IFT

Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

151

TESE DE DOUTORAMENTO

IFT–T.003/99

OK

Modelo BCS Renormalizado e Supercondutores de Alta Temperatura

Angsula Ghosh

INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA — BIBLIOTECA
027

Orientador

Sadhan K. Adhikari

Agosto de 1999

Dedicado a minha avó Sra Lily Ghosh

Agradecimentos

Gostaria de agradecer o Prof. Sadhan K. Adhikari do Instituto de Física Teorica, UNESP por sua ajuda e orientação. Sou grata ao Prof. Anthony J. Leggett da University of Illinois at Urbana-Champaign por sua hospitalidade e também pelas discussões interessantes e frutíferas durante minha estada em sua universidade. Gostaria de expressar minha profunda gratidão a meu pai, Prof. A. S. Ghosh do Indian Association for the Cultivation of Science cuja constante inspiração e ajuda fez possível completar este trabalho. É um prazer agradecer Prof B. M. Escobar Pimentel do IFT, UNESP, Prof S. R. A. Salinas do IFUSP e Prof S. N. Nandi e Prof P. W. Westhaus da Oklahoma State University, USA, pelo incentivo e encaminhamento nos vários estágios de meu doutorado. Devo agradecer meus amigos Eduardo Chohfe e Angelina Veiga Chakrabarti pelo constante auxílio e por tornar possível minha estada em São Paulo. Agradeço também meu amigo Cristiano Santos por, não somente pelo auxílio na tradução, como também pela amizade. Por esta ocasião quero expressar meus sinceros agradecimentos ao meu marido Puspitapallab Chaudhuri por sua paciência, cooperação e amor, que me ajudaram a completar este trabalho e também aos meus sogros pelo apoio e encorajamento.

A autora agradece o apoio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pela bolsa.

Resumo

O modelo BCS renormalizado tem sido estudado para explicar as propriedades de supercondutores a altas temperaturas. São considerados soluções em duas e três dimensões para várias ondas parciais com interação separável de alcance finito. O parâmetro de ordem, a temperatura crítica T_c, o comprimento de coerência ξ e o salto do calor específico em $T = T_c$ exibem escalonamento universal como funções da energia condensada. No limite de acoplamento fraco, observamos valores altos de T_c e pequenos de ξ, apropriados para muitos materiais de altas temperaturas. Observamos o escalonamento do calor específico, da entropia, do comprimento de penetração, da suscetibilidade e da condutividade térmica como funções da temperatura em ondas d. A presença de singularidade de van Hove nas densidades de estados mostra um aumento no valor da razão do salto do calor específico por T_c como função de T_c, de acordo com os resultados experimentais. Os escalonamentos universais estabelecidos anteriormente continuam válidos na presença da singularidade. O parâmetro de ordem misto de tipo $d + is$ também foi considerado. Nesse caso, achamos uma segunda transição, de segunda ordem, em T_{c1} ($< T_c$) manifestada pelos dois saltos de calor específico em T_c e T_{c1} e também pelas dependências da suscetibilidade, da comprimento de penetração, da condutividade térmica como funções da temperatura.

Palavras Chaves: supercondutividade, teoria BCS, supercondutores de alta temperatura, transição de fase

Áreas do conhecimento: 1.05.07-00-01

Abstract

The renormalized BCS model is considered to explain several properties of the high temperature superconductors. The solutions are studied in two and three space dimensions for various partial waves for a finite range separable potential. The order parameter, critical temperature T_c, coherence length ξ and jump in specific heat at $T = T_c$ as a function of condensation energy exhibit universal scalings. In the weak coupling regime this model gives us a small ξ and a high T_c suitable for many high temperature materials. The penetration depth, specific heat, susceptibility and thermal conductivity scale as a function of temperature for d waves. The presence of a van Hove singularity in the density of states exhibits an increase of the jump in specific heat to T_c ratio as a function of T_c in accord with the experimental findings. The universal scalings established before remain valid even with the presence of the singularity. The mixed order parameter $d + is$ has also been considered. It leads to a second second-order phase transition at T_{c1} ($< T_c$) manifested by the two jumps in specific heat at T_c and T_{c1} and also by the temperature dependencies of susceptibility, penetration depth and thermal conductivity.

Key Words: superconductivity, BCS theory, high-temperature superconductors, phase transition

Índice

1 Introdução 1

2 Revisão de Supercondutores Convencionais 8

2.1 Introdução 8

2.2 Propriedades 9

2.3 Sistemas de Transmissão com Tecnologia a Frio 11

2.4 A Teoria BCS 14

2.4.1 A Equação de Cooper 14

2.4.2 As Equações BCS 17

2.5 Quantidades Termodinâmicas e Eletromagnéticas: algumas definições 24

3 Supercondutores a Altas Temperaturas - sua estrutura e suas propriedades de estado normal 29

3.1 Introdução 29

3.2 Os materiais 31

3.3 Propriedades do estado normal 37

3.4 Simetria de parâmetro de ordem supercondutor 42

4 Escalonamento Universal no modelo BCS Renormalizado 45

4.1 Introdução 45

4.2 A Equação de Cooper 48

4.3 *Crossover* da BCS para o limite de Bose 52

4.4 A Equação de Número 56
4.5 O modelo BCS Renormalizado 58
4.6 Resultados e Discussões 61
4.6.1 Resultados analíticos 61
4.6.2 Resultados Numéricos 67
5 Singularidade de van Hove em ondas s e d **85**
5.1 Introdução 85
5.2 Modelo BCS Renormalizado e van Hove 88
5.3 Resultados e Discussão 90
6 Parâmetro de ordem misturado e Modelo BCS Renormalizado **97**
6.1 Introdução 97
6.2 Equações e Definições 101
6.3 Resultados e Discussões 102
7 Conclusão **108**
Referências **114**

Capítulo 1

Introdução

A descoberta da supercondutividade, em 1911 pelo pesquisador holandês Kamerlingh Onnes [1], foi uma das mais revolucionárias do século XX. Kamerlingh observou esse fenômeno no mercúrio, que se torna supercondutor a uma temperatura de 4,19 K, sendo hélio usado como líquido refrigerante. Resistência zero e diamagnetismo perfeito foram as duas características mais surpreendentes dos supercondutores. Após esse primeiro experimento, muitos outros metais apresentaram propriedades supercondutoras. A mais alta temperatura crítica observada em metais, em 1973[2], foi de 23,2 K em um composto metálico de nióbio e germânio. Desde essas primeiras observações, muitas teorias foram elaboradas para tentar explicar algumas propriedades dos supercondutores, mas apenas em 1957, quarenta e seis anos depois das primeiras descobertas, que uma teoria microscópica foi proposta.

Essa teoria, elaborada por Bardeen, Cooper e Schrieffer, comumente chamada de teoria BCS[3], teve bastante sucesso. Algumas outras surpresas nesse campo ainda viriam nesse século. Em 1986, os europeus J. Georg Bednorz e K. Alex Müller[4] encontraram compostos de LBCO (um óxido de lantânio, bário e cobre) com temperatura crítica $T_c \approx 35$K. Apenas depois de muitas repetições das medidas, esses pesquisadores acreditaram em seu resultado e o publicaram na Zeitschrift für

Physik de abril de 1986, fazendo história na ciência. Com esse salto na temperatura crítica, um novo campo de pesquisa foi aberto, hoje conhecido como Supercondutores a Altas Temperaturas. Desde então a temperatura crítica (T_c) cresceu muito rapidamente, sendo a maior observada até hoje de 164K sob pressão. Sob pressão atmosférica, o valor T_c de 133K tem sido encontrado em um nova classe de óxidos de cobre contendo mercúrio[5, 6]. Estes novos compostos, conhecidos como cupretos, conseguiram alcançar quatro vezes o limite considerado em supercondutores convencionais. Os cupretos consistem de uma estrutura de dois ou mais planos de CuO_2 separados por camadas de outros átomos (Ba, La, etc). A maior importância desses novos compostos é a temperatura de operação. Estes novos materiais funcionam com nitrogênio líquido como refrigerante. A atmosfera consiste de 80% de gás nitrogênio que, quando condensado como líquido, não é somente barato, mas também de fácil manuseio. Dessa maneira pode-se ter supercondutores mais baratos e tecnologicamente viáveis. No dia 10 de março de 1987 o jornal americano The New York Times publicou uma reportagem com a seguinte frase: "Pensando ainda mais longe, poderíamos chegar ao dia em que veríamos carros levitando ao invés de sobre rodas". A possibilidade de se conseguir supercondutores a temperatura ambiente foi aventada. Com toda a publicidade o número de pessoas dispostas a trabalhar nesses novos supercondutores cresceu muito. Para os pesquisadores, foi uma grande oportunidade, uma chance de ser parte de um avanço tecnológico maior. Com essa descoberta, esperava-se que muitos instrumentos úteis e que já estavam sendo estudados há alguns anos poderiam se tornar economicamente viáveis.

Desde 1987, tem-se visto um fenomenal crescimento na literatura voltada ao assunto da supercondutividade. Ela cresce tão rapidamente que novas publicações

devotadas exclusivamente ao assunto foram formadas. Embora dirigido para a área experimental, a quantidade de trabalhos teóricos tem sido imensa. A teoria convencional poderia prever um máximo de 40K. Daí, os altos valores de T_c imediatamente colocam em questão a aplicabilidade da teoria convencional para os novos materiais. Estes novos materiais não somente mostram um alto T_c mas também várias anomalias em propriedades normais de estado. As peculiaridades destes supercondutores tem sido um desafio para milhares de cientistas ao redor do mundo. Na teoria BCS, elétrons são ligados por uma interação elétron-fônon (i.e. *phonon mediated pairing*). Com apenas a teoria BCS, e levando-se em conta a energia do fônon (da ordem da energia de Debye), os atuais valores de T_c são impossíveis. Porém, há uma série de observações que, de uma forma ou de outra, apoiam a teoria BCS. Algumas delas são:

1. No estado de supercondutividade, os elétrons ficam emparelhados. Experimentos diferentes mostram que nesse estado a carga fundamental é 2e, indicando emparelhamento;

2. Espectroscopia de foto-emissão, tunelamento eletrônico e outros experimentos indicam a existência de um *gap* de energia tal como nos supercondutores convencionais. Todavia, esse gap é, provavelmente, anisotrópico e está entre $3.5_B T_c$ e $8k_B T_c$, o qual é maior que o valor BCS de $3.54k_B T_c$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Porém, com algumas mudanças esses altos valores podem ser obtidos;

3. Muitos experimentos sugerem o emparelhamento em um estado singleto e um estado de momento angular orbital s, como previsto pela BCS. Esses experimentos incluem partículas isoladas e tunelamento de Josephson entre um supercondutor convencional (por exemplo, Pb ou Sn) e algum cupreto, assim como experimento de

medida de penetração magnéticas em barreiras;

4. Estes novos materiais de alto T_c mostram muitas características familiares, tal como tunelamento de Josephson e estrutura de vórtices, encontrados em qualquer supercondutor tipo II[7].

Enquanto os aspectos precedentes de cupretos de alto T_c são bastante parecidos às propriedades da BCS convencional, é difícil conciliá-las com propriedades não usuais, tais como:

1. Valores extremamente altos de T_c;
2. Resistividade linear dc no estado normal;
3. Comportamento inesperado da razão de relaxação nuclear abaixo de T_c;
4. Fases antiferromagnéticas muito próximas
5. Comprimento de coerência extremamente pequeno.

Até nos dias atuais, não há consenso a respeito do mecanismo que causa alta em T_c para estes materiais. Assim, a procura por novos materiais tem sido feita de maneira totalmente empírica. Com os problemas com a BCS, algumas outras teorias têm sido propostas. Os modelos de uma e três bandas de Hubbard, bem como o modelo $t - J$, tentam representar menos detalhadamente o comportamento eletrônico dos novos materiais.

Infelizmente, muitos dos resultados experimentais não são suficientemente precisos para confirmar de forma convincente ou descartar estas teorias. Antiferromagnetismo, defeitos, fônons e a forte anisotropia dos materiais complica a interpretação dos resultados. Teorias que combinam a idéia do emparelhamento com a presença de fortes correlações antiferromagnéticas podem ser úteis para descrever os novos supercondutores. Por exemplo, a teoria de *spin-bag*[8], teoria de líquidos de Fermi anti-

ferromagnéticos [9] e a recentemente desenvolvida teoria $d_{x^2-y^2}$ tem atraído atenção considerável. A mudança de *magnons* pode produzir as forças necessárias para emparelhar os portadores de carga [11].

Entre as teorias baseadas em líquido de Fermi podemos encontrar o cenário da singularidade de van Hove[12], o chamado mecanismo de buraco [13], o "nested Fermi liquid" [14] e o cenário de van Hove antiferromagnético [15]. Alguns teóricos não acreditam que a teoria BCS possa ser aplicável a estes supercondutores a altas temperaturas[16]. Em seu lugar, cenários estão sendo propostos nos quais as excitações elementares são *spinons* e *holons*. Spinons são partículas com carga zero e spin 1/2, enquanto holons têm carga e e spin zero. Outras teorias - que não são baseadas em líquido de Fermi - que têm atraído atenção são a supercondutividade *anyon*[17], a teoria do líquido de Fermi marginal [18], teorias de gauge[19] e muitas outras. Da discussão acima, vemos que a teoria BCS ainda tem uma grande chance de explicar a supercondutividade a altas temperaturas, embora seja necessário fazer certas modificações. A BCS, sob certas generalizações, pode explicar estes novos materiais [7]. Inspirada pelo sucesso da teoria BCS, propomos um modelo BCS renormalizado, o qual pode ter muitas vantagens. Esse modelo foi sugerido alguns anos atrás por A. J. Leggett [20]. Ao contrário da teoria do acoplamento fraco, a soma na equação do gap extende-se sobre toda a zona Brillouin. Além disso, não há nenhuma motivação para usar o cut-off de Debye pois acredita-se que o acoplamento elétron-fônon não é o mecanismo de interação. À parte do sucesso acima mencionado, esse modelo renormalizado oferece altos T_c e também pequeno comprimento de coerência. O pequeno comprimento de coerência é uma motivação adicional para a escolha desse modelo. O comprimento do par de cobre em supercondutores con-

vencionais está entre $500A^0$ $\sim$$10000A^0$, mas para esses novos supercondutores esses valores mudam para $12A^0$ $\sim$$15A^0$.

Pode-se resumir os capítulos posteriores da seguinte forma. No capítulo 2 fazemos um breve resumo dos supercondutores convencionais e suas propriedades. Há uma série de aplicações em vários campos. A seção 3 versa sobre isso. A teoria BCS é discutida com certo detalhe nesse capítulo. Muitos cálculos de propriedades eletromagnéticas e termodinâmicas estão na literatura. As definições foram incluídas pois são úteis em nosso estudo. No capítulo 3 os supercondutores a altas temperaturas, que têm revolucionado a ciência e especialmente a física da matéria condensada, são abordados. Depois de uma breve visão histórica, explicamos as anomalias das propriedades normais de estado e suas estruturas. Ainda não se tem certeza da simetria dos parâmetros de ordem. Uma discussão é apresentada baseada nas novas descobertas. No capítulo 4 descrevemos nosso modelo e também elucidamos o porquê de ser chamado "renormalizado". O estudo desse modelo foi feito tanto em duas, quanto em três dimensões. Apresentamos nossos resultados baseados em cálculos numéricos e analíticos. Também apresentamos a dependência com a temperatura de várias propriedades termodinâmicas e eletromagnéticas. Nosso modelo parece descrever algumas das mais importantes propriedades de supercondutores a altas temperaturas. Feito isso, calculamos várias outras propriedades. No capítulo 5 consideramos o cenário de van Hove em ondas s e d. Muitos experimentos com materiais a altas temperaturas tem identificado a presença de pontos de sela na banda de estrutura, correspondendo à singularidade de van Hove na densidade de estados. Calculamos o salto no calor específico e a dependência com a temperatura da $C_s(T)$ e o deslocamento Knight. Também apresentamos nossos cálculos

dos parâmetros de ordem misturados, no capítulo 6. Existem vários trabalhos na literatura sobre os estados misturados das ondas s e d dos parâmetros de ordem. Por fim, as conclusões são apresentadas no capítulo 7. Resumimos nossos resultados, encontrando e discutindo outros cálculos que poderiam ser efetuados para os novos materiais. Terminamos discutindo alguns outros tópicos de recente pesquisa e a possibilidade de encontrar supercondutores a temperatura ambiente, o sonho de muitos pesquisadores.

Capítulo 2

Revisão de Supercondutores Convencionais

2.1 Introdução

A supercondutividade - o anulamento da resistência na corrente elétrica - é um dos fenômenos mais estranhos da natureza. Foi descoberta por Kammerlingh Onnes [1] em 1911 e publicada como "Sobre a mudança abrupta na taxa pela qual a Resistência do mercúrio se anula". Fios metálicos têm resistência elétrica que, quando da passagem de um fluxo de corrente, perdem energia em forma de calor. Supercondutores são materiais que não possuem resistência elétrica: uma corrente elétrica pode fluir através de um supercondutor sem qualquer perda de energia. Um metal consiste, geralmente, de um arranjo cristalino regular ou uma rede de átomos com partículas idênticas não interagentes sujeitas ao princípio da exclusão de Pauli, formando um gás de Fermi. Na rede alguns elétrons estão livres, sendo capazes de conduzir corrente elétrica. Eles são chamados de elétrons de condução e juntos formam um líquido de Fermi. Um líquido de Fermi é um gás de Fermi com interações. A teoria de líquido de Fermi é de Landau [26]. Os elétrons podem se mover livremente pela rede regular cristalina, mas qualquer quebra na regularidade obstrue o fluxo e causa resistência.

Há duas fontes importantes de resistência elétrica em fios. A primeira são as

imperfeições na rede cristalina, causada ou por impurezas ou por lacunas, onde um átomo está ausente da rede. Cada vez que um elétron colide com uma irregularidade, acaba perdendo energia. A segunda fonte de resistência são as vibrações da rede. A temperaturas acima do zero absoluto, os íons da rede vibram. O movimento espalha-se como uma onda por toda a rede, transmitido por fônons. Em 1911, já se sabia que a resistência elétrica num metal diminui com a temperatura. Exatamente o que aconteceria aproximando-se do zero absoluto era tema de discussões. Lord Kelvin acreditava que o fluxo de elétrons, que aparentemente melhoraria com o decréscimo da temperatura, no anulamento da resistência, ficaria congelado no espaço. A resistência no zero absoluto seria infinitamente alta. Outros, incluindo Onnes e Dewar, assumiam que o decréscimo na resistência continuaria de qualquer maneira, alcançando o zero no ponto de temperatura zero. Finalmente no final de 1911, Onnes mostrou que a resistência do mercúrio (Hg) caía por um fator de, no mínimo, 10^{10} no começo do estado de supercondutividade. Esse estado seria a uma temperatura abaixo de 4.15 K. A escolha de Hg deveu-se ao fato dessa substância ser facilmente purificada.

Um pouco mais tarde ficou claro que a resistência de alguns metais, incluindo mercúrio, realmente cai a zero a partir de uma certa temperatura, chamada de temperatura crítica. Qualquer corrente introduzida num circuito nessas condições continuará o fluxo indefinidamente.

2.2 Propriedades

Resistividade elétrica dc:

No estado de supercondução a resistividade elétrica dc é zero ou tão próxima de

zero que já foi observado que a corrente elétrica persiste sem atenuação em anéis supercondutores por mais de um ano. O decaimento da supercorrente foi estudado por File e Mills [27] usando métodos de precisão em RMN para medir o campo magnético associado à supercorrente. Eles concluíram que o tempo de decaimento da supercorrente não é menor que cem mil anos. Portanto *condutividade perfeita* é a primeira característica própria da supercondutividade.

Efeito Meissner: diamagnetismo perfeito

Meissner e Ochsenfeld [28] encontraram que, quando uma esfera é resfriada abaixo da temperatura de transição num campo magnético, ela anula o fluxo magnético. O mesmo acontece quando a esfera é primeiro resfriada e depois colocada num campo magnético. Daí, supercondutores, são também materiais com perfeito diamagnetismo. Um condutor perfeito resistiria a uma mudança de fluxo, enquanto que um supercondutor expele qualquer fluxo. A explicação para isto é que um supercondutor não é um condutor teoricamente perfeito, como descrito pelas leis de Maxwell. Um supercondutor é um *diamagneto perfeito*, ou seja, um material que resiste a fluxos internos. Essa é a segunda característica própria dos supercondutores. Esse fenômeno é conhecido como efeito Meissner-Ochsenfeld, ou mais comumente referido como efeito Meissner.

Efeito isótopo:

É a transição da temperatura com o crescimento da média da massa isotópica. Os resultados experimentais nos quais séries de isótopos podem ser fitadas por uma relação da forma

$$M^{\alpha}T_c = constante \tag{2.1}$$

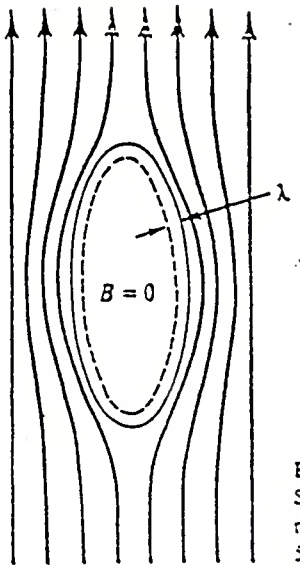

FIGURE 2.1
Schematic diagram of exclusion of magnetic flux from interior of massive superconductor. λ is the penetration depth, typically only 500 Å.

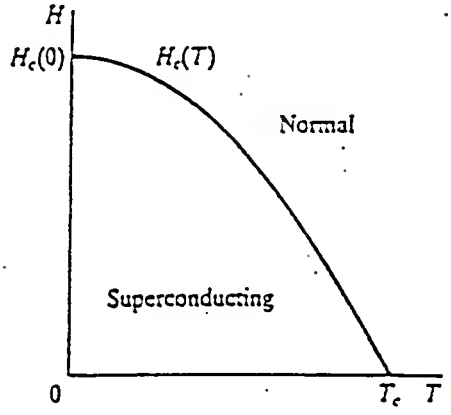

FIGURE 2.2
Temperature dependence of the critical field.

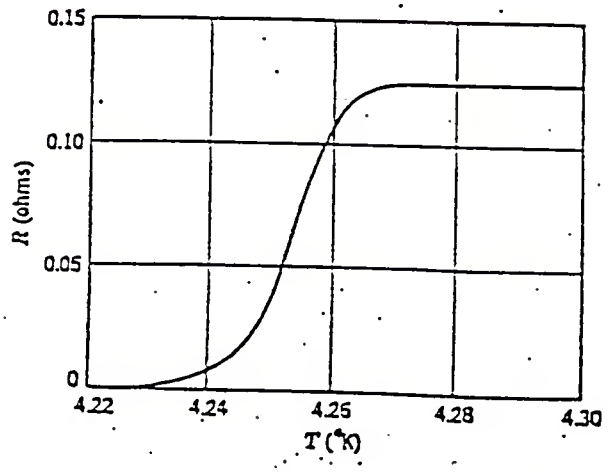

Fig. 2.3 Resistance of mercury versus temperature (after Kamerlingh Onnes, 03).

onde M é a massa isotópica, T_c a temperatura crítica e α é uma constante.

Campo magnetico crítico:

A existência de um efeito Meissner reversível implica na destruição da supercondutividade por um campo magnético crítico, H_c, o qual está relacionado termodinamicamente à energia livre entre o estado normal e o de supercondutividade em um campo zero, chamada energia de condensação do estado de supercondução. Mais precisamente, este *campo crítico termodinâmico* H_c é denotado pela equação de energia $H^2/8\pi$ por unidade de volume, associada com a presença do campo externo contrário a pressão magnética com a energia de condensação. Isso quer dizer

$$H_c^2(T)/8\pi = f_N(T) - f_S(T) \tag{2.2}$$

onde f_N e f_S são as energias livres de Helmholtz por unidade de volume nas suas respectivas fases em um campo zero. Foi encontrado empiricamente que $H_c(T)$ é bem aproximado por uma lei parabólica

$$H_c^2(T)/8\pi = H_c(0)[1 - (T/T_c)^2] \tag{2.3}$$

2.3 Sistemas de Transmissão com Tecnologia a Frio

O uso da supercondutividade tem sido sugerido em vários campos. Talvez o mais óbvio seja para o transporte de potência elétrica de um lugar para outro. A eletricidade é gerada em grandes estações, e transmitida por fios para consumidores que podem estar a centenas de quilômetros de distância. Tipicamente, o calor resistivo de uma linha de transmissão consome cinco por cento da potência elétrica. Algo que pudesse reduzir seria de um valoroso investimento ás fornecedoras de eletricidade.

Fios supercondutores não são realmente apropriados para isto. Uma seção do fio

pode tornar-se abruptamente não supercondutora. Isso faria com que a resistência crescesse dramaticamente, especialmente com materiais supercondutores mais resistivos do que cobre a temperatura normal. O calor resistivo poderia vaporizar o fio, destruindo o sistema de transmissão. Um segundo problema é que os fios teriam que ser resfriados abaixo da temperatura crítica usando hélio líquido, e isso requer uma tecnologica complexa. Tipicamente, hélio líquido a 4.2 K é armazenado num recipiente a vácuo envolvido por nitrogênio líquido a 77 K, o que está contido em um outro recipiente a vaćuo. Isso pode ser caro e de difícil feitio.

A despeito destes problemas, supercondutores tem utilidades práticas, especialmente para aplicações que os custos são menos significativos. Em alguns deles usa-se magnetos supercondutores. O fio, feito de um material supercondutor, é dobrado na forma de um solenóide. Uma alta corrente faz com que o fluxo pelo solenóide provoque um forte campo magnético com densidade de fluxo acima de 20 teslas, mais ou menos metade de um milhão de vezes mais forte que o campo magnético da Terra. As altíssimas correntes necessárias para a geração desse campos causariam uma superaquecimento em eletromagnetos convencionais. Magnetos supercondutores são usados para a formação de imagem por ressonância magnética, que pode mostrar com detalhes o organismo de pacientes, sem a necessidade de submetê-los aos perigos dos raios X ou gama. Solenóides supercondutores são também utilizados como mecanismo de suspensão de alguns dos trens mais rápidos do mundo. O "Maglev" é apoiado pela repulsão entre dois pólos opostos de um solenóide interno (que pode ser resfriado) e solenóides não supercondutores no trilho. Com a suspensão, a fricção entre o trem e o trilho é eliminada. Complexos circuitos de alta velocidade são usados para ajustar a corrente a fim de que o trem tenha um peso constante

sobre os trilhos.

Aceleradores de partículas também têm usado magnetos supercondutores. Por exemplo, no Fermilab próximo a Chicago, magnetos supercondutores produzem a órbita de prótons por um túnel circular com mais de dois quilômetros de diâmetro. Das partículas mais energéticas, as mais rápidas, num campo forte, precisam de um caminho curvo. Somente magnetos supercondutores são fortes o bastante.

Aparelhos eletrônicos são os que usam os menores supercondutores. Em uma junção Josephson, inventada em 1962 por Brian Josephson quando trabalhava como estudante graduado na Universidade de Cambridge, dois pedaços de material supercondutor são reunidos por uma fina camada de um material isolante tal como alumínio (Al_2O_3). A camada isolante é composta por poucos átomos e pequenas correntes podem passar através dele. Porém, se a corrente excede um certo valor crítico a junção vai para um alto estado de resistência e a corrente é interrompida. Dessa forma uma junção de Josephson pode funcionar como um interruptor eletrônico. Pode-se ter interruptores muito rápidos - da ordem de picosegundos (10^{-12} seg). Tais dispositivos poderiam ser usados em supercondutores, que se tornariam vinte vezes mais rápidos que as máquinas de hoje.

A junção Josephson é também usada em outra aplicação eletrônica, o *superconducting quantum interference device* ou SQUID. Uma ou mais junções são colocadas num loop e quando um campo magnético passa através do loop inclue uma corrente. Pequenas mudanças no campo magnético produzem diferenças mensuráveis na corrente, tanto que o SQUID pode ser usado como um dispositivo extremamente sensível para medir campos magnéticos. O SQUID pode detectar mudanças menores que um bilionésimo do campo magnético da Terra e isso pode ter muitas aplicações práticas.

Por exemplo, geólogos usam esse aparelho para prospecção de minerais. Químicos o usam no monitoramento de corrosão. Biofísicos o usam para construir imagens da atividade do cefebro e coração humanos, pela deteção de campos magnéticos gerados de correntes elétricas fluindo pelo corpo.

2.4 A Teoria BCS

Depois da descoberta de Onnes em 1911, muito mais supercondutores foram descobertos em laboratório numa rápida sucessão. Embora algumas teorias macroscópicas fizessem sucesso, tais como de F. e H. London [29], Ginzburg e Landau [?], nenhuma dessas teorias se mostrou apropriada para explicar esses estranhos fenômenos.

A teoria que melhor explica esses fenômenos foi desenvolvida quarenta e seis anos depois da descoberta de Onnes, em 1957, na Universidade de Illinois pelos físicos John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer. Não demorou muito para que passasse a ser conhecida pelas iniciais de seus nomes, ou seja, teoria BCS [3]. Bardeen, Cooper e Schrieffer receberam o Prêmio Nobel de física em 1972 por sua teoria que revolucionou a qualidade do nosso entendimento da supercondutividade.

2.4.1 A Equação de Cooper

Pares de Cooper são a base da teoria BCS. Em 1956, Cooper mostrou que uma atração fraca pode ligar pares de elétrons e um estado ligado, o que foi conhecido mais tarde como pares de Cooper. Por uma interação atrativa residual arbitrariamente fraca, no ponto zero de temperatura, sobre o mar de Fermi, forma-se espontaneamente um par de Cooper ligado se a região de interação iônica for maior que a repulsão elétron-elétron [31]. Esses pares de Cooper são a fundação da teoria microscópica da supercondutividade [3].

Quantização do fluxo e outras evidências experimentais apoiam a idéia dos pares de Cooper e a teoria BCS. O mar de Fermi é instável à formação de pelo menos um par ligado desconsiderando que a interação fraca é atrativa. No problema ordinário de dois férmions no vácuo, ocorrem ligações em uma e duas dimensões para interações atrativas muito fracas, não havendo nenhum estado ligado em três dimensões para dois elétrons ainda que o potencial exceda o valor limite. Pares de Cooper são encontrados em qualquer dimensão espacial para elétrons interagentes via uma interação atrativa sobre o mar de Fermi cheio. Sendo assim, esse resultado é uma consequência da estatística de Fermi e da existência do mar de Fermi de fundo. Consideremos um modelo simples com dois elétrons adicionados ao mar de Fermi a T=0, estipulando que os elétrons extras interajam entre si, mas não com o mar, exceto via exclusão de Pauli. Assim, teremos uma função de onda para duas partículas. Pelo argumento geral de Bloch, esperamos que o mais baixo estado de energia possua momento total zero [7], tendo assim, os elétrons, momentos iguais e opostos. Isso sugere a construção de um função de onda orbital da seguinte forma

$$\psi_0(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r_1}} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{r_2}} \tag{2.4}$$

onde g_k é o peso do coeficiente, k é o momento e $\mathbf{r_1}$ e $\mathbf{r_2}$ são os vetores radiais. Levando em conta a antissimetria da função de onda total com respeito à troca de dois elétrons, ψ_0 é convertido em uma soma de produtos de $\cos \mathbf{k}.(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ com a função antissimétrica do singleto de spin $(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$ ou em uma soma de produtos de $\sin \mathbf{k}.(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ com uma funcão simétrica do tripleto de spin $(\alpha_1\alpha_2,\ \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1,\ \alpha_1\alpha_2)$. Nessa expressão α_1 refere-se ao estado de spin up da partícula 1 e β_1 ao estado de spin down. Antecipando uma interacão atrativa, esperamos que o acoplamento singleto tenha a mais baixa energia pois a dependência cossenoidal de sua função de

onda orbital em $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ produza uma amplitude de probabilidade tão larga quanto os elétrons estejam próximos um dos outros. Portanto, consideremos uma função de onda singleto para dois elétrons da seguinte forma

$$\psi_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \left[\sum_{k>k_F} g_k \cos \mathbf{k}.(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\right](\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) \tag{2.5}$$

onde k_F é o momento de Fermi. Inserindo a função de onda acima na equacão de Schrödinger do problema, teremos que a equação para o par de Cooper é dada por

$$(\hat{E} - 2\epsilon_k)g_k = \sum_{k'>k_F} V_{kk'}g_{k'} \tag{2.6}$$

onde E é a energia dos autovalores, ϕ_k é o espaço de momento da função de onda de Cooper, ϵ_k é a energia da quasipartícula e $V_{kk'}$ é o potencial de interação.

