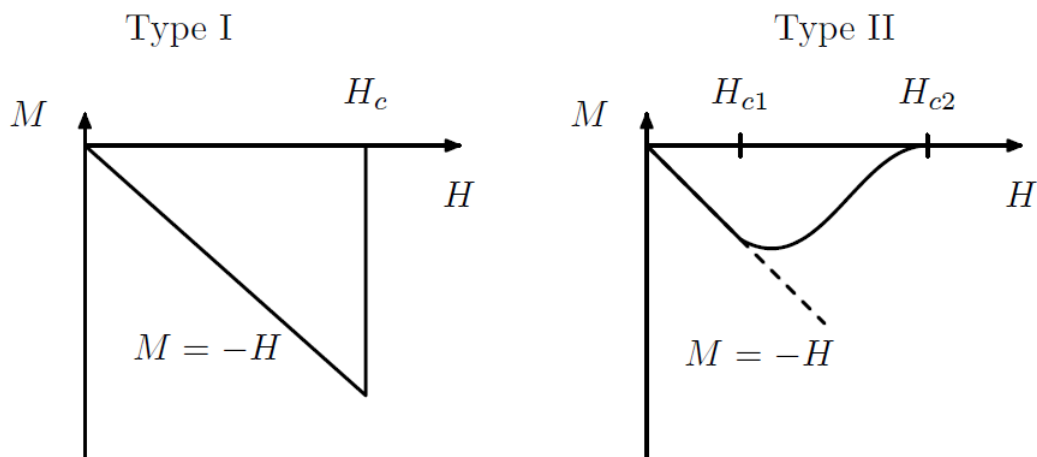


Figura 12: A magnetização \vec{M} em função de \vec{H} em um supercondutor tipo I e II. Para o tipo I observa-se um comportamento diamagnético perfeito para campos menores que \vec{H}_c até que H_c seja atingido e a supercondutividade destruída. Para os materiais tipo II o diamagnetismo perfeito ocorre apenas abaixo de \vec{H}_{c1} (ANNETT, 2003).

A explicação física da fase termodinâmica entre \vec{H}_{c1} e \vec{H}_{c2} foi dada por Abrikosov (A. A. ABRIKOSOV, 1957) e é descrita em termos dos vórtices presentes no supercondutor

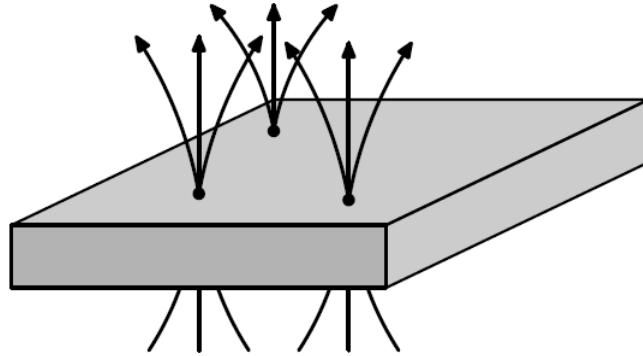


Figura 13: Vórtices em um supercondutor tipo II. O campo magnético pode passar através do supercondutor e é canalizado através do chamado núcleo vórtex. O núcleo vórtex é um metal normal. Isto permite que a estrutura do material permaneça supercondutora enquanto ao mesmo tempo permite que uma finita densidade de fluxo magnético \vec{B} atravessasse o mesmo (ANNETT, 2003).

Tipo II.

Cada vórtice consiste em uma região de circulação de uma supercorrente em torno de um pequeno núcleo central que essencialmente torna-se um metal convencional. É possível que o campo magnético passe através da amostra pelo interior dos vórtices, e as correntes circulantes servem para expulsar o campo magnético do resto do material que está fora do vórtice.

Cada vórtice apresenta um fluxo magnético finito Φ_0 e, conseqüentemente, se há um total de N_v vórtices em uma amostra de área A , então a média da densidade de fluxo magnético B é dada por

$$B = \frac{N_v}{A} \frac{h}{2e} \quad (4.15)$$

Pode-se também relacionar este resultado com o número de vórtices por unidade de área, da forma

$$\frac{N_v}{A} = \frac{2eB}{h} \quad (4.16)$$

4.6 Pares de Cooper

Os pares de Cooper são formados quando os elétrons interagem com os íons, criando uma deformação espacial local na estrutura do cristal. Este efeito cria um aumento local na densidade de cargas positivas que acaba por atrair outro elétron, e a interação entre os elétrons é intermediada por um fônon associado à deformação da rede.

Como a velocidade do elétron é muito maior do que a do fônon, há uma diferença na propagação da deformação e isto faz com que os elétrons que formam o par de Cooper

possam estar ligados à grandes distâncias. Tal distância pode ser estimada multiplicando a velocidade de Fermi $v_F \approx 10^8$ cm/s pela frequência de Debye $\omega_D \approx 10^{13}$ s⁻¹:

$$v_F \cdot \omega_D = 1000 \text{ \AA} \quad (4.17)$$

A função de onda associada ao par pode ser deduzida analogamente a realizada para o gás de elétrons no capítulo 2.3, da forma:

$$\psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{1}{L^3} \sum g(k) e^{i[\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]} \quad (4.18)$$

Ou simplesmente da forma:

$$\psi = n_s^{1/2} e^{i\theta(r)} \quad (4.19)$$

em que $\theta(r) = \vec{k} \cdot \vec{r}$ é a chamada fase da função de onda.

