

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

CLEVERTON OLIVEIRA DIAS

TEORIA BCS COM EFEITO RASHBA

Dissertação apresentada como requisito para obtenção do título de mestre junto ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas.

Orientador: Prof. Dr. Hidembergue Ordozgoith da Frota

Manaus, AM
Novembro de 2015

Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

D541t Dias, Cleverton Oliveira
Teoria BCS com efeito Rashba / Cleverton Oliveira Dias. 2015
58 f.: il. color; 31 cm.

Orientador: Hidembergue Ordozgoith da Frota
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas.

1. Teoria BCS. 2. Efeito Rashba. 3. Propriedades Termodinâmicas . 4. Gaps de Energia. I. Frota, Hidembergue Ordozgoith da II. Universidade Federal do Amazonas III. Título

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Contexto histórico	1
1.2	Resumo de algumas propriedades do estado supercondutor	7
1.2.1	Resistividade Nula	7
1.2.2	Destruição da supercondutividade por campos magnéticos	9
1.2.3	Efeito Meissner	10
1.2.4	Estrutura Cristalina	14
1.2.5	Calor específico eletrônico	14
1.2.6	Bandas proibidas	14
1.2.7	Condutividade Térmica	16
1.2.8	Efeito Isótopo	16
2	Teoria BCS	19
2.1	Introdução	19
2.2	Interação elétron-rede	20
2.3	Pares de Cooper	21
2.4	O estado fundamental BCS	25
2.4.1	A função de onda BCS	25
2.4.2	Método variacional	26
3	Hamiltoniano de Rashba	30
4	Hamiltoniano do Modelo	35
4.1	Introdução	35
4.2	Diagonalização do Hamiltoniano	36
4.2.1	Primeiro passo	36
4.2.2	Segundo Passo	39
5	Resultados e Discussão	44
5.1	Determinação do Gap $\Delta_{\vec{k}}$	44
5.1.1	Relação entre o gap e a temperatura	45
5.2	Propriedades Termodinâmicas	50
5.2.1	A descontinuidade do calor específico de um supercondutor	50
5.2.2	O campo magnético no efeito de transição	51
6	Conclusões	54

Lista de Figuras

1.1	K. Onnes, o cientista que descobriu a supercondutividade. Fonte: The American Physical Society (2007) [4].	3
1.2	Esquema representativo do campo magnético devido uma corrente elétrica em uma espira supercondutora. Fonte: Autoria própria (2015).	3
1.3	Representação esquemática do efeito Meissner, pelo qual, no interior do supercondutor, o campo magnético aplicado é cancelado pelo campo magnético gerado pelas correntes superficiais, cujo módulo é igual ao do campo aplicado e sentido contrário, resultando em um campo magnético total nulo [6]. Assim, dizemos que o campo magnético é expulso do interior do supercondutor. Fonte: Autoria própria (2015).	5
1.4	Evolução da temperatura crítica ao longo dos anos, desde 1911, ano da descoberta da supercondutividade por Kamerlingh Onnes. Verifica-se o crescimento da temperatura crítica quase linear até a década de 1970, com um crescimento vertiginoso entre o final da década de 1980 e o início da década de 1990, após o que parece estar sofrendo uma nova inflexão no sentido de estabilização. Fonte: IX Escola CBPF (2012) [10].	8
1.5	Medida histórica da resistividade do mercúrio em função da temperatura realizada por Kamerlingh Onnes em 1911. A resistividade diminui linearmente com a temperatura até atingir a temperatura de 4,2 K. Nessa temperatura a resistividade cai abruptamente para 10^{-5} Ohms, descortinando-se, pela primeira vez, um material supercondutor. Fonte: H. Kamerlingh Onnes (1911) [2].	9
1.6	Variação do campo magnético crítico H_c com a temperatura, com duas regiões representando os estados normal (região externa à curva) e supercondutor (região interna à curva). Fonte: Tinkhan (1996) [5].	10
1.7	Fluxo magnético no interior dos supercondutores do tipo I e do tipo II. No supercondutor tipo I existe um campo magnético externo H_c abaixo do qual o fluxo magnético interno é nulo. No caso do supercondutor tipo II, o fluxo magnético é totalmente nulo para campo externo menor que H_{c1} , apresentado o efeito Meissner, com o material no estado supercondutor. Entretanto, existe um intervalo $H_{c1} < H < H_{c2}$ em que o sistema apresenta simultaneamente as características de metal normal e de supercondutor. Para $H > H_{c2}$ o sistema encontra-se completamente no estado normal. Fonte: Tinkhan (1996) [5].	12