Uma quasipartícula pode ser entendida como uma partícula acompannhada por uma nuvem de distorção no gás de elétrons. A ligação de Cooper é dada por $B_c = 2E_F - \hat{E}$, onde E_F é a energia de Fermi. Sendo difícil analisar essa situação para $V_{\mathbf{kk'}}$ geral, Cooper faz uma aproximação que

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{kk'}} &= -V, \quad \text{if } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D \text{ and } |\xi_{\mathbf{k'}}| < \hbar\omega_D; \\ &= 0, \quad \text{otherwise.} \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde $\hbar\omega_D$ é a energia de Debye para fótons na rede sendo $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - E_F$, E_F a energia de Fermi. Com essa interação simplificada, o lado direito de (2.6) torna-se constante, independente de $\mathbf{k}$. Ficamos então com

$$g_{\mathbf{k}} = V\frac{\sum_{k'>k_F} g_{\mathbf{k'}}}{(2\epsilon_{\mathbf{k}} - \hat{E})} \tag{2.8}$$

Somando ambos os lados e cancelando $\sum g_{\mathbf{k}}$, teremos

$$\frac{1}{V} = \sum_{\mathbf{k}>k_F} (2\epsilon_{\mathbf{k}} - \hat{E})^{-1} \tag{2.9}$$

Quando transformamos a soma em uma integração, com $N(0)$ denotando a densidade de estados no nível de Fermi para elétrons de uma orientação de spin, encontramos

$$\frac{1}{V} = N(0) \int_{E_F}^{E_F+\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{2\epsilon - \hat{E}} = \frac{1}{2} N(0) \ln \frac{2E_F - \hat{E} + 2\hbar\omega_D}{2E_F - \hat{E}} \tag{2.10}$$

Em muitos supercondutores, encontra-se que $N(0)V < 0.3$. Essa é a chamada *aproximação de acoplamento fraco*, válida para $N(0)V \ll 1$, na qual a solução da equação precedente pode ser escrita como

$$\begin{aligned} E &\approx 2E_F - 2\hbar\omega_D\, e^{-2/N(0)V} \\ &\approx 2E_F - B_c \end{aligned} \tag{2.11}$$

Portanto realmente há um estado ligado de energia negativa com respeito à superfície de Fermi, composto inteiramente de elétrons com $k > k_F$, i.e., com energia cinética em excesso de E_F. A contribuição para a energia do potencial atrativo descarta esse excesso de energia cinética, levando a desconsiderar o quão pequeno é V.

2.4.2 As Equações BCS

Tendo visto que o mar de Fermi e instável com relação a formação de um par de Cooper quando a interação da rede é atrativa, claramente podemos esperar então que os pares se condensem até que um ponto de equilíbrio seja alcançado.

O par de Cooper é muito maior que as distâncias entre as partículas. Isso significa que um grande número de outros pares estão viajando por entre um dado par. Este número é da ordem de 10^6. Esse grande overlap de pares contribue para uma correlação no movimento de todos os outros pares, podendo-se dizer que o efeitos quânticos do gás de Fermi representam os efeitos quânticos numa escala

macroscópica. Um gás de Fermi é um sistema de partículas idênticas não interagentes sujeitas ao princípio da exclusão de Pauli. O estado coletivo pode ser entendido como um gás de Fermi "condensado" em uma "macromolécula" que inclue o sistema de supercondutividade inteiro.

Portanto, a macromolécula permanece no estado de supercondutividade mesmo que o gap de energia seja superado. O estado de supercondutividade é uma fase, tal como o estado líquido ou o sólido. Na transição de temperatura, o estado de supercondutividade torna-se mais favorável, indo para o estado de mais baixa energia. Quando o supercondutor está aquecido, o calor serve para quebrar o par de Cooper antes de aumentar a temperatura do material. Isso explica o salto no calor específico quando o material passa do estado de supercondutividade ao estado normal.

Diferentemente das fases de gás e líquido, a transição de fase do estado normal ao de supercondutividade é de segunda ordem. Isso significa que a transição se faz instantaneamente, sem qualquer calor latente, mas todavia com uma descontinuidade no calor específico. Isto pode ser visto pela queda abrupta na resistência em um pequeno intervalo de temperatura na Fig. 2.3. A teoria BCS nos dá o ferramental apropriado para lidar com esse estado complicado.

Em sua teoria microscópica BCS (Bardeen, Cooper e Schrieffer) tomam um ansatz variacional, usado para ter máxima vantagem na condensação de Cooper. Na teoria BCS o estado fundamental tentativa $|\psi_g\rangle$ é tomado como

$$|\psi_g\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c^*_{\mathbf{k}\uparrow} c^*_{-\mathbf{k}\downarrow})|\phi_0\rangle \tag{2.12}$$

onde $|\phi_0\rangle$ é um estado de vácuo sem partículas. A notação $c^*_{\mathbf{k}\uparrow}$, fornece os operadores de criação de um elétron com momento $\mathbf{k}$ e spin up. O correspondente operador de aniquilação é $c_{\mathbf{k}\uparrow}$. A expressão $|u_{\mathbf{k}}|^2$ é a probabilidade que o par $(\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow)$ esteja

desocupado e $|v_{\mathbf{k}}|^2$ é a probabilidade de que esteja ocupado. A amplitude variacional complexa satisfaz

$$u_{\mathbf{k}} = u_{-\mathbf{k}} \tag{2.13}$$

$$v_{\mathbf{k}} = v_{-\mathbf{k}} \tag{2.14}$$

e a normalização devida é

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \tag{2.15}$$

O produto é sobre todos os valores de $\mathbf{k}$ definidos pelas condições de normalização na caixa [32].

Embora a $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ possa ser considerada real por simplicidade, a escolha particular dos coeficientes variacionais

$$u_{\mathbf{k}} = 0, v_{\mathbf{k}} = 1 \text{ for } |\mathbf{k}| < k_F \tag{2.16}$$

$$u_{\mathbf{k}} = 1, v_{\mathbf{k}} = 0 \text{ for } |\mathbf{k}| > k_F \tag{2.17}$$

reduz $|\phi_0\rangle$ ao estado fundamental normal de Fermi; o ansatz é geral, embora contenha o estado fundamental não supercondutor. Deve-se notar que o estado variacional da equação (2.12) não contém um número fixo de partículas, uma vez que somente as probabilidades dos pares de ocupação são especificadas. Ultimamente isso tem sido visto como uma fraqueza do formalismo, embora tenha sido apontado por Leggett [20], por exemplo, que a espécie supercondutora é normalmente sondada por um fio condutor, tal que o número de elétrons nele contido seja genuinamente variável.

Anderson [33] foi o primeiro a envolver uma "relação de incerteza número-fase", $\delta N \delta\phi \sim 1$ onde δN é a incerteza no número de partículas N e $\delta\phi$ é a incerteza na fase ϕ. Deve-se notar que existe uma diferença de fase $e^{i\phi}$ entre $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$, onde ϕ é

independente de k e esta é a fase para o estado BCS. Pode-se mostrar que a energia variacional é independente da fase.

Determinação dos Coeficientes:

O hamiltoniano $\mathcal{H}$ é tomado como a energia cinética de todos os elétrons, juntamente com a interação da equação 2.7. O "hamiltoniano de emparelhamento" ou "hamiltoniano reduzido" em termos dos operadores de criação e destruição é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{kq}} V_{\mathbf{kq}} c^*_{\mathbf{k}\uparrow} c^*_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{q}\downarrow} c_{\mathbf{q}\uparrow} \tag{2.18}$$

onde $c^*_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} = n_{\mathbf{k}\sigma}$ é o operador número da partícula, V_{kq} é o elemento de matriz do potencial de interação. A solução pode ser obtida usando a aproximação variacional tal como feito no trabalho original de BCS [3]. Trabalhando com um estado no qual o número de partículas é variável, necessitamos minimizar o valor esperado $\langle\psi_g|\mathcal{H}|\psi_g\rangle$ sujeito ao vínculo $\langle\psi_g|\hat{N}|\psi_g\rangle = N$. Aqui $\hat{N}$ é o operador número e N o número médio de partículas no sistema. Daí, pelo método dos multiplicadores indeterminados, minimizamos o hamiltoniano

$$\delta\langle\psi_g \mid \mathcal{H} - \mu\hat{N} \mid \psi_g\rangle = 0 \tag{2.19}$$

Como no caso de gás de Fermi não interagente, isso significa que μ é a energia de Fermi, E_F (ou potencial químico). A inclusão de $-\mu\hat{N}$ é matematicamente equivalente a tomar o zero de energia cinética em μ. Assim, escrevendo mais explicitamente

$$\delta\langle\psi_g \mid \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{kq}} V_{\mathbf{kq}} c^*_{\mathbf{k}\uparrow} c^*_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{q}\downarrow} c_{\mathbf{q}\uparrow} \mid \psi_g\rangle = 0 \tag{2.20}$$

onde $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ é a energia da partícula relativa a energia de Fermi. O operador número, $\hat{N}$ aparece em conjunto com o operador energia cinética , daí as energias da

partícula $\xi_{\mathbf{k}}$ são, efetivamente, medidas de E_F. Considerando o estado fundamental na eq. (2.12), teremos

$$\langle \psi_g \mid \mathcal{H} - \mu \hat{N} \mid \psi_g \rangle = \sum_{\mathbf{k}} 2\xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{kq}} V_{\mathbf{kq}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \tag{2.21}$$

o qual é minimizado sujeito à condição que

$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1.$

Esse vínculo é convenientemente imposto tomando

$$u_{\mathbf{k}} = \sin\theta_{\mathbf{k}} \quad \text{and} \quad v_{\mathbf{k}} = \cos\theta_{\mathbf{k}} \tag{2.22}$$

Portanto, substituindo em (2.20) teremos

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} \sin 2\theta_{\mathbf{q}}}{2\xi_{\mathbf{k}}} \tag{2.23}$$

É conveniente definir

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} \sin 2\theta_{\mathbf{q}} \tag{2.24}$$

e

$$E_{\mathbf{k}} = (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)^{1/2} \tag{2.25}$$

Com essas duas definições (2.23) tem-se

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}} \tag{2.26}$$

tal que

$$2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tag{2.27}$$

e

$$v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tag{2.28}$$

A escolha de sinais para o seno e cosseno dá o número de ocupação $v_{\mathbf{k}}^2 \to 0$ como $\xi \to \infty$, de tal modo que se tenha uma solução razoável. A condição para autoconsistência é dada por

$$\Delta_k = -\sum_{\mathbf{q}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}} V_{\mathbf{kq}} = -\sum_{\mathbf{q}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2(\Delta_{\mathbf{q}}^2 + \xi_{\mathbf{q}}^2)^{1/2}} V_{\mathbf{kq}}, \tag{2.29}$$

As equações no final dessa seção são para uma interação geral $V_{\mathbf{kq}}$. Retomamos o modelo de $V_{\mathbf{kq}}$ usado por Cooper na BCS, eq. (2.7)

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{kq}} &= -V, \quad \text{if } |\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{q}}| < \hbar\omega_D; \\ &= 0, \quad \text{otherwise.} \end{aligned} \tag{2.30}$$

com V sendo uma constante positiva. Inserindo esse $V_{\mathbf{kq}}$ em (2.29), encontramos que é satisfeita por

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= \Delta, \quad \text{if } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D; \\ &= 0, \quad \text{otherwise.} \end{aligned} \tag{2.31}$$

Aqui a soma é restrita à região de interação definida na equação (2.7) ou (2.30), i.e., camada de interação $|\xi_{\mathbf{k}}| \ll \hbar\omega_D$, sendo $\hbar\omega_D \ll \xi_F|$. Então, podemos colocar

$$\sum_{\mathbf{k}} = N(0) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\xi \tag{2.32}$$

Agora, usando a simetria dos valores $\pm\xi$, obtemos de

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{(\Delta_{\mathbf{q}}^2 + \xi_{\mathbf{q}}^2)^{1/2}} = \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \tag{2.33}$$

Portanto

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh[1/N(0)V]} \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/N(0)V} \tag{2.34}$$

onde o último passo é justificado no limite de acoplamento fraco $N(0)V \ll 1$. Desde que $1/N(0)V$ é tipicamente ≤ 0.3, a igualdade aproximada em (2.34) é tipicamente boa em 1 por cento. Fisicamente, o parâmetro Δ é a energia mínima de excitação, ou o *gap de energia.* Um supercondutor comporta-se como se fosse um gap na energia de largura 2Δ centrado na energia de Fermi no conjunto dos níveis de um elétron. Portanto o elétron de energia ϵ pode ser acomodado por um supercondutor somente se $|\epsilon - E_F|$ exceder Δ. Tendo encontrado Δ podemos simplesmente computar o coeficiente $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ que especificam função de onda BCS ótima. Usando a equação (2.28) e a constante de normalização $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, encontramos

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2}(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{(\Delta_{\mathbf{q}}^2 + \xi_{\mathbf{q}}^2)^{1/2}}\right) \tag{2.35}$$

além de

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) = 1 - |v_{\mathbf{k}}|^2 \tag{2.36}$$

Teoria BCS a temperatura não-zero

O estado BCS em $T = 0$ é descrito pela função de onda ψ_g da equação (2.12).

$$|\psi_g\rangle = \prod_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \tag{2.37}$$

com

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}|00\rangle + v_{\mathbf{k}}|11\rangle) \tag{2.38}$$

onde $|00\rangle$ e $|11\rangle$ representam o par desocupado e o ocupado respectivamente. Em $T = 0$ somente os pares de estados $|00\rangle$ e $|11\rangle$ ocorrem, mas para $T \geq 0$ é necessário considerar a quebra dos pares de estado $|01\rangle$ e $|10\rangle$. Especificamente, $f_{\mathbf{k}}$ é a probabilidade em $|01\rangle$ e $|10\rangle$ estarem ocupados, tal que $(1 - 2f_{\mathbf{k}})$ é a probabilidade de

que o par de estados $\psi_{\mathbf{k}}$ da equação (2.37) esteja ocupado. Daí, podemos redefinir Δ para qualquer valor de temperatura da equação (2.24) como

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} (1 - 2f_{\mathbf{q}}) \\ &= -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}} (1 - 2f_{\mathbf{q}}) \end{aligned} \tag{2.39}$$

Como $E_{\mathbf{k}}$ é uma excitação, ou energia de quasipartícula, a equação (2.25) mostra que, exatamente a temperatura zero, $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ é o gap de energia e $E_{\mathbf{k}}$ deve ser uma quantidade positiva $\geq |\Delta_{\mathbf{k}}|$. Uma vez que $f_{\mathbf{q}}$ é a probabilidade de ocupação térmica, isso mostra que $\Delta_{\mathbf{q}}$ é dependente da temperatura. A função de Fermi usual é definida como

$$f_{\mathbf{q}} = (e^{\beta E_{\mathbf{q}}} + 1)^{-1} \tag{2.40}$$

onde $\beta = 1/k_B T$, desde que $E_{\mathbf{q}} \geq \Delta$, $f_{\mathbf{q}} \to 0$ at $T = 0$ para todo $\mathbf{q}$. Assim, considerando as equações (2.39), (2.40), (2.36) e (2.35) teremos

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{q}}}{2k_B T}. \tag{2.41}$$

Fazendo uso da aproximação BCS que $V_{\mathbf{kq}} = -V$ e $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{q}} = \Delta$, a condição de autoconsistência fica

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\beta E_{\mathbf{k}}/2)}{2E_{\mathbf{k}}} \tag{2.42}$$

onde, como usual $E_{\mathbf{k}} = (\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}$.

2.5 Quantidades Termodinâmicas e Eletromagnéticas: algumas definições

A dependência do parâmetro de ordem com a temperatura pode ser determinada da equação (2.42). Com $\Delta(T)$ determinado, o conjunto de temperaturas dependentes

das energias de excitação dos férmions $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta(T)^2)}$ é fixado. Essas energias determinam o número de ocupação da quasipartícula $f_{\mathbf{k}}$ a qual, por sua vez determina a entropia eletrônica como

$$S_S(T) = -2k_B \sum_{\mathbf{k}} [(1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}}] \tag{2.43}$$

onde $\beta = 1/k_B T$. No estado normal, $E_q = \xi_q - \mu$, desde que o parâmetro de gap seja zero. Dado $S_S(T)$, o calor específico pode ser calculado usando

$$C_S(T) = T\frac{dS_S}{dT} = -\beta\frac{dS_S}{d\beta}.$$

Daí, usando a equação (2.43), podemos escrever

$$C_S(T) = 2\beta k_B \sum_{\mathbf{k}} -\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}}\left(E_{\mathbf{k}}^2 - \frac{1}{2}\beta\frac{d\Delta_{\mathbf{k}}^2}{d\beta}\right) \tag{2.44}$$

O primeiro termo na equação acima vem da redistribuição das quasipartículas pelos vários estados de energia como mudança da temperatura. O segundo termo descreve o efeito do gap dependente da temperatura. O calor específico normal $C_N(T)$ pode ser obtido da expressão acima colocando $\Delta(T) = 0$. Trocando $E_{\mathbf{k}}$ por $|\xi_{\mathbf{k}}|$ em (2.44) obtem-se

$$C_N(T) = \gamma T = \frac{2\pi^2}{3} N(0) k_B^2 T \tag{2.45}$$

que é contínua em T_c. Há uma descontinuidade no calor específico C_S em $T = T_c$ pelo fato que o segundo termo da eq. (2.44) é finito em T_c onde $d\Delta^2/dT$ é largo, mas é zero acima de T_c. O salto indica que a transição supercondutora normal é de segunda ordem. O salto no calor específico $\Delta C = (C_S - C_N)|_{T_c}$ pode ser encontrado por

$$\Delta C = \sum_q \frac{d\Delta_q^2}{dT}\frac{\partial f}{\partial E_q} \tag{2.46}$$

A energia interna por partícula pode também ser calculada conhecendo o calor específico e a entropia como

$$U_S(T) = U_N(0) + \frac{1}{2}\gamma T_c^2 - \int_T^{T_c} C_S dT \tag{2.47}$$

onde $U_N(0) + \frac{1}{2}\gamma T_c^2$ é a energia interna em T_c, mesmo como o valor do estado normal. Da (2.47) e da entropia (2.43) podemos encontrar a energia livre

$$F_S(T) = U_S(T) - TS_S(T) \tag{2.48}$$

o campo crítico termodinâmico é então determinado através da relação

$$\frac{H_c^2(T)}{8\pi} = F_N(T) - F_S(T) \tag{2.49}$$

Da discussão anterior, próximo a energia do estado fundamental em $T = 0$ a energia de condensação por partícula pode ser definida como

$$\Delta U = U_S(0) - U_N(0) \tag{2.50}$$

A energia para o estado normal $\Delta = 0$ é

$$E_n = \sum_{q<q_F} 2\xi_q \tag{2.51}$$

Daí a energia de condensação em $T = 0$ é dada por

$$E_s - E_n = \sum_{q>q_F} \left(\xi_q - \sqrt{\xi_q^2 + \Delta_q^2} + \frac{\Delta_q^2}{2E_q}\right) + \sum_{q<q_F} \left(\xi_q + \sqrt{\xi_q^2 + \Delta_q^2} - \frac{\Delta_q^2}{2E_q}\right) \tag{2.52}$$

Mudamos a soma para uma integral e efetuamos a primeira no intervalo de q_F até ∞ e a segunda de $-q_F$ até 0. No limite de acoplamento fraco, temos que a energia de condensação por partícula é

$$E_s(0) - E_n(0) = \Delta U = \frac{1}{2}N(0)\Delta^2 \tag{2.53}$$

Uma outra propriedade muito importante dos supercondutores é o comprimento de penetração λ_L que foi calculado por F. e H. London[29]. As duas equações de London descrevem bem duas propriedades básicas da eletrodinâmica dos supecondutores. As duas equações que governam os campos microscópicos elétrico e magnético são

$$\mathbf{E} = \frac{\partial}{\partial t}\Lambda J_S \tag{2.54}$$

e

$$\mathbf{h} = -c\nabla \times (\Lambda J_S) \tag{2.55}$$

onde $\Lambda = 4\pi\lambda_L^2/c^2 = m/n_s e^2$, n_s é o número de elétrons supercondutores, h é a densidade de fluxo na escala microscópica, J_S é a corrente e c uma constante. Obtemos em $T = 0$[7]

$$\lambda_L(0) = \left(\frac{mc^2}{4\pi n e^2}\right)^{1/2} \tag{2.56}$$

onde n é a densidade total dos elétrons condutores.

A dependência da temperatura do comprimento de penetração pode ser calculado como se segue

$$\frac{\lambda_L^2(0)}{\lambda_L^2(T)} = 1 - \frac{2\beta}{N}\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}}) \tag{2.57}$$

Estudando o comprimento de penetração, Pippard [34] em 1953 chegou a importante conclusão de que a relação entre a corrente e o campo deve ser não local. Ainda mais, a densidade de corrente em qualquer ponto depende do campo magnético em todos pontos numa distância de coerência ξ_0 do ponto que é definido[7, 35].

$$\xi_0 = a\frac{\hbar v_F}{k_B T_c} \tag{2.58}$$

onde v_F é a velocidade de Fermi e a é uma constante numérica da ordem da unidade, a ser determinada. Para supercondutores típicos, tais como tin e alumínio $\xi_0 \gg$

$\lambda_L(0)$.

A suscetibilidade de spin χ do sistema é definida por

$$\chi(T) = \frac{2\mu_N^2}{T} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}}) \tag{2.59}$$

onde μ_N é o magnetom nuclear. Em $T = T_c$ encontramos $\chi_S(T_c) = \chi_N(T_c)$.

A razão de condutividade térmica entre o estado supercondutivo (K_s(T)) e o estado normal (K_n(T)) é dado por

$$\frac{K_s(T)}{K_n(T)} = \frac{\sum_q \zeta_q E_q f_q(1 - f_q)}{\sum_q \zeta_q^2 f_q(1 - f_q)} \tag{2.60}$$

onde o denominador do (2.60) correspondente estado normal com $\Delta = 0$. Isso representa a condutividade térmica do espalhamento da impuridade onde a função distribuição f_k sai desse valor de equilíbrio. A expressão acima (2.60) é baseada no cálculo da mudança da distribuição.

Capítulo 3

Supercondutores a Altas Temperaturas - sua estrutura e suas propriedades de estado normal

3.1 Introdução

Uma nova classe de supercondutores apareceu em meados da década de 80. Um breve artigo entitulado "Possible High T_c superconductors activity in the Ba-La-Cu-O system", por J. G. Bednorz e K. A. Müller [4] iniciou a era dos supercondutores a altas temperaturas. A temperatura de transição cresceu substancialmente através dos anos, o que pode ser visto na fig 3.1 abaixo. Por 56 anos o nióbio e seus componentes dominaram o campo da supercondutividade, podendo-se dizer que de 1930 a 1986 foi a Era dos Supercondutores de Nióbio. O novo período, que se iniciou em 1986, trouxe o peróxido de cobre, pois a presença de cobre e oxigênio tem sido essencial, com raras exceções, para T_c acima de 40k.

Logo após a descoberta do óxido de cobre, lantânio e bário - por Müller e Bednorz - em 1987, Paul Chu da Universidade de Houston, em colaboração com Mang-Kang Wu [36] da Universidade do Alabama, descobriu uma nova classe de materiais supercondutores, conhecida como classe "123", exemplificada por $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ ("YBCO") que possui um T_c acima de 90K. (Nessa estrutura, o Y (ítrio) pode ser trocado por muitos elementos terras-raras, e.g., La, Nd, Sm, Eu, Gd, Ho, Er e

Lu, obtendo-se o mesmo resultado de alto T_c). Eles observaram que uma pressão aplicada eleva T_c em cupretos de La e, portanto, seria razoável que átomos de terra-rara - com pequeno raio iônico - pudesse exercer uma pressão química desejada na rede cupreto.

Portanto, em um ano a temperatura de transição cresceu quase por um fator três e ficou claro que uma revolução havia chegado. Pouco tempo depois, um otimismo crescente encorajou a descoberta de $T_c = 110K$ em um sistema 'BSCCO" (óxido de bismuto, estrôncio, cálcio e cobre) [37], $T_c = 125K$ em um sistema "TBCCO" [38] (óxido de tálio, bário, cálcio e cobre) e $T_c = 133K$ em sistemas "Hg-1223" [5, 6]. A aplicação da pressão [39, 40] no Hg-1223 empurrou a temperatura ($T_c = 164K$) para metade da temperatura ambiente. O dramático crescimento em T_c que tem sido observado desde 1986 está ilustrado na fig 3.1 onde o valor máximo de T_c está plotado versus a data. É interessante observar que o Hg foi o primeiro supercondutor conhecido, e 82 anos depois, os componentes de mercúrio voltam a ser os melhores. Parece que o final vislumbrado para essa corrida será supercondutores a temperatura ambiente. O mais importante é que não é necessário resfriá-los a temperaturas muito baixas para chegar a ser supercondutores. Esses supercondutores a altas temperaturas abrem a porta para aplicações que não necessitam de hélio líquido, podendo-se usar em seu lugar nitrogênio líquido a 77k. Nitrogênio líquido custa 0,10 de dólar por litro, menos que 1/20 do preço do hélio líquido.

Todos supercondutores a altas temperatura contem cobre, mas seus constituintes podem ser muito variados. Valores de T_c acima da temperatura de ebulição do nitrogênio líquido são imediatamente candidatos a aplicações tecnológicas.

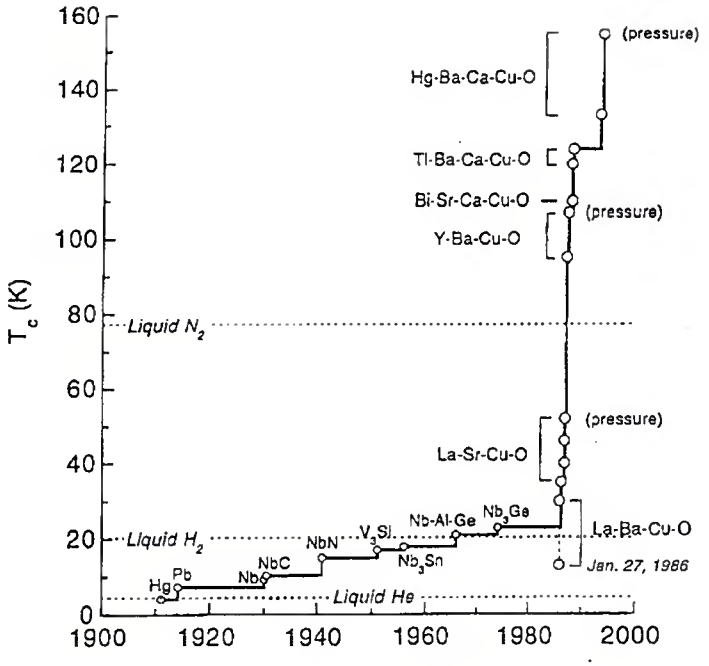

Fig. 3.1 Temperatura crítica máxima supercondutora T_c vs ano. Fig. 1

3.2 Os materiais

Aproximadamente 100 diferentes tipos de cupretos, muitos dos quais são supercondutores, foram descobertos desde 1986. Alguns dos mais importantes cupretos supercondutores estão listados na tabela 3.1, com seus valores máximos de T_c em cada classe de materiais. Atualmente, dois dos grandes candidatos a supercondutividade são os materiais $(LnBa_2)Cu_3O_{7-\delta}$ e $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$.

Tabela 3.1.(a) Algumas classes importantes de cupretos supercondutores e o valor máximo de T_c observado em cada classe. (b) Exemplos de nomes abreviados para denotar materiais cupretos.

(a)

Materiais	$T_c(K)$
$La_{2-x}M_xCuO_4$	≈ 40
$Ln_{2-x}M_xCuO_{4-y}$	≈ 25
$Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$	92
$LnBa_2Cu_3O_{7-\delta}$	95
Ce, Tb não formam fase	
Pr forma fase; nenhum do metálicos não supercondutor	
$RBa_2Cu_4O_8$	≈ 80
$Bi_2Sr_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$	(n=1,2,3, 4) (n=3) 110
$TlBa_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$	(n=1,2,3, 4) (n=4) 122
$Tl_2Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$	(n=1,2,3, 4) (n=3) 122
$Hg_2Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$	(n=1,2,3, 4) (n=3) 133

(b)

Materiais	Abreviação	$T_c(K)$
$Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$	YBCO; YBCO-123; Y-123	92
$Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$	BSCCO; BSCCO-2223; Bi-2223	110
$Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10}$	TBCCO; TBCCO-2223; Tl-2223	122
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$	HBCCO; HBCCO-1223; Hg-1223	133
$La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$	LSCO	≈ 40
$Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_{4-y}$	NCCO	≈ 25
$(LnBa_2)Cu_3O_{7-\delta}$		≈ 95
Ce, Tb não formam fase		
Pr forma fase; nenhum do metálicos		
não supercondutor		
$RBa_2Cu_4O_8$		≈ 80

Todos esses materiais de alto T_c compartilham de um ponto estrutural comum que parece ser responsável pela ocorrência da supercondutividade, que é a presença de planos contendo Cu e O separados por outros materiais. Dependendo da escolha da estequiometria, a célula unitária cristalográfica contem um número variado de planos de CuO_2. Os compostos 123 contem "cadeias" de CuO que imagina-se que agem com reservatórios de carga para controle da densidade eletrônica nos planos [7]. Em um único plano CuO cada átomo de Cu está rodeado por quatro átomos de O numa configuração plano quadrada. Em estruturas de alto T_c, esses planos **ab**

são perpendicular ao eixo c. No ($La_{2-x}Sr_xCuO_4$, cada plano Cu-O está separado de seu plano Cu-O vizinho próximo por $\approx$ 6.6 Å(fig 3.2), uma distância razoavelmente grande em cristais. Entre os dois planos vizinhos de CuO, existem dois planos de La-O, indicados pelos planos tracejados na fig 3.2. Usamos a notação La(n=1) para designar ($La_{2-x}Sr_xCuO_4$, referindo-se a um plano Cu-O suficientemente isolado dos outros. Essa notação pode ser extendida a outros supercondutores a altas temperaturas para os quais planos Cu-O são agrupados em dois ou três [41].