4.7 Equações de London

Consideremos que somente uma fração dos elétrons de condução se encontra no estado supercondutor. Sendo n , n_n e n_s , a densidade total dos elétrons, dos elétrons normais e dos elétrons no estado supercondutor, respectivamente, obtêm-se a expressão:

$$n = n_n + n_s \quad (4.20)$$

A corrente supercondutora é dada por:

$$\vec{J}_s = -n_s e \vec{v}_s \quad (4.21)$$

onde \vec{v}_s é a velocidade dos elétrons no estado supercondutores. Utilizando a segunda lei de Newton e a equação 3.18:

$$m \frac{\partial \vec{v}_s}{\partial t} = -e \vec{E} \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial \vec{J}}{\partial t} = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E} \quad (4.23)$$

$$\vec{E} = \frac{\partial}{\partial t} (\lambda_L \vec{J}_s) \quad (4.24)$$

em que:

$$\lambda_L \equiv \frac{m}{n_s e^2} \quad (4.25)$$

\vec{E} é o campo elétrico ao qual os elétrons no estado supercondutor estão submetidos. Tal campo, é dependente da posição \vec{r} dos elétrons e deve satisfazer a equação de Maxwell:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4.26)$$

Combinando as equações 4.24 e 4.26, obtêm-se a expressão:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\nabla \times (\lambda_L \vec{J}_s) + \vec{B} \right] = 0 \quad (4.27)$$

ou

$$\vec{B} = -\nabla \times (\lambda_L \vec{J}_s) \quad (4.28)$$

Esta é a chamada equação de London. A solução geral da equação de London é expressa:

$$\vec{B} + \lambda_L \nabla \times \vec{J}_s = \text{constante} \quad (4.29)$$

e representa o fato de que o fluxo magnético se conserva em um material com resistência elétrica nula. Ao aplicarmos um campo \vec{B} no material supercondutor, a variação do fluxo magnético causa o aparecimento de uma corrente supercondutora \vec{J}_s que produz um campo $\lambda_L \nabla \times \vec{J}_s$ que cancela exatamente \vec{B} . A partir da equação de Maxwell:

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_s \quad (4.30)$$

é possível deduzir as seguintes equações para \vec{B} e \vec{J}_s :

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{\mu_0}{\lambda_L} \vec{B} \quad (4.31)$$

$$\nabla^2 \vec{J}_s = \frac{\mu_0}{\lambda_L} \vec{J}_s \quad (4.32)$$

Caso um campo magnético seja aplicado na direção \vec{z} ao longo da superfície de um supercondutor, tais equações terão como soluções:

$$\vec{B}_z = \vec{B}_z(0) e^{-x/\Lambda_L} \quad (4.33)$$

$$\mu_0 \vec{J}_z = \vec{J}_z(0) e^{-x/\Lambda_L} \quad (4.34)$$

As equações 4.33 e 4.34 mostram que o campo magnético e a corrente dentro do material supercondutor decaem exponencialmente a partir de sua superfície, com o chamado comprimento característico de London $\Lambda_L = \sqrt{\lambda_L/\mu_0} = \left(\frac{m}{\mu_0 n_s e^2}\right)^{1/2}$. Alguns exemplos da literatura são: Estanho (Sn) com $\lambda_L = 23 \times 10^{-6}$ cm, Alumínio (Al) com $\lambda_L = 160 \times 10^{-6}$ cm e o Chumbo (Pb) com $\lambda_L = 8,3 \times 10^{-6}$ cm (MESERVEY; SCHWARTZ, 1969).

4.8 Teoria BCS

A teoria BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957) afirma fundamentalmente que os elétrons de condução de um material na fase supercondutora se agrupam nos chamados pares de Cooper, que são elétrons que apresentam *spins* opostos e estão acoplados através de um fônon.

Um elétron movendo-se em um material condutor atrai cargas positivas criando um certo tipo de deformação na estrutura do material. Tal deformação faz com que um outro elétron de *spin* oposto mova-se para uma região que apresenta densidade de carga positiva maior. A chamada energia de ligação mantém dois elétrons unidos e caso esta energia seja maior do que a energia fornecida pelas oscilações dos átomos em um condutor, que é maior em baixas temperaturas, então os pares de elétrons mantêm-se juntos não sentindo as vibrações a sua volta, ou seja, movem-se sem dissipação de energia (resistência igual a zero).

Além disso, a teoria BCS estabelece que a temperatura crítica de um supercondutor obedece à seguinte expressão:

$$k_B.T_c = 1,14.\hbar.\omega_D.e^{-1/g(E_f)V_0} \quad (4.35)$$

Em que V_0 é o potencial efetivo atrativo entre os elétrons e $g(E_F)$ é a densidade de estados na energia de Fermi. Explicitando a relação entre a temperatura crítica de um material com a sua respectiva frequência de Debye (ω_D). Uma tentativa experimental de aumentar T_c foi a de sintetizar materiais com maiores valores para a frequência de Debye pois, segundo a relação acima, as duas grandezas estão relacionadas de maneira diretamente proporcional.

A chamada temperatura de Debye é diretamente relacionada à frequência de Debye, obedecendo à equação:

$$k_B.\Theta_D = \hbar.\omega_D \quad (4.36)$$

em que k_B é a constante de Boltzman ($1,3807 \times 10^{-23}$ J/K), Θ_D a temperatura de Debye e ω_D a frequência de Debye.

A temperatura de Debye é diferente para cada elemento e alguns exemplos podem ser vistos na tabela abaixo:

ELEMENT	Θ_D (K)	ELEMENT	Θ_D (K)
Li	400	A	85
Na	150	Ne	63
K	100		
		Cu	315
Be	1000	Ag	215
Mg	318	Au	170
Ca	230		
		Zn	234
B	1250	Cd	120
Al	394	Hg	100
Ga	240		
In	129	Cr	460
Tl	96	Mo	380
		W	310
C (diamond)	1860	Mn	400
Si	625	Fe	420
Ge	360	Co	385
Sn (grey)	260	Ni	375
Sn (white)	170	Pd	275
Pb	88	Pt	230
		La	132
As	285	Gd	152
Sb	200	Pr	74
Bi	120		

Figura 14: Temperatura de Debye para alguns elementos (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

4.9 Efeito Josephson D.C. e A.C.

Um dos efeitos interessantes relacionados à supercondutividade é o chamado Efeito Josephson, que é o aparecimento de uma supercorrente de tunelamento através de uma junção isolante entre dois supercondutores, mesmo que não exista campo elétrico finito aplicado. O que ocorre é que há uma probabilidade finita de que os pares de Cooper tunelem de um supercondutor para o outro, dando origem à corrente supercondutora.