1.8	O campo magnético externo H_{c1} e H_{c2} em função da temperatura T . Existe uma região entre as curvas $H_{c1}(T)$ e $H_{c2}(T)$ em que coexistem simultaneamente o estado normal e o estado supercondutor, identificado na figura como estado misto. Fonte: Tinkhan (1996) [5].	13
1.9	Esboço do calor específico correspondente a um material no estado normal e no estado supercondutor para temperaturas muito baixas. Para o estado normal o calor específico varia linearmente com a temperatura. Por outro lado, para um material que tem a propriedade de supercondutor, para temperaturas maiores que a temperatura crítica comporta-se como um metal normal. Baixando a temperatura, ao atingir a temperatura crítica T_c , o calor específico sofre uma descontinuidade e cai exponencialmente para zero devido à criação do gap no nível de Fermi. Fonte: Tinkhan (1996) [5].	15
1.10	Lacuna de energia associada a superfície de Fermi. Fonte: Autoria própria (2015).	15
1.11	Em (a) temos a banda de condução do estado normal e em (b) a banda proibida para o estado supercondutor. Fonte: Autoria própria (2015). . .	16
1.12	Condutividade térmica do chumbo (κ) em função da temperatura T . Os pontos na parte superior indicam o estado normal e os pontos na parte inferior representam o estado supercondutor. Verifica-se que no estado supercondutor o chumbo apresenta baixa condutividade térmica. Fonte: Adaptado do trabalho original de Watson e Graham [15].	17
2.1	Quando um elétron passa através da rede cristalina, em razão da interação atrativa entre elétron e íon, os íons são atraídos por esse elétron. Em consequência disso, o elétron seguinte passando pela mesma região da rede é atraído diretamente pelos íons que se deslocaram devido a passagem do primeiro elétron. Aquele (o elétron seguinte) acompanha as deformações da rede cristalina formadas ao longo da trajetória deste (o primeiro elétron). Assim, indiretamente os elétrons se atraem, mediados pela rede cristalina, formando um par de elétrons, conhecido como par de Cooper. Fonte: Autoria própria (2015).	21
2.2	Analogia da formação dos pares de Cooper, devido à deformação da rede cristalina pelos elétrons que se movem através da mesma, com o movimento de duas bolas de bilhar sobre um colchão de água. Quando se lança uma primeira bola sobre o colchão de água, ela se movimenta formando sulcos que canalizam o movimento de uma segunda bola lançada sobre o colchão, deixando a impressão que ambas formam um par de bolas de bilhar que se atraem, ao mesmo tempo que se movimentam ao longo do colchão. Fonte: RBF (1998) [6].	22
2.3	Pares de Cooper, antes e depois do espalhamento. Fonte: Autoria própria (2015).	24
2.4	Aqui observamos o intervalo de energia em que $V_{\vec{k},\vec{k}'} = -V$. Fonte: IX Escola CBPF (2012) [10].	24
3.1	Partícula livre transitando sob o efeito de um Campo elétrico. Fonte: Autoria própria (2015).	31

5.1	Valores de Δ em função da temperatura ($k_B T$) para o caso em que não existe o efeito Rashba, isto é, $\bar{\alpha}_R = 0$. Nesse caso recupera-se os valores obtidos pela teoria BCS. Fonte: Autoria própria (2015).	47
5.2	Gaps de energia de um supercondutor sob o efeito Rashba. Fonte: Autoria própria (2015).	48
5.3	Relação entre a constante de Rashba $\bar{\alpha}_R$ e a temperatura crítica T_c de um supercondutor descrito pela teoria BCS. Fonte: Autoria própria (2015). . .	49
5.4	Gráfico do desnível entre o calor específico no estado supercondutor pelo calor específico no estado normal em função do α de Rashba. Fonte: Autoria própria (2015).	51
5.5	Campo magnético crítico em função da temperatura. Fonte: Autoria própria (2015).	53

Lista de Tabelas

1.1	Valores de T_c para alguns elementos químicos. Fonte: RBF (1998) [6]. . . .	9
1.2	Valores experimentais de α em $M^\alpha T_c = const.$, M é a massa isotópica. Fonte: (Kittel, p. 362) [16].	18
A.1	Unidades	56

RESUMO

A presente dissertação consiste em apresentar de forma sistemática os supercondutores tradicionais, levando em consideração sua descoberta, as propriedades que os caracterizam, a teoria que os descrevem e as mudanças que ocorrem em suas propriedades termodinâmicas quando submetidos à interação spin-órbita de Rashba.