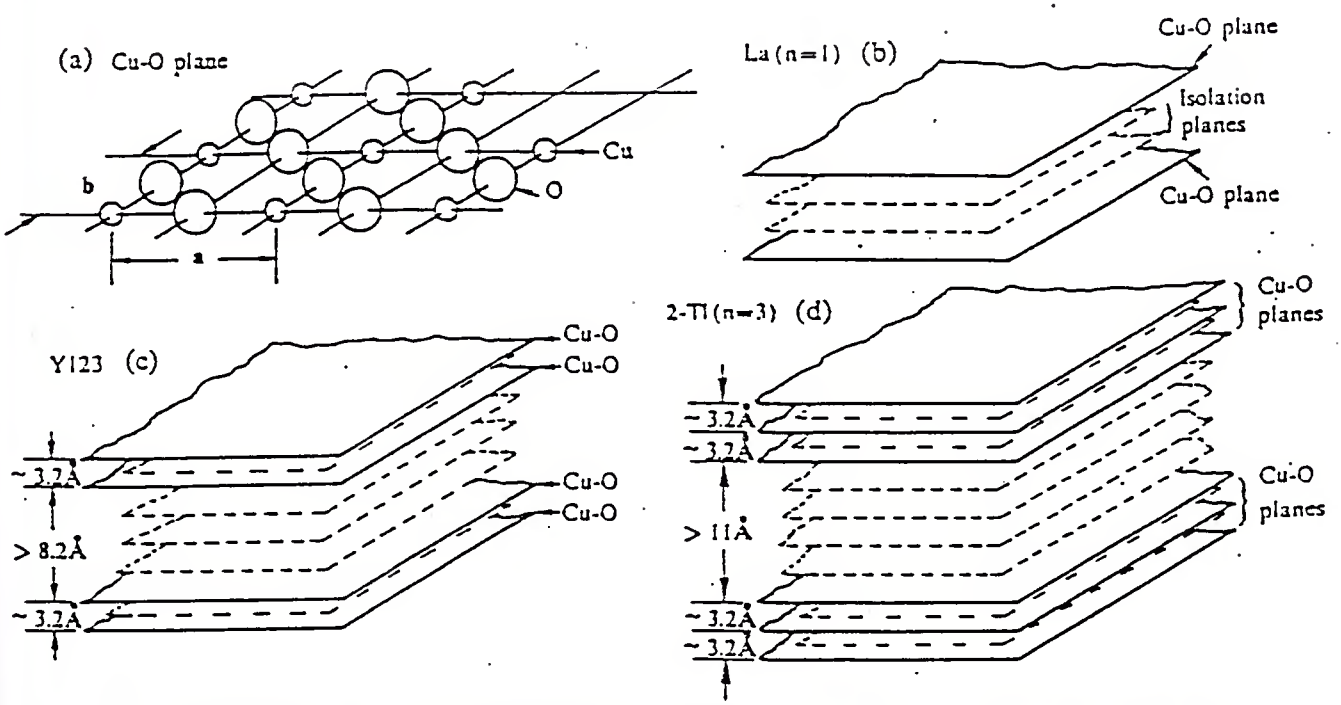

Fig (a) An infinite plane of Cu-O atoms emphasizing the square-planar Cu-O_2 bonding. (b) A schematic diagram of the La(n=1) structure emphasizing the Cu-O planes (solid) perpendicular to the c axis, with two isolation La-O planes (dashed) between the Cu-O planes. (c) A schematic representation of the Y123 structure emphasizing the two immediately adjacent Cu-O planes. The sparsely occupied Y-atom plane between the two immediately adjacent Cu-O planes is indicated by a very light set of dashes. The three other (isolation) metal-O planes separating the pairs of Cu-O planes are indicated by heavier dashes. (d) A schematic representation of the structure of 2-Tl(n=3). Two sparsely occupied planes of Ca atoms between the three immediately adjacent Cu-O planes are indicated by very light dashes. The four other (isolation) metal-oxygen planes separating the three Cu-O planes are indicated by heavier dashes.

Muitos dos cupretos discutidos acima são materiais dopados. Por exemplo, substituição de Sr bivalente por La no isolante antiferromagnético La_2CuO_4 produz supercondutividade em $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ com um máximo T_c de $\approx$ 40 K em x=0.17 [42]. Substituição similar de Ce por Nd no composto Nd_2CuO_4 resulta em $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$. A temperatura no diagrama de fase T vs x para os dois compostos acima são mostrados na figura abaixo.

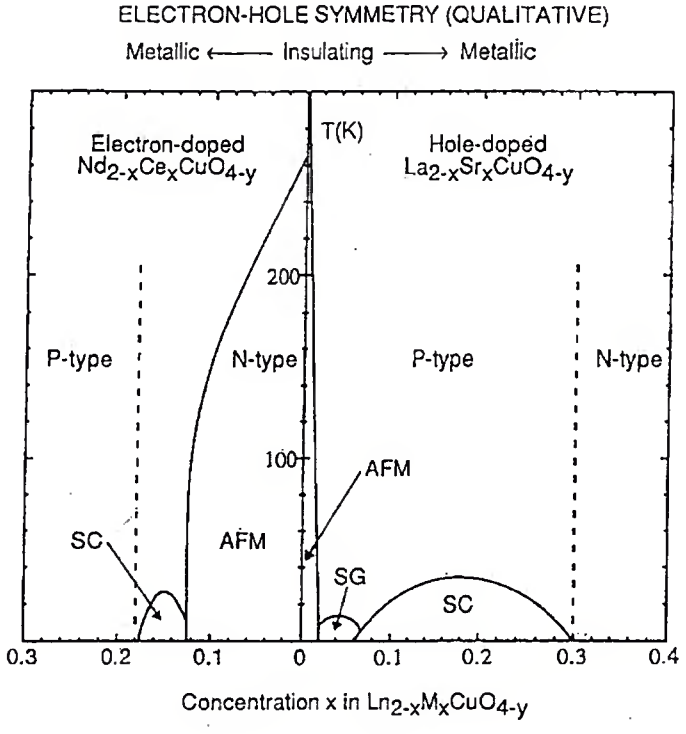

Fig. 3.3 Diagrama de fase Temperatura vs concentração dopante (T-x) delineando as regiões de supercondutividade e ordenação antiferromagnética de íons de sistemas Cu^{2+} de buraco dopado $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ e elétron dopado $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$. AFM = fase antiferromagnética , SG=fase de spin -glass, e SC=fase supercondutora.

Fig. 2

Por exemplo em $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (Y123) há dois planos Cu-O imediatamente adjacentes (i.e., n=2), sobre 3.2 Å, separados um do outro por um único plano ocupado por átomos Y. Em Y123, um par de planos Cu-O imediatamente adjacentes está mais que > 8.2 Ådistante do próximo par. Entre um par de planos Cu-O imediatamente adjacentes e o próximo par, três planos não tão importantes metal-O são encontrados, sendo os metais comumente usados La, Ba, Tl ou Bi. Esses "planos não tão importantes" so as vezes referidos como"planos isolados" ou "reservatórios de carga". Para $\delta = 1$, $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ é um isolante, tal como $(La_{2-x}Sr_x)CuO_4$ para x=0. Todavia, para $\delta \leq 0.65$, Y123 é um metal e supercondutor. Em geral, a distância entre os n planos Cu-O imediatamente adjacentes é sempre pequena ($\approx 3.2\mathring{A}$) e entre esses planos está um plano de Y ou Ca escassamente ocupado. Esse plano escassamente ocupado contém átomos Y para Y123, ao passo que átomos de Ca ou Sr são encontrados em cristais supercondutores de Tl e Bi. Esses n planos Cu-O imediatamente adjacentes são sempre separados dos próximos n planos por um distância muita curta. Quanto mais alto o valor de n, maior é o valor de T_c, sendo o mínimo n maior ou igual a 3. Para n=1,2 e 3, valores de T_c estão no intervalo aproximado de 0-85K, 60-92 K e 105-125 K, respectivamente, embora exceções aconteçam. Deve-se notar que as estruturas são tetragonais ou próximo disso (tendo um pequena distorção ortorômbica ou algo do gênero). Elétrons (ou buracos) conduzem corrente primariamente ao longo dos planos Cu-O nas estruturas do cupreto, ao passo que o espaços maiores entre as camadas criam uma barreira de condução perpendicular a esses planos. Um misterioso damping dos portadores de carga distingue esses cupretos de alto T_c de outro metais anisotrópicos, e a origem desse damping é considerada como um desafio teórico básico. A frequência de variação linear peculiar do damping

observado leva a pensar na existência de uma superfície de Fermi. Existem porém, propostas de que a fonte do damping provenha do mecanismo de supercondutividade dessas estranhas ligas.

Um outro tipo, um pouco mais comum, desses supercondutores são cerâmicos, "flaky" oxidos, que são metais pobres a temperatura ambiente, materiais difíceis de se trabalhar, contendo poucos portadores de carga comparado ao metais normais, tendo propriedades elétricas e magnéticas altamente anisotrópicas, que são notadamente sensíveis ao oxigênio.

É interessante notar que os valores de T_c na vizinhança de 30k são encontrados em dois materiais não cupretos: o perovskite cúbico $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ ($T_c \approx 30K$) [43, 44] e o fulleride Rb_3C_{60} ($T_c \approx 29K$) [45, 46].

3.3 Propriedades do estado normal

Acredita-se que um bom entendimento das propriedades do estado normal de materiais de alto T_c pode levar a um entendimento significativo das propriedades dos supercondutores. As propriedades do estado normal não são usuais e parecem violar o paradigma de Landau de líquido de Fermi [47, 48, 17, 18].

As primeiras propriedades identificadas desses materiais foram a resistividade e o efeito Hall. A resistividade elétrica ρ_{ab} no plano ab de muitos dos buracos dopados dos cupretos próximos a uma dopagem ótima tem uma dependência linear entre T_c e altas temperaturas e tem a forma $\rho_{ab}(T) = \rho_0 + cT$, onde $\rho_{ab}(0)$ é a resistividade residual extrapolada cujo valor é muito pequeno e c é similar em diferentes classes de cupretos. No caso de metais normais o comportamento a baixa temperatura tem uma dependência T^5 e uma dependência linear a alta.

O coeficiente de Hall R_H, é determinado quando o campo magnético e a corrente são perpendiculares à voltagem Hall. Constata-se que R_H é inversamente proporcional a T e não é uma constante relacionada à densidade de portadores n como $R_H = 1/(nec)$ onde c é a velocidade da luz e e é a carga do próton. A cotangente do ângulo $\theta_H = R_H/\rho$ varia com T, i.e., $\cot(\theta_H) = \sigma_{xx}/\sigma_{xy} = AT^2 + B$ [49]. A dependência linear T de $\rho(T)$ e a dependência quadrática T de $\cot(\theta_H)$ é atribuída à razão do espalhamento longitudinal e transversal τ_l^{-1} e τ_t^{-1} que variam com T e T^2 respectivamente [50].

A evolução do estado fundamental normal dos cupretos como uma função da concentração dopante é particularmente interessante. Tanto $\rho_{ab}(T)$ quanto $\rho_c(T)$ mostram comportamento isolante na região não dopada, $\rho_{ab}(T)$ é metálico e $\rho_c(T)$ é isolante ou metálico na região sobre dopante [52]. A dependência linear T de $\rho_{ab}(T)$ e o comportamento isolante de $\rho_c(T)$ sugerem um comportamento bidimensional do líquido de não-Fermi próximo a região otimamente dopada ao passo que o comportamento metálico $\rho(T) \propto T^n$ prediz um comportamento tridimensional de líquido de Fermi na região sobre dopada. Medidas recentes em campos magnéticos de $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ mostram que $\rho_{ab}(T)$ e $\rho_c(T)$ divergem com $\ln T$ na região sobdopada sugerindo um líquido de não-Fermi tridimensional.

Tabela 3.2. Algumas formas nas quais os estados normais de materiais de alto T_c anômalos.

Características	Convencional	Alto T_c
Resistividade	$\rho \approx T^2$	$\rho \approx T$
Tempo de vida da quasipartícula, $\frac{1}{\tau(T,\omega)}$	$aT^2 + b\omega^2$	$aT + b\omega$
Spin excitation spectrum	Flat	Peaked at $Q_s \sim (\pi/a, \pi/a)$
Força máxima de spin excitation	$\sim$ 1 state/eV	20-300 states/eV
Charaterística de spin excitation energy	$\sim E_f$	$\omega_{ef} \sim T \ll E_f$
Uniform susceptibility, $\chi_\sigma(T)$	Flat	varies with temperature, maximum at $T_\sigma > T_c$ for magnetically underdoped system

O aspecto mais proeminente do estado normal é o pseudogap no espectro de excitação de carga e spin de cupretos sobdopados [51]. O pseudogap é inferido de várias medidas termodinâmicas, dinâmica de spin, tunelamento e transporte. A medida da resistência de Pr dopado $Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ mostra que em sistemas sobdopados ρ_{ab} desvia-se do comportamento linear em altas temperaturas para uma temperatura característica T^* que representa o estado de pseudogap em $T \leq T^*$. O estudo de transporte térmico, magnético e infravermelho tem sido feito para muito cupretos. A medida do angle resolved photoemission spectroscopy (ARPES) [53] principalmente em BSCCO e YBCO oxygen-deficient mostra vários aspectos do pseudogap. A

magnetude do pseudogap tem a dependência k no plano ab como encontrada para a magnetude do gap de energia supercondutor. A simetria da onda d $|\cos k_x - \cos k_y|$ também foi encontrada de acordo com o tunelamento de Josephson em buracos cuprates dopados. Os resultados do ARPES não mostram qualquer diferença entre os gaps acima mencionados, exceto por sua linha de comprimento. Também não se notou que qualquer assinatura da transição de fase em T_c na magnetude do gap, que eventualmente se anula em T^*.

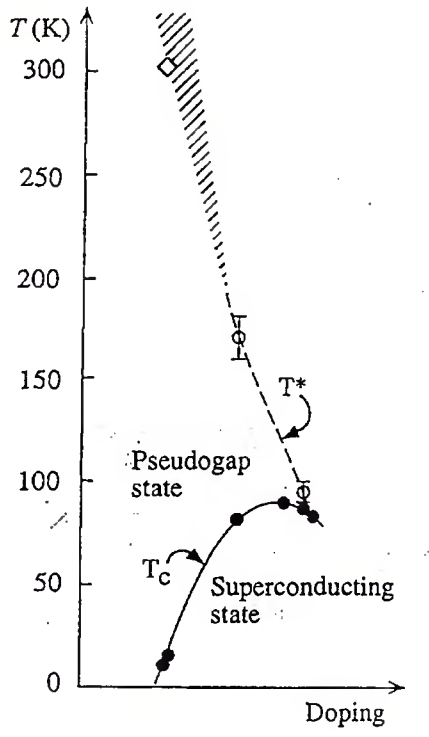

Fig. 3.4 Diagrama esquemático de fase de BSCCO-2212 como função do dopante. Os símbolos cheios representam os T_c's determinada medida de suscetibilidade magnética. Os símbolos abertos são os T^*'s nos quais o pseudogap anula-se da data na Ref. [53].

A dependência com a temperatura do pseudogap no ângulo onde é máximo mostra que o gap supercondutor cresce continuamente fora do pseudgap e o valor da soma de ambos a baixa temperatura e uma constante independente da temperatura T^* ou T_c. No caso de supercondutores convencionais, vemos que o gap de energia é proporcional a temperatura crítica. O pseudogap parece estar intimamente ligado com o gap anterior O pseudogap e as regiões de supercondutividade de BSCCO-2212 são mostrad(

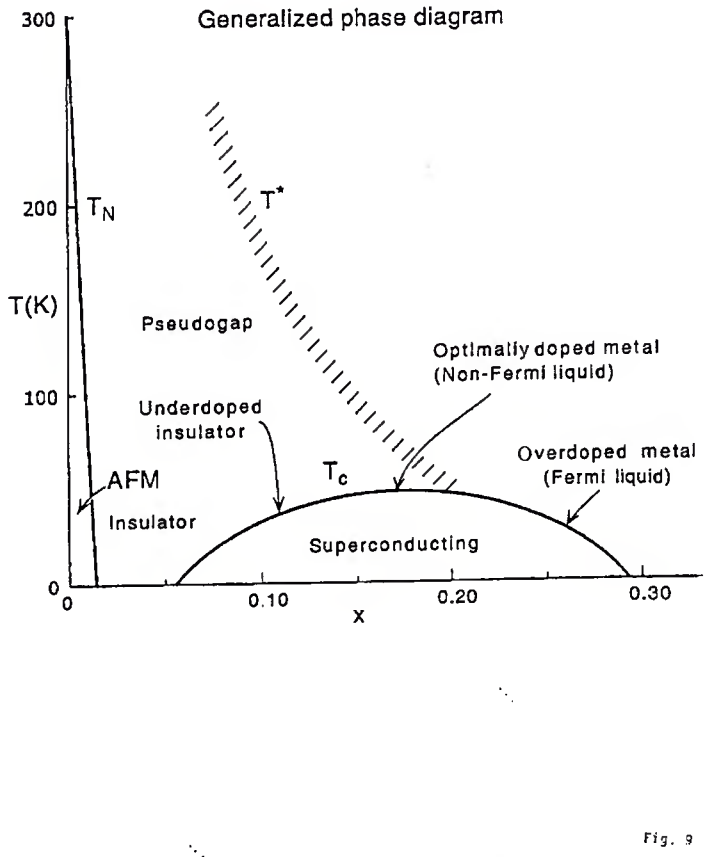

Fig. 9

Fig. 3.5 Diagrama de fase de temperatura genérica T vs concentração dopante x para cupretos. A linha tracejada T^* representa a temperatura abaixo da qual tipos de emparelhamentos locais ocorrem levando a supressão das excitações de baixas de energia e a formação do pseudogap. A linha sólida T_c delinea a região supercondutora.

Baseado na investigação de muito sistemas, pode-se construir uma fase genérica [54] pelo diagrama da Fig 3.5. O diagrama de fase mostra o isolante, antiferromagnético, líquido de não-Fermi bidimensional assim como tridimensional.

3.4 Simetria de parâmetro de ordem supercondutor

A simetria de emparelhamento sugere a identidade do mecanismo de emparelhamento o qual é essencial para o desenvolvimento da teoria de supercondutores a altas temperaturas. Mesmo após doze anos desta descoberta ainda há uma quantidade considerável de questões sobre a simetria de emparelhamento

Pouco tempo depois da descoberta da supercondutividade a altas temperaturas em cupretos estabeleceu-se que para esses materiais, elétrons se emparelhavam em estados singletos [55]. Possíveis órbitas emparelhantes envolvem ondas s estendendo-se a ondas s e d. No estado de onda s Δ_k é isotrópico sendo constante sobre a superfície de Fermi. No caso de ondas s e d temos Δ_k anisotrópico, i.e, exibe variação e tem nós sobre a superfície de Fermi. A simetria de ondas d tem a forma $d_{x^2-y^2}$ e pode ser escrita como $\Delta_k = \Delta_0[\cos k_x a - \cos k_y a]$. No caso de ondas s e d estendidas, temos um comportamento de lei de potência das propriedades físicas como $C_e(T) \sim T^2$ e comprimento de penetração $\lambda(T) \sim T$ [54]. Um bom número de diferentes medidas tem sido efetuadas em cupretos que são sensíveis a $|\Delta_k|$. Isto inclue comprimento de penentração em microondas[56], superfície de condutividade em microondas [57], razão de relaxação RMN $1/T_1(T)$ [58], dependência do campo magnético no calor específico eletrônico $C_e(T)$ [59], condutividade térmica [60], ARPES [61], tunelamento de quasipartícula [62, 63] e espalhamento Raman [64]. Os resultados desses estudos são, em geral, consistentes com o $d_{x^2-y^2}$ ou com a simetria de onda s estendida para

YBCO-123,124, LSCCO e BSCCO e simetria de onda s para NCCO[65, 66, 67]. Todavia, os experimetos discutidos acima indicam um componente dominante de simetria $d_{x^2-y^2}$ no parâmetro supercondutor do buraco dopado. Vários tipos diferentes de experimentos que são sensíveis à fase do parâmetro de gap estão sendo feitos. A medida do efeito Josephson tem sido possível através da interferometria SQUID [68, 69, 70], modulação de junção única [71, 72], magnetometria em anéis de tricristal [73, 74, 75], tunelamento de Josephson no eixo c [76, 77, 78, 79, 80] e tunelamento em contornos granulares [81]. Esses experimentos indicam que o parâmetro de ordem em YBCO e TBCCO tem simetria $d_{x^2-y^2}$.

Todavia, o estudo de tunelamento no eixo c em junções consistindo de um supercondutor convencional (Pb) e cristais duplos (*twinned*) e não duplos (*untwinned*) de YBCO indicam que o parâmetro de ordem supercondutor tem um componente de onda s significante [76, 77]. Recentemente um experimento de tunelamento de Josephson no eixo c foi realizado por Kouznetsov et al [82] no qual um supercondutor convencional (Pb) foi depositado transversalmente a um contorno duplo de um cristal YBCO. A corrente crítica de Josephson I_c foi então medida como uma função da magnetude e do ângulo do campo magnético B no plano da amostra. Para B alinhado perpendicular ao contorno duplo, um máximo de I_c foi observado em B=0, ao passo que para B paralelo, um mínimo foi observado em $B = 0$. Os resultados neste experimento dão fortes evidências da mistura das ondas d e s no YBCO.

Mais recentemente Krishana et al. [83] reportou uma transição de fase em supercondutores $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ induzida por um campo magnético, formando um estudo da condutividade térmica como função da temperatura e do campo magnético. Eles observaram uma grande anomalia a baixas temperaturas, encontrando também que

o campo magnético anula a anomalia, estudando o comportamento detalhado da condutividade térmica. Proporam então que o campo pode induzir uma mudança abrupta da simetria do parâmetro de gap (tal com $d_{x^2-y^2} + \mathrm{i}d$ ou $d_{x^2-y^2} + \mathrm{i}s$) que reflete a quebra da invariança temporal reversa no campo. Laughlin [84] sugeriu que uma nova fase supercondutora é a quebra de simetria reverso temporal misturando os estados $d_{x^2-y^2}$ e d_{xy} .

Capítulo 4

Escalonamento Universal no modelo BCS Renormalizado

4.1 Introdução

Uma coleção de elétrons (férmions) interagindo, via um interação fraca residual a baixa temperatura e alta densidade, exibe intabilidade de emparelhamento. Um grande overlap de pares de Cooper [31] formado espontaneamente de acordo com a teoria BCS de supercondutividade [3]. Vimos no primeiro capítulo que, para supercondutores usuais, a teoria BCS leva a $\xi k_F \sim 1000$ e $2\Delta/(k_B T_c) = 3.52$ de acordo com os experimentos. No limite oposto da interação residual forte, moléculas diatômicas bosônicas não formando overlaps como dos estados ligados dos pares de férmion [20, 85]. A temperatura e densidade suficientemente baixas, estes compósitos comportam-se como um gás ideal de bósons com $\xi k_F \sim 0$, o que pode estar abaixo da transição de fase[20, 86]. Em duas dimensões pode-se ter uma transição superfluida sob condições apropriadas[87, 88]. Vemos então que os limites extremos do mesmo sistema exibem dois fenômenos interessantes.

Como discutido no terceiro capítulo, os supercondutores a altas temperaturas são muito diferentes dos convencionais. Os novos supercondutores obedecem a mesma fenomenologia geral como os supercondutores clássicos, mas o estado normal de

supercondutores de alto T_c ainda não têm sido satisfatoriamente entendidos [89]. Há controvérsia sobre o hamiltoniano microscópico apropriado, o mecanismo de emparelhamento e ainda sobre o parâmetro de gap [90, 91, 92].

O modelo BCS ainda tem algum sucesso na descrição desses novos materiais. A descrição da BCS para os elétrons no estado de supercondução é uma das observações que apoiam o modelo. O valor do gap de energia para a razão T_c é também uma razão para considerar o modelo acima. Estes novos materias não somente tem uma alta temperatura crítica mas também um pequeno ξ, $\xi k_F \sim 10$ [91, 90]. O pequeno valor de ξ sugere que a fase supercondutora pode ser entendida como um regime intermediário [86, 88, 91, 93], entre o limite do grande overlap dos pares de Cooper ($\xi k_F \gg 1$) e a condensação de bósons ($\xi k_F \ll 1$) consistindo de pares de férmions fortemente ligados. Leggett [20] enfatizou a importância do problema de crossover da supercondutividade BCS para a condensação de Bose. O problema de crossover tem sido analizado pela variação do potencial: acoplamento fraco indica o regime BCS, a região de Bose pode ser atacada pelo acréscimo da força do acoplamento. Este problema tem ganhado novo ímpeto depois a descoberta dos cupretos de alto T_c com certas propriedades gerais [86, 88, 93, 94].

Muitos cupretos de alto T_c tem uma estrutura similar a camadas bidimensionais de portadores [93, 92, 95], o que sugere o uso de modelos bidimensionais. Existem também evidências de supercondutores tridimensionais como compostos de metais alcalinos fulleride. Temos também visto que supercondutores a alto T_c (cupretos) possuem singletos de pares de Cooper de ondas d o parâmetro de gap de simetria $d_{x^2-y^2}$ [92]. De acordo como a teoria BCS isotrópica para ondas s, quando $T \to 0$, os observáveis exibem dependência exponencial na temperatura [7, 96]. A dependência

experimental de lei de potência desses observáveis na temperatura pode ser esplicada considerando o parâmetro de gap anisotrópico com nó(s) na superfície de Fermi nas mais altas onda parciais [97, 96]. É visto que algumas propriedades dos supercondutores a alto T_c pode ser explicado pela equação BCS de onda d para o acoplamento médio. Ainda não tem sido sistemático o estudo de equações BCS e ondas não s em duas e três dimensões.

Previamente, estão sendo realizados estudos desses problemas em termos de energias de dois corpos no vácuo B_2 ou do comprimento de espalhamento do par no vácuo empregando potenciais de curto e zero alcances [93, 94, 21]. Tais estudos não tem revelado completamente a natureza universal da solução. A energia B_2 não é realmente a variável ideal para o estudo do problema pois, em ondas parciais não-s, e também em três dimensões poderiam haver pares de Cooper e daí a BCS, na ausência de um estado ligado de dois corpos no vácuo [93].

Estudamos o acoplamento médio BCS com potencial separável de intervalo finito em duas e três dimensões para ondas s, p e d com dois objetivos em mente. O primeiro objetivo é identificar a natureza universal da solução apropriada para supercondutores de alto T_c. O segundo objetivo é descobrir para que extensão a natureza universal da solução é modificada na presença de potenciais realísticos de alcance finito (separável e não-local). Ao invés de resolvermos a equação BCS na rede com a simetria apropriada, resolvemos as equações no contínuo. Esse procedimento mostra-se suficiente para os objetivos presentes. Calculamos μ e Δ na região inteira de crossover, e ξ e T_c na região BCS para diferentes valores de intervalo do parâmetro. Estudamos a variação de Δ, μ, T_c, e ξ com a energia do par de Cooper B_c. Observamos o escalonamento em cada caso, válido sobre ordens de grandeza

de energia do par Cooper. Escalonamento similar não foi observado em estudos anteriores quando considerado com uma função da energia ou potencial de dois corpos. Porém, encontramos que o estudo leva a resultados dependentes do intervalo do parâmetro. Para valores diferentes do intervalo do parâmetro, observamos linhas separadas para as variáveis acima. Daí, consideramos a variação com a energia de condensação ΔU quando observamos um escalonamento inverso robusto dos parâmetros com ΔU independente do intervalo do parâmetro. Como a energia de condensação cresce, o acoplamento passa de fraco para médio. Também, ΔU é um observável físico e é a variável referencial apropriada. Também a dependeñcia com a temperatura de diferentes quantidades, tais como, $\Delta(T)$, comprimento de penetração $\lambda(T)$, suscetibilidade $\chi(T)$, $C_s(T)$, energia internal $U_s(T)$, entropia $S_s(T)$ e condutividade térmica $K_s(T)$ for $T < T_c$.

4.2 A Equação de Cooper

Considerando um sistema de dois corpos, cada um de massa m, com o referencial de centro de massa [93]. A energia da partícula singleto (dois) é dada por $\epsilon_q = \hbar^2 q^2/(2m)$ $[2\epsilon_q]$, onde q é o número de onda. Consideremos primeiramente o potencial trivial dado por $V_{kq} = -\lambda f_k f_q$, [21] onde f_k e f_q são os fatores de forma e λ denota o potencial. Esse potencial a instabilidade de emparelhamento para qualquer λ e f_p. Substituindo o potencial acima na equação de Cooper (2.6) teremos,

$$\phi_k = f_k \sum_{q>k_F} \frac{\lambda f_q \phi_q}{(2\hat{E} - 2\epsilon_q)} = c f_k. \tag{4.1}$$

onde $2\hat{E}$ é a energia paramétrica relativa e $B_c = 2E_F - 2\hat{E}$ a energia de Cooper. Daí, da eq. (4.1) podemos escrever

$$1 = \lambda \sum_{q>k_F} \frac{f_q^2}{(2\hat{E} - 2\epsilon_q)}. \tag{4.2}$$

A matrix T de dois corpos é dada pela soma da série de Born:

$$T(E) = V + VG_0(E)T(E) \tag{4.3}$$

onde V é o potencial e $G_0(E)$ é a função livre de Green para o problema de dois corpos

$$(G_0(2E))_{kq} = \lim_{\eta \to 0}[2(E - \epsilon_k + i\eta]^{-1}\delta_{k,q} \tag{4.4}$$

Com o potencial acima e eq. (4.4), a solução da eq. (4.3) é dada por

$$T_{pk}(2\hat{E}) = f_p f_k[-\lambda^{-1} - \sum_q f_q^2(2\hat{E} - 2\epsilon_q)^{-1}]^{-1} \tag{4.5}$$

Daí B_2 é dada por

$$1 = \lambda \sum_q \frac{f_q^2}{(B_2 + 2\epsilon_q)}, \tag{4.6}$$

Assim teremos

$$\sum_{q>k_F} \frac{f_q^2}{(2\hat{E} - 2\epsilon_q)} - \sum_q \frac{f_q^2}{(B_2 + 2\epsilon_q)} = 0. \tag{4.7}$$

Consideremos a eq. (4.7) em duas dimensões. A soma na Eq. (4.7) pode ser feita em duas dimensões concordando para

$$\sum_{\mathbf{q}} \to \frac{N(0)}{2\pi} \int d\epsilon_q d\theta \equiv \frac{N(0)}{2\pi} \int_0^\infty d\epsilon_q \int_0^{2\pi} d\theta. \tag{4.8}$$

Considerando Eqns. (4.7) e (4.8) vemos que a equação para o par de Cooper em duas dimensões toma a forma integral

$$\int d\epsilon_q \Big[\frac{1}{B_2 + 2\epsilon_q} - \frac{\theta(\epsilon_q - E_F)}{2(\epsilon_q - \hat{E})}\Big] = 0 \tag{4.9}$$

tal que podemos calcular B_c em termos da energia de dois corpos B_2 resolvendo a equação acima numéricamente. Mas, para potencial atrativo puramente de alcance zero é possível calcular B_c analiticamente e encontrar que as partes logaritmicamente divergentes da eq. (4.9) se cancelam no limite superior e levam a

$$B_c = B_2 \tag{4.10}$$

Entendendo o formalismo para o potencial mais trivial, passamos a trabalhar com um potencial mais generalizado para diferente ondas parciais. Consideramos um potencial de curto alcance separável em ondas parciais l em duas dimensões:

$$V_{\mathbf{pq}} = -V_0 c_l g_{pl} g_{ql} \cos(l\theta) \tag{4.11}$$

onde θ é o ângulo entre os vetores $\mathbf{p}$ e $\mathbf{q}$ e $c_l = 1$ (2) para $l = 0$ ($\neq 0$) como an Ref. [98]. A condição para um estado ligado de duas partículas no vácuo de energia B_2 é

$$V_0^{-1} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{c_l g_{ql}^2 \cos^2(l\theta)}{(B_2 + 2\epsilon_q)}, \tag{4.12}$$

A fim de simplificar a notação, a dependência trivial de muitas quantidades tais como $V_{\mathbf{pq}}$, B_2, etc., é suprimida.