Para o caso D.C. a corrente supercondutora é calculada pela expressão $J_s = 2e\psi^*v\psi$ e a equação de Schrödinger pode ser escrita da forma:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \hbar T\psi_2 \quad ; \quad i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = \hbar T\psi_1 \quad (4.37)$$

em que $\hbar T$ está associado com a taxa de transferência dos pares de Cooper pelo isolante e tem dimensão de taxa ou frequência. As funções de onda $\psi_1 = n^{1/2}e^{i\theta_1}$ e $\psi_2 = n^{1/2}e^{i\theta_2}$

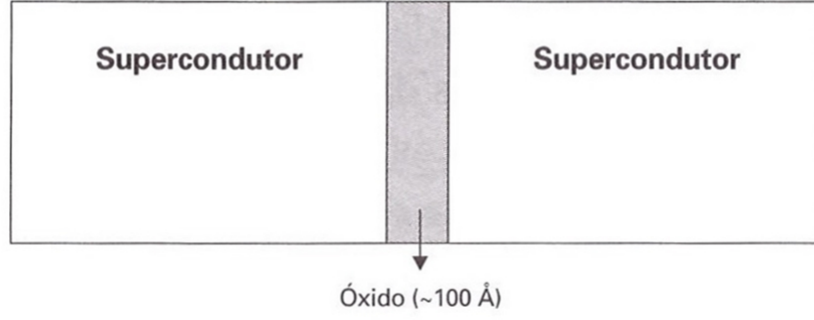


Figura 15: Dois supercondutores “ligados” através de uma camada de óxido (por exemplo AlO_2) semiconductor muito fina apresentam uma corrente D.C., mesmo na ausência de uma tensão externa (IVAN; VITOR, 2011).

do par de Cooper podem ser derivadas no tempo e substituídas em 4.37:

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{1}{2} n_1^{-1/2} e^{i\theta_1} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i\psi_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT\psi_2 \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \frac{1}{2} n_2^{-1/2} e^{i\theta_2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + i\psi_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT\psi_1 \quad (4.39)$$

Multiplicando 4.38 por $n_1^{1/2} e^{-i\theta_1}$:

$$\left(\frac{1}{2} n_1^{-1/2} e^{i\theta_1} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i\psi_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} \right) n_1^{1/2} e^{-i\theta_1} = -iT\psi_2 n_1^{1/2} e^{-i\theta_1} \quad (4.40)$$

$$\frac{1}{2} \overbrace{n_1^{1/2} n_1^{-1/2}}^1 \overbrace{e^{i\theta_1} e^{-i\theta_1}}^1 \frac{\partial n_1}{\partial t} + n_1^{1/2} n_1^{1/2} \overbrace{e^{-i\theta_1} e^{i\theta_1}}^1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT n_2^{1/2} n_1^{1/2} e^{i\theta_2} e^{-i\theta_1} \quad (4.41)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i n_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT (n_1 n_2)^{1/2} e^{i\delta} \quad \delta \equiv (\theta_2 - \theta_1) \quad (4.42)$$

Multiplicando 4.39 por $n_2^{1/2} e^{-i\theta_2}$:

$$\left(\frac{1}{2} n_2^{-1/2} e^{i\theta_2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + i\psi_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} \right) n_2^{1/2} e^{-i\theta_2} = -iT\psi_1 n_2^{1/2} e^{-i\theta_2} \quad (4.43)$$

$$\frac{1}{2} \overbrace{n_2^{-1/2} n_2^{1/2}}^1 \overbrace{e^{i\theta_2} e^{-i\theta_2}}^1 \frac{\partial n_2}{\partial t} + i n_2^{1/2} \overbrace{e^{i\theta_2} e^{-i\theta_2}}^1 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT n_1^{1/2} n_2^{1/2} e^{i\theta_1} e^{-i\theta_2} \quad (4.44)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + i n_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT (n_1 n_2)^{1/2} e^{-i\delta}; \quad \delta \equiv (\theta_2 - \theta_1) \quad (4.45)$$

Utilizando a fórmula de Euler:

$$e^{ix} = \cos(x) + i \text{sen}(x) \quad (4.46)$$

É possível escrever 4.42, da forma:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i n_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT (n_1 n_2)^{1/2} [\cos(\delta) + i \text{sen}(\delta)] \quad (4.47)$$

Tomando somente a parte real de $\partial n_1/\partial t$:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = 2T(n_1 n_2)^{1/2} \text{sen}(\delta) \quad (4.48)$$

Somente a parte real de $\partial \theta_1/\partial t$:

$$-in_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT(n_1 n_2)^{1/2} \text{cos}(\delta) \quad (4.49)$$

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -T \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^{1/2} \text{cos}(\delta) \quad (4.50)$$

Analogamente para a equação 4.45, é obtido:

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = -2T(n_1 n_2)^{1/2} \text{sen}(\delta); \quad \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -T \left(\frac{n_1}{n_2} \right)^{1/2} \text{cos}(\delta) \quad (4.51)$$

Considerando que os dois supercondutores sejam exatamente iguais, é possível estabelecer a relação $n_1 \cong n_2$:

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} = \frac{\partial \theta_2}{\partial t}; \quad \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} = 0 \quad (4.52)$$

E também:

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = -\frac{\partial n_1}{\partial t} \quad (4.53)$$

Desta forma, é possível concluir que o fluxo de corrente de um supercondutor para outro é proporcional a $\partial n_2/\partial t$ ou $-\partial n_1/\partial t$. Conclui-se que a densidade de corrente J dos pares de Cooper através da junção depende da diferença de fase δ :

$$J = J_0 \text{sen}(\delta) = J_0 \text{sen}(\theta_2 - \theta_1) \quad (4.54)$$

Em que J_0 é proporcional a T . A corrente elétrica J_0 é a máxima possível sem a presença de uma diferença de potencial e uma corrente D.C. fluirá através da junção com um valor entre J_0 e $-J_0$ de acordo com a diferença de fase δ .