Na primeira parte são discutidos os tópicos fundamentais referentes ao fenômeno da supercondutividade. Inicia-se o capítulo 1 com uma abordagem da evolução histórica da supercondutividade e a apresentação das propriedades que caracterizam um supercondutor convencional, além de definir supercondutores tipo I (convencionais) e tipo II. O capítulo 2 destina-se a uma explanação da teoria microscópica BCS, cuja aplicação está associada a supercondutores de tipo I, ainda neste capítulo argumenta-se sobre a interação dos elétrons com a rede, formando assim o que chamamos de pares de Cooper.

O capítulo 3 destina-se a apresentar o modelo de Rashba, que pode ser verificado de duas maneiras: por geração espontânea de campo elétrico na interface da junção de dois materiais ou em razão da aplicação de um campo elétrico externo. No trabalho não se levará em conta a maneira que será produzido esse campo elétrico. No capítulo 4 apresenta-se o Hamiltoniano do modelo, que consiste na junção do Hamiltoniano BCS com o Hamiltoniano de Rashba, a partir deste modelo pretende-se calcular o efeito da interação de Rashba, sobre os gaps de energia utilizando o método das transformações canônicas, que consiste em avaliar a evolução temporal do operador em questão por meio de uma equação de evolução dinâmica, o que nos permitirá encontrar os autovetores de energia e seus respectivos autovalores e associa-los aos gaps de energia.

Como consequência do capítulo 4, no capítulo 5 determinaremos o gap do supercondutor em função da temperatura e do parâmetro de Rashba α_R , bem como as propriedades termodinâmicas do modelo estudado, neste capítulo também abre-se um espaço para comentários e discussões. Finalizamos com o capítulo 6, apresentando conclusões parciais, relacionadas a análise de algumas curvas feitas a partir de dados numéricos, estas curvas permitirão analisar a variação nas propriedades termodinâmicas dos supercondutores devido o efeito Rashba.

Palavras-chave: Teoria BCS, Efeito Rashba, Propriedades termodinâmicas.

ABSTRACT

This dissertation presents systematically the traditional superconductors, taking into account its discovery, properties that characterize the theory describing and changes taking place in their thermodynamic properties when subject to spin-orbit interaction Rashba.

In the first part are the key topics discussed related to phenomenon of superconductivity. It begins with a chapter 1 approach of the historical evolution of superconductivity and presentation properties that characterize a conventional superconductor, in addition to define superconductors Type I (conventional) and type II. The Chapter 2 is intended for an explanation of the microscopic BCS theory whose application is associated with type I superconductors, although this chapter argue about the interaction of electrons with the network, thus forming what is called Cooper pairs.

The Chapter 3 is intended to introduce the Rashba model, which can be verified in two ways: by spontaneous generation of electric field the junction interface of two materials or because application of the an external electric field. In work not take into account the so that will be produced this electric field. In Chapter 4 it shows the model Hamiltonian that constitutes the junction BCS Hamiltonian with the Hamiltonian of Rashba, from this model it is intended to calculate the effect of Rashba interaction on the gap energy using the method of canonical transformations, consisting to assess the evolution of the operator concerned by a equation of dynamic evolution, allowing us find the self energy carriers and their respective eigenvalues and associates them to gaps of energy.

As a result of Chapter 4, Chapter 5 determine the gap superconductor function of temperature and the parameter α_R Rashba and as the thermodynamic properties of the model studied in this chapter also opens a space for comments and discussions. We end with Chapter 6, presenting partial conclusions, Related analytical curve made from certain data numerical, these curves will analyze the variation in thermodynamic properties of superconductors because the effect Rashba.

Key-words: BCS theory. Rashba effect, thermodynamic properties.