O problema do par de Cooper para dois elétrons acima do mar de Fermi é dado por

$$V_0^{-1} = \sum_{\mathbf{q}(\mathbf{q}>\mathbf{k_F})} \frac{c_l g_{ql}^2 \cos^2(l\theta)}{2\epsilon_q - 2\hat{E}}, \tag{4.13}$$

tal que precisamos escrever o problema de Cooper como

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{c_l g_{ql}^2 \cos^2(l\theta)}{(B_2 + 2\epsilon_q)} - \sum_{\mathbf{q}(\mathbf{q}>\mathbf{k_F})} \frac{c_l g_{ql}^2 \cos^2(l\theta)}{(2\epsilon_q - 2\hat{E})} = 0 \tag{4.14}$$

Daí, considerando $g_{ql} = 1$ para ondas s chegamos a mesma relação que é dada pela equação (4.10).

Similarmente, podemos calcular a energia do par de Cooper em um espaço tridimensional. Em três dimensões, o a energia de dois corpos não é uma condição necessária. Podemos calcular o Cooper binding em termos do comprimento de espalhamento. O potencial entre os elétrons no estado de momento angular lm é

$$V_{\mathbf{pq}} = -V_0 g_{plm} g_{qlm} Y_{lm}(\Omega_p) Y_{lm}(\Omega_q) \tag{4.15}$$

onde g é o fator de forma potencial e Ω representa o ângulo sólido. O parâmetro de gap tem a forma: $\Delta_{\mathbf{q}} = g_{qlm} \Delta Y_{lm}(\Omega_q)$.

Daí, a equação dos pares de Cooper e a matriz T podem ser similarmente escritos como em (4.7) e dado por

$$\sum_{q>k_F} \frac{g_{qlm}^2 Y_{lm}^2(\Omega_q)}{(2\hat{E} - 2\epsilon_q)} - \sum_{q} \frac{g_{qlm}^2 Y_{lm}^2(\Omega_q)}{2\epsilon_q} = \frac{1}{k_F a_s}. \tag{4.16}$$

onde a_s é o comprimento de espalhamento.

A soma na Eq. (4.16) é resolvida de acordo com

$$\sum_{\mathbf{q}} \to \frac{3N(0)}{16\pi} \int_0^\infty \sqrt{\epsilon_q} d\epsilon_q \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi. \tag{4.17}$$

$$\int d\epsilon_q \sqrt{\epsilon_q} g_{qlm}^2 \Big[\frac{1}{2\epsilon_q} - \frac{\theta(\epsilon_q - E_F)}{2(\epsilon_q - \hat{E})} \Big] = \frac{\pi}{a_s k_F} \tag{4.18}$$

Integrando sobre a equação e substituindo $g_{glm} = 1$ e $l = 0$, i.e., considerando o alcance zero do potencial na onda s temos a energia de Cooper pela relação:

$$B_c = \frac{8E_F}{e^2} \exp(-\frac{\pi}{|a_s| k_F}) \tag{4.19}$$

4.3 *Crossover* da BCS para o limite de Bose

Leggett [20] enfatizou a importância da supercondutividade BCS para o problema de crossover na condensação de Bose. Ele mostrou que a equação BCS e a equação de Schrödinger para moléculas diatômicas são os dois limites do mesmo sistema. BCS é o modelo de acoplamento fraco onde $\xi k_F \sim 1000$, enquanto que a condensação de Bose é o limite de acoplamento forte com $\xi k_F \sim 0$. Materials de alta temperatura com $\xi \sim k_F$ seriam considerados no regime de crossover entre estes dois limites extremos. Na seção seguinte discutiremos esse problema de crossover variando a força da interação e considerando um ansatz geral para o problema de N corpos. Seguimos o trabalho de Leggett, discutido em seu artigo [20]. No problema de ondas s em três dimensões, Leggett considerou N elétrons, de massa m e de espaçamento l, interagindo via potencial de curto alcance de $r_0(<< l)$. O comprimento de espalhamento a_s satisfaz $|a_s| >> r_0$. Pela variação da razão l/a_s, a BCS e o limite de Bose estariam juntos. Quando a escala é mudada muitas das propriedades do sistema se tornam insensíveis aos detalhes do potencial e são funções universais da variável adimensional l/a_s. Em três dimensões $l \sim k_F^{-1}$ e poderia se usar a variável equivalente $1/(k_F a_s)$. Para o problema de onda s em duas dimensões com um potencial atrativo de curto alcance, a presença um estado ligado de dois corpos no vácuo é a condição necessária e suficiente a instabilidade de emparelhamento [85, 91]. Os dois limites acima podem ser vistos como o final do espectro contínuo de um sistema fermiônico com interação atrativa. O ansatz para a função de onda de um sistema de N corpos que se reduz a descrição de um conjunto de moléculas diatômicas não-interagentes no limite $l/a_S \to +\infty$ e para um sistema de pares de Cooper no limite

oposto $l/a_s \to -\infty$ é dado por [20]

$$\bar{\psi}(r_1\sigma_1, .r_2\sigma_2, \ldots r_N\sigma_N) = \mathcal{A}\phi(r_1\sigma_1 r_2\sigma_2)\phi(r_3\sigma_3 r_4\sigma_4) \quad \ldots$$

$$\ldots \phi(r_{N-1}\sigma_{N-1} r_N\sigma_N) \tag{4.20}$$

onde σ_i é o spin de um férmion, r_i é a posição do férmion e $\mathcal{A}$ operador de antissimetrização. A função de onda molecular pode ser escrita como

$$\phi(r_1\sigma_1 r_2\sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)\phi(\mid r_1 - r_2 \mid) \tag{4.21}$$

onde $|r_1 - r_2|$ é a separação relativa dos férmions. A equação acima corresponde ao estado singleto de spin ($l = 0$), com centro de massa at rest.

Seguindo o procedimento padrão de BCS, o número de conservação e de minimização tal como feito no capítulo 2 vemos que a função de onda em (4.20) é a projeção de N partículas de função tipo BCS no espaço de momento dado pela eq. (2.12) no capítulo 2. Vemos que uma função de muitos corpos da forma (4.20) é completamente parametrizada por

$$F_k = u_k^* v_k \tag{4.22}$$

onde F_k é a transformada de Fourier de $F(r)$ que estabelece uma função de onda do movimento relativo dos pares de Cooper. Podemos definir F_k das energias dos pares como

$$F_k = \frac{\Delta_k}{2E_k} \tag{4.23}$$

Toda a discussão acima é verdadeira uma vez que assumimos (4.20) como a função de onda de muitos corpos, independentemente de ser ou não o limite do par de Cooper. No limite BCS, pode-se assumir que o potencial químico μ é a energia livre

de Fermi E_F, mas fora desse limite essa afirmação não é válida e devemos determinar algo consistente de

$$\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = N \tag{4.24}$$

usando o fato de que o número de partícular no estado de onda plana k (com qualquer um do spin) é dado por

$$n_{\mathbf{k}} = 2 \mid v_{\mathbf{k}} \mid^2 = 1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}}, \tag{4.25}$$

Como estamos nos distanciando do limite BCS, μ decresce a zero e torna-se negativo, o que marca o regime de condensação de Bose.

Agora, para a determinação da equação $F(\mathbf{q})$ devemos notar que a familiar equação de Schrödinger para uma molécula diatômica pode ser escrita sob uma transformação de Fourier na forma

$$(2\epsilon_{\mathbf{k}} - \hat{E})\psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}}\psi_{\mathbf{q}} = 0. \tag{4.26}$$

Isso faz com que $F_{\mathbf{k}}$ obedeça equação

$$2E_{\mathbf{k}}F_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}}F_{\mathbf{q}} = 0. \tag{4.27}$$

o qual pode ser escrito como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}}, \tag{4.28}$$

Agora, se considerarmos os valores de $\mathbf{k}$ sendo da ordem de r_0^{-1} encontramos então que E_k é muito menor que as energias μ e $|\Delta_k|$. Sob estas condições a equação BCS (4.27) se reduz a equação de Schrödinger (4.26), encontrando então que a função de onda do par $F(r)$ é exatamente a mesma que da função de onda de uma molécula diatômica isolada. Consideremos a solução das equações (4.26) e (4.27)

nos casos limites. No limite $l/a_s \to +\infty$ (estado ligado de duas partículas, sistema muito diluído) nós temos $\Delta \to 0$, $\mu \to -\hbar^2/2ma_s^2$ e a equação (4.27) se reduz a equação Schrödinger para todos k para uma molécula diatômica.

O caso $l/a_s \to -\infty$ leva a equação BCS. Para ondas s no limite de alcance zero ($V_{kq} = -\lambda$) $\Delta_k = \Delta$. Neste caso, a expressão analítica para o parâmetro de gap Δ pode ser obtida por renormalização. Sob as condições acima a equação (4.28) fica

$$\lambda^{-1} = -\sum_q \frac{1}{2E_q}. \tag{4.29}$$

No limite $q \to \infty$ a equação acima diverge e a constante de acoplamento mínimo λ pode ser substituída por λ_Λ da matriz regularizada T

$$T(2E) = [-\lambda_\Lambda^{-1} - \sum_{q<\Lambda}(2E - 2\epsilon_q)^{-1}]^{-1} \tag{4.30}$$

Agora, implementando a condição que a matriz T vai com o comprimento de espalhamento como $E \to 0$ encontramos que a constante de acoplamento é

$$\lambda_\Lambda^{-1} = -\frac{1}{a_s^2} + \sum_{q<\Lambda} \frac{1}{\epsilon_q}. \tag{4.31}$$

Agora, dividindo todas as quantidades por ϵ_F podemos escrever a equação BCS de gap (4.28) na forma integral

$$\frac{\pi}{k_F a_s} = \int_0^\infty d\epsilon_q \left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon_q}} - \frac{\sqrt{\epsilon_q}}{\sqrt{(\epsilon_q - \mu)^2 + \Delta^2}}\right] \tag{4.32}$$

A energia química tende a energia de Fermi e Δ pode ser obtida da equação (4.32), pela integração com um cutt-off como limite superior. Consideremos a segunda parte da equação (4.32) indicando essa como I_1. Como a integral mostra divergência ultravioleta, consideramos um cut off Λ e integramos tomamos o limite $\Lambda \to \infty$. A

integral I_1 é dada por

$$I_1 = \int_0^{\Lambda} \frac{\sqrt{\epsilon_q}}{\sqrt{(\epsilon_q - \mu)^2 + \Delta^2}} \tag{4.33}$$

$$= \int_0^{\Lambda} \frac{1}{\sqrt{(\epsilon_q - \mu)^2 + \Delta^2}} + \int_0^{\Lambda} \frac{\sqrt{\epsilon_q} - 1}{\sqrt{(\epsilon_q - \mu)^2 + \Delta^2}} \tag{4.34}$$

Em ambas as partes da equação acima (4.34) uma mudança de variáveis é feita, definindo $\epsilon_q - 1 = \Delta x$. Assim, podemos dizer que I_1 é igual a

$$I_1 = 2\sqrt{\Lambda} - 2\ln\left[\frac{\Delta \exp(2)}{8}\right] \tag{4.35}$$

Agora, substiuindo o valor de I_1 de volta na equação (4.32) encontramos que os dois termos divergentes na integração se cancelam

$$\Delta \sim \exp[-\pi/(2k_F \mid a_s \mid)] \tag{4.36}$$

A transição entre os dois limites ou, em outras palavras, o crossover do BCS para Bose pode ser estudados para valores gerais de l/a_s. Uma mudança qualitativa ocorre no ponto no qual o potencial químico μ passa pelo zero. Isto pode ser entendido considerando o gap de energia nos dois limites. Para $\mu > 0$ o valor mínimo para E_k é $\mid \Delta \mid$ e portanto, justifica o nome gap de energia. No outro limtie $\mu < 0$ o gap de energia é $(|\Delta|^2 + |\mu|^2)^{\frac{1}{2}}$. Daí, os dois limites significam dois sistemas físicos diferentes. A discussão do problema de crossover refere-se a temperatura zero.

4.4 A Equação de Número

Consideremos a equação de número da teoria BCS dada pela equação (4.25). Consideremos somente o emparelhamento de onda s nesta seção. Daí para emparelhamento de onda s, $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$ para todo $\mathbf{k}$. Portanto

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \tag{4.37}$$

onde a soma fica,

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^2}\int d^2\mathbf{k}, \qquad \text{(2 dim.)} \tag{4.38}$$

$$\rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3\mathbf{k} \quad \text{(3 dim.)} \tag{4.39}$$

para dar

$$N = \frac{V}{2\pi}\int_0^\infty dk k\left(1-\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right), \qquad \text{(2 dim.)} \tag{4.40}$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\int_0^\infty dk k^2\left(1-\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \quad \text{(3 dim.)} \tag{4.41}$$

onde V é o volume do sistema. Quando $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2k^2/(2m)$ pode-se escrever as equações acima como

$$N = \frac{V}{4\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\epsilon_k\left(1-\frac{\zeta_k}{E_k}\right), \qquad \text{(2 dim.)} \tag{4.42}$$

$$= \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\epsilon_k\sqrt{\epsilon_k}\left(1-\frac{\zeta_k}{E_k}\right) \quad \text{(3 dim.)} \tag{4.43}$$

com $E = \sqrt{(\epsilon_k-\mu)^2+\Delta^2}$. Todavia, para o gás ideal de Fermi (sem interação)

$$N = 2\,\frac{V}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} 2\pi k\,dk$$

$$= \frac{V}{2\pi}k_F^2 = \frac{V}{2\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}E_F \qquad \text{(2 dim.)} \tag{4.44}$$

e

$$N = 2\,\frac{V}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F} 4\pi k^2\,dk$$

$$= \frac{V}{3\pi^2}k_F^3 = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}E_F^{3/2} \quad \text{(3 dim.)} \tag{4.45}$$

onde $E_F = \hbar^2k_F^2/2m$. Então, eliminando N de (4.44), (4.45) e (4.43) teremos,

$$E_F = \frac{1}{2}\int_0^\infty d\epsilon_k\left(1-\frac{\zeta_k}{E_k}\right) \qquad \text{(2 dim.)} \tag{4.46}$$

e

$$\frac{4}{3}E_F^{3/2} = \int_0^\infty d\epsilon_k \sqrt{\epsilon_k}\left(1 - \frac{\zeta_k}{E_k}\right) \quad \text{(3 dim.)} \tag{4.47}$$

Escrevendo a equação acima em unidades de $E_F(k_F)$, i.e., colocando $\epsilon_k \equiv \epsilon_k/E_F$, $E \equiv E/E_F$, $\zeta_k \equiv \zeta_k/E_F$, $\mu \equiv \mu/E_F$ and $\Delta \equiv \Delta/E_F$, chegamos na *equação de número reduzida*

$$1 = \frac{1}{2}\int_0^\infty d\epsilon_k \left(1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}\right) \quad \text{(2 dim.)} \tag{4.48}$$

e

$$\frac{4}{3} = \int_0^\infty d\epsilon_k \sqrt{\epsilon_k}\left(1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}\right) \quad \text{(3 dim.)} \tag{4.49}$$

Estas são as equações de número em duas e três dimensões que contém μ e Δ. Estas equações necessitam ser resolvidas simultaneamente com a equação BCS de gap para um estudo consistente do crossover.

4.5 O modelo BCS Renormalizado

O problema de dois corpos, a equação de Cooper e o modelo BCS exibem todas as divergências ultravioletas para potenciais de alcance zero e requer regularização para produzir resultados finitos tanto em duas quanto em três dimensões. O tratamento usual da BCS emprega um potencial no espaço de momento com um valor constante para o momento entre $2m(E_F - E_D)/\hbar^2$ e $2m(E_F + E_D)/\hbar^2$ e zero no restante com energia de Debye E_D. Isso implica num alcance moderado da interação. Este potencial é fisicamente motivado por um fônon induzindo a interação elétron-elétron [3].

Para T finito, tem-se a seguinte equação BCS e de número na região de acopla-

mento médio

$$\Delta_{\mathbf{p}} = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{pq}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{q}}}{2k_B T}, \tag{4.50}$$

$$N = \sum_{\mathbf{q}} \Big[1 - \frac{\epsilon_q - \mu}{E_{\mathbf{q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{q}}}{2k_B T} \Big], \tag{4.51}$$

com $E_{\mathbf{q}} = [(\epsilon_q - \mu)^2 + |\Delta_{\mathbf{q}}|^2]^{1/2}$, onde $\Delta_{\mathbf{q}}$ função de gap. Nas equações (4.50) − (4.51) e em todas as variáveis seguintes energia/momento são expressos em unidades de E_F, tais como $\mu \equiv \mu/E_F$, $T \equiv T/T_F$, $q \equiv q/k_F$, $E_{\mathbf{q}} \equiv E_{\mathbf{q}}/E_F$, etc. É essencial resolver a equação de número com a BCS pois a mudança na energia conserva o número de partículas. Como estamos no regime BCS temos $\mu = 1$ mas quando a energia cresce o valor do potencial químico decresce e torna-se negativo no regime de Bose.

A equação de Cooper e a BCS exibem divergência ultravioleta para potencial de alcance zero, $\alpha = \infty$ no nosso caso e portanto requer renormalização para produzir resultados finitos. O resultado analítico pode ser obtido pela própria renormalização das respectivas renormalizações. A situação fica mais complicada com o acréscimo do valor do momento angular (l=1,2..) e nenhuma prescrição geral de renormalização tem sido obtida. Como discutido na seção (4.3) é possível integrar as equações sem a necessidade de um cut-off pelo uso de um acoplamento renormalizado como dado na equação (4.31). Com esta idéia em mente, passamos a escrever as equações de Cooper e BCS, as quais pensamos ser úteis em mais termos gerais. Este estudo nos ajuda a obter resultados analíticos e numéricos bem definidos para todos os valores de momento angular e alcance sem a necessidade de cut-off como nas equações originais.

Consideremos primeiro o caso de duas dimensões. O parâmetro de ordem $\Delta_{\mathbf{q}}$ tem

a seguinte forma anisotrópica: $\Delta_{\mathbf{q}} \equiv g_{ql}\Delta\sqrt{c_l}\cos(l\theta)$ onde Δ e g_{ql} são adimensionais. O gap usual BCS é definido pela forma $\Delta(T) = g_{q(=1)l}\Delta$, que é a raiz quadrada média de $\Delta_{\mathbf{q}}$ na superfície de Fermi. Substituindo Δ_q e V_{pq} de (4.11) na equação (4.50) e considerando (4.13) teremos

$$\sum_{\mathbf{q}} g_{ql}^2 \cos^2(l\theta)\Big[\frac{1}{\epsilon_q - \hat{E}} - \frac{1}{E_{\mathbf{q}}}\tanh\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T}\Big] = 0. \tag{4.52}$$

As equações (4.51) e (4.52) podem ser explicitamente escritas

$$\int d\epsilon_q d\theta\Big[1 - \frac{\epsilon_q - \mu}{E_{\mathbf{q}}}\tanh\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T}\Big] = 4\pi, \tag{4.53}$$

$$\int d\epsilon_q d\theta g_{ql}^2 \cos^2(l\theta)\Big[\frac{1}{\epsilon_q - \hat{E}} - \frac{1}{E_{\mathbf{q}}}\tanh\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T}\Big] = 0. \tag{4.54}$$

O dois termos nas equações (4.53) e (4.54) sob a integral divergem. Todavia, a diferença dos dois termos é finita. Mesmo na ausência do fatores de forma equations (4.53) e (4.54) estão bem definidas sem qualquer cut-off de energia momento, apesar de cada parte da integral divergir separadamente. Por esta razão é que o modelo é chamado de renormalizado.

No caso de três dimensões, podemos escrever equações BCS e de número. O potencial entre elétrons no estado de momento angular lm é definido na equação (4.15). A função de gap tem a forma: $\Delta_{\mathbf{q}} = g_{qlm}\Delta Y_{lm}(\Omega_q)$. Daí, podemos escrever o BCS renormalizado e a equação de número de (4.50) e (4.51) como

$$\int d\Omega \int d\epsilon_q \sqrt{\epsilon_q}\Big[1 - \frac{\epsilon_q - \mu}{E_q}\tanh\frac{E_q}{2T}\Big] = \frac{16\pi}{3} \tag{4.55}$$

$$\int d\Omega |Y_{lm}(\Omega_q)|^2\Big[\int d\epsilon_q \frac{\sqrt{\epsilon_q} g_{qlm}^2}{\epsilon_q + \hat{E}} - \int d\epsilon_q \frac{\sqrt{\epsilon_q} g_{qlm}^2}{E_q}\tanh\frac{E_q}{2T}\Big] = 0 \tag{4.56}$$

Assim, temos as equações BCS e de número para duas [21, 22] e três dimensões [22] as quais podem ser resolvidas sem cut-off. Na ausência de fatores de forma

do potencial estas equações são completamente independentes do potencial e são regidas pelo observável B_c. Na próxima seção discutiremos os resultados que são obtidos no caso de cálculos numéricos e analíticos.

4.6 Resultados e Discussões

As equações de número de BCS renormalizado podem ser resolvidas em duas e três dimensões. Na ausência dos fatores de forma e no caso de $T = 0$ resultados analíticos podem ser extraídos. É também possível calcular alguns resultados para $T = T_c$ onde o parâmetro de gap $\Delta = 0$. Daí, primeiro apresentamos os resultados analíticos para duas e três dimensões e então discutimos os resultados numéricos.

4.6.1 Resultados analíticos

Em duas dimensões a equação (4.54) tem soluções analíticas para ondas s no caso especial ($g_{q0} = 1$) no limite de acoplamento fraco ($\mu = 1$). Esse potencial é independente do parâmetro de alcance e é usualmente chamado de potencial de alcance zero. Em $T = 0$, temos $\tanh(E_q/k_BT) = 1$, daí, integrando sobre ϵ_q com um cut-off de energia larga Λ e então tomando o limite $\Lambda \to \infty$ como feito na equação (4.32) temos $\Delta(0) = \sqrt{2B_c}$. Em $T = T_c$ ($\Delta = 0$), temos:

$$T_c = \exp(\gamma)\sqrt{2B_c}/\pi \tag{4.57}$$

onde $\gamma = 0.57722...$ Aqui, temos a razão universal $2\Delta(0)/T_c = 2\pi/\exp(\gamma) \approx 3.528$. A equação (4.53) também tem soluções analíticas nos extremos. Em $T = 0$ temos $\mu = 1 - B_c/2$ [93]. Em $T = T_c$ ($\Delta = 0$) no limite BCS ($\mu \approx 1$) encontramos as soluções analíticas: $\mu + 2T_c \ln[2\cosh(\mu/(2T_c)] = 2$.

Estudamos posteriormente a (4.54) analiticamente no caso de mais altas ondas

parciais ($l \neq 0$) para acoplamento fraco ($\mu = 1, \Delta << 1$) e para $g_{ql} = 1$. Em $T = 0$, a equação (4.54) pode ser integrada para levar a

$$\int_0^{2\pi} d\theta \cos^2(l\theta) \ln \frac{[1 + \Delta^2(0) c_l \cos^2(l\theta)]^{1/2} - 1}{B_2} = 0,$$

o qual, para $\Delta(0) << 1$ e $l \neq 0$ reduz e se a

$$\ln \frac{c_l \Delta^2(0)}{2B_2} = -\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \cos^2(l\theta) \ln \cos^2(l\theta) \equiv 0.3863,$$

ou, $\Delta(0) \approx 1.213\sqrt{B_c}$. Em $T = T_c$, de novo temos a mesma expressão como visto em ondas s $T_c = \exp(\gamma)\sqrt{2B_c}/\pi$, tal que temos a seguinte nova constante universal para $l \neq 0$: $2\Delta(0)/T_c \approx 3.026$. Daí, encontramos a primeira constante universal para ser dependente em ondas s ou não-s.

Em três dimensões calculamos a temperatura crítica T_c no caso $g_{qlm} = 1$. Então, no caso de potencial de alcance zero tomamos por integração a equação (4.56) para $\Delta = 0$:

$$T_c = \frac{2\exp(\gamma - 1)}{\pi} \sqrt{B_c} \tag{4.58}$$

onde $\gamma = .57722$ é a constante de Euler. Em $T = 0$, a equação (4.56) pode ser resolvida analiticamente na ausência do fator de forma do potencial: $g_{qlm} = 1$. Então, cada integral na equação (4.56) é divergente no limite superior Λ, mas para um Λ suficientemente grande a diferença torna-se finita. Daí, a equação (4.56) pode ser integrada no limite de acoplamento fraco ($\mu = 1$) para dar:

$$2\sqrt{\Lambda} - \ln(e^2 B_c/8) = 2\sqrt{\Lambda} - 2\ln[e^2 \Delta(0)\sqrt{4\pi}/8] + \ln F^2,$$

onde $\ln F = -\int d\Omega |Y_{lm}(\Omega)|^2 \ln |Y_{lm}(\Omega)|$ com $e = 2.718281...$ Para $\Lambda \to \infty$ isso leva a $\Delta(0) = F\sqrt{2B_c}\ /(e\sqrt{\pi})$. Todavia, T_c é dado pela equação (4.58) para todos lm. Neste caso temos a constante universal $A \equiv \Delta(0)/T_c = F\sqrt{\pi}/\{2\exp(\gamma)\}$. Embora A

seja independente do modelo e da dimensão do espaço, $\Delta(0)$ e T_c são dependentes. Tanto em duas quanto em três dimensões, a equação BCS renormalizada prevê T_c realçado sobre o padrão BCS, T_c dado por

$$\frac{T_c}{T_D} = \frac{\exp(\gamma)}{\pi}\sqrt{\frac{2B_c}{T_D}} \tag{4.59}$$

onde T_D é a temperatura de Debye. Para ilustrar a vantagem de (4.57) e (4.58) sobre (4.59) na predição de um grande T_c no limite de acoplamento fraco, consideramos um exemplo específico com $T_D = 300$ K e $T_F = 3000$ K. No resultado BCS padrão (4.59), a região de acoplamento fraco é usualmente definida por $B_c \approx 1$ meV ou $B_c/T_D \approx 0.037$. A pequenez de B_c justifica o limite de acoplamento fraco e temos $B_c \leq 1$ meV como definindo a região de acoplamento fraco. Schrieffer [3] sugere que B_c seja a medida própria do acoplamento. Ele notou que $B_c = 0.1$ meV está seguramente no domínio de acoplamento fraco. Neste caso para $B_c = 1$ meV $= 0.0037$ obtem-se da equação (4.59) que T_c é 46 K. Da equação (4.58) obtemos $T_c = 0.036 = 107$ K e de (4.57) temos $T_c = .048 = 146K$. Esse resultado reflete um aumento de T_c no modelo renormalizado. Para um acoplamento fixo, denotado por um B_c, encontramos um aumento de T_c em duas dimensões sobre as de três dimensões por um fator de $e/2$. Para provar evidências posteriores do limite de acoplamento fraco do presente modelo renormalizado, resolvemos as equações de número (4.53) e (4.55) numericamente para o potencial químico μ e obtido $\mu = 1.000$, que é o domínio do acoplamento fraco. O resultado renormalizado (4.57) e (4.58) tem a vantagem de produzir o escalonamento linear observado experimentalmente entre T_c e T_F em materiais de alto T_c [95].

A energia de condensação por partícula em $T = 0$ é definida por: [7]

$$\Delta U = \sum_{\mathbf{q}(q<1)} 2\zeta_q - \sum_{\mathbf{q}}(\zeta_q - \frac{\zeta_q^2}{E_\mathbf{q}} - \frac{\Delta_\mathbf{q}^2}{2E_\mathbf{q}}),$$

onde $\zeta_q = (\epsilon_q - \mu)$. Em duas dimensões isto pode ser resolvido quebrando em duas integrais, uma para $q < 1$ e a outra para $q > 1$ como feito no caso convencional. Integrando sobre a energia temos,

$$\Delta U = \frac{1}{8\pi}\int_0^{2\pi} c_l \Delta^2(0)\cos^2(l\theta)d\theta,$$

o qual leva a $\Delta(0) = 2\sqrt{\Delta U}$ para todo l. Usando a relação universal entre $\Delta(0)$ e T_c dada acima tem-se $T_c \approx 1.134\sqrt{\Delta U}$ $(1.322\sqrt{\Delta U})$ para $l = 0$ $(l \neq 0)$. Para todo l, $U_n(T_c) = \pi^2 T_c^2/6$, tal que $\Delta U/U_n(T_c) \approx 0.473$ (0.348) for $l = 0$ $(\neq 0)$.

Similarmente em três dimensões para $g_{qlm} = 1$ a energia de condensação pode ser evoluída como [7]

$$\Delta U = \frac{3}{8}\int d\Omega \Delta^2(0)|Y_{lm}(\Omega)|^2,$$

o qual leva a s $\Delta(0)/\sqrt{\Delta U} = \sqrt{8/3}$ para todo lm. Usando a relação universal entre $\Delta(0)$ e T_c, obtem-se $T_c/\sqrt{\Delta U} = \sqrt{8/3}A^{-1}$. Para todo lm, $U_n(T_c) = \pi^2 T_c^2/4$, tal que $\Delta U/U_n(T_c) = 3A^2/(2\pi^2)$. Assim, em ambas as dimensões, obtemos o mesmo tipo de dependência do parâmetro de gap e temperatura crítica em ΔU, mas o prefator é dependente da dimensionalidade do sistema e é menor para espaço de três dimensões.

O salto no calor específico por partícula em t $T = T_c$ ΔC é dado por [7]

$$\Delta C = -\frac{1}{NT_c}\sum_{\mathbf{q}}\left[f_\mathbf{q}(1 - f_\mathbf{q})\frac{d\Delta_\mathbf{q}^2}{dT}\right]_{T_c}. \tag{4.60}$$

Em duas dimensões temos

$$\Delta C = \int \frac{c_l d\epsilon_q d\theta}{4\pi}\left[\frac{\partial f_\mathbf{q}}{\partial E_\mathbf{q}}\frac{d\Delta^2(T)}{dT}\right]_{T_c}\cos^2(l\theta) \tag{4.61}$$

onde $f_{\mathbf{q}} = 1/(1+\exp(E_{\mathbf{q}}/T))$. Isto leva a [7] $\Delta C = -(1/2)[d\Delta^2(T)/dT]_{T=T_c}$ para todo l. Se usamos o fit universal [7] $\Delta(T)/\Delta(0) \approx 1.74(1-T/T_c)^{1/2}$ válido para $T \approx T_c$ em todas as ondas parciais, e a razão universal $2\Delta(0)/T_c$, obtemos $\Delta C/C_n(T_c) \approx$ 1.43 (1.05) for $l = 0$ ($\neq 0$). O calor específico normal pode ser obtido da expressão acima colocando $\Delta(T) = 0$. Daí o calor específico eletrônico do estado normal é dado por

$$C_n = \frac{2}{NT^2} \sum \frac{\zeta_q^2}{(e^{-\frac{\zeta_q}{2T}} + e^{+\frac{\zeta_q}{2T}})^2} \tag{4.62}$$

No acoplamento fraco e no limite de baixas temperaturas podemos simplificar a equação acima para dar

$$C_n = 4T \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{\cosh^2 x} \tag{4.63}$$

onde fazemos uma mudança de variáveis $x = \zeta_q/2T$. A integração na equação (4.63) pode ser feita analiticamente dando $\pi^2/1/2$ e levando a expressão final do calor específico por partícula:

$$C_n = \frac{\pi^2}{3} T \tag{4.64}$$

Agora considerando $C_n(T_c)$ e também a razão $T_c/\sqrt{\Delta U}$ podemos obter $C_s(T_c) \approx$ $9.065\sqrt{\Delta U}$ ($8.915\sqrt{\Delta U}$) for $l = 0$ ($\neq 0$).