Já para o caso A.C. uma tensão V é aplicada através da junção e os pares de elétrons estão sujeitos à uma diferença de potencial qV ao tunelar através da junção, uma vez que $q = -2e$.

É possível dizer que um par de um lado tem uma energia potencial $-eV$ e o par do

outro lado apresenta energia eV . Desta forma, as equações de movimento são:

$$\begin{cases} \partial\psi_1/\partial t = -iT\psi_2 + eiV\psi_1\hbar^{-1} \\ \partial\psi_2/\partial t = -iT\psi_1 - ieV\psi_2\hbar^{-1} \end{cases}$$

Utilizando as mesmas funções de onda para o caso D.C., é possível escrever:

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \frac{1}{2}n_1^{-1/2}e^{i\theta_1}\frac{\partial n_1}{\partial t} + i\psi_1\frac{\partial\theta_1}{\partial t} \quad (4.55)$$

$$\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = \frac{1}{2}n_2^{-1/2}e^{i\theta_2}\frac{\partial n_2}{\partial t} + i\psi_2\frac{\partial\theta_2}{\partial t} \quad (4.56)$$

Multiplicando 4.55 por $n_1^{1/2}e^{-i\theta_1}$:

$$\frac{1}{2}\overbrace{n_1^{-1/2}n_1^{1/2}}^1\overbrace{e^{i\theta_1}e^{-i\theta_1}}^1\frac{\partial n_1}{\partial t} + in_1^{1/2}n_1^{1/2}\overbrace{e^{i\theta_1}e^{-i\theta_1}}^1\frac{\partial\theta_1}{\partial t} = -iTn_2^{1/2}n_1^{1/2}e^{i\theta_2}e^{-i\theta_1} + eiVn_1^{1/2}n_1^{1/2}\overbrace{e^{i\theta_1}e^{-i\theta_1}}^1\hbar^{-1} \quad (4.57)$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial n_1}{\partial t} + in_1\frac{\partial\theta_1}{\partial t} = -iT(n_1n_2)^{1/2}e^{i\delta} + ieVn_1\hbar^{-1} \quad (4.58)$$

Utilizando a fórmula de Euler na equação 4.58 e tomando apenas a parte real de $\partial n_1/\partial t$:

$$\frac{1}{2}\frac{\partial n_1}{\partial t} = -i^2T(n_1n_2)^{1/2}\text{sen}(\delta) \quad (4.59)$$

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = 2T(n_1n_2)^{1/2}\text{sen}(\delta) \quad (4.60)$$

Da mesma forma o processo pode ser realizado para $\partial\theta_1/\partial t$, tendo como resultado:

$$\frac{\partial\theta_1}{\partial t} = -\frac{eV}{\hbar} - T\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^{1/2}\text{cos}(\delta) \quad (4.61)$$

Analogamente, o mesmo pode ser feito para $\partial n_2/\partial t$ e $\partial\theta_2/\partial t$:

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = -2T(n_1n_2)^{1/2}\text{sen}(\delta) \quad (4.62)$$

$$\frac{\partial\theta_2}{\partial t} = -\left(\frac{eV}{\hbar}\right) - T\left(\frac{n_1}{n_2}\right)^{1/2}\text{cos}(\delta) \quad (4.63)$$

Como os supercondutores são considerados exatamente iguais $n_1 \cong n_2$, sendo possível escrever:

$$\frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} = \frac{\partial\delta}{\partial t} = -\frac{2eV}{\hbar} \quad (4.64)$$

$$d\delta = -\frac{2eV}{\hbar}dt \quad (4.65)$$

Tomando a integral da equação 4.65:

$$\int d\delta = \int -\frac{2eV}{\hbar} dt \quad (4.66)$$

É obtida a expressão:

$$\delta(t) = \delta(0) - \frac{2eV}{\hbar} t \quad (4.67)$$

Substituindo $\delta(t)$ na equação:

$$J = J_0 \text{sen}(\delta) \quad (4.68)$$

A expressão para a densidade de corrente supercondutora para o regime A.C. é dada por:

$$J = J_0 \text{sen} \left[\delta(0) - \frac{2eVt}{\hbar} \right] \quad (4.69)$$

E a corrente elétrica oscila com a frequência:

$$\omega = \frac{2eV}{\hbar} \quad (4.70)$$

Uma tensão de $1 \mu\text{V}$ produz uma frequência de aproximadamente $483,6 \text{ MHz}$ e a equação 4.70 é interpretada pelo fato de que um fóton de energia $\hbar\omega = 2eV$ é emitido ou absorvido quando um par de elétrons atravessa a barreira semicondutora. Medindo a tensão e a frequência é possível obter um valor muito de preciso de e/\hbar e a partir dessa relação, é possível calcular com maior precisão a chamada constante de estrutura fina, por exemplo. Tal constante caracteriza a magnitude da força eletromagnética entre duas partículas e é dada pela expressão:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \cdot \frac{1}{c4\pi\epsilon_0} \quad (4.71)$$

Figura 16: Tensão V em função da corrente i característica para o efeito Josephson. Uma corrente D.C. finita flui sem a aplicação de tensão acima da chamada corrente crítica i_c , este é o Efeito Josephson D.C. Para qualquer tensão acima de V_c a junção semicondutora tem uma resistência finita mas a corrente apresenta uma componente oscilatória de frequência $\omega = 2eV/\hbar$, este é o Efeito Josephson A.C. (KITTEL, 2005).

em que e é a carga do elétron, c a velocidade de luz no vácuo ($3 \times 10^8 \text{ m/s}$), h a constante de Planck e ϵ_0 é a permissividade elétrica no vácuo ($8,85 \times 10^{-12} \text{ C}^2\text{N}^{-1}\text{m}^{-2}$). Desta forma, o efeito Josephson também pode contribuir indiretamente para o estudo das propriedades fundamentais da matéria.