Capítulo 1

Introdução

Por décadas os fenômenos fundamentais da supercondutividade são estudados por cientistas de todos os lugares, os motivos para tais estudos são muitos, que vão desde aplicações, até explicação dos fenômenos termodinâmicos dos supercondutores.

Neste trabalho se estudará a supercondutividade representada pela teoria BCS, associada a interação spin-órbita de Rashba. Dentre muitos motivos para esse estudo, pode-se destacar: As alterações nas propriedades termodinâmicas de um supercondutor tradicional e os motivos dessas alterações.

Para que a análise nas propriedades termodinâmicas sejam feitas, há necessidade de acrescentar alguns objetivos, são eles:

Objetivo geral

Diagonalizar o Hamiltoniano representativo do modelo e obter as alterações nos gaps de energia devido o parâmetro de Rashba α_R .

Objetivos específicos

Apresentar as propriedades termodinâmicas de um supercondutor tradicional.

Apresentar o Hamiltoniano BCS e o Hamiltoniano de Rashba.

Acrescentar ao Hamiltoniano BCS o Hamiltoniano de Rashba.

Estender os cálculos dos gaps de energia para determinar a influência do parâmetro de Rashba nas propriedades termodinâmicas do modelo.

1.1 Contexto histórico

Os tradicionais condutores de eletricidade (por exemplo cobre e ferro), apresentam resistência a passagem de corrente elétrica. Dependendo do tipo de material essa resistência

pode ser alta ou baixa (levando em consideração a geometria e o tipo do material). Outros materiais, que à temperatura ambiente aparentemente são ou não bons condutores de eletricidade, quando são submetidos a uma determinada temperatura, sua resistência tende a diminuir repentinamente. Esses materiais apresentam algumas características peculiares, que os caracterizam como supercondutores.

Podemos dizer que as pesquisas que acabaram levando à descoberta da supercondutividade iniciaram com a tentativa de liquefazer os gases, técnica experimental conhecida como criogenia (palavra que vem do grego Kryos (frio) e genos (geração)), ou seja, os pesquisadores da época tentavam atingir baixas temperaturas por meio da liquefação dos gases. Essas pesquisas iniciais ocorreram entre os séculos XIII e século XIX [1].

O primeiro a conseguir liquefazer um gás foi Van Martin, que anunciou tal feito no ano de 1798, quando conseguiu liquefazer o gás de amônia. Depois que o anúncio foi dado, a comunidade científica iniciou uma corrida para liquefazer outros gases. Com o avançar do tempo ocorreram mudanças nas técnicas de liquefazer os gases, com maior domínio teórico e prático para se realizar a tão buscada liquefação.

Chegando ao final do século XIX, o físico- químico James Dewar desenvolve uma nova técnica e consegue liquefazer o hidrogênio. No ano de 1906 Kamerlingh Onnes liquefez o hidrogênio utilizando um outro processo diferente do processo de Dewar. Até aqui os cientistas se prendiam em liquefazer gases, e talvez descobrir novas técnicas para tal processo, mas ainda não haviam verificado o que ocorria com as propriedades dos materiais quando eram submetidos a temperaturas tão baixas. Ao liquefazer o hélio (He) em 1909, Kamerlingh Onnes conseguiu atingir uma temperatura de aproximadamente 4,2 K. Com a liquefação do He, Onnes começou a estudar as propriedades dos materiais quando submetidos a temperaturas baixas.

No ano de 1911, estudando o mercúrio (Hg) à temperatura de 4,2 K, Kamerlingh Onnes, figura (1.1) observou uma das propriedades mais marcantes de um supercondutor. Verificou que a resistência do mercúrio abruptamente caía para zero àquela temperatura [2][3]. Dois anos depois dessa descoberta Kamerlingh Onnes ganha o prêmio Nobel de Física, em razão da liquefação do Hélio e estudos das propriedades da matéria a baixas temperaturas, mas não especificamente pela supercondutividade.

Embora, sozinha, não seja a principal característica de um supercondutor, a resistência elétrica nula é bastante mencionada quando se usa o termo supercondutor. A figura (1.2) mostra esquematicamente como esse efeito é observado. Uma corrente em espira supercondutora pode apresentar uma estabilidade no campo magnético produzido pela corrente elétrica que a percorre que pode durar anos [5].