Em três dimensões, para o caso especial $g_{qlm} = 1$, temos

$$\begin{aligned} \Delta C &= -\frac{3}{4T_c} \int d\Omega \int \sqrt{\epsilon_q}\, d\epsilon_q \\ &\times \left[f_{\mathbf{q}}(1-f_{\mathbf{q}}) \frac{d\Delta^2(T)}{dT} \right]_{T_c} |Y_{lm}(\Omega)|^2. \end{aligned} \tag{4.65}$$

Isto leva a [7] $\Delta C = -(3/4)[d\Delta^2(T)/dT]_{T=T_c} = (3/4)A^2B^2T_c$ for all lm. Assim, obtemos $H \equiv (D-1) = \Delta C/C_n(T_c) \equiv 1.5A^2B^2/\pi^2$. Podemos calcular o calor específico do estado normal colocando o espaço de fase próprio, o que leva a $C_n(T_c) = \pi^2 T_c/2$, tal que $C_s(T_c) = (\pi^2 + 1.5A^2B^2)T_c/2$. Consequentemente, $C_s(T_c)/\sqrt{\Delta U} \equiv$

$G = \sqrt{2/3}(\pi^2 A^{-1} + 1.5AB^2)$. Os valores numéricos das constantes A, B, H, F e G são dados na Tabela 4.2.

O raio adimensional do par de ondas s é definido por

$$\xi^2 = \frac{\langle \psi_q | r^2 | \psi_q \rangle}{\langle \psi_q | \psi_q \rangle}. \tag{4.66}$$

Em duas dimensões, consideramos o par da função de onda $\psi_q = g_{ql}\Delta/(2E_q)$ que pode ser resolvido usando $r^2 = -\nabla_q^2$. No limite de acoplamento fraco, podemos calcular o valor de ξ para o caso de alcance zero. Depois da diferenciação com relação a k podemos escrever o numerador de (4.66) da seguinte forma:

$$\langle \psi_q | r^2 | \psi_q \rangle = 4 \int_0^\infty d\epsilon_q \left[\frac{(2\epsilon_q - \mu)}{E_q^{3/2}} - \frac{\epsilon_q (2\epsilon_q - \mu)^2}{E_q^{5/2}} \right] \tag{4.67}$$

Integrando a (4.67) temos,

$$\langle \psi_q | r^2 | \psi_q \rangle = \frac{\mu}{2\Delta^3} \left(\frac{\pi}{2} + \tan^{-1} \frac{\mu}{2\Delta} \right) + \frac{1}{2\Delta^2} \left(\frac{\mu + 2\Delta^2}{\mu + \Delta^2} \right) \tag{4.68}$$

Agora necessitamos calcular o denominador de (4.66)

$$\langle \psi_q | \psi_q \rangle = \frac{1}{\Delta} \left(\frac{\pi}{2} + \tan^{-1} \frac{\mu}{2\Delta} \right) \tag{4.69}$$

Dividindo (4.68) por (4.69) temos,

$$\xi^2 = \frac{1}{2\Delta} \left[\frac{\mu}{\Delta} + \frac{\mu + 2\Delta^2}{\mu + \Delta^2} \left(\frac{\pi}{2} + \tan^{-1} \frac{\mu}{2\Delta} \right)^{-1} \right] \tag{4.70}$$

Daí o resultado analítico para alcance zero, onde $\mu = 1$ e $\Delta << 1$, leva a $\xi^2 = 0.5\Delta^{-2}(0) = 0.125(\Delta U)^{-1}$.

O raio adimensional do par de ondas s em três dimensões pode ser obtido de (4.66) com o par de função de onda $\psi_q = g_{qlm}\Delta/(2E_q)$ e usando $r^2 = -\nabla_q^2$. For $g_{qlm} = 1$ a expressão é dada por [90]

$$\xi^2 = \frac{1}{2\Delta^2(\mu^2 + \Delta^2)^{1/2}} \left[\left(\mu^2 + \frac{5}{4}\Delta^2 \right) + \frac{\Delta^2}{2} \right] \tag{4.71}$$

No limite de acoplamento fraco, o resultado analítico para alcance zero de (4.71) leva a $\xi^2 = \Delta^{-2}(0)/2 = 3/(16\Delta U)$. Consequentemente, tanto em duas quanto em três dimensões, temos

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}AT_c} \tag{4.72}$$

4.6.2 Resultados Numéricos

Duas Dimensões

As equações (4.53) e (4.54) são resolvidas numericamente em ondas s, p e d com fatores de forma $f_q = \epsilon_q^{l/2}[\alpha/(\epsilon_q + \alpha)]^{(l+1)/2}$ onde α é o parâmetro de alcance. Estudamos o problema de crossover em todo o domínio em $T = 0$ e calculamos o parâmetro adimensional Δ e μ como funções de B_c para diferentes l e α. Os parâmetros de ordem são mostrados nas figuras 4.1 (a), 4.1 (b), e 4.1 (c) para ondas s, p, e d, respectivamente. Na Fig. 4.2 exibimos μ nestes casos. Os $(\xi)^2$ calculados são mostrados na Fig. 4.3 como uma função de B_c. O comprimento Pippard de coerência $(= 1/(\pi m\Delta))$ para ondas s é também mostrado na Fig. 4.3 para comparação. Também calculamos T_c no domínio BCS fazendo $\Delta_q = 0$ nas Eqs. (4.54) e (4.53). O T_c calculado e também plotado na Fig. 4.1 para diferentes ondas parciais

Antes de apresentar um discussão dos resultados, vamos mencionar uma limitação do modelo. O tamanho do estado ligado de dois corpos no vácuo com esse potencial aproxima-se de s $B_2^{-1/2}$ (α^{-1}) quando $B_2/2 < (>)\ \alpha^2$. Daí, o tamanho desse estados ligados bem como o par de Cooper se mostram não realísticos para $B_2/2 > \alpha^2$. Consequentemente, para B_c muito grandes, o limite ideal de Bose de bósons que não estão em overlap é realizado para pequenos α. Assim, o presente estudo é limitado

ao potencial de alcances intemediários: $\alpha \sim 1 - 10$.

Da Fig. 4.1 encontramos que Δ e T_c exibem comportamento universal como função de B_c em diferentes ondas parciais. Na região BCS exibem escalonamento linear válido de quatro a cinco ordens de grandeza. O escalonamento exponencial é grosseiramente constante para l e α:$\Delta \sim B_c^{1/2}$, $T_c \sim B_c^{1/2}$. Para um gás ideal não há condensação em duas dimensões e poderia se pensar que T_c mostraria redução a zero quando B_c cresce na região de Bose.

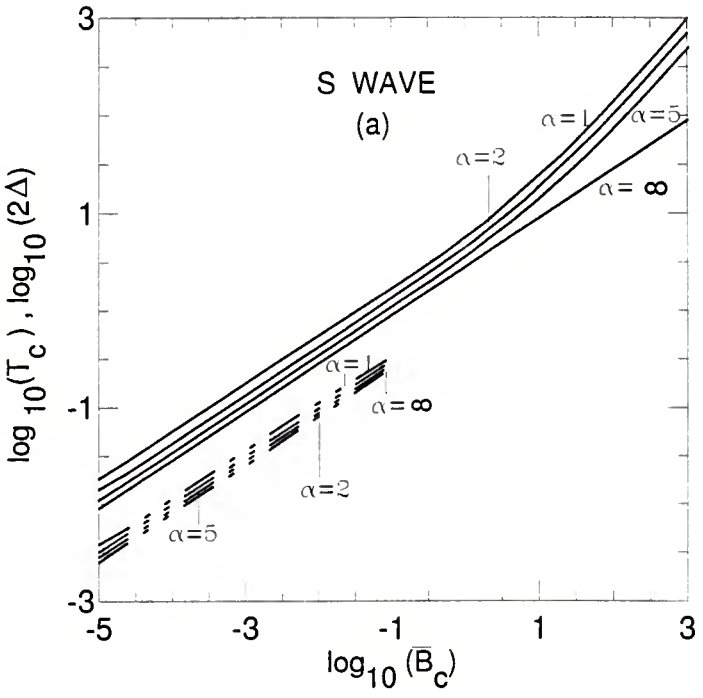

Fig. 4.1 Gráficos $\log_{10}(2\Delta)$ e $\log_{10}(T_c/T_F)$ para ondas s denotados por linhas sólidas e tracejada-pontilhadas, respectivamente. T_c é calculado no acoplamento fraco ou no regime BCS.

Todavia, por causa de uma fraca interação residual entre Bosons, este sistema pode passar por uma transição superfluida com alcance de ordem quase longa até um pequeno T_c fixo independente de B_c[88]. O T_c para esta transição pode ser

somente encontrado de forma numérica. Daí, todos os T_c da Fig. 4.1 se reduziriam rapidamente e atingiriam um pequeno valor constante quando B_c crescesse na região de Bose [88]. Encontramos que ambos T_c e Δ crescem com o decréscimo de α e l. A razão $2\Delta/T_c$ cresce quando α decresce e/ou l cresce. Por exemplo, para $\alpha = 1$ (2, 5) esta razão é 4.93 (4.31, 3.87) para $l = 0$, 7.07 (5.29, 4.21) for $l = 1$, and 10.0 (6.37, 4.39) for $l = 2$.

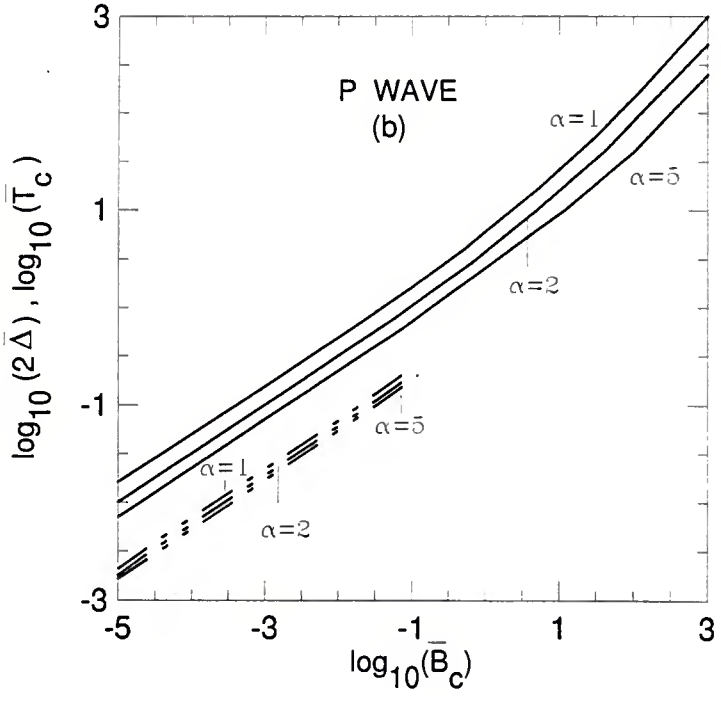

Fig. 4.1 O mesmo para onda p.

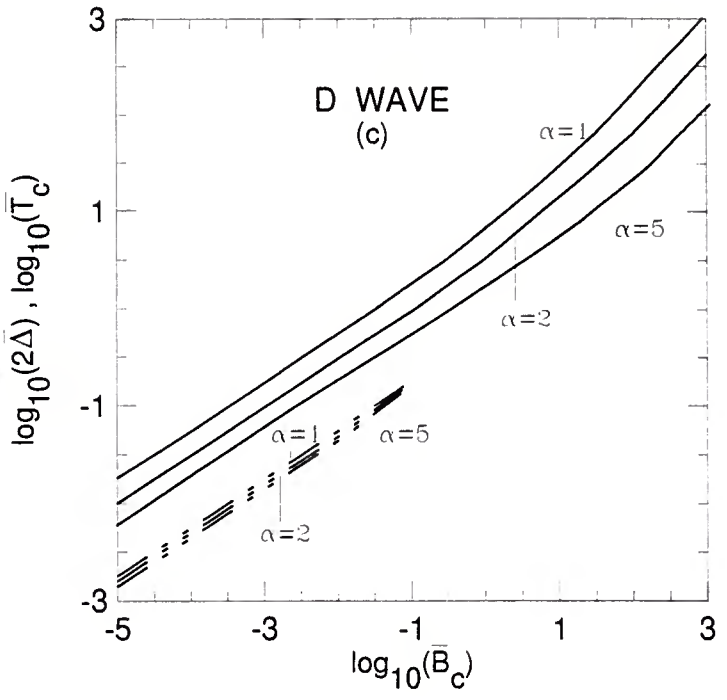

Fig. 4.1 O mesmo para onda d.

Da Fig. 4.2 encontramos que, à temperatura zero, μ tem uma dependência linear em B_c para todo α e l sobre toda a região de crossover. O menor desvio de linearidade ocorre para pequenos μ. Apresentamos esta dependência para $B_c = 40$. Para maiores B_c, μ é essencialmente dado pela solução de onda s analítica para alcance zero: $\mu = 1 - B_2/2$.

Da Fig. 4.3, para todo α e l, temos o escalonamento universal $\xi^2 \sim B_c^{-1}$ válido sobre três ordens de grandeza de B_c no domínio BCS. O correspondente comprimento de coerência Pippard da onda s satisfaz o mesmo escalonamento. O parâmetro ξ decresce quando l e/ou α decrescem. No extremo de domínio de Bose, este escalonamento poderia ser tomado em todos os casos. A solução analítica de onda s de

alcance zero tem esta escala[93, 94].

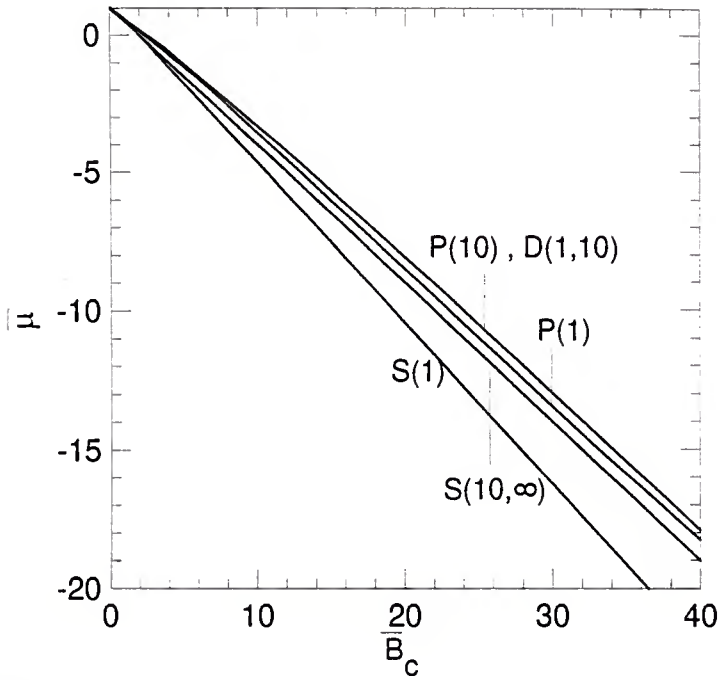

Fig. 4.2 Gráficos μ/ϵ_F vs B_c/ϵ_F para diferentes ondas parciais e α. As ondas são etiquetadas pela(s) sua(s) onda(s) parcial(is) e por α

Para um B_c fixo, a Fig. 4.1 leva a um escalonamento de T_c com T_F para todo α e l. Este escalonamento foi observado por Uemura et al. [95] para supercondutores de alto T_c. Da Fig. 4.1 encontramos para ondas s, p, e d, que os valores experimentais de Uemura $T_c \simeq 0.05$ levam a um B_c no domínio $0.01-0.001$, o qual implica no limite de acoplamento fraco. Na Fig. 4.1 observamos que, para $\alpha = 5$, $T_c = 0.05$ leva a $B_c = 0.0032$ (0.0079, 0.0135) para ondas s (p, d). Da Fig. 4.3 o binding par de Cooper acima dado $\xi \simeq 9$ em todas ondas parciais. Isto implica uma correlação universal entre T_c e ξ em todas as ondas parciais.

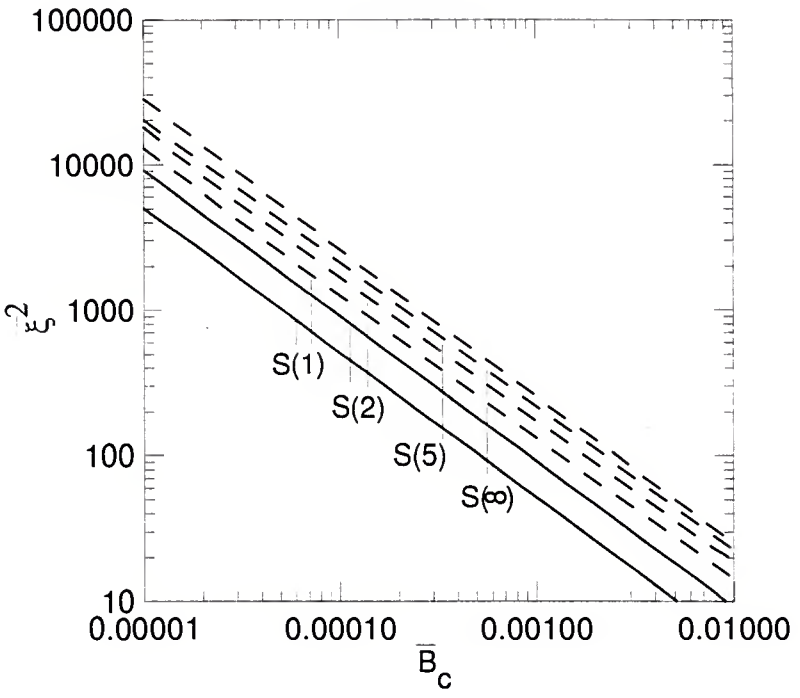

Fig. 4.3 Gráfico de $(\xi k_F)^2$ versus B_c/E_F para diferentes ondas parciais e α: linhas tracejadas para ondas $-$ S, linhas pontilhadas $-$ onda P, linhas tracejadas-pontilhadas $-$ resultados de onda D, linhas cheias $-$ o comprimento de coerência de Pippard de onda S. As curvas são etiquetadas por ondas parciais e por α.

Dos gráficos com a energia de Cooper, observamos um escalonamento de todos parâmetros, mas observamos que não são exatamente universais na natureza pois a variação com a mudança no parâmetro de alcance e leva a uma curva distinta para todos α. Então, prosseguindo nosso estudo com o intuito a natureza universal do problema como previsto por Leggett [20]. Segundo ele, quando sensivelmente escalonadas, as propriedades do sistema se mostrariam insensíveis aos detalhes do potencial. Daí, empregamos a energia de condensação por partícula em $T = 0$ como a nova variável de referência. Resolvemos também as equações acopladas (4.53) e (4.54) numericamente usando fatores de forma adimensionais com o correto com-

portamento threshold para pequenos momentos, onde α é o parâmetro de alcance. Calculamos parâmetro adimensional de gap $\Delta(0) = g_{q(=1)l}\Delta$, T_c, $C_s(T_c)$, o raio do par de onda s ξ^2 em $T = 0$ bem como $\Delta(T)$, $\lambda(T)$, $C(T)$, $S(T)$, $U(T)$ e $K(T)$ para diferentes acoplamentos. Na Fig. 3.4 plotamos $\Delta(0)$, T_c, $C_s(T_c)$, e ξ^2 em $T = 0$ versus ΔU e encontramos o escalonamento universal. Os cálculos são repetidos para diferentes alcance de potencial α. Variamos α de 1 a ∞ e encontramos que a Fig. 4.4 é insensível a esta variação em cada onda parcial. O acréscimo em ΔU da Fig. 4.4 corresponde a um crescimento do acoplamento. Poderíamos expressar esta mudança no acoplamento por uma mudança em B_2 ou no Cooper pair binding e plotar as variáveis da Fig. 3.4 em termo desses bindings como na Ref. [21]. Então, cada valor do parâmetro de alcance leva a uma curva distinta. Todavia, expressamos a variação no acoplamento por uma variação de um observável do supercondutor tal como ΔU ou T_c, escalonamentos universais independentes do potencial são obtidos. Em cada caso, o expoente e o prefator de cada escalonamento estão em excelente acordo com a relação analítica obtida acima sem fatores de forma.

Tabela 4.1. Temperaturas crítica e de Fermi em Kelvin e comprimento de coerência em k_F^{-1} para cupretos da Ref. [94]: Pi - Pippard, Ex - Experimental, Pr - Cálculo Teórico usando a Eq.(4.66)

Composto	T_c	T_F	ξ(Pi)	ξ(Ex)	ξ(Pr) $l=0$	ξ(Pr) $l\neq 0$
YBaCuO	93	8807	40-25	66-12	37	43
BiSrCaCuO	100	4234	26-16	35-18	17	20
TlBaCaCuO	125	4234	21-13	31-18	14	16

Neste caso também a curva T_c na Fig. 4.4 tem sido plotada para $T_c = 0.1$. Para uma vasta classe de materiais, T_c tem sido estimado em 0.05 [95], que está na região de acoplamento médio onde a universalidade do presente estudo é válida. Este ponto de vista é também apoiado pela adimensionalidade do raio do par ($\xi^2 \sim 80$) em $T_c = 0.05$, como obtido da Fig. 4.4, em completa concordância com análises experimentais [95]. Assim, o presente estudo é relevante para estes materiais de altos T_c.

Tabela 4.2. Valores numéricos de várias constantes de expoentes em diferentes ondas parciais no espaço de bidimensional. Os símbolos são exatamente os mesmos em três dimensões

l	F	A	B	H	G	β_S $\approx$	β_C $\approx$	β_K $\approx$	β_λ $\approx$
0	1.414	1.764	1.74	1.43	9.065				
$\neq 0$	1.213	1.513	1.70	1.00	8.915	2	2	1.2	1.3

Posteriormente estudamos a dependência com a temperatura de $\Delta(T)$, $\lambda(T)$, $C_s(T)$, $S_s(T)$, and $U(T)$ para $T < T_c$. Destes, $C_s(T)$ e $\lambda(T)$ são especialmente interessantes. Para supercondutores BCS, $C_s(T)$ e $\lambda(T)$ tem dependência exponencial em T quando $T \to 0$ [7, 96]. Supercondutores bidimensionais tem uma dependência de lei de potência em T. Na Fig. 3.5 plotamos o calor específico $C_s(T)$ versus T/T_c como definido em (2.44) para diferentes ondas parciais. No caso de ondas s, observamos uma dependência exponencial. Mas para $l \neq 0$ encontramos uma dependência de lei de potência universal, essencialmente independente do alcance do potencial. É observado que $C_s(T) \approx 2C_n(T_c)(T/T_c)^2$ para boa parte do intervalo de

temperaturas e estes T^2 dependente de $C_s(T)$ foi encontrado num estudo teórico da equação de Eliashberg [97] e em uma análise dos dados experimentais [59].

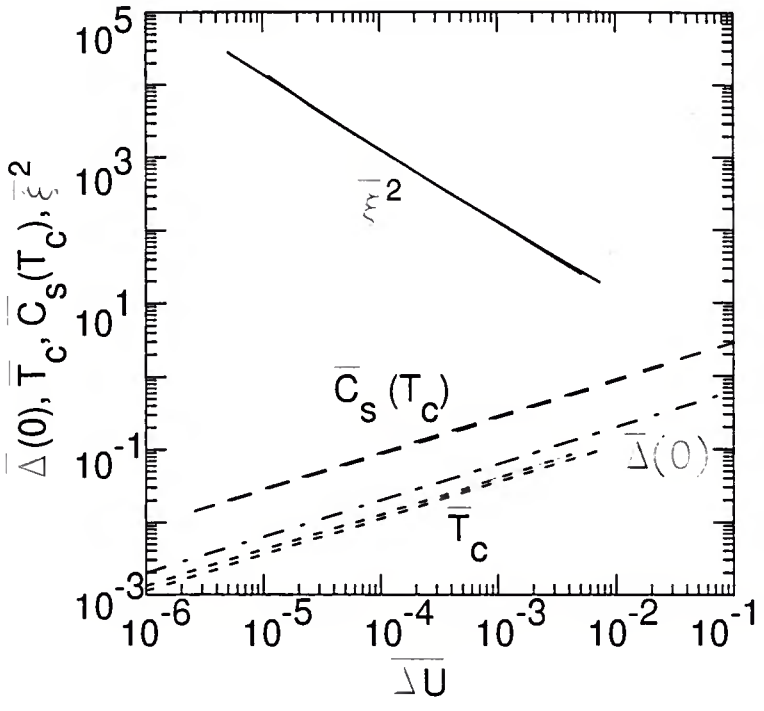

Fig. 4.4 O gráfico do calor específico $C_s(T_c)$ (linha tracejada), T_c (linha pontilhada), $\Delta(0)$ (linha tracejada-pontilhada) para ondas s, p, e d e raio do par de ondas s ξ^2 (solid line) vs ΔU para diferentes parâmetros do potencial entre $\alpha = 1$ e ∞. Para as duas primeiras variáveis há duas duas linhas distintas: a superior para ondas p e d e a inferior para ondas s Na Fig. 3.6 plotamos $\Delta\lambda(T) \equiv (\lambda(T) - \lambda(0))/\lambda(0)$. A dependência de lei de potência de $\Delta\lambda(T)/\lambda(0) \sim (T/T_c)^{1.3}$ para pequeno T/T_c. Isto também foi conjecturado [96].

Na Fig. 3.7 plotamos $S(T)$ versus T/T_c e encontramos comportamento do lei de potência universal $S_s(T) \approx S_s(T_c)(T/T_c)^2$ para todo intervalo de temperatura.

Nenhum escalonamento como este foi encontrado para $l = 0$. Na fig. 4.8 obser-

vamos a variação de $K_s(T)/K_n(T)$ com T/T_c o qual exibe um comportamento de lei de potência para ondas não s. Encontramos $K_s(T) \approx 2K_n(T)(T/T_c)^{1.2}$ para a maioria do intervalo de temperatura. Para ondas s, observamos a bem conhecida dependência exponencial na temperatura reduzida (T/T_c). Também calculamos $U_s(T)$ e a energia magnética para diferentes ondas parciais e alcances do potencial. Todavia, nestes casos nenhuma mudança qualitativa é observada nos resultados para $l \neq 0$ de $l = 0$. A função de gap $\Delta(T)$ teve essencialmente o mesmo comportamento universal que em ondas s[7].

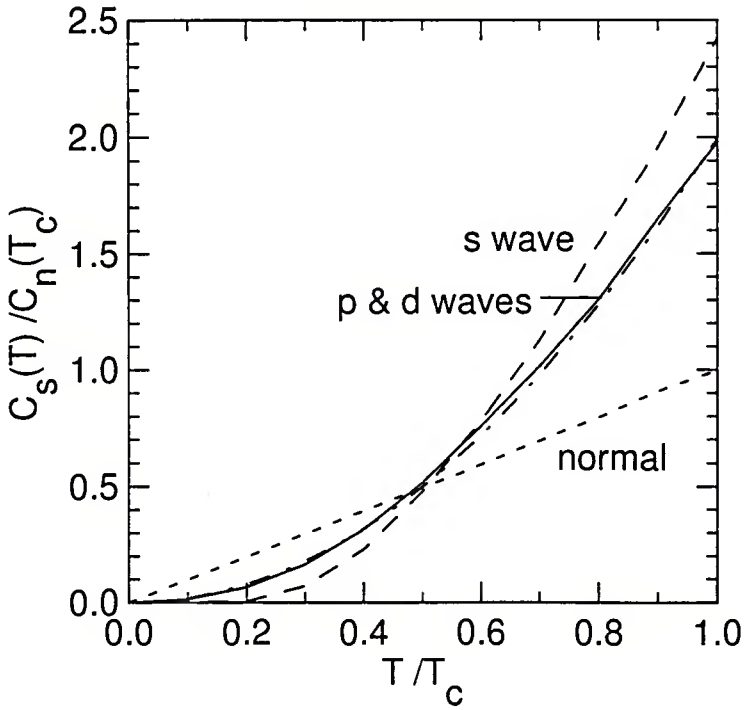

Fig. 4.5 Calor específico $C_s(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c para ondas s (linha tracejada), p e d (solid line) e parâmetros de potencial entre $\alpha = 1$ e ∞. O fit analítico (linha tracejada-pontilhada) $C_s(T)/C_n(T_c) = 2(T/T_c)^2$, para ondas p e d é mostrado também.

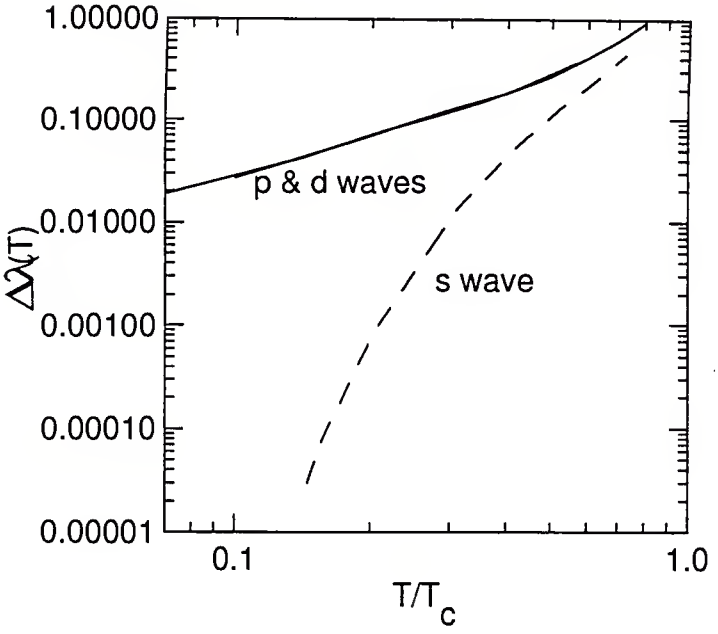

Fig. 4.6 Barreira de penetração $\Delta\lambda(T)$ versus T/T_c para diferentes ondas parciais e parâmetro potencial entre $\alpha = 1$ e ∞.

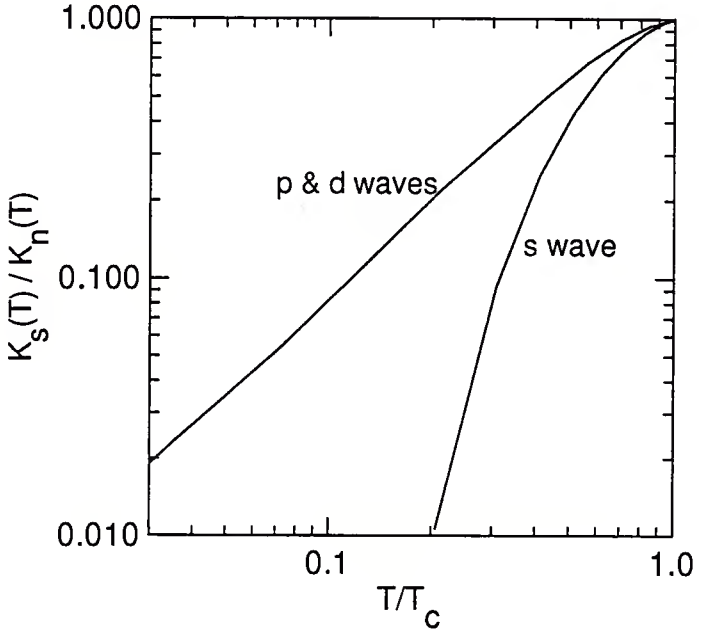

Fig. 4.7 Condutividade térmica $K_s(T)/K_n(T_c)$ versus T/T_c para diferentes ondas parciais parâmetros de potencial entre $\alpha = 1$ to ∞.