5 REVISÃO DA LITERATURA

- $FeSe_{1-x}$

A descoberta de materiais supercondutores contendo ferro em sua estrutura, constitui um dos tópicos de alto interesse no campo de pesquisa da supercondutividade nos últimos cinco anos. Neste contexto, a liga binária $FeSe_{1-x}$ constitui um material de interesse particular. Enquanto as suas fases tetragonais (δ' e β) apresentam supercondutividade sob pressão ambiente em torno de $T_c \approx 8,5$ K (M. DE SOUZA *et al.*, 2010) (FONG-CHI HSU *et al.*, 2008) (B. MASSALSKI; H. OKAMOTO *et al.*, 1990), a fase hexagonal (δ) não é supercondutora. Desta forma, uma das questões ainda em discussão na literatura é investigar a explicação física para este fenômeno. As estruturas cristalinas das fases em estudo podem ser visualizadas na Figura 17.

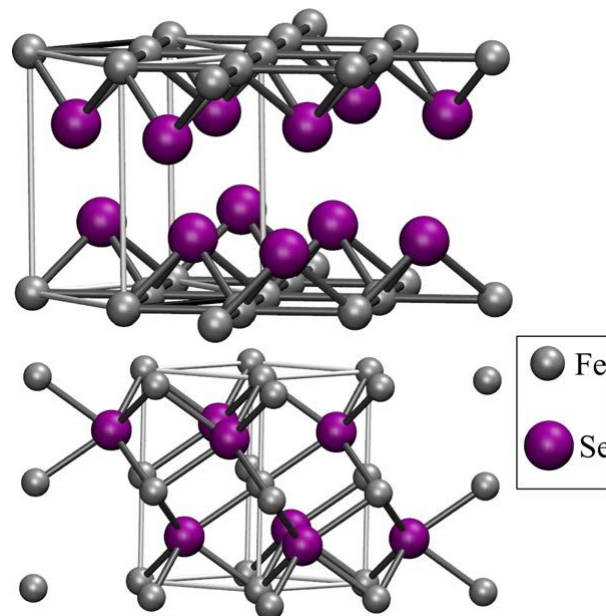


Figura 17: Estrutura cristalina tetragonal (acima) e estrutura cristalina hexagonal (abaixo) da liga binária $FeSe$ (L. CRACO; S. LEONI, 2010).

Atualmente, a busca por diferentes combinações de elementos químicos formando no-

vos materiais supercondutores com temperaturas críticas cada vez mais altas constitui um desafio na pesquisa de fronteira dentro da Física da Matéria Condensada. Geralmente, após a síntese de um determinado material, a estrutura cristalina é determinada através de experimentos de raio-X e são realizadas medidas de resistividade em função da temperatura a fim de se verificar as propriedades de transporte elétrico do material. Entre os cupratos até então reportados na literatura, o que apresenta T_c mais alta é a liga $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$, cuja estrutura é tetragonal e T_c é 134 K (H. TAKAHASHI *et al.*, 1993) (P. DAI *et al.*, 1995). Para os supercondutores à base de ferro, o que apresenta T_c mais alta é o material $\text{Sr}_{0,5}\text{Sm}_{0,5}\text{FeAsF}$ também na fase tetragonal com $T_c \approx 56$ K (G. WU *et al.*, 2009).

O entendimento do diagrama de fases é de grande importância para este estudo, uma vez que o mesmo fornece todas as informações relevantes para a síntese da liga com a composição e propriedades desejadas, conforme a Figura 18. Dentre os diversos trabalhos

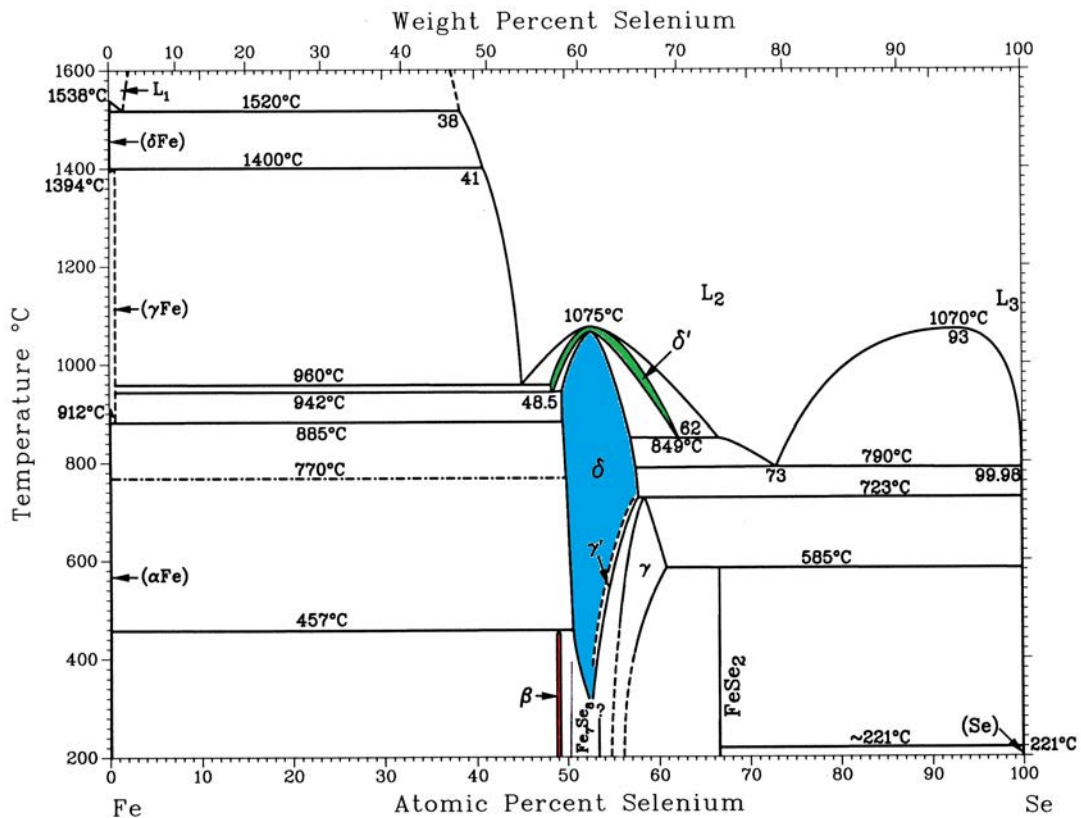


Figura 18: Diagrama de fases da liga binária FeSe_{1-x} . É possível verificar as várias fases de Fe-Se incluindo as fases de interesse: δ' (verde), β (faixa estreita em vermelho) e δ (azul) (B. MASSALSKI; H. OKAMOTO *et al.*, 1990).