Logo após a sua descoberta, a supercondutividade começou a se popularizar no meio científico, com a conseqüente expansão da procura por novos materiais. Alguns tentaram



Figura 1.1: K. Onnes, o cientista que descobriu a supercondutividade. Fonte: The American Physical Society (2007) [4].

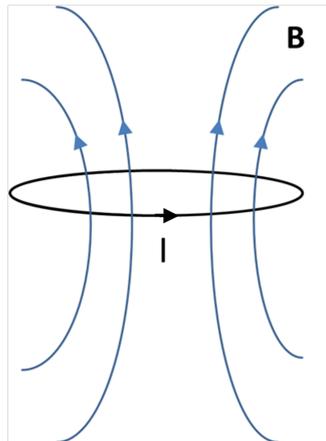


Figura 1.2: Esquema representativo do campo magnético devido uma corrente elétrica em uma espira supercondutora. Fonte: Autoria própria (2015).

verificar se bons metais, como o ouro, a prata e o cobre, por exemplo, também seriam supercondutores. Entretanto, constataram que, embora esses materiais sejam bons condutores, curiosamente não são supercondutores.

Chegando ao ano de 1933, os físicos alemães W. Meissner e R. Ochsenfeld descobriram o fenômeno que atualmente conhecemos como efeito Meissner. Esse fenômeno é bastante importante para classificar os supercondutores. Esses pesquisadores verificaram que o campo magnético dentro do supercondutor, em qualquer situação, é nulo, ou seja, os supercondutores são diamagnetos perfeitos. Deve-se distinguir esse efeito com o que ocorre em um condutor perfeito. Nesse caso, como no interior de um condutor perfeito o campo elétrico é sempre nulo, pela lei de Faraday,

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{E} = \vec{0}, \quad (1.1)$$

o campo magnético é constante, ou seja, não varia com o tempo. Agora vejamos o caso de um supercondutor. Vamos considerar que inicialmente o supercondutor esteja a uma temperatura acima da temperatura crítica T_c submetido a um campo magnético externo nulo. Ao ser resfriado abaixo de T_c , o campo magnético no interior do supercondutor continua nulo, não variando, obedecendo a Lei de Faraday $\partial \vec{B} / \partial t = 0$, comportando-se como um condutor perfeito. Por outro lado, consideremos que o material esteja a uma temperatura acima da temperatura crítica T_c , portanto em um estado não supercondutor, submetido a um campo magnético não nulo. Mantendo-se o campo magnético aplicado e resfriando-se o material até a uma temperatura abaixo da temperatura crítica, quando ele passa a se comportar como um supercondutor, verifica-se que nessa temperatura o campo magnético é excluído do interior do material. Esse efeito ocorre devido às correntes elétricas geradas na superfície do supercondutor, que criam um campo magnético no seu interior de módulo igual e sentido contrário ao do campo magnético aplicado, resultando em um campo magnético total nulo. Nesse caso, de forma diferente do que ocorre no condutor perfeito, o campo magnético total varia com o tempo no interior do supercondutor. Esquemáticamente apresenta-se esse efeito na figura (1.3).

Até o ano em que o efeito Meissner foi descoberto estudos estavam associados principalmente a novos supercondutores, mas não havia ainda explicações para responder a seguinte pergunta: “por que um material se torna supercondutor?”. Então, no ano de 1934, Gorter e Casimir apresentam o conhecido modelo de dois fluidos, no qual para eles existia uma corrente supercondutora e uma corrente condutiva normal. No mesmo ano, os irmãos London [7] apresentam algumas equações associadas aos procedimentos eletrodinâmicos dos supercondutores. Tais equações complementavam as equações de Maxwell para o estado supercondutor (chamamos a atenção para a palavra estado, uma vez que até então ainda não se associava a supercondutividade a um estado da matéria).