Três Dimensões

As equações (4.55) e (4.56) são resolvidas numericamente sem aproximação em ondas s, p e d para potenciais separáveis e fator de forma adimensional $g_{qlm} = \epsilon_q^{l/2}[\alpha/(\epsilon_q + \alpha)]^{(l+2)/2}$ com comportamento threshold correto quando $q \to 0$, onde α é o parâmetro de alcance. Da mesma forma com em duas dimensões, calculamos $\Delta(0)$, T_c, $C_s(T_c)$, raios do par de ondas s ξ^2 em $T = 0$ bem como $\Delta(T)$, $\lambda(T)$, $C(T)$, $S(T)$, and $U(T)$ para diferentes V_0 e α. Na Fig. 3.8 plotamos $\Delta(0)$, T_c, $C_s(T_c)$, e ξ^2 versus ΔU e estabeleceu-se escalonamento universal mencionado. Os cálculos são repetidos para a variação de α de 1 a ∞ e encontramos que a Fig. 4.8 é insensível a estas variação para cada lm. O acréscimo em ΔU da Fig. 4.8 corresponde ao acréscimo no acoplamento V_0. Poderíamos plotar as variáveis da Fig. 4.8 em termos de V_0 como na Ref. [86]. Então cada α leva a uma curva distinta. Todavia, se expressarmos por variação de um observável do supercondutor, tal como ΔU ou T_c, o escalonamento universal do independente do potencial é obtido. Em cada caso, o expoente e o prefator de cada relação de escalonamento estão em excelente acordo com os resultados analíticos obtidos acima, sem o uso de prefatores.

Como no caso bidimensional, T_c não mostraria arbitrariamente um acréscimo com o acoplamentos com a Fig. 4.8 pode implicar. Com o acoplamento aumentado o par de elétrons forma compositos de bósons que levam a condensação de abaixo de $T = T_c \equiv 0.218$, para bósons com duas vezes a massa eletrônica e metado da densidade eletrônica [86]. Daí a curva da Fig. 4.8 é somente plotada em $T_c = 0.1$. Para uma grande classe de supercondutores tridimensionais não convencionais T_c tem sido estimado em 0.05 [95], onde a universalidade do presente estudo é mantida. Para um material típico $T_c = 0.04$ e da Eq. (4.72) encontramos o tamanho do par

$\xi \approx 10$ em onda s. Daí, com o acréscimo de T_c, ξ reduziu-se apropriadamente na região de acoplamento fraco como encontrado experimentalmente.

Tabela 4.3. Valores numéricos de várias constantes e expoentes e diferentes estados de momento angular em três dimensões.

lm	F	A	B	H	G	β_S $\approx$	β_C $\approx$	β_χ $\approx$	β_λ $\approx$
00	3.5449	1.764	1.74	1.43	11.11				
10	2.8563	1.422	1.60	0.79	10.12	2	2		1.1
11	3.3300	1.658	1.68	1.18	10.59	3	2.6		2.4
20	2.7748	1.382	1.57	0.72	10.00	2	2	1.2	1.1
21	3.1006	1.544	1.63	0.96	10.24	2.1	2	1.4	1.5
22	3.1006	1.544	1.63	0.96	10.24	2.1	2	1.4	1.5

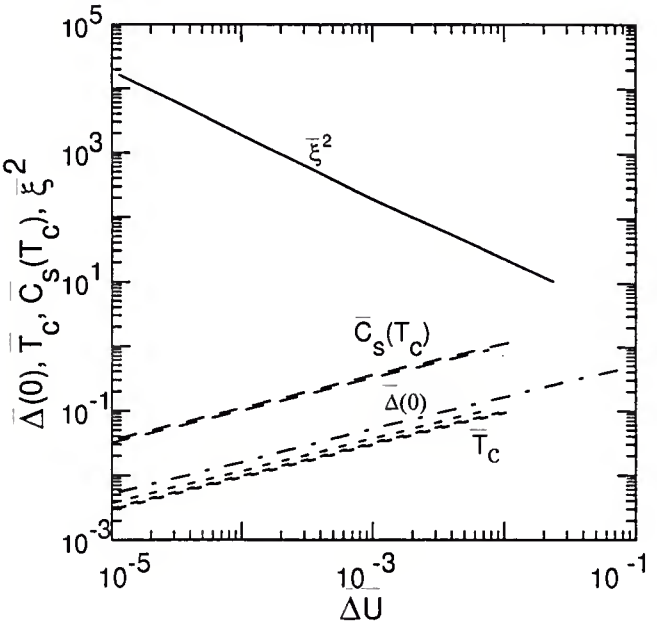

Fig. 4.8 $C_s(T_c)$ (linha tracejada), T_c (linha pontilhada), $\Delta(0)$ (linha tracejada-pontilhada) para diferentes lm e raios de par de onda s, ξ^2 (linha sólida), versus energia de condensação a temperatura zero ΔU para diferentes V_0 e α (de 1 a ∞). Para $C_s(T_c)$ e T_c existem seis linhas distintas e para $\Delta(0)$ tem-se um única linha para todo α e lm. As linhas para $C_s(T_c)$ (T_c) correspondem a $lm = 00, 11, (21, 22), 10$, e 20 de cima para baixo (baixo para cima).

Estudamos a dependência com a temperatura de $\Delta(T)$, $S_s(T)$, $C_s(T)$, $\chi_s(T)$, $U_s(T)$, e $\lambda_s(T)$ para $T < T_c$ para diferentes V_0, e intervalo α variando de 1 a ∞. Encontramos que $\Delta(T)/\Delta(0)$ versus T/T_c é uma função universal para cada lm independente dos parâmetros do potencial. Encontramos o fit universal $\Delta(T)/\Delta(0) \approx B(1 - T/T_c)^{1/2}$ válido para $T \approx T_c$ com valores numéricos de B colocados na Tabela I. Para ondas s, supercondutores BCS $S_s(T)$, $C_s(T)$, $\chi_s(T)$, e $\lambda_s(T)$ tem dependência exponencial em T quando $T \to 0$. Mas para estados de ondas não s estas variáveis tem dependência de lei de potência em T como observado em alguns

materiais [96, 59, 56, 97]. Nas Figs. 4.9, 4.10, 4.11, e 4.12 plotamos $S_s(T)/S_n(T_c)$, $C_s(T)/C_n(T_c)$, $\chi_s(T)/\chi_n(T_c)$, e $\Delta\lambda(T)/\lambda(0)$, respectivamente, versus T/T_c onde $\Delta\lambda(T) = (\lambda(T) - \lambda(0))/\lambda(0)$. Como comentado na Ref. [98], χ_s será significantemente diferente de χ_n somente l par. Calculamos χ_s somente para $l = 0$ e 2. Os expoentes desses escalonamentos são dados na Tabela I. Afim de encontrar β_C também plotamos $C_s(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c escala log. Este gráfico foi usados para calcular os expoentes β_C. Todavia, na escala log diferentes curvas próximas ao overlap não são mostradas aqui. Da Fig. 3 encontramos que o zero de $[C_s(T) - C_n(T)]$ aparece em todos os casos para $T/T_c \approx 0.5$. Mais ainda, todas as curvas para calor específico supercondutor encontram-se em $T/T_c \approx 0.6$. Esses comportamentos são típicos de modelos baseados em equações BCS.

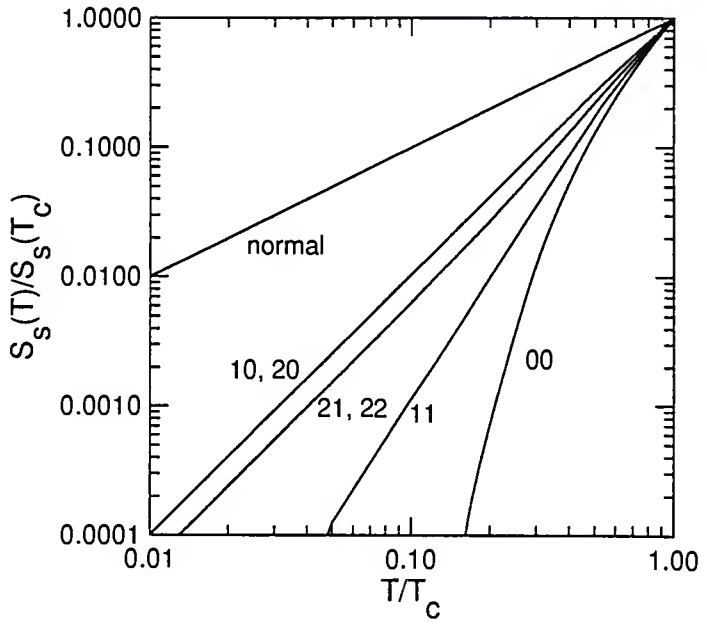

Fig. 4.9 Entropia $S_s(T)/S_s(T_c)$ versus T/T_c para diferentes lm, V_0, e α entre 1 to ∞. As curvas são etiquetadas por lm.

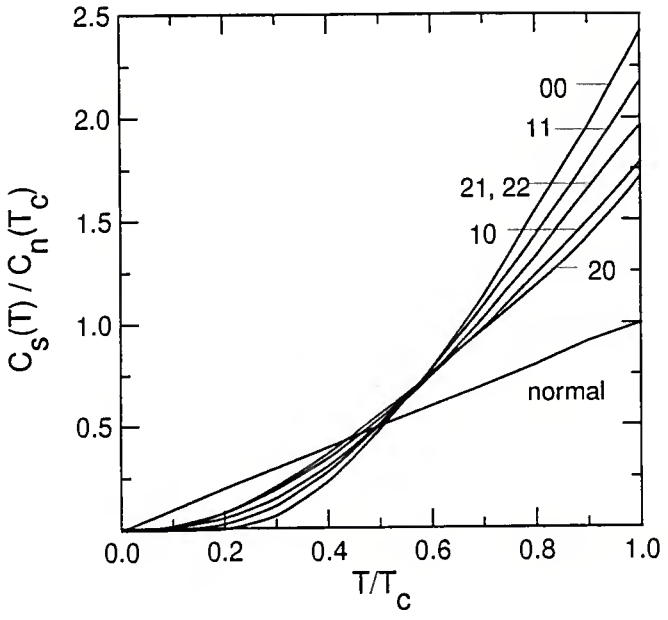

Fig. 4.10 Mesmo que na Fig. 4.9 para calor específico $C_s(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c..

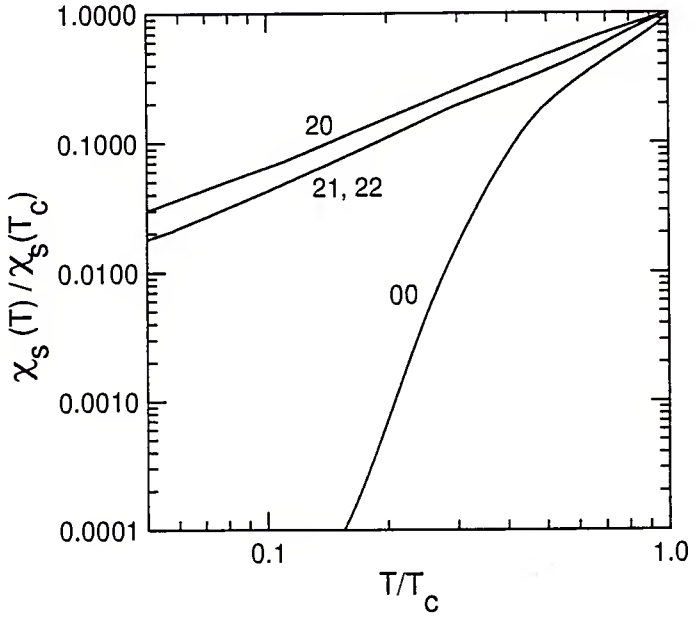

Fig. 4.11 O mesmo que na Fig. 4.9 para spin-susceptibilidade $\chi_s(T)/\chi_s(T_c)$ versus T/T_c..

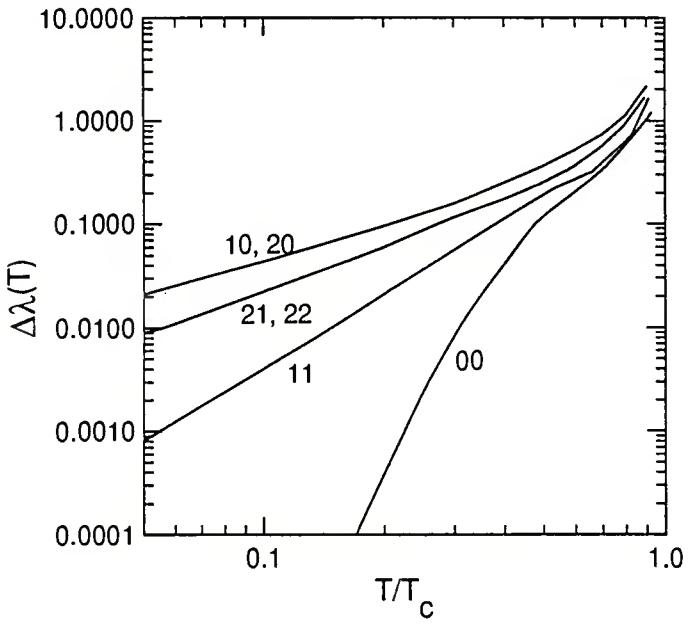

Fig. 4.12 Mesmo como na Fig. 4.9 para $\Delta\lambda(T)$ versus T/T_c.

As constantes na Tabela 4.2 para diferentes lm satisfazem $C_{00} > C_{11} > C_{21} = C_{22} > C_{10} > C_{20}$, onde C_{lm} ficam para F, A, B, H, and G. Daí, a seguinte sequência dos estados lm represntam o acréscimo da anisotropia para a função de gap: 00, 11, (21,22), 10, e 20. Dos gráficos de entropia na Fig. 4.9, encontramos que estas sequência de lm tambe, representa o acréscimo da disordem e, consequentemente, decréscimo na supercondutividade ou uma aproximação ao estado normal, como é claro da Fig. 4.10 – 4.12. Pela aproximação para mais desordem e anisotropia, os observáveis para o estado normal estão mais próximas ao do estado supercondutor $l \neq 0$ do que estado supercondutor $l = 0$.

Neste capítulo temos estudado a equação BCS renormalizada para um potencial separável de alcance finito para diferentes onas parciais em duas e três dimensões. Apresentamos resultados analíticos para o potencial de alcance zero. O presente modelo toma um largo T_c e uma ξ apropriadamente pequeno para muitos materiais

de alto T_c. Também, estabelecemos escalonamentos para $\Delta(0)$, T_c, $C_s(T_c)$ e ξ^2 como função de B_c e ΔU. Escalonamentos com B_c dão resultados dependentes do alcance, mas no caso de observáveis ΔU observamos resusltados dependentes do alcance do potencial, i.e., os escalonamentos não dependem dos detalhes do potencial. A dependência da temperatura de $\Delta\lambda(T)$, $C_s(T)$, $K_s(T)$, $S_s(T)$ e $\chi_s(T)$ até T_c para ondas não s exibem escalonamentos de lei de potência apropriados para materiais de alto T_c e baixas energias. Nenhuma dependência de lei de potência foi observada no caso de ondas s. Então, concordamos que este modelo BCS mais generalizado pode ser usado para explicar algumas das mais importantes propriedades dos novos materiais.

Capítulo 5

Singularidade de van Hove em ondas s e d

5.1 Introdução

O modelo BCS renormalizado parece explicar duas das mais importantes propriedades de supercondutores a altas temperaturas. Porém, o estado normal de cupretos de alto T_c ainda não são satisfatoriamente entendidos e existem controvérsias sobre o hamiltoniano microscópico apropriado e o mecanismo de emparelhamento [93, 89, 92]. Nosso modelo pode predizer com sucesso uma alta temperatura crítica e um pequeno ξ apropriados para vários materiais. Além disso, ele também dá uma correlação linear entre T_c e T_F como encontrado em muitos materiais [95] enquanto que na teoria BCS convencional observamos uma correlação entre T_c e T_D. Estes novos materiais tem muitas outras propriedades não usuais, tais como, um estranhamente grande ΔC e $\Delta(0)/T_c$ e pequeno efeito isótopo que necessitam ainda ser explicados.

O uso de uma singularidade de van Hove (vHs) na densidade de estados (DOS) próximo ou na superfície de Fermi faz o modelo padrão BCS mais adequado para cupretos de alto T_c [100, 101, 102]. Alguns experimentos também sugerem um pico no DOS associado com um vHs próximo a energia de Fermi [56, 103, 59]. Quando o nível de Fermi está próximo a uma singularidade de van Hove na estrutura da

banda bidimensional de um supercondutor cupreto, o sistema exibe aumento de T_c, deslocamento isótopo reduzido e um líquido de Fermi marginal [94]. A singularidade na densidade de estados conhecida como singularidade de van Hove surge onde a velocidade de grupo e onde haja uma região localmente plana de frequência como uma função do vetor de onda k. Os pontos críticos onde estas singularidades são observadas podem ser pontos de sela. A origem da supercondutividade do cupreto é encontrada nos planos CuO_2, os quais estão fracamente acoplados ao longo do eixo c tanto que suas propriedades eletrônicas são bidimensionais. Essa natureza bidimensional leva presença de no mínimo uma singularidade de van Hove. O pico da densidade de estados de largura $\ln|1/\epsilon$ coincide com com um ponto de sela na superfície ϵ. Daí, tem havido evidências de ponto de sela em bandas bidimensionais que levam a uma divergência logaritmica. Além disso, recentes experimentos [103, 104] tem dado evidências diretas para uma banda plana e uma singularidade de ponto de sela extendida a qual corresponde a um comportamento de lei de potência [101]. O uso de um vHs no DOS pode simular diferentes tipos de propriedades de líquidos de não-Fermi dos estados normal e supercondutor [100, 101]. Tem-se tentado explicar muitas características anômalas nos cupretos de alto T_c usando um vHs no DOS [100, 101] tais como: altos valores de ΔC e $\Delta(0)/T_c$, efeito isótopo anômalo, coeficiente de pressão de T_c, variação de temperatura de calor específico $C_s(T)$ e deslocamento Knight. Virtualmente, em todas essas aplicações uma interação de onda s tem sido empregada.

Todavia, das discussões no capítulo 3 e 4 é evidente que alguns dos cupretos de alto T_c tem um par de Cooper singleto de onda d e o parâmetro de gap tem simetria $d_{x^2-y^2}$ em duas dimensões [89, 92]. Medidas recentes da barreira de penetração

$\lambda(t)$ [56, 103, 59] e do calor específico supercondutor em temperaturas diferentes T [56, 103, 59] e análises teóricas relacionadas [97] também apoiam esse ponto de vista. Como foi visto anteriormente, na teoria isotrópica BCS de ondas s, os observáveis exibem dependência exponencial em T quando $T \to 0$ [7]. A dependência com lei de potência, vista experimentalmente, desses observáveis em T pode ser explicada considerando o parâmetro de gap anisotrópico com nó(s) na superfície de Fermi [93, 97].

Estudamos o modelo BCS renormalizado de fraco acoplamento em duas dimensões para ondas s e d na presença de vários tipos de vHs com dois objetivos em mente. O primeiro objetivo é ver se esse escalonamento modifica-se significantemente na presença de vHs no DOS. O segundo objetivo é ver quais propriedades de cupretos de altos T_c podem ser entendidos pela teoria BCS de acoplamente fraco em duas dimensões com um vHs no DOS. Trabalhamos em duas dimensões pois os cupretos exibem um estrutura condutiva similar à camada bidimensional dos portadores.

No estudo anterior do modelo BCS renormalizado de acoplamento fraco em duas e três dimensões encontramos um forte escalonamento entre as energias de condensação ΔU, gap BCS $\Delta(0)$, temperatura crítica T_c e calor específico por partícula $C_s(T_c)$ válidas para muitas ordens de grandeza [93]. Calculamos também a dependência com a temperatura de quantidades diferentes, tais como, o gap BCS $\Delta(T)$, suscetibilidade de spin $\chi(T)$, e $C_s(T)$ para $T < T_c$. Para ondas isotrópicas s (anisotrópicas d), a teoria BCS toma dependência exponencial (lei de potência) na temperatura quando $T \to 0$ para estes valores de observáveis independentes da dimensão do espaço [7, 93]. Aqui, reexaminamos estes escalonamentos na presença

de uma vHs no DOS. Encontramos que as relações de escalonamento permanecem válidas na presença de um vHs com uma levemente mudança nos valores dos expoentes.

5.2 Modelo BCS Renormalizado e van Hove

Consideremos um sistema de N elétrons supercondutores, cada um de massa m sob a ação de um potencial puramente atrativo de curto alcance de dois elétrons em ondas parciais:

$$V_{\mathbf{pq}} = -V_l c_l \cos(l\theta_p)\cos(l\theta_q), \tag{5.1}$$

O potencial (5.1) para um arbitrariamente pequeno V_l e qualquer l leva a instabilidade do emparelhamento de Cooper em temperatura zero em estados de momento angular par (ímpar) para o estado de singleto de spin (tripleto) do sistema de dois elétrons. O problema do par de Cooper para dois elétrons sobre o mar de Fermi cheio é dado por [93]

$$V_l^{-1} = \sum_{\mathbf{q}(q>1)} c_l \cos^2(l\theta)(2\epsilon_q + B_c - 2)^{-1}, \tag{5.2}$$

Os somatórios na Eq. (5.2) e na seguinte são resolvidas de acordo com

$$\sum_{\mathbf{q}} \to \frac{N}{4\pi}\int_0^\infty n(\epsilon_q)d\epsilon_q \int_0^{2\pi} d\theta, \tag{5.3}$$

onde $n(\epsilon_q)$ é uma vHs integrável no DOS que tende a um alto valor na, ou perto da, superfície de Fermi. Aqui consideramso as seguintes três densidades de estado:

$$n(\epsilon) = \frac{1}{2\ln 2}\ln\left|\frac{\epsilon+1}{\epsilon-1}\right|, \tag{5.4}$$

$$n(\epsilon) = \frac{2(1-x)}{(\epsilon-1)^x}, \tag{5.5}$$

$$n(\epsilon) = \frac{\delta}{\arctan(1/\delta)}\frac{1}{(\epsilon-1)^2+\delta^2}, \tag{5.6}$$

que são um vHs logaritmico, vHs lei de potência e DOS lorentziano, respectivamente. Também estudamos DOS lorentziano, que não tem uma singularidade na superfície de Fermi pois serve ao mesmo propósito que um vHs e nos fornece um escopo mais amplo a fim de se comparar com os resultados experimentais. Cada uma destas densidades tem sido normalizadas tal que, quando todos os estados acima da superfície de Fermi estão cheios, o número total de partículas seja N.

$\Delta_{\mathbf{q}}$ tem a seguinte forma anisotrópica: $\Delta_{\mathbf{q}} \equiv \Delta_0\sqrt{c_l}\cos(l\theta)$, onde Δ_0 é adimensional. Usando as Eqs. (5.1) e (5.2), Eq. (4.50) pode ser escrito explicitamente em termos da energia do par de Cooper como se segue [93]:

$$\int_0^{2\pi} d\theta \cos^2(l\theta)\Big[\int_1^{\infty} \frac{2n(\epsilon_q)d\epsilon_q}{2\epsilon_q + B_c - 2} - \int_0^{\infty} \frac{n(\epsilon_q)d\epsilon_q}{E_{\mathbf{q}}} \tanh\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T}\Big] = 0. \tag{5.7}$$

Este é o modelo BCS renormalizado como escrito e discutido em detalhes no capítulo anterior.

O salto no calor específico por partícula em $T = T_c$ ($\Delta(T_c) = 0$), $\Delta C \equiv [C_s - C_n]_{T_c}$ é dado por [7]

$$\Delta C = A^2 B^2 k_B^2 T_c < n(\delta) >_{k_B T_c} \tag{5.8}$$

onde $A^2 = [\Delta(0)/k_B T_c]^2$, $B^2 = -d[\Delta(T)/\Delta(0)]^2/d(T/T_c)$ em $T = T_c$, k_B é a constante de Boltzmann e

$$< n(\delta) >_{k_B T} = \int_{-\infty}^{\infty} n(\epsilon)d\epsilon(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}). \tag{5.9}$$

Isto dá o salto para a razão T_c em termos das unidades próprias como encontrado em experimentos e não em termos da forma adimensional que usamos para o resto do cálculo. Isso foi feito, principalmente, a fim que comparar as predições teóricas com os dados experimentais. O deslocamento Knight $K(T)$ pode ser encontrado da

suscetibilidade de spin [93] $\chi(T) = (2\mu_N^2/T)\sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{q}})$, onde μ_N é o magneto nuclear.

5.3 Resultados e Discussão

Resolvemos a equação (6.8) numericamente e calculamos o gap BCS $\Delta(0)$, T_c, $C_s(T_c)$, ΔU em $T = 0$ bem como $\Delta(T)$, $C_s(T)$, e $\chi_s(T)$ em ondas s e d na região de acoplamento fraco. Na ausência de uma vHs em duas dimensões, estabelecemos $\Delta(0) = 2\sqrt{\Delta U}$, $T_c = 2\sqrt{\Delta U}/A$, e $C_s(T_c) \sim \sqrt{\Delta U}$. Na presença de uma vHs ou DOS lorentziana, estabelecemos no presente estudo escalonamentos $\Delta(0) \sim \sqrt{\Delta U}$ e $T_c \sim \sqrt{\Delta U}$. O expoente destes escalonamentos não mudam na presença da vHs no DOS, embora o prefator mude. Na presença de uma vHs no DOS, o escalonamento $C_s(T_c) \sim \sqrt{\Delta U}$ e a razão A cresce vagarosamente do valor universal BCS 1.764 para $l = 0$ (1.513 for $l = 2$) [93] com o crescimento de ΔU ou acoplamento. Todavia, como já foi notado, a razão A é sempre limitada por 2.

Um dos aspectos mais interessantes da introdução de uma vHs no DOS e o acréscimo no salto do calor específico $\Delta C(T_c)/C_n(T_c)$ acima do valor BCS de 1.43 para $l = 0$ e 1.0 para $l = 2$ para todo T_c [93]. Muitos dos cupretos, experimentalmente, tomam um significante aumento no valor dessa [100, 101]. Na Fig. 5.1 plotamos o salto de $\Delta C/T_c$ para diferentes T_c no caso de ondas s e d para lei de potência vHs $x = .5$ e $.75$ respectivamente sendo que $\Delta C/T_c$ está em J/K^2/mol e T_c está em kelvin. $< n(\delta) >_{k_B T_c}$ é escolhido 2.5 ev^{-1} spin^{-1} e 1.5 ev^{-1} spin^{-1} para ondas s e d. O valores acima de $< n(\delta) >_{k_B T_c}$ estão em razoável acordo com os valores estimados de outros experimentos [94].

Como o problema de ondas s já tem sido estudado [100, 101], aqui nos concen-

tramos mais em ondas d. Da Fig. 1 encontramos que $\Delta C/T_c$ cresce com T_c. Em ambas ondas $\Delta C/T_c$ exibe um muito lento crescimento com a temperatura, mas acima de $T_c = 80K$, o salto no crescimento e maior com a temperatura. Para um T_c fixo e o mesmo DOS, o salto de onda s é sempre maior que o salto de d. Os resultados calculados são comparados com os experimentais [105]. Em termos de toda dependência em T_c o acordo entre teoria e experimento é definitivamente bom.

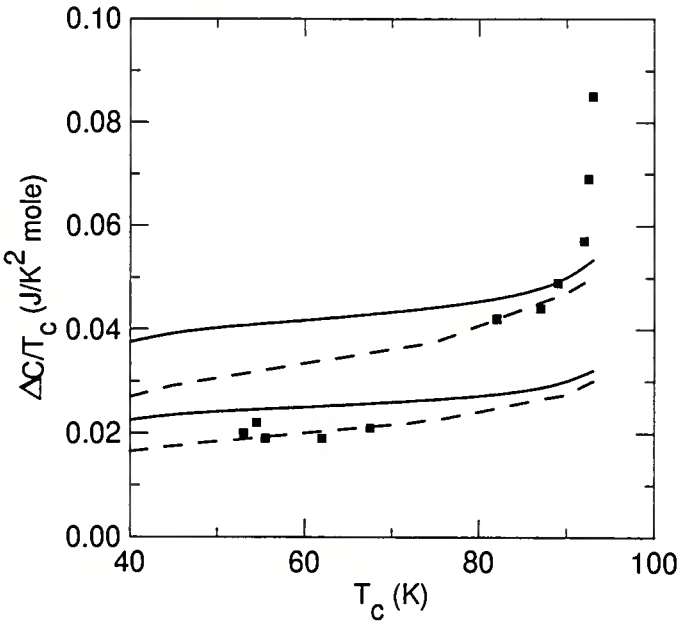

Fig. 5.1 Salto no calor específico $\Delta C/T_c$ versus T_c em ondas s (linha sólida) e d (linha dashed) para PL − vHs (5.5) para ondas s(d) com $x = 0.5(0.75)$. O conjunto linhas inferior (superior) são para $< n(\delta) >_{k_B T_c}$ =1.5 (2.5) ev^{-1} $spin^{-1}$. Resultados experimentais do sistema Y-123 (Daumling) são mostrados.

Depois estudamos a dependência com a temperatura de $\Delta(T)$, $C_s(T)$, e deslocamento Knight para $T < T_c$. A função de gap $\Delta(T)$ tem essencialmente o mesmo comportamento universal que em ondas s [7]. Para $T \approx T_c$, encontramos $\Delta(T)/\Delta(0) =$

$B\,(1 - T/T_c)^{1/2}$, com $B = 1.74$ (1.70) para $l = 0$ (= 2). O valor da constante B é essencialmente independente da presença de uma vHs.

Em nossa tentativa de estudar o salto do calor específico com vHs no DOS, consideramso os compostos $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ (cupreto de onda s em duas dimensões) e $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ (cupreto de onda d em duas dimensões) [102]. Para $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, $T_c = 93$ K, $T_F = 8800$ K, $T_c/T_F \approx 0.01$ e $\Delta C/C_n(T_c) \approx 5$. Para $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$, $T_c = 100$ K, $T_F = 4200$ K, $T_c/T_F \approx 0.024$ e $\Delta C/C_n(T_c) \approx 2$ [102]. A fim de simular estes dois cupretos consideramos DOS (5.4), (5.5) e (5.6) com $T_c = 0.01$ (onda s) e $T_c = 0.025$ (onda d).

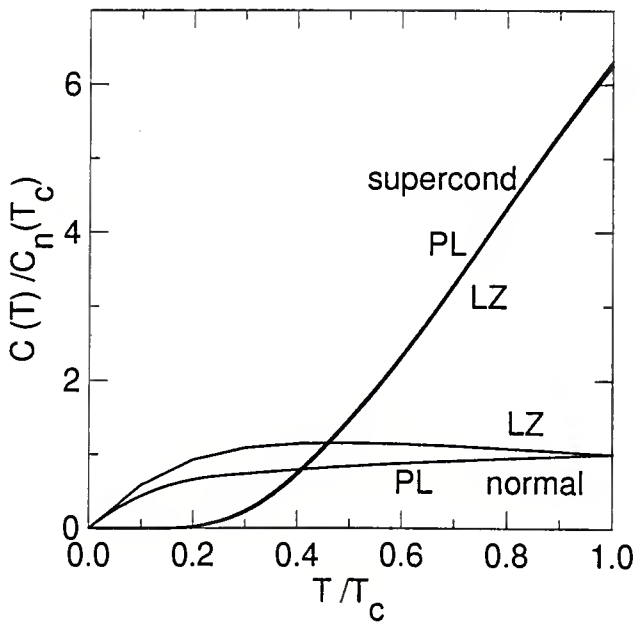

Fig. 5.2 Calor específico do estado supercondutor e normal $C(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c para ondas s: PL – vHs (5.5) com $x = 0.75$, LZ – DOS (5.6) com $\delta = 0.01$.