realizados para a liga binária FeSe, uma observação fundamental é que a fase supercondutora pura emerge somente em amostras preparadas intencionalmente com deficiência de Se. Os planos de FeSe estão separados pelo chamado *gap* de Van der Waals. Isto faz com

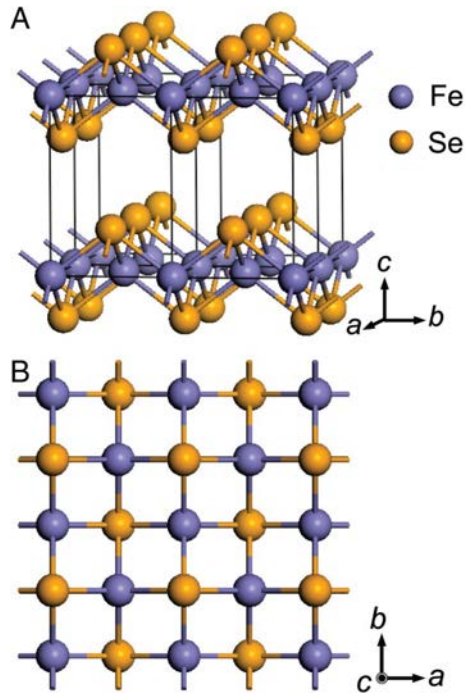


Figura 19: Estrutura cristalina esquemática para o α -FeSe. Quatro células unitárias são mostradas para revelar a estrutura em camadas (FONG-CHI HSU *et al.*, 2008).

que a rede de FeSe na fase tetragonal seja extremamente compressível. Tal propriedade está intimamente relacionada com o aumento de T_c sob aplicação de pressão hidrostática (S. MEDVEDEV *et al.*, 2009).

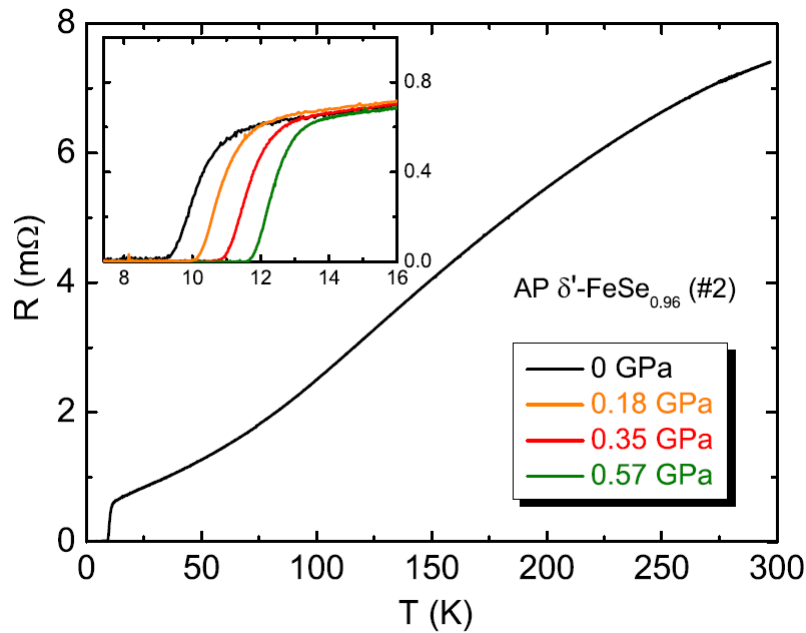


Figura 20: Painel principal: medida de resistividade elétrica em função da temperatura para o material δ' -FeSe_{0.96}. *Inset*: medidas de resistividade elétrica em baixas temperaturas em função da pressão hidrostática aplicada (M. DE SOUZA *et al.*, 2010).

Conforme a temperatura é reduzida, a resistividade elétrica da amostra na fase tetragonal

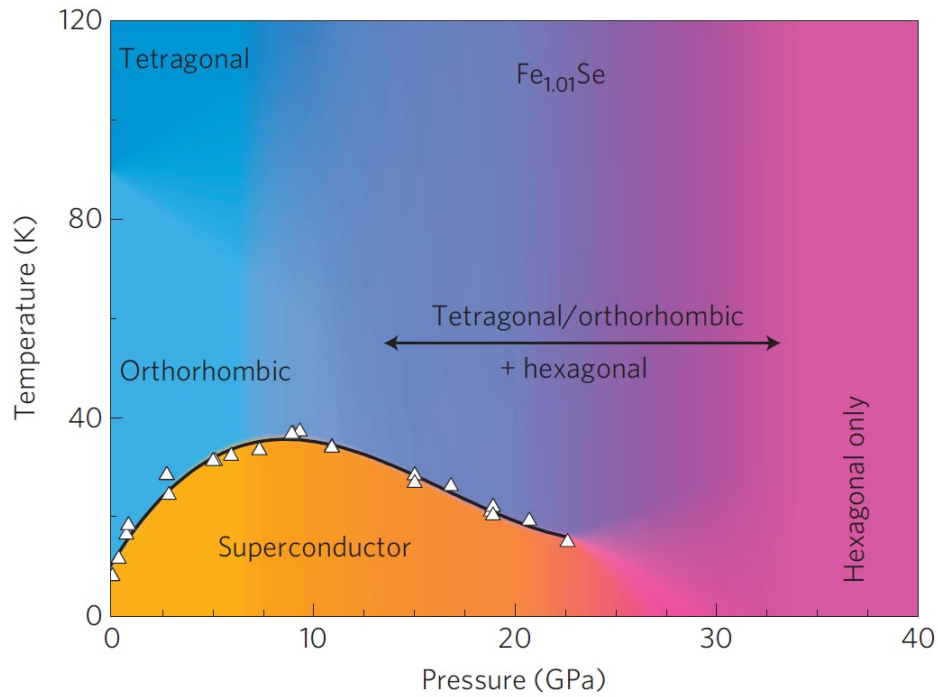


Figura 21: Sem pressão aplicada a liga FeSe sofre uma distorção estrutural de ortogonal para ortorrômbica a temperatura de 90 K. O máximo valor de T_c é observado em 36,7 K sob pressão de 8,9 GPa. Em altas pressões, a liga está unicamente na fase hexagonal e apresenta um comportamento semicondutor (S. MEDVEDEV et al., 2009).