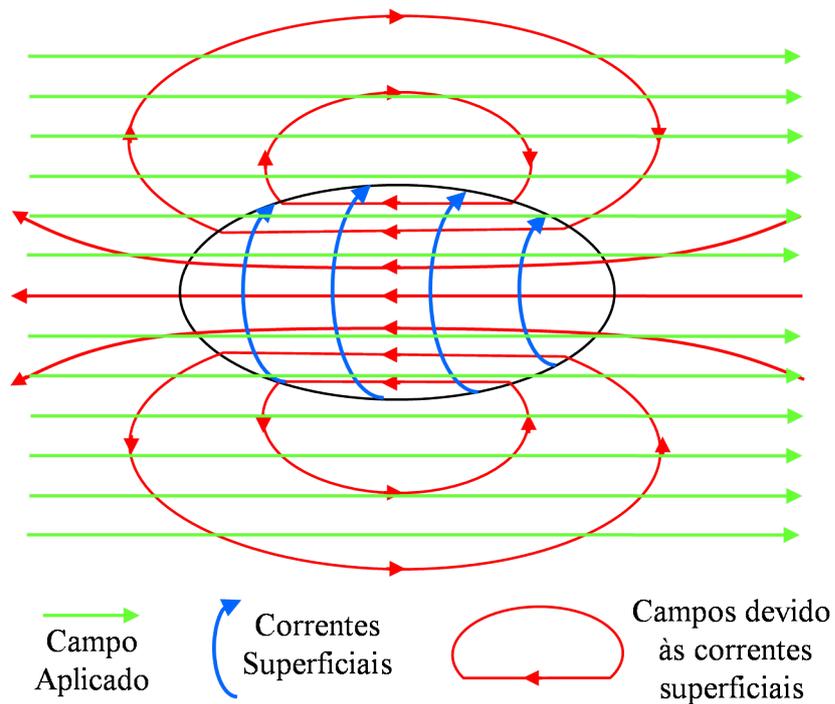


Figura 1.3: Representação esquemática do efeito Meissner, pelo qual, no interior do supercondutor, o campo magnético aplicado é cancelado pelo campo magnético gerado pelas correntes superficiais, cujo módulo é igual ao do campo aplicado e sentido contrário, resultando em um campo magnético total nulo [6]. Assim, dizemos que o campo magnético é expulso do interior do supercondutor. Fonte: Autoria própria (2015).

Em 1950, os físicos soviéticos V. L. Ginzburg e L. D. Landau apresentaram mais uma nova teoria, conhecida como teoria de Ginzburg-Landau, que visa explicar as propriedades termodinâmicas da transição do estado normal para o estado supercondutor [8]. Ainda em 1950, o Físico Frölich propusera uma possível relação entre os elétrons de condução e as excitações da rede cristalina, o que chamamos de interação elétron-fônon, por motivos que serão vistos um pouco à frente.

Chegou-se o ano de 1956 com a hipótese apresentada por Cooper pela qual uma possível interação atrativa entre pares de elétrons levaria a uma redução da energia de Fermi. Em princípio improvável quando se leva em consideração apenas a interação de Coulomb entre esses elétrons, que sempre é repulsiva. Entretanto, no interior de um material, como os supercondutores, os elétrons estão sujeitos a outros processos de interação com o meio, o que poderia levar a uma interação efetiva elétron-elétron negativa.

No ano de 1957, Cooper, Bardeen e Schrieffer apresentaram uma teoria microscópica para o estado supercondutor [9], tendo como origem a interação entre dois elétrons formando os conhecidos pares de elétrons de Cooper. Essa teoria atualmente é conhecida como teoria BCS em alusão aos nomes de Bardeen, Cooper e Schrieffer, respectivamente. Em 1972 os três ganharam juntos o prêmio Nobel de Física pela formulação da citada teoria, que explicava de forma satisfatória o fenômeno da supercondutividade. Para muitos, essa é uma das mais belas teorias explicativas das propriedades da matéria.

Depois da teoria BCS que descreve satisfatoriamente a supercondutividade, atualmente denominada clássica, em referência a outras formas de supercondutividade surgidas a partir da década de 1980, e do surgimento de ferramentas matemáticas oriundas da teoria de campos capazes de dar um tratamento rigoroso aos modelos representativos da supercondutividade, como métodos de muitos corpos com base nas funções de Green, algumas curiosidades ainda pairavam no ar. O que se pode esperar quando juntam dois materiais supercondutores? Suas propriedades são alteradas ou continuam as mesmas? Em 1962 o físico britânico Brian David Josephson, verificou que os materiais supercondutores ao se acoplarem através de um isolante bem fino, formando uma junção, conhecida hoje como junção Josephson, apresentam novas características, bem diferentes dos materiais isolados. A sua previsão da relação matemática entre a supercorrente através de tal junção e a voltagem aplicada, denominada efeito Josephson, posteriormente foi comprovada experimentalmente e lhe rendeu o prêmio Nobel de Física de 1973.