Na Fig. 5.2 plotamos o calor específico do estado normal e supercondutor $C(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c para DOS (5.5) com $x = 0.75$, e (5.6) com $\delta = 0.01$. O salto $\Delta C/C_n(T_c)$ nestes dois casos é aproximadamente igual ao valor experimental 5 mencionado acima para cupretos de onda s. O salto no calor específico para (5.4) é pequena e não é considerada aqui.

Voltando a estudar o caso do calor específico em ondas d, na Fig. 5.3 plotamos o calor específico normal e supercondutor de ondas d $C(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c para DOS (5.5) com $x = 0.5$ e (5.6) com $\delta = 0.04$.

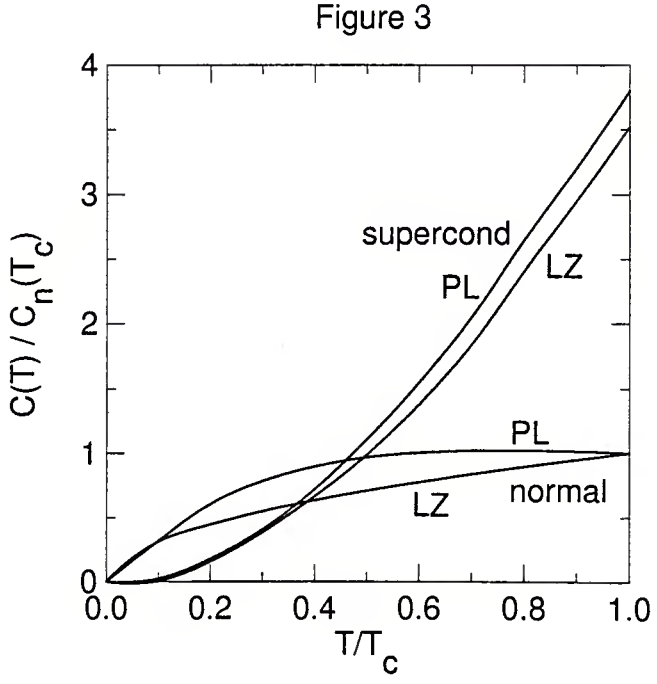

Fig. 5.3 Calor específico do estado supercondutor e normal $C(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c para ondas d: PL – vHs (5.5) com $x = 0.5$ (curva tracejada), LZ – DOS (5.6) com $\delta = 0.04$ (curva sólida).

Estudamos as propriedades de escalonamento neste caso e encontramos $C_s(T) \sim (T/T_c)^{\beta_C}$, com $\beta_C = 1.8$ para ambas raízes quadradas vHs no DOS. A fim de extrair este expoente β_C plotamos a Fig.3 na escala log-log (não mostrada). Na ausência da vHs no DOs em duas dimensões $\beta_C = 2$ [93]. O expoente $\beta_C = 2$ tem sido observada no trabalho experimental de Phillips et al [106].

Finalmente, estudamos o deslocamente Knight. Plotamos $K(T)/K(T_c)$ versus T/T_c na Fig. 4 para DOS (5.6) com $\delta = 0.01$ (onda s) e $\delta = 0.04$ (onda d), e DOS (5.4).

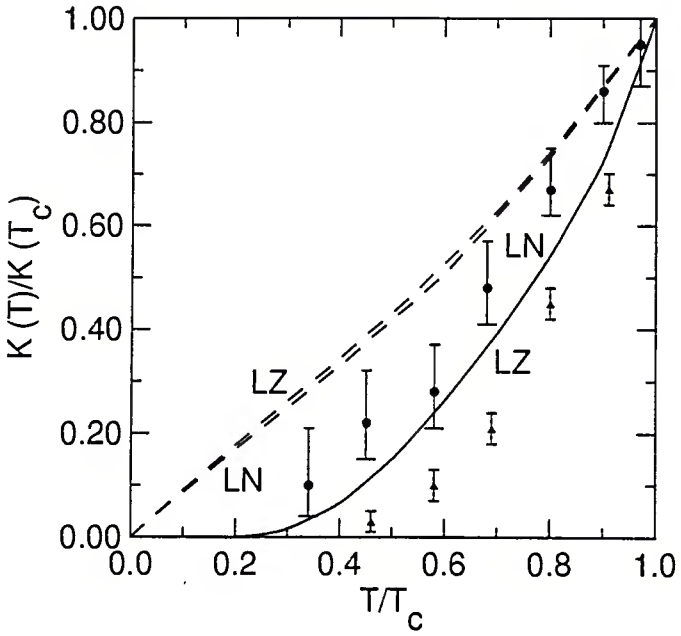

Fig. 5.4 $K(T)/K(T_c)$ versus T/T_c para onda s (linha sólida) e d (linha tracejada). LZ – DOS (5.6) com $\delta = 0.01$ para onda s, LZ – DOS (5.6) com $\delta = 0.04$ para onda d e LN – DOS (5.4). Pontos experimentais no sistema Y-123: círculo (perpendicular), triângulo (paralelo) (ref. 15).

Os resultados de onda s levam essencialmente a uma única curva. As duas

possibilidades de onda d também levam a resultados muito similares. Neste caso, estabelecemos a seguinte dependência em T/T_c para $l = 2$: $K(T)/K(T_c) \sim (T/T_c)^{\beta_k}$ com $\beta_k = 1.0$ para boa parte do intervalo de temperatura. Em duas dimensões, na ausência de uma vHs, encontramos que o expoente é 1.2 [93]. Também plotamos os pontos experimentais [107] que a predição teórica do nosso modelo fita de forma razoável.

Para resumir, estudamos um modelo BCS renormalizado de acoplamento fraco em ondas s e d na presença de um DOS de van Hove e lorentziano. Escalonamentos são estabelecidos para $\Delta(0)$ e T_c como função de ΔU: $\Delta(0) \sim \sqrt{\Delta U}$ e $T_c \sim \sqrt{\Delta U}$. Escalonamentos idênticos tem sido estabelecidos recentemente na ausência de uma vHs [93]. A dependência com a temperatura de $C_s(T)$ e $\chi_s(T)$ abaixo de T_c em ondas d exibem escalonamento de lei de potência distintos para alguns materiais de alto T_c a baixas energias [56, 103, 59]. Nenhuma dependência de lei de potência em T é encontrada em ondas s para estes observáveis. Para $l = 2$ obtemos $C_s(T)/C_n(T_c) \sim (T/T_c)^{1.8}$ e $K(T)/K(T_c) \sim (T/T_c)^{1.0}$ para a maior parte do intervalo de temperatura na presença de uma vHs. Escalonamentos similares, com um expoente levemente diferente, foram encontrados na ausência de uma vHs [93]. Na presença de uma vHs, o salto no calor específico $\Delta C/C_n(T_c)$ poderia ter valores muito maiores que o valor padrão BCS 1.43 (1.0) para $l = 0$ (2) [93]. Tais valores altos foram observados experimentalmente para alguns cupretos de alto T_c [100, 102]. As razões $\Delta C/T_c$ e A tem um crescimento com o acoplamento (T_c). Embora haja controvérsias sobre a formulação microscípica dos cupretos de alto T_c, foi visto que o presente modelo BCS renormalizado, que prediz um alto T_c e um pequeno ξ pode ser usado com uma vHs para explicar propriedades mais universais como os grandes valores de ΔC, a

dependência correta com a temperatura do deslocamento de Knight, etc.

Capítulo 6

Parâmetro de ordem misturado e Modelo BCS Renormalizado

6.1 Introdução

A teoria BCS renormalizada de supercondutividade [21, 22, 23, 25] tem sido aplicada com sucesso a diferentes sistemas em estados de momento angular pura tais como ondas s, p, e d. Todavia, os supercondutores não convencionais de alto T_c [4] com alta temperatura crítica T_c tem uma estrutura complicada de rede com simetrias extendidas e/ou misturadas para o parâmetro de ordem [53]. Alguns dos materiais de alto T_c tem singletos de pares de Cooper de ondas d e o parâmetro de ordem tem simetria $d_{x^2-y^2}$ em duas dimensões [89]. Medidas recentes [56] da barreira de penetração $\lambda(T)$ e calor específico do supercondutor em diferentes temperaturas T e análises teóricas relacionadas [97, 93] também apoiam este ponto de vista. Em alguns casos existe a signature de uma simetria extendida s ou d. A possibilidade de uma simetria misturada $(s-d)$ foi sugerida algum tempo atrás por Ruckenstein et al.[108] e Kotliar [94]. No trabalho teórico de Kotliar o pure-exchange model de Baskaran, Zou e Anderson [33] foi considerado. As equações de campo médio

obtidas por Baskaran et al podem ser escritas como [94]:

$$\sum_k \frac{V_{qk}\Delta_k \tanh(E_k/2T)}{2E_k} = \Delta_q \tag{6.1}$$

$$\sum_k \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k}\frac{\tanh(E_k/2)}{2}\right) = N(1-\delta) \tag{6.2}$$

onde N é o número de sítios $1-\delta$ é o número de elétrons por sítios. Baskaran e colaboradores assumiram parâmetro de ordem $\Delta_k = \Delta_d(\cos k_x + \cos k_y)$ ie. um parâmetro de ordem de onda d. Mas Kotliar propôs a solução de paridade par mais geral do que (6.1) que seria

$$\Delta_k = \Delta_d(\cos k_x - \cos k_y) + \exp(i\theta)\Delta_s(\cos k_x + \cos k_y) \tag{6.3}$$

uma mistura de simetrias de onda s e d. Propôs também que a onda d como parâmetro de ordem tem um alto T_c comparado ao caso de onda s. A minimização da expressão da energia livre com o mesmo tipo de mistura prevê que a fase relativa entre as ondas s e d é $\pi/2$ que é energeticamente favorável. A fase relativa entre o parâmetro de ordem pode ser entendida em termos da expansão simples de Landau-Ginzburg da energia livre.

Evidências experimentais tem sido encontradas de simetrias misturadas de ondas s e d em compostos tais como $YBa_2Cu_3O_7$ (YBCO) [76, 82], and $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ [81], onde uma simetria $[s+\exp(i\theta)d]$ é aplicável. Recentemente, esta idéia tem sido explorada para explicar os dados de RMN em supercondutores YBCO e a corrente crítica de Josephson observado em junções YBCO-SNS e YBCO-Pb[109].

As evidências experimentais deste tipo de parâmetro misturado vem da medida do tunelamento de Josephson no eixo c entre $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ and Pb [82]. Esta nova classe de experimentos inclue um supercondutor convencional (Pb) depositado num

duplo contorno de cristal de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO). Foi medida a corrente crítica como uma função da magnetude e ângulo de um campo magnético aplicado ao plano da junção. Esta foi uma forte evidência de que a simetria do parâmetro de ordem em YBCO é do tipo misturado com uma componente de onda d dominante e uma componente s. Como Pb é um supercondutor de onda s o *counterelectrode* acopla somente a componente de onda s do parâmetro de ordem de YBCO; a diferença de fase na rede com qualquer componente de onda d, quando integrada, vai a zero. Se YBCO fosse um supercondutor de onda s convencional, a corrente crítica $I_c(B)$ exibiria um Fraunhofer como dependência no campo magético B com um máximo em $B = 0$ no plano da junção. Se, por outro lado, YBCO fosse predominantemente onda d, qualquer componente de onda s do parâmetro de ordem mudaria de sinal através do duplo contorno (*twin boundary*) fornecendo uma diferente dependência angular. Um campo magnético perpendicular ao contorno produziria um mínimo local em I_c em $B = 0$. A dependência da corrente crítica com o ângulo, sugere fortemente uma interpretação em termos de uma inversão de sinal da componente s do parâmetro de ordem do YBCO across the twin boundary. A variação de $I_c(B)$ com o campo magnético no único domínio duplo com um máximo global em $B = 0$ para todo ϕ e quando YBCO é ortorrômbico, o parâmetro de ordem é esperado ser $d + \epsilon s$. A discrepância nos valores da razão da corrente crítica no campo zero a correntes críticas maiores em um campo paralelo ao contorno twin seria resolvida para uma componente adicional de onda s para o parâmetro de ordem e uma quebra no estado $d + is$ de inversão temporal no duplo contorno.

Existem também trabalhos teóricos recentes usando simetrias misturadas de ondas s e d [110]. Notou-se que estados $s + id$ são mais fáceis de se realizar do que

estados considerando acoplamentos diferentes e simetrias de rede.

É portanto natural que os elétrons de Cooper interajam tanto em ondas s quanto em d com diferentes acoplamentos. Na presença de potenciais centrais simples o problema de Cooper separa-se em duas componentes desacopladas s e d. O mesmo desacoplamento ocorre na equação linear de Schrödinger. Todavia, na teoria BCS não linear a presença de componentes de ondas s e d na interação levaria a um parâmetro de ordem de simetria misturada e, consequentemente, um conjunto acoplado de equação BCS. A simetria do parâmetro de ordem é especificada para resolver este conjunto acoplado de equações.

O estado normal de muitos materiais de alto T_c não tem sido satisfatoriamente entendido e há controvérsia sobre o hamiltoniano microscópico apropriado e o mecanismo de emparelhamento [89, 93]. A despeito disso, estudamos o caso de simetria $(s + id)$ do parâmetro de ordem usando a teoria BCS microscópica de acoplamento fraco baseada no modelo de líquido de Fermi para extrair algumas propriedades independentes de tal descrição. Para uma mistura mais fraca de onda s, encontramos uma outra transição de fase de segunda ordem em $T = T_{c1} < T_c$, onde a fase supercondutora muda de um estado puro d, para $T > T_{c1}$, para um misturado estado $(s + id)$, para $T < T_{c1}$. O calor específico exibe dois saltos nos pontos de transição $T = T_{c1}$ e $T = T_c$. A dependência na temperatura do calor específico supercondutor, suscetibilidade, barreira de penetração e condutividade térmica mudam drasticamente em $T = T_{c1}$ de um comportamento de lei de potência (típico do estado com nó(s) no parâmetro de ordem na superfície de Fermi), para $T > T_{c1}$, para comportamento exponencial (típico do estado s sem nós), para $T < T_{c1}$. O parâmetro de ordem para a presente onda $(s + id)$ não tem nós na superfície de

Fermi para $T < T_{c1}$ e comporta-se como uma onda s. O observáveis para o estado normal estão mais próximos ao estado supercondutor $l = 2$ do que para o estado supercondutor $l = 0$ [93]. Consequentemente, supercondutividade em ondas s é mais pronunciada do que em ondas d. Daí quando a temperatura diminue o sistema passa do estado normal a um estado "menos" supercondutor de onda d em $T = T_c$ e então a um estado de onda s "mais" supercondutor em $T = T_{c1}$ sinalizando uma segunda transição de fase.

6.2 Equações e Definições

Consideremos um sistema de N elétrons supercondutores sob a ação de um potencial de dois elétrons puramente atrativo em onda parcial l (0,2):

$$V_{\mathbf{pq}} = -\sum_{l=0,2} V_l \cos(l\theta_p)\cos(l\theta_q) \tag{6.4}$$

onde θ_p é o ângulo do vetor momento $\mathbf{p}$.

Consideramos um modelo BCS renormalizado de acoplamento fraco em duas dimensões com simetria $(s + id)$. Em um T finito, a equação BCS é

$$\Delta_{\mathbf{p}} = -\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{pq}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} \tag{6.5}$$

O parâmetro de ordem $\Delta_{\mathbf{q}}$ tem a seguinte forma anisotrópica: $\Delta_{\mathbf{q}} \equiv \Delta_0 + i\Delta_2 \cos(2\theta)$, onde Δ_l's são adimensionais. O gap BCS é definido por $\Delta(T) = (\Delta_0^2 + \Delta_2^2/2)^{1/2}$, que a raiz quadrada média de $\Delta_{\mathbf{q}}$ na superfície de Fermi. Usando a forma acima de $\Delta_{\mathbf{q}}$ e o potencial (6.4), (6.5) o conjunto acoplado de equações BCS para $l = 0$ e 2 se torna

$$\frac{1}{V_l} = \sum_{\mathbf{q}} \cos^2(l\theta) \frac{1}{2E_{\mathbf{q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} \tag{6.6}$$

onde o acoplamento é introduzido através de $E_{\mathbf{q}}$.

Usando (5.2), o conjunto de equações BCS (6.6) pode ser explicitamente escrito em termos dos Cooper bindings como se segue:

$$\int_1^\infty \frac{2d\epsilon_q}{2\epsilon_q - \hat{E}_0} - \int_0^\infty \frac{d\epsilon_q}{E_\mathbf{q}} \tanh \frac{E_\mathbf{q}}{2T} = 0. \tag{6.7}$$

$$\int d\theta \cos^2(2\theta) \Big[\int_1^\infty \frac{2d\epsilon_q}{2\epsilon_q - \hat{E}_2} - \int_0^\infty \frac{d\epsilon_q}{E_\mathbf{q}} \tanh \frac{E_\mathbf{q}}{2T} \Big] = 0. \tag{6.8}$$

6.3 Resultados e Discussões

Resolvemos o conjunto acoplado de equações BCS (6.7) e (6.8) numericamente e calculamos os gaps Δ_0 e Δ_2 em várias temperaturas para $T < T_c$. O correspondente gap BCS $\Delta(T)$ foi também calculado. Para uma interação muito fraca de onda s (d) a única solução possível a $\Delta_0 = 0$ ($\Delta_2 = 0$). Para que haja um acoplamento entre ondas s e d ambos potenciais de interação seja razoável. Temos estudado a solução somente quando um acoplamente entre as duas equações é definido. Neste domínio temos deixado o acoplamento de onda d mais forte que o de s, tal que, quando a temperatura é diminuída à fase supercondutora e a onda d aparece. Na Fig. 6.1 plotamos a dependência da temperatura de diferentes Δ's para os seguintes conjuntos de misturas s-d correspondendo a (1) $C_0 = 0.0006$, $C_2 = 0.001$, (full line) and (2) $C_0 = 0.00085$, $C_2 = 0.001$ (dashed line), referido como modelos sd1 e sd2, respectivamente. Para um supercondutor com $T_F = 5000$ K, o mais largo destes Cooper bindings C_2 é 5 K. O menor destes garante o limite de acoplamento fraco, onde o modelo BCS daria uma boa descrição. Em ambos os casos o parâmetro Δ_2 é suprimido na presença de um Δ_0 não zero. Todavia, o gap BCS $\Delta(T)$ tem a mesma forma quando no caso de ondas puras s e d, No modelo sd1 (sd2) $\Delta(0)/T_c = 1.535$ (1.644), $T_c = 0.0266$ (0.0266), $T_{c1} = 0.01065$ (0.0206). Para uma onda pura s (d)

$\Delta(0)/T_c = 1.764$ (1.513) [93]. Em $T = 0$ o parâmetro de ordem tem componentes de onda s e d e encontramos que, quando T cresce ambas as componentes decrescem e para $T \geq T_{c1}$ a componente de onda s anula-se e fica com uma componente pura d, que se anula em $T = T_c$.

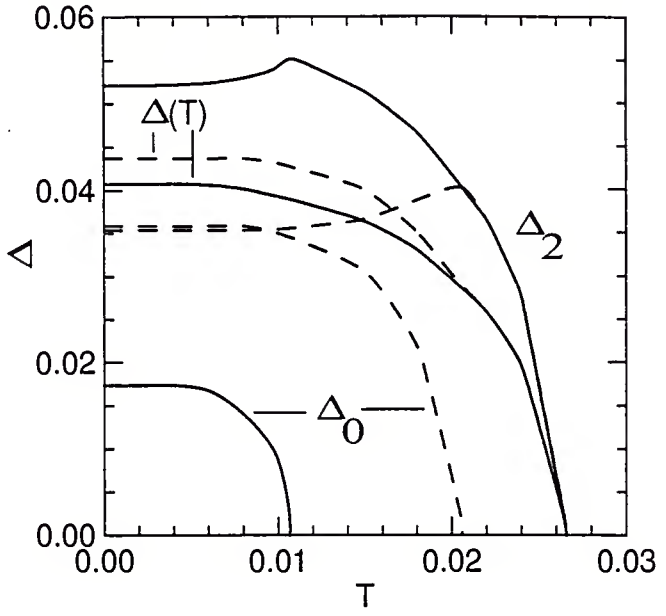

Fig. 6.1 As ondas s- e d, parâmetros Δ_0 e Δ_2, e o gap $\Delta(T)$ em diferentes temperaturas para o modelos de onda (s+id) sd1(linha cheia) e sd2 (linha tracejada) descritos no texto com diferentes misturas de ondas s e d.

Afim de entender a segunda transição de fase $T = T_{c1}$, estudamos a dependência na temperatura do calor específico com algum detalhe. Os diferentes valores de calor específico estão plotados na Fig. 6.2. Com esta transição de dois passos, o calor específico supercondutor exibe um comportamento bem peculiar. Em ambos os modelos o calor específico exibe dois saltos − um em T_c e outro em T_{c1}. Da (??) e da Fig. 6.1 vemos que a temperatura derivada de $|\Delta_{\mathbf{q}}|^2$ tem descontinuidade em T_c e T_{c1} causando o anulamento de Δ_2 e Δ_0, respectivamente, responsável pelos dois

saltos no calor específico.

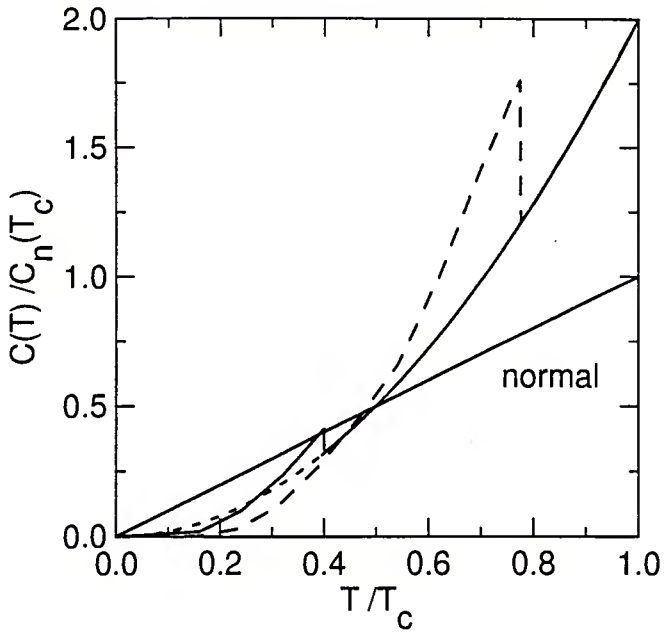

Fig. 6.2 Razão do calor específico $C(T)/C_n(T_c)$ versus T/T_c para os modeos sd1 (linha cheia) sd2 (linha tracejada). A linha tracejada representa o resultado de onda d pura de Ref. [93] por comparação.

Para $T_c > T > T_{c1}$, o calor específico exibe comportamento típico de lei de potência para ondas d $C_s(T)/C_n(T_c) = 2(T/T_c)^2$ encontrado em recentes estudos [93]. Para $T < T_c$, encontramos um comportamento exponencial. Os saltos no calor específico tem sido observados recentemente em certos supercondutores compostos o que sugere a existência de uma fase $s + id$ acoplada [111].

Posteriormente estudamos a dependência da temperatura de suscetibilidade de spin, barreira de penetração e condutividade térmica que são exibidos nas Figs. 6.3 – 6.5 onde também plotamos os resultados para ondas puras s e d da Ref. [93] por comparação. Em todos os casos, comportamentos de potência tipo ondas d são

obtidos para T_c. Obtemos em ondas d $K_s(T) \approx K_n(T)(T/T_c)^{1.2}$ e $\chi_s(T)/\chi_n(T_c) \approx (T/T_c)^{1.3}$ [93]. Para $T < T_{c1}$, não há nenhum nó no presente parâmetro de ordem na superfície de Fermi, tendo um comportamento típico do estado s

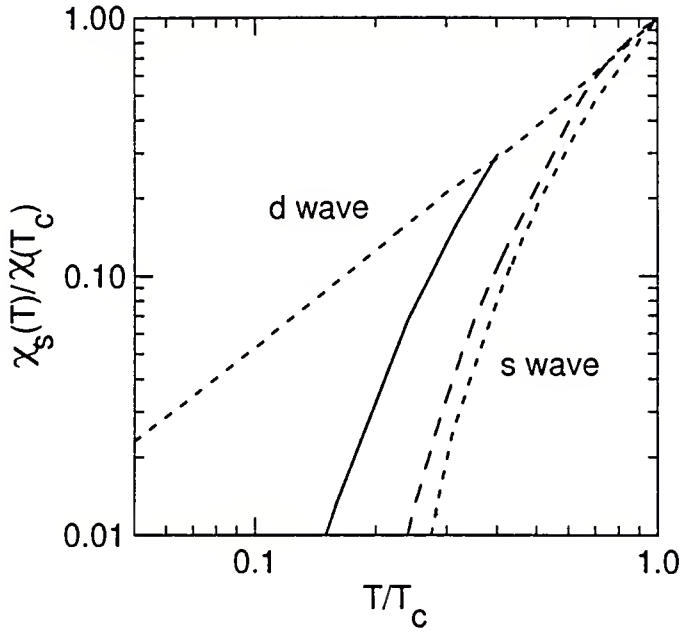

Fig. 6.3 Razão de suscetibilidade de spin $\chi_s(T)/\chi(T_c)$ versus T/T_c para modelos sd1 (linha cheia) e sd2 (linha tracejada). As linhas pontilhadas representam o resultado de ondas puras s e d de Ref. [93] por comparação.

Uma passagem do estado d para o estado $s + id$ em T_{c1} representa um acréscimo na ordem e daí um acréscimo na supercondutividade [93]. Como a temperatura diminue, o sistema passa do estado normal ao de onda d em $T = T_c$ e então ao de onda $d + is$ em $T = T_{c1}$ sinalizando um segunda transição.

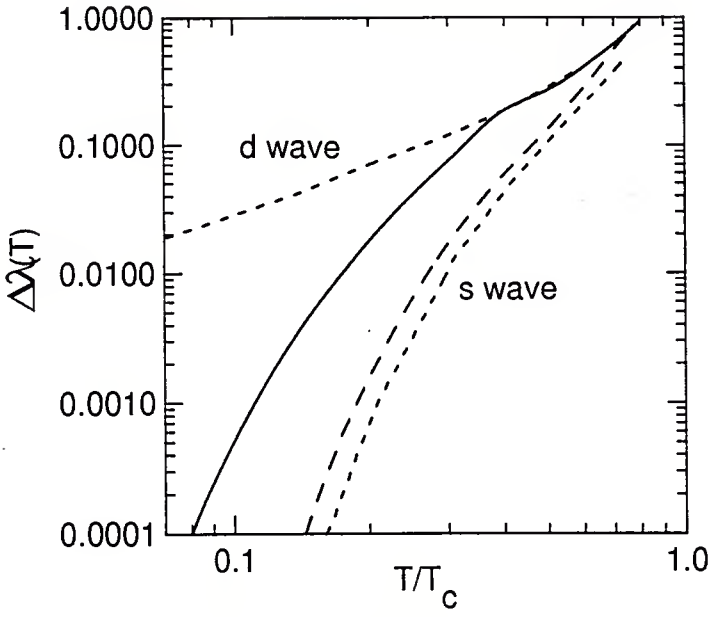

Fig. 6.4 Razão de barreira de penetração $\Delta\lambda(T) \equiv [\lambda(T) - \lambda(0)]/\lambda(0)$ versus T/T_c para modelos sd1 (linha cheia) e sd2 (linha tracejada). As linhas pontilhadas representam os resultados de onda pura s e d de Ref. [93] por comparação.

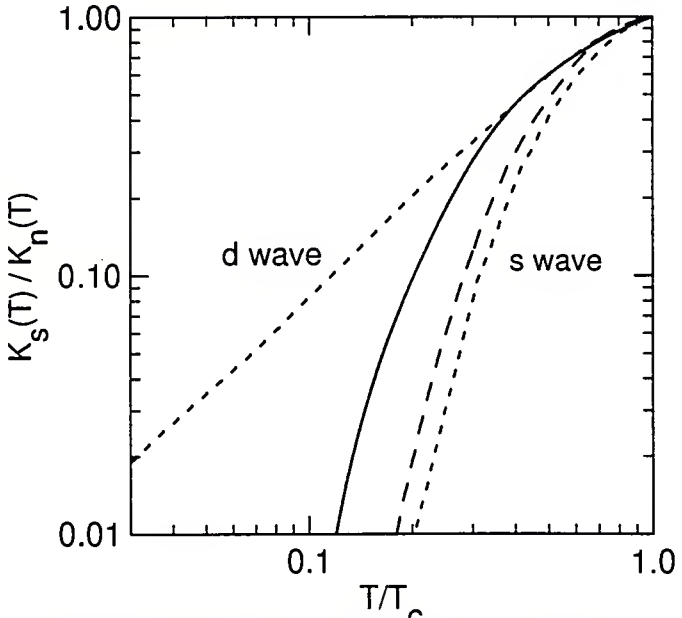

Fig. 6.5 Razão de condutividade térmica $K_s(T)/K_n(T)$ versus T/T_c para modelos sd1 (linha cheia) e sd2 (linha tracejada). As linhas pontilhadas representam os resultados de onda pura s e d de Ref. [93] para comparação.

Concluindo, temos estudado a supercondutividade em ondas $(s + id)$ empregando um modelo BCS renormalizado em duas dimensões e confirmado uma segunda transição de fase em $T = T_{c1}$ na presença de uma onda s mais fraca. Temos deixado os acoplamentos em ondas s e d em tal domínio que uma solução de onda $(s + id)$ é encontrada. Quando a temperatura passa pela primeira temperatura crítica, uma fase supercondutora mais fraca (menos ordenada) é criada na onda d, a qual muda para uma fase supercondutora mais forte (mais ordenada) em onda $(s + id)$ em T_{c1}. O estado de onda $(s + id)$ é similar ao estado de uma onda s se nó no parâmetro de ordem. A transição de fase em T_{c1} é também marcada por uma dependência na temperatura de lei de potência (exponencial) de $C(T), \chi(T), \Delta\lambda(T)$ e $K(T)$ para$T > T_{c1}$ $(< T_{c1})$. Uma segunda transição de fase similar pode ocorrer para alguns outros tipos de misturas de estados de momento angular.