tende a zero quando T_c é atingida. Entretanto, a curva teórica de resistividade na fase hexagonal apresenta uma derivada negativa ($dR/dt < 0$) em baixas temperaturas.

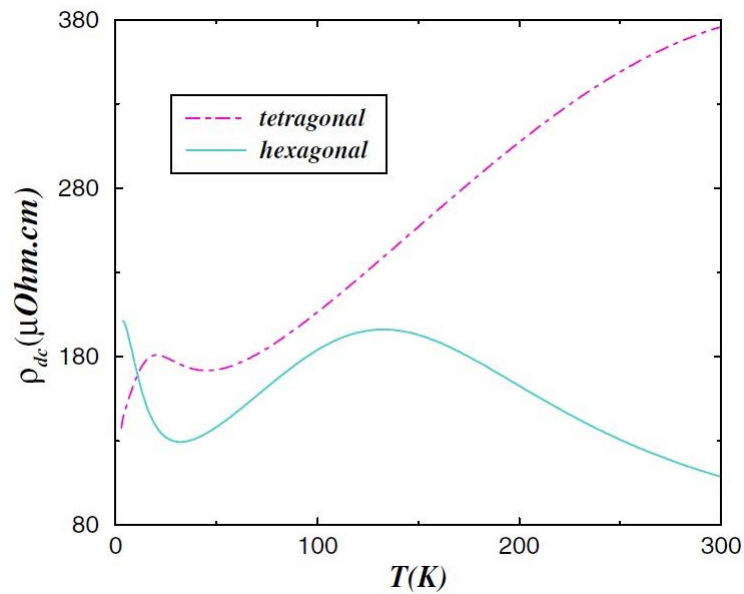


Figura 22: Resistividade elétrica em função da temperatura para a fase δ (linha contínua) e para as fases δ' e β (linha pontilhada) do diagrama de fases da liga binária FeSe_{1-x} de acordo com a predição teórica (L. CRACO; S. LEONI, 2010).

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho foram apresentados alguns conceitos fundamentais da Mecânica Quântica no capítulo “Revisão de Física Moderna” que são de extrema importância para o entendimento dos fenômenos relacionados à supercondutividade. Os tópicos foram discutidos visando uma sequência lógica para conectar todos os aspectos aqui envolvidos.

O modelo quântico do gás de elétrons foi resolvido para descrever a função de onda associada ao elétron livre e utilizada para demonstrar que as auto-energias de um elétron são quantizadas, ou seja, só podem variar de maneira discreta. A partir daí, foi realizada uma discussão sobre a origem da resistividade elétrica, o modelo de Drude A.C. e D.C., a condutividade elétrica nos metais e a formação das chamadas bandas de energia pela sobreposição dos orbitais eletrônicos.

No que diz respeito às propriedades dos supercondutores, foi apresentada uma discussão sobre suas propriedades elétricas, a descrição de alguns fenômenos interessantes, tal como o Efeito Meissner, e uma breve descrição das equações de London e teoria BCS. Além disso, foi realizada uma descrição da função de onda associada aos pares de Cooper, a qual posteriormente foi utilizada para descrever o efeito Josephson D.C. e A.C.

Uma vez que a liga binária FeSe_{1-x} apresenta uma fase supercondutora, os estudos mencionados anteriormente são de grande importância para o entendimento dos fenômenos físicos de tal liga.

7 REFERÊNCIAS

- (A. A. ABRIKOSOV, 1957) A. A. Abrikosov, *Soviet Physics JETP* **5** 1174, 1957.
- (ANNETT, 2003) *Superconductivity, superfluids and condensates*, James F. Annett, University of Bristol, Oxford University Press, 2003.
- (ASHCROFT; MERMIN, 1976) *Solid State Physics*, N. W. Ashcroft, N. David Mermin, Saunders College Publishing, Estados Unidos, 1976.
- (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957) J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Physical Review Letters* **108** 1175, 1957.
- (BEDNORZ; MUELLER, 1986) J. G. Bednorz, K. A. Mueller, *Zeitschrift für Physik B - Condensed Matter* **64** 189-193, 1986.
- (B. MASSALSKI; H. OKAMOTO *et al.*, 1990) B. Massalski, H. Okamoto *et al.*, *Binary Alloy Phase Diagrams - Second Edition*, 1990.
- (DRUDE, 1900) P. Drude, *Zur Elektronentheorie der Metalle, Annalen der Physik* **1** 566, 1900.
- (D. K. FINNEMORE *et al.*, 1966) D. K. Finnemore *et al.*, *Physical Review Letters* **149** 231, 1966.
- (FONG-CHI HSU *et al.*, 2008) Fong-Chi Hsu *et al.*, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **105**, 14262-14264 (2008).
- (G. WU *et al.*, 2009) G. Wu *et al.*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 142203 (2009).
- (H. TAKAHASHI *et al.*, 1993) H. Takahashi *et al.*, *Physica C* **218**, 1-4 (1993).
- (IVAN; VITOR, 2011) Ivan S. Oliveira, Vitor L. B. de Jesus - *Introdução à Física do Estado Sólido, 2ª edição* - 2011.
- (KITTEL, 2005) Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics - eighth edition*,

2005.

(K. SHIMIZU et al., 2001) K. Shimizu *et al.*, *Nature*, 412, 316-318, 2001.