Até aqui, aparentemente, todas as questões com relação a teoria que descreve os supercondutores e as suas propriedades parecem estar respondidas. Mas novos desafios surgiram, como por exemplo, a aplicação desses novos materiais.

As pesquisas por materiais supercondutores a temperaturas cada vez mais altas intensificou-se nas décadas de 1970 e 1980, culminando com as descobertas de 1986 de J. George Berd-

norz e K. Muller de materiais cerâmicos supercondutores apresentando uma temperatura de 30 K, pela qual receberam o prêmio Nobel de Física de 1987.

A partir da descoberta de supercondutores a temperaturas maiores, como 30 K, os físicos entram em uma nova temporada, descobrir materiais com temperaturas mais elevadas e, quem sabe, encontrar materiais supercondutores a temperaturas bem próximas da temperatura ambiente. Um detalhe que deve ser observado é que alguns efeitos, como o efeito Meissner, pareciam ser um pouco diferente para esses materiais. O outro detalhe é que a teoria BCS parece não descrever mais satisfatoriamente os efeitos nesses supercondutores. Então surge a necessidade de classificá-los, chegando-se à conclusão que o fenômeno da supercondutividade não é explicado somente pela teoria BCS, mas também por uma junção de várias especulações e teorias que englobam em sentido mais amplo os supercondutores a altas temperaturas.

A figura (1.4) mostra a evolução com o tempo das descobertas de novos supercondutores a temperaturas cada vez mais elevadas. Nota-se pelo gráfico que demorou muito tempo até atingir os 30 K. Isso se deve ao fato de existir nesse intervalo de tempo um maior interesse com a teoria que descreveria o fenômeno do que buscar descobrir novos materiais supercondutores com temperaturas críticas cada vez maiores. É interessante observar que entre o final da década de 1980 e o início da década de 1990 houve um crescimento abrupto da temperatura crítica, observando-se, nos últimos anos, uma tendência à estabilização. Com as novas tecnologias nanométricas os cientistas cada vez mais estão tomando controle da fabricação de novos materiais a partir dos elementos químicos isolados que constituem o universo, de maneira que no futuro seria possível criar novos materiais com propriedades pré-estabelecidas, conforme o interesse do pesquisador.

1.2 Resumo de algumas propriedades do estado supercondutor

1.2.1 Resistividade Nula

Quando se fala em supercondutores, a primeira característica a se pensar geralmente é a resistividade nula. Essa é uma das características mais populares, mas sozinha não é a principal, embora seja muito útil para a maioria das aplicações. Mais à frente veremos que uma outra característica está mais fortemente ligada ao estado supercondutor. Historicamente o primeiro elemento no qual se observou a supercondutividade foi o mercúrio (figura (1.5)), por Kamerlingh Onnes.

Provavelmente pela facilidade de minimizar as suas impurezas, K. Onnes observou que alguns materiais começam a apresentar resistividade nula quando atingem uma tempe-