Capítulo 7

Conclusão

Na presente tese temos estudado o modelo BCS renormalizado para entender várias propriedades de supercondutores de alta temperatura. Embora o entendimento destes novos materiais é ainda incompleto e não haja acordo com relação ao mecanismo de emparelhamento, o hamiltoniano microscópico e a simetria do parâmetro de ordem, nosso modelo fornece algumas idéias úteis. A despeito da grande diferença destes novos materiais com relação ao supercondutores convencionais, encontramos que a teoria BCS, com algumas generalizações e modificações, poderia explicar os fenômenos de alta temperatura. Assim, tornou-se essencial entender a teoria BCS antes de detalhes posteriores. O segundo capítulo desta tese trata da teoria BCS, que tem sido de extremo sucesso na explicação de supercondutores convencionais. Temos discutido tanto o ponto de vista matemático quanto físico com uma pequena perspectiva histórica. A teoria BCS discutida no capítulo 2 é baseada no campo médio usando técnica variacional. A equação BCS de temperatua zero e dependente da temperatura tem sido tratadas. As propriedades importantes termodinâmicas e eletromagnéticas dos supecondutores são definidas. Estas são usadas em nossos cálculos. No terceiro capítulo apresentamos uma revisão da presente situação dos novos materiais. Muitos dos supercondutores de alta temperatura encontrados são

óxidos de cobre (cupretos). Uma lista destes cupretos com respectivas temperaturas críticas é mostrada. Estes novos supercondutores tem anomalias nas propriedades de estado normal que também são discutidas em detalhe. Vários trabalhos experimentais também são considerados. Este capítulo fornece uma clara visão da presente situação deste materiais. Nos capítulos 4-6 apresentamos nosso trabalho baseado no modelo BCS renormalizado sugerido por Leggett[20]. Temos trabalhado principalmente em duas dimensões, pois cupretos têm sido experimentalmente encontrados com portadores bidimensionais. O capítulo 4 dá um estudo do modelo em duas e três dimensões com um potencial separável de alcance finito em diferentes ondas parciais. O trabalho explica com sucesso propriedades destes novos materiais no regime de acoplamento fraco. Com relação ao modelo BCS convencional, o presente modelo nos dá um T_c muito maior. Além disso, fornece também escalas T_c com T_F e não com T_D, como previsto pelos experimentos de Uemura e colaboradores. É também exibido um pequeno ξ sensível para estes materiais. Parâmetro de gap, temperatura crítica, potencial químico e comprimento de coerência exibem robusto escalonamento quando plotados contra B_c, que não foi observado anteriormente quando estudado com variação de B_2 ou a_s. Mas este estudo não poderia revelar a natureza universal do escalonamento, como previsto por Leggett. O escalonamento deveria ser independente dos detalhes do potencial. Gráficos de Δ_k, T_c, ξ vs ΔU exibem um escalonamento universal independente do intervalo do parâmetro em todas ondas parciais e em duas e três dimensões. Inspirados pelo sucesso do modelo em descrever algumas propriedades destes compostos, também calculamos a dependência com a temperatura de várias propriedades eletromagnéticas e termodinâmicas como entropia, calor específico, energia interna, energia livre, barreira

de penetração e suscetibilidade magnética em ondas s e d. Em ondas s, observamos a bem conhecida dependência exponencial de todas as quantidades na temperatura reduzida, mas para ondas d, observamos escalonamento com T/T_c como encontrado em vários experimentos. Os respectivos valores exponenciais tem sido apresentados no capítulo.

No capítulo 5, consideramos a singularidade de van Hove no modelo renormalizado. Empregamos três tipos de singularidades na expressão da densidade de estados: logarítmica, lei de potência, lorentziana. Os escalonamentos $\Delta(0)$ e T_c como uma função de ΔU permaneceram inalterados na presença de uma vHs. O acréscimo do salto do calor específico com T_c e a dependência da temperatura com o deslocamento Knight abaixo de T_c pode ser bem explicado neste cenário. Os resultados experimentais foram também bem concordantes com as previsões teóricas.

No capítulo 6 a simetria misturada de onda estava em acordo com os muitos experimentos e previsões teóricas. Observamos uma segunda transição de fase em T_{c1} para uma onda d dominante com suficiente mistura de onda s. O segundo salto no calor específico em T_{c1} confirma o segundo ponto de transição. Em T_{c1} observamos dependência de temperatura de lei de potência (exponencial) de $C(T), \chi(T)$, $\Delta\lambda(T)$ e $K(T)$ para $T > T_{c1}$ $(< T_{c1})$. O estado misturado $s + id$ é muito similaras ondas s sem nós na superfície de Fermi.

Todos os trabalhos precedentes tem sido feitos no contínuo por simplicidade matemática. Entendendo os resultados também trabalhamos na rede com simetria própria [112, 113, 114] e podemos concluir que nossos resultados e conclusões são independentes dela. Temos considerado muitas misturas de parâmetros de ordem, e.g. $(s + id_{x^2-y^2})$ [112], $(d_{x^2-y^2} + id_{xy})$ [113] e $(d_{x^2-y^2} + d_{xy})$ [114] empregando um modelo

BCS de energia bidimensional na rede quadrada e também distorção ortorrômbica. Nesta tese não discutimos estes trabalhos em muitos detalhes. Para uma admixture mais fraca d_{xy} (s) num estado quebrado de inversão temporal $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ $(s + id_{x^2-y^2})$ observamos uma segunda transição de fase de segunda ordem numa temperatura mais baixa T_{c1}. O estado de onda $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ $(s + id_{x^2-y^2})$ é similar ao estado de onda s sem nenhum parâmetro de ordem. A transição de fase em T_{c1} é também marcada pela dependência na temperatura de muitos observáveis. O estado de reversão temporal $d_{x^2-y^2} + d_{xy}$ é similar ao estado com tipo de onda $d_{x^2-y^2}$ com nós na superfície de Fermi no parâmetro de ordem. Consequentemente, encontramos lei de potência na dependência temporal do calor específico e suscetibilidade de spin em ondas $d_{x^2-y^2} + d_{xy}$. Os expoentes dessas leis de potência para ondas misturadas $d_{x^2-y^2} + d_{xy}$ estão muito próximos das ondas puras $d_{x^2-y^2}$. Em todos casos acima temos deixado os acoplamentos s e d em tal domínio que uma solução de onda acoplada $d_{x^2-y^2} + i\chi$, $d_{x^2-y^2} + d_{xy}$ é definida onde χ pode ser estado s ou d_{xy}.

Concluímos nossa tese com a mais frequente questão de muitos pesquisadores do campo da supercondutividade. "Teremos supercondutores a temperatura ambiente?". Esse idéia foi seriamente discutida vinte anos antes da descoberta de cupretos por W. A. Little [115]. Ele não poderia prever supercondutividade em materiais óxidos de cobre, mas considerou a possibilidade de supercondutividade a temperatura ambiente em longas cadeias de moléculas. Aplicou então os cálculos da teoria BCS em uma hipotética molécula policonjugada (cadeias de moléculas com ligações única e dupla) e obteve uma incrível temperatura de 2000 K como transição. Seria fácil provar a existência de um material que se torna supercondutor

a uma temperatura muito maior se o mecanismo de supercondutividade em cupretos fosse conhecido. Mas, existem muitos trabalhos experimentais prevendo supercondutividade em torno de 250 K, porém sem nunca terem sidos reproduzidos em outros laboratórios, um requisito necessário para a aceitação pela comunidade científica. Uma lista de alguns exemplos publicados, mas nunca reproduzidos, é apresentada na tabela 7.1 [116].

Tabela 7.1. (a) Exemplos de Observações publicadas mas não reproduzidas de supercondutores de alta temperatura.

Composição	T_c(K)
$YBaSrMCuO_{7-x}$	340
$BiSrCaCu_8O_{6+x}$	270
$Y_2BaSrCu_3O_8$	250
$Bi_{1.9}Pb_{0.4}Sr_{1.9}Ca_2Cu_{3.2}O_x$	240
$Bi_2Sr_2CuO_{6+x}$	300
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_x$	235
$Ca_{1-x}Sr_xCuO_2$	180

Então, embora haja apenas uma pequena esperança de um supercondutor a temperatura ambiente, tem havido uma grande procura nos últimos anos. Em 1992 um grupo de pesquisadores em um *workshop* em Bodega Bay, California, reuniram-se para discutir a possibilidade de se fazer um supercondutor de temperatura mais alta.

Algumas das idéias que surgiram da discussão foram[117]:

- Materiais poderiam ser acomodados em camadas com um ou mais planos capazes de conduzir um elétron ou um buraco; estes planos são CuO em cupretos.
- Estados localizados no plano de condução teriam uma rede de spin meio; cobre em supercondutores óxidos de cobre teriam uma rede de spin meio.
- Entre as camadas de planos condutores, teriam camadas de outros íons que agem como portadores de carga para os planos condutores dopados.
- A concentração de portadores em planos deveria ser tal que o sistema estivesse próximo a uma transição de metal isolante. Em supercondutores de óxido de cobre, há geralmente uma concentração de buracos onde o material não é supercondutor, mas pode sofrer uma transição de metal isolado.
- Um material não dopado, por exemplo $LaCuO_4$ sem Sr, deveria mostra ordenação antiferromagnética.
- Numa analogia com supercondutores orgânicos, supercondutores candidatos poderiam ser materiais unidimensionais mostrando flutuações supercondutoras e transições metal-isolante, ou sujeitando possíveis supercondutores a pressão ou dopagem, então, com aditivos apropriados para incrementar a dimensionalidade.

Assim, esperamos que, no futuro próximo, o mundo veja um explicação para o mecanismo de supercondutividade em cupretos, e possivelmente supercondutores a temperatura ambiente.

Referências

[1] K. Onnes Leiden Comm. **120b, 122b, 124c** (1911).

[2] J. R. Gavaler, Appl. Phys. Lett. **23**, 480 (1973).

[3] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957); J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, (Benjamin, New York, 1964).

[4] J. G. Bednorz and K. A. Muller, Z. Phys. B. **64**, 189 (1986).

[5] S. N. Putilin, E. V. Antipov, O. Chmaissen and M. Marezio Nature **362**, 226 (1993).

[6] A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo and H. R. Ott Nature **363**, 56 (1993).

[7] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity* 2nd ed., McGraw Hill, New York (1997).

[8] J. R. Schrieffer, X. G. Wen ans S. C. Zhang, Phys Rev. Lett 60, 944 (1988); Phys. Rev. B. **39**, 11663 (1989).

[9] A. J. Mills, H. Monien and D. Pines, Phys. Rev. B. **42**, 1667 (1990).

[10] N. E. Bickers, D. J. Scalapino and S. R. White, Phys. Rev. Lett. **62**, 961 (1989).

[11] K. Miyake, S. Schmitt-Rink and C. M. Varma, Phys. Rev. B. **34**, 6554 (1986).

[12] D. M. Newns, P. C. Pattnaik and C. C. Tsuei, Phys. Rev. B. **43**, 3075 (1991).

[13] J. E. Hirsch and F. Marsigilio, Phys. Rev. B **39** 11515 (1989).

[14] A. Virosztek and J. Ruvalds, Phys. Rev. B **42**, 4064 (1990).

[15] E. Dagotto, A. Nazarenko and M. Boninsegni, Phys. Rev. Lett. **73**, 728 (1994).

[16] P. W. Anderson, Phys. Rev. B **42**, 2624 (1990).

[17] R. B. Laughlin, Science **242**, 525 (1988); Phys. Rev. Lett. **60**, 2677 (1988).

[18] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **63**, 1996 (1989).

[19] N. Nagaosa and P. A. lee, Phys. Rev. Lett. **64**, 2450 (1990).

[20] A. J. Leggett, J. Phys. (Paris) Colloq. **41**, C7-19 (1980).

[21] S. K. Adhikari and A. Ghosh, Phys. Rev.B **55**, 1110 (1997).

[22] S K Adhikari and A Ghosh J. Phys.: Cond. Mat. **10** 135 (1998).

[23] A Ghosh and S K Adhikari Euro. Phys. J. B, **2** 31 (1998).

[24] A. Ghosh Braz. J. Phys. **29**, ***, (1999).

[25] A Ghosh and S K Adhikari J. Phys.: Cond. Mat. **10**, L311 (1998).

[26] L. Landau, Soviet Physics JETP **3** 920 (1957).

[27] J. File and R. G. Mills, Phys. Rev. Lett. **10**, 93 (1963).

[28] W. Meissner and R. Ochsenfeld, Naturwissenschaft **21**, 787 (1933).

[29] F. and H. London Proc. Roy. Soc. (London), **A149** , 71 (1935).

[30] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksp. i. Teor. Fiz. **20**, 1064 (1950).

[31] L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).

[32] D. R. Tilley and J. Tilley, *Superfluidity and Superconductivity*, Institute of Physics, Bristol (1990).

[33] G. Baskaran, Z. Zou and P. W. Anderson, Solid State Commun.

[34] A. B. Pippard, Proc. Roy. Soc. (London), **A216** , 547 (1953).

[35] G. Rickayzen in *Superconductivity* ed. R. D. Parks Marcel dekker, New York (1969).

[36] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. H. Huang, Y. Q. Wang amd C. W. Chu, Phys. Rev. Lett. **58**, 908 (1987).

[37] H. Maeda et al. Jpn. J. Appl. Phys. **27**, L809 (1988).

[38] Z. Z. Sheng and A. M. Herman, Nature **232**, 55 (1988).

[39] C. W. Chu, L. Gao, F. Chen, Z. J. Huang, R. L. Meng and Y. Y. Xue Nature **365**, 323 (1993).

[40] M. Nuñez-Regueiro, J. L. Tholence, E. V. Antipov, J. J. Capponi and M. Marezio, Science **262**, 97 (1993).

[41] G. Burns, *High-Temperature Superconductivity : An Introduction*, Academy Press, Inc, San Diego, (1992).

[42] R. J. Cava, R. B. van Dover, B. Batlogg and E. A. Rietman, Phys. Rev. Lett. **58**, 408 (1987)

[43] L. F. Mattheis, E. M. Gyorgy and D. W. Johnson Jr., Phys. Rev. B **37**, 3745 (1988).

[44] R. J. Cava, B. Batlogg, J. J. Krajewski, R. Farrow, L. W. Rupp Jr, A. E. White, K. Short, W. F. Peck and T. Kometani, Nature **332**, 814 (1988).

[45] M. J. Rosseinsky, A. P. Ramirez, S. H. Glarum, D. W. Murphy, R. C. Haddon, A. F. Hebard, T. T. M. Palstra, A. R. Kortan, S. M. Zahurak and A. V. Makhija Phys. Rev. lett. **66**, 2830 (1991).

[46] K. Holczer, O. Klein, S. M. Huang, R. B. Kaner, K. J. Fu, R. L. Whetten and F. Diederich, Science **252**, 1154 (1991).

[47] see for example B. G. Levi, Physics Today **20**, March(1990); and references therein

[48] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).

[49] T. R. Chien, Z. Z. Wang and N. P. Ong, Phys. Rev. Lett. **67**, 2008 (1991).

[50] P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **67**, 2092 (1991).

[51] K. Levin, J. H. Kim, J. P. Lu and Q. Si, Physica C **175**,]449 (1991).

[52] S. L. Cooper and K. E. Gray in *Physical Proeprties of High Temperature Superconductors IV*, ed. by D. M. Ginsberg (World Scientific, Singaore, 1994), ch 3.

[53] H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano, T. Takahashi, M. Randeria, M. R. Norman, T. Mochiku, K. Kadowaki and J. Giapintzakis, Nature **382**, 51 (1996).

[54] M. B. Maple, preprint cond-mat/9802218

[55] B. Batlogg in *High Temperature Superonductivity; Proc. Los Alamos Symp.* 1989

[56] W. N. Hardy, D. A. Bonn, D. C. Morgan, R. Liang and K. Zhang, Phys. Rev. Lett. **70** 3999 (1993).

[57] D. A. Bonn, R. Liang, T. M. Riseman, D. J. Baar, D. C. Morgan, K. Zhang, P. Dosanjh, T. L. Duty, A. MacFarlane, G. D. Morris, J. H. Brewer, W. N. Hardy, C. Kallin and A. J. Berlinsky Phys. Rev. B **47** 11314 (1993).

[58] J. A. Martindale, S. E. Barrett, K. E. O'Hara, C. P. Slichter, W. C. Lee and D. M. Ginsberg Phys. Rev. B **47** 9155 (1993).

[59] K. A. Moler, D. J. Baar, J. S. Urbach, R. Liang, W. N. Hardy and A. Kapitulnik, Phys. Rev. Lett. **73** 2744 (1994).

[60] H. Aubin, K. Behnia, M. Ribault, R. Gagnon and L. Taillefer, Phys. Rev. Lett. **78** 2624 (1997).

[61] Z. X. Shen, D. S. Dessau, B. O. WElls, D. M. King, W. E. Spicer, A. J. Arko, D. Marshall, L. W. Lombardi, A. Kapitulnik, P. Dickenson, S. Doniach, J. DiCarlo, T. Loeser, and C. H. Park, Phys. Rev. Lett. **70** 1553 (1993).

[62] D. Mandrus, J. Hartge, C. Kendiziora, L. Mihaly and L. Forro Euro. Phys. Lett. **22**, 460 (1990).

[63] D. Coffey and L. Coffey, Phys. Rev. Lett. **70** 1529 (1993).

[64] T. P. Deveraux, D. Einzel B. Stadlober, R. Hackl, D. H. Leach and J. J. Neumeier, Phys. Rev. Lett. **72** 396 (1994).

[65] D. H. Wu, J. Mao, S. N. Mao, J. L. Peng, X. X. Xi, R. L. Greene and S. M. Anlage, Phys. Rev. Lett. **70** 85 (1993).

[66] S. M. Anlage, D. H. Wu, J. Mao, S. N. Mao, X. X. Xi, T. Venkatesan, J. L. Peng and R. L. Greene, Phys. Rev. B **50** 523 (1994).

[67] B. Stadlober, G. Krug, R. Nemetschek, R. Hackl, J. L. Cobb and J. T. Markert, Phys. Rev. Lett. **74** 4911 (1995).

[68] D. A. Wollman, D. J. Harlingen, W. C. Lee, D. M. Ginsberg and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **71**, 2134 (1993).

[69] D. A. Brauner and H. R. Ott, Phys. Rev. B **50**, 6530 (1994).

[70] A. Mathai, Y. Gin, R. C. Black, A. Amar and F. C. Wellstood, Phys. Rev. Lett. **74**, 4523 (1995).

[71] D. A. Wollman, D. J. Harlingen, J. Gianpintzakis and D. M. Ginsberg, Phys. Rev. Lett. **74**, 797 (1995).

[72] J. H. Miller, Q. Y. Ying, Z. G. Zou, N. Q. Fan, J. H. Xu, M. F. Davis and J. C. Wolfe Phys. Rev. Lett. **74**, 2347 (1995).

[73] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, C. C. Chi, L. S. Yu-Jahnes, A. Gupta, J. Z. Sun and M. B. Ketchen Phys. Rev. Lett. **72**, 593 (1994).

[74] J. R. Kirtley, C. C. Tsuei, J. Z. Sun, C. C. Chi, L. S. Yu-Jahnes, A. Gupta, M. Kupp and M. B. Ketchen Nature **373**, 225 (1995).

[75] C. C. Tsuei,J. R. Kirtley, M. Kupp, J. Z. Sun, A. Gupta, M. B. Ketchen C. A. Wang, Z. F. Ren, J. H. Wang and M. Bhushan, Science **271**, 329 (1996).

[76] A. G. Sun, D. A. Gajewski, M. B. Maple, and R. C. Dynes, Phys. Rev. Lett. **72**, 2267 (1994).

[77] A. G. Sun, S. H. Han, A. S. Katz, D. A. Gajewski, M. B. Maple, and R. C. Dynes, Phys. Rev. B **52**, R15731 (1995).

[78] J. Lesueur, M. Aprili, A. Goulan, T. J. Horton and L. Dumolin, Phys. Rev. B **55**, 3308 (1997).

[79] A. G. Sun, A. Truscott, A. S. Katz, R. C. Dynes, B. W. Veal and C. Gu, Phys. Rev. B **54**, 6734 (1996).

[80] R. Kleiner, A. S. Katz, A. G. Sun, R. Summer, D. A. Gajewski, S. H. Han, S. I. Woods, E. Dantsker, B. Chen, K. Char, M. B. Maple, R. C. Dynes and J. Clarke, Phys. Rev. Lett. **76**, 2161 (1996).

[81] P. Chaudhuri and S. Y. Lin, Phys. Rev. Lett. **72**, 1084 (1994).

[82] K. A. Kouznetsov A. G. Sun, B. Chen, A. S. Katz, S. R. Bachall, J. Clarke, R. C. Dynes, D. A. Gajewski, S. H. Han, M. B. Maple, J. Giapintzakis, J. T. Kim and D. M. Ginsberg, Phys. Rev. Lett. **79**, 3050 (1997).

[83] K. Krishana N. P. Ong, Q. Li, G. D. Gu and N. Koshizuka Science **277** 83 (1997).

[84] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **80** 5188 (1998).

[85] K. Miyake, Prog. Theor. Phys. **69**, 1794 (1983).

[86] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985);

[87] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).

[88] M. Drechsler and W. Zwerger, Ann. Physik **1**, 15 (1992).

[89] H. Ding, Nature **382**, 51 (1996);

N. Trivedi and M. Randeria, Phys. Rev. Lett. **75**, 312 (1995).

[90] M. Casas, J. M. Getino, M. de Llano, A. Puente, R. M. Quick, H. Rubio and D. M. van der Walt, Phys. Rev. B **50**, 15945 (1994).

[91] M. Randeria, J-M. Duan, and L-Y. Shieh, Phys. Rev. Lett. **62**, 981 (1989);

Phys. Rev. **B41**, 327 (1990).

[92] R. Fehrenbacher and M. R. Norman, Phys. Rev. Lett. **74**, 3884 (1995);

D. J. Scalapino, Phys. Rep. **250**, 329 (1995);

J. P. Carbotte and C. Jiang, Phys. Rev. B **48**, 4231 (1993);

B. G. Levi, Phys. Today **49**, 19 (1996).

[93] C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria, and J. R. Engelbrecht, Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993).

[94] D M Newns , C C Tsuei, P C Pattnaik and C L Kane Comments Condens. Matter Phys. **15**, 273 (1995).

[95] Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, H. Yamochi, Phys. Rev. Lett. **66**, 2665 (1991).

[96] J. Annett, N. Goldenfeld, and S. R. Renn, Phys. Rev. B **43** 2778 (1991).

[97] M. Prohammer, A. Perez-Gonzalez, and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **47**, 15152 (1993).

[98] S. K. Adhikari, Am. J. Phys. **84**, 362 (1986).

[99] For an account of renormalization in quantum mechanics, see,

S K Adhikari and A Ghosh J. Phys. A **30**, 6653 (1997);

A. Ghosh, S. K. Adhikari and B. Talukdar, Phys. Rev. C **58**, 1913 (1998).

[100] J E Hirsch and D J Scalapino Phys. Rev. Lett. **56** 2732 (1986).

[101] S Sarkar and A N Das Phys. Rev. B **54**, 14974 (1996).

[102] S Dorbolo , M Houssa and M Ausloos Physica C **267**, 24 (1996).

[103] K Gofron, J. C. Campuzano and A. A. Abriskov, Phys. Rev. Lett. **73** 3302 (1994).

[104] D. M. King, Z. X.Shen and D. S. Dessau Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).

[105] M. Daumling Physica C **185-189**, 755 (1991).

[106] N. E. Phillips, R. A. Fisher, J. E. Gordon, S. Kim, A. M. Stacy, M. K. Crawford and E. M. McCarron, III, Phys. Rev. Lett. **65**, 357 (1990).

[107] M. Takigawa, P. C. Hammel, R. H. Heffner, Z. Fisk, K. C. Ott and J. D. Thompson, Physica C **162-164**, 853 (1989).

[108] A. E. Ruckenstein, P. Hirscfeld and J. Appell, Phys. Rev. B **36**, 857 (1987).

[109] J. H. Xu, J. L. Shen, J. H. Miller Jr and C. S. Ting Phys. Rev. Lett. **73**, 2492 (1994);

Q. P. Li, B. E. C. Koltenbah and R. Joynt, Phys. Rev. B, **48**, 437 (1993).

[110] M. Liu, D. Y. Xing and Z. D. Wang, Phys. Rev. B **55**, 3181 (1997);

K. A. Musaelin, J. Betouras, A. V. Chubukov and R. Joynt, Phys. Rev. B **53**, 3598 (1996);

Y. Ren, J. H. Xu and C. S. Ting, Phys. Rev. B **53**, 2249 (1996);

A. J. Mills, H. Monnin and D. Pines Phys. Rev. B **42**, 167 (1990);

C O'Donovan and J. P. Carbotte Physica C **252**, 87 (1995);

M. T. Beal-Monod and K. Maki Physica C **265**, 309 (1996);

M. T. Beal-Monod and K. Maki Phys Rev. B **53**, 5775 (1996).

[111] S. Sridhar, H. Srikanth, Z. Zhai, B. A. Willemsen, T. Jacobs, A. Erb, E. Walker and R. Flukiger Physica C **282-287**, 256 (1997).

[112] A. Ghosh and S. K. Adhikari, Physica C (in press).

[113] A. Ghosh and S. K. Adhikari Physica C **309**, 251 (1998).

[114] A. Ghosh and S. K. Adhikari, Phys. Rev. B (in press).

[115] W. A. Little, *Superconductivity at room temperature*, Scientific American Feb (1965).

[116] F. J. Owens and C. P. Poole Jr, *Selected Topics in Superconductivity; The New Superconductors*, Plenum press, New York (1996).

[117] T. H. Geballe, Science **259**, 1550 (1993); Physica C **209**, 13 (1993).

[74] J. R. Kirtley, C. C. Tsuei, J. Z. Sun, C. C. Chi, L. S. Yu-Jahnes, A. Gupta, M. Kupp and M. B. Ketchen Nature **373**, 225 (1995).

[75] C. C. Tsuei,J. R. Kirtley, M. Kupp, J. Z. Sun, A. Gupta, M. B. Ketchen C. A. Wang, Z. F. Ren, J. H. Wang and M. Bhushan, Science **271**, 329 (1996).

[76] A. G. Sun, D. A. Gajewski, M. B. Maple, and R. C. Dynes, Phys. Rev. Lett. **72**, 2267 (1994).

[77] A. G. Sun, S. H. Han, A. S. Katz, D. A. Gajewski, M. B. Maple, and R. C. Dynes, Phys. Rev. B **52**, R15731 (1995).

[78] J. Lesueur, M. Aprili, A. Goulan, T. J. Horton and L. Dumolin, Phys. Rev. B **55**, 3308 (1997).

[79] A. G. Sun, A. Truscott, A. S. Katz, R. C. Dynes, B. W. Veal and C. Gu, Phys. Rev. B **54**, 6734 (1996).

[80] R. Kleiner, A. S. Katz, A. G. Sun, R. Summer, D. A. Gajewski, S. H. Han, S. I. Woods, E. Dantsker, B. Chen, K. Char, M. B. Maple, R. C. Dynes and J. Clarke, Phys. Rev. Lett. **76**, 2161 (1996).

[81] P. Chaudhuri and S. Y. Lin, Phys. Rev. Lett. **72**, 1084 (1994).

[82] K. A. Kouznetsov A. G. Sun, B. Chen, A. S. Katz, S. R. Bachall, J. Clarke, R. C. Dynes, D. A. Gajewski, S. H. Han, M. B. Maple, J. Giapintzakis, J. T. Kim and D. M. Ginsberg, Phys. Rev. Lett. **79**, 3050 (1997).

[83] K. Krishana N. P. Ong, Q. Li, G. D. Gu and N. Koshizuka Science **277** 83 (1997).

[84] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **80** 5188 (1998).

[85] K. Miyake, Prog. Theor. Phys. **69**, 1794 (1983).

[86] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985);

[87] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).

[88] M. Drechsler and W. Zwerger, Ann. Physik **1**, 15 (1992).

[89] H. Ding, Nature **382**, 51 (1996);

N. Trivedi and M. Randeria, Phys. Rev. Lett. **75**, 312 (1995).

[90] M. Casas, J. M. Getino, M. de Llano, A. Puente, R. M. Quick, H. Rubio and D. M. van der Walt, Phys. Rev. B **50**, 15945 (1994).

[91] M. Randeria, J-M. Duan, and L-Y. Shieh, Phys. Rev. Lett. **62**, 981 (1989);

Phys. Rev. **B41**, 327 (1990).

[92] R. Fehrenbacher and M. R. Norman, Phys. Rev. Lett. **74**, 3884 (1995);

D. J. Scalapino, Phys. Rep. **250**, 329 (1995);

J. P. Carbotte and C. Jiang, Phys. Rev. B **48**, 4231 (1993);

B. G. Levi, Phys. Today **49**, 19 (1996).

[93] C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria, and J. R. Engelbrecht, Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993).

[94] D M Newns , C C Tsuei, P C Pattnaik and C L Kane Comments Condens. Matter Phys. **15**, 273 (1995).

[95] Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, H. Yamochi, Phys. Rev. Lett. **66**, 2665 (1991).

[96] J. Annett, N. Goldenfeld, and S. R. Renn, Phys. Rev. B **43** 2778 (1991).

[97] M. Prohammer, A. Perez-Gonzalez, and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **47**, 15152 (1993).

[98] S. K. Adhikari, Am. J. Phys. **84**, 362 (1986).

[99] For an account of renormalization in quantum mechanics, see,

S K Adhikari and A Ghosh J. Phys. A **30**, 6653 (1997);

A. Ghosh, S. K. Adhikari and B. Talukdar, Phys. Rev. C **58**, 1913 (1998).

[100] J E Hirsch and D J Scalapino Phys. Rev. Lett. **56** 2732 (1986).

[101] S Sarkar and A N Das Phys. Rev. B **54**, 14974 (1996).

[102] S Dorbolo , M Houssa and M Ausloos Physica C **267**, 24 (1996).

[103] K Gofron, J. C. Campuzano and A. A. Abriskov, Phys. Rev. Lett. **73** 3302 (1994).

[104] D. M. King, Z. X.Shen and D. S. Dessau Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).

[105] M. Daumling Physica C **185-189**, 755 (1991).

[106] N. E. Phillips, R. A. Fisher, J. E. Gordon, S. Kim, A. M. Stacy, M. K. Crawford and E. M. McCarron, III, Phys. Rev. Lett. **65**, 357 (1990).

[107] M. Takigawa, P. C. Hammel, R. H. Heffner, Z. Fisk, K. C. Ott and J. D. Thompson, Physica C **162-164**, 853 (1989).

[108] A. E. Ruckenstein, P. Hirscfeld and J. Appell, Phys. Rev. B **36**, 857 (1987).

[109] J. H. Xu, J. L. Shen, J. H. Miller Jr and C. S. Ting Phys. Rev. Lett. **73**, 2492 (1994);

Q. P. Li, B. E. C. Koltenbah and R. Joynt, Phys. Rev. B, **48**, 437 (1993).

[110] M. Liu, D. Y. Xing and Z. D. Wang, Phys. Rev. B **55**, 3181 (1997);

K. A. Musaelin, J. Betouras, A. V. Chubukov and R. Joynt, Phys. Rev. B **53**, 3598 (1996);

Y. Ren, J. H. Xu and C. S. Ting, Phys. Rev. B **53**, 2249 (1996);

A. J. Mills, H. Monnin and D. Pines Phys. Rev. B **42**, 167 (1990);

C O'Donovan and J. P. Carbotte Physica C **252**, 87 (1995);

M. T. Beal-Monod and K. Maki Physica C **265**, 309 (1996);

M. T. Beal-Monod and K. Maki Phys Rev. B **53**, 5775 (1996).

[111] S. Sridhar, H. Srikanth, Z. Zhai, B. A. Willemsen, T. Jacobs, A. Erb, E. Walker and R. Flukiger Physica C **282-287**, 256 (1997).

[112] A. Ghosh and S. K. Adhikari, Physica C (in press).

[113] A. Ghosh and S. K. Adhikari Physica C **309**, 251 (1998).

[114] A. Ghosh and S. K. Adhikari, Phys. Rev. B (in press).

[115] W. A. Little, *Superconductivity at room temperature*, Scientific American Feb (1965).

[116] F. J. Owens and C. P. Poole Jr, *Selected Topics in Superconductivity; The New Superconductors*, Plenum press, New York (1996).

[117] T. H. Geballe, Science **259**, 1550 (1993); Physica C **209**, 13 (1993).