(L. CRACO; S. LEONI, 2010) L. Craco, S. Leoni, *Europhysics Letters* **92**, 67003 (2010).

(M. DE SOUZA *et al.*, 2010) M. de Souza *et al.*, *The European Physical Journal B* **77**, 101-107 (2010).

(MESERVEY; SCHWARTZ, 1969) R. Meservey and B. B. Schwartz, *Equilibrium Properties: Comparison of Experimental Results with Predictions of the BCS Theory* (Marcel Dekker, Inc., New York, 1969), pp. 117–84

(ONNES, 1909) H. Kamerlingh Onnes, *The liquefaction of helium*, KNAW, Proceedings **11** 1908-1909, Amsterdam, 1909, pp. 168-185.

(ONNES, 1911) H. K. Onnes, *The resistance of pure mercury at helium temperatures*, *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden* **12**, 1911.

(P. A. TIPLER; G. MOSCA, 2011) P. A. Tipler, G. Mosca, Física para cientistas e engenheiros, LTC, 6ª Edição, 2011.

(P. DAI *et al.*, 1995) P. Dai *et al.*, *Physica C* **243**, 201-206 (1995).

(S. MEDVEDEV *et al.*, 2009) S. Medvedev *et al.*, *Nature Materials* **8**, 576 (2009).

(REITZ; MILFORD; CHRISTY, 1982) John R. Reitz, Frederick J. Milford, Robert W. Christy - Fundamentos da Teoria Eletromagnética, 1982.

(R. A. Millikan, 1911) Robert Andrews Millikan, *The Isolation of an Ion, a Precision Measurement of its Charge, and the Correction of Stokes's Law*, *Physical Review (Series I)* **32** (4) pp. 349-397 (1911).

(TIPLER; MOSCA, 2011) P. A. Tipler, G. Mosca, Física para cientistas e engenheiros, 6ª Edição, LTC, 2011.

(VARSHNI, 1967) Y. P. Varshni, *Physica* **34**, 149-154 (1967)

(WELT, 2011) Welt der Physik: Geschichte der Supraleitung.
<http://www.weltderphysik.de/de/1445.php>. Versão: 2011.

(WU *et al.*, 1987) M. K. Wu, *et al.* *Physical Review Letters* **58** 908, 1987.

(YOSHIO, 2003) Yoshio Yuyama; *International Symposium on Speed-up and Service Technology for Railway and Maglev Systems 2003*; (STECH'03) Tokyo - JAPAN.

8 *BIBLIOGRAFIA*

- *Física para cientistas e engenheiros*, P. A. Tipler, G. Mosca, LTC, 6ª Edição 2011.
- *Solid State Physics*, N. W. Ashcroft, N. David Mermin, Saunders College Publishing, Estados Unidos, 1976.
- *Introdução à Física do estado sólido*, Ivan S. Oliveira, Vitor L. B. de Jesus, Livraria da Física, 2ª edição, 2011.
- *Superconductivity, superfluids and condensates*, James F. Annett, University of Bristol, Oxford University Press, 2003.
- *Introduction to Solid State Physics*, Charles Kittel, eighth edition, 2005.
- John R. Reitz, Frederick J. Milford, Robert W. Christy - *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*, 1982.

9 *Eventos científicos e premiações*

- Participação (1^a e 2^a fase) no XXIV Congresso de Iniciação Científica da Unesp (2013) com pôster de título “Estudo dos processos de síntese da liga binária FeSe_{1-x}”
- Prêmio de melhor pôster no XXXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada (2014) sob título “Investigation of the physical properties of the binary alloy FeSe_{1-x}”, Sociedade Brasileira de Física (SBF)
- Prêmio de melhor pôster na XIV Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica (2014) sob título “A Comparative Study of the Various Phases of FeSe_{1-x}”, Sociedade Brasileira de Física (SBF)

10 Agradecimentos

Meus imensuráveis agradecimentos ao meu orientador Prof. Dr. Mariano de Souza que acreditou em meu potencial e proporcionou-me um aprendizado sobre a Física de uma maneira fantástica. Sua orientação foi um divisor de águas em minha vida acadêmica e pessoal e tenho a certeza de que tal orientação fez a total diferença em minha graduação. Agradeço-lhe imensamente também pela oportunidade em ser monitor da disciplina de Física I proporcionando-me uma riquíssima experiência tanto na sala de aula quanto em nossas discussões periódicas. Me sinto muito honrado em tê-lo como orientador e pelo trabalho que realizamos sempre inspirado na ética e no amor à ciência. Além disso, agradeço por ser um grande amigo e pelo ser-humano que você é, inspirando-me muito em minha própria busca pessoal.

Agradeço aos meus colegas de laboratório Cesar Augusto Sônego e Paulo Eduardo Menegasso Filho, em especial ao Paulo que também foi de extrema importância em minha formação acadêmica. Obrigado por todas as discussões, todos os auxílios e por ser um dos meus melhores amigos. Me sinto muito honrado em chamar-lhe de amigo e tê-lo em minha vida.

Não possuo palavras para descrever meus agradecimentos a minha mãe Lindalva Gomes e a minha irmã Isis Gomes Marques que são uma das bases da minha vida. Agradeço muito a minha mãe que sempre lutou e batalhou para proporcionar tudo o que o mundo pode oferecer de melhor a seus filhos. Gostaria de dizer que você é um grande exemplo de mulher, mãe e ser-humano que sempre levarei comigo em minha busca pela minha evolução pessoal. Nunca esquecerei o que fez por mim e espero um dia retribuí-la da melhor forma possível.

Aos meus grandes amigos Carlos Alberto Abreu Aleixo e Paulo Renato Matos Lopes que me proporcionaram uma maravilhosa chegada à universidade e fizeram do meu caminho nesta vida muito mais prazeroso e rico de experiências. Espero que um dia possa retribuir o que fizeram por mim e não me resta dizer que vocês são pessoas muito preciosas

em minha vida.

Por fim, agradeço também à todos que contribuíram direta ou indiretamente para o desenvolvimento deste trabalho de conclusão de curso.