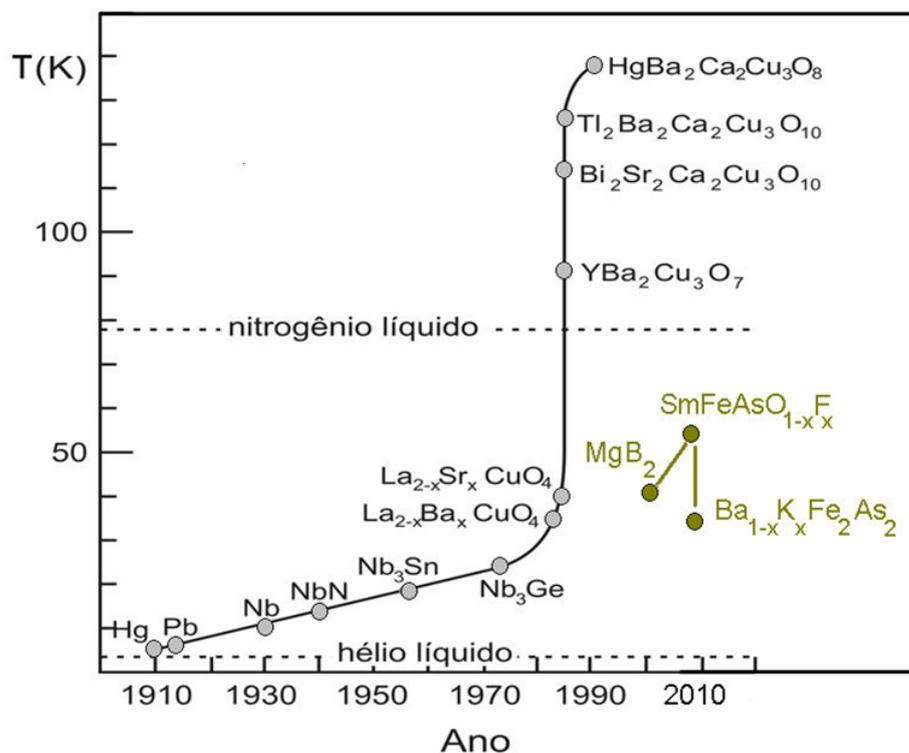


Figura 1.4: Evolução da temperatura crítica ao longo dos anos, desde 1911, ano da descoberta da supercondutividade por Kamerlingh Onnes. Verifica-se o crescimento da temperatura crítica quase linear até a década de 1970, com um crescimento vertiginoso entre o final da década de 1980 e o início da década de 1990, após o que parece estar sofrendo uma nova inflexão no sentido de estabilização. Fonte: IX Escola CBPF (2012) [10].

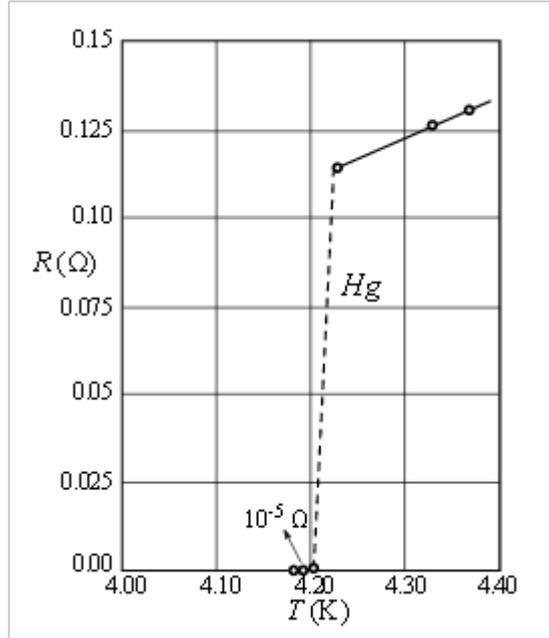


Figura 1.5: Medida histórica da resistividade do mercúrio em função da temperatura realizada por Kamerlingh Onnes em 1911. A resistividade diminui linearmente com a temperatura até atingir a temperatura de 4,2 K. Nessa temperatura a resistividade cai abruptamente para 10^{-5} Ohms, descortinando-se, pela primeira vez, um material supercondutor. Fonte: H. Kamerlingh Onnes (1911) [2].

ratura T_c , denominada de temperatura crítica ou temperatura de transição, (ver tabela 1.1).

Tabela 1.1: Valores de T_c para alguns elementos químicos. Fonte: RBF (1998) [6].

Elemento	Nb	Pb	Ta	Sn	Zr	Bi	Ge
$T_c(K)$	9.3	7.2	4.5	3.7	0.8	ñsc	ñsc

É importante observar que muitos elementos metálicos são supercondutores, assim como algumas ligas, alguns semi-condutores e também outros materiais orgânicos. Tem-se também materiais com bastante irregularidades em suas propriedades físicas, ou seja, são diferentes em cada ponto, esses são os cupratos.

1.2.2 Destruição da supercondutividade por campos magnéticos

Observou-se experimentalmente que o estado supercondutor é destruído por um campo magnético maior que um valor crítico H_c , representado, em boa aproximação, pela equação a seguir [5]:

$$H_c(T) \approx H_c(0) \left[1 - \left(T/T_c \right)^2 \right]. \quad (1.2)$$

A figura (1.6) representa H_c em função de T , onde a parte interna (esquerda da curva) representa o estado supercondutor e a externa (direita da curva) representa o estado normal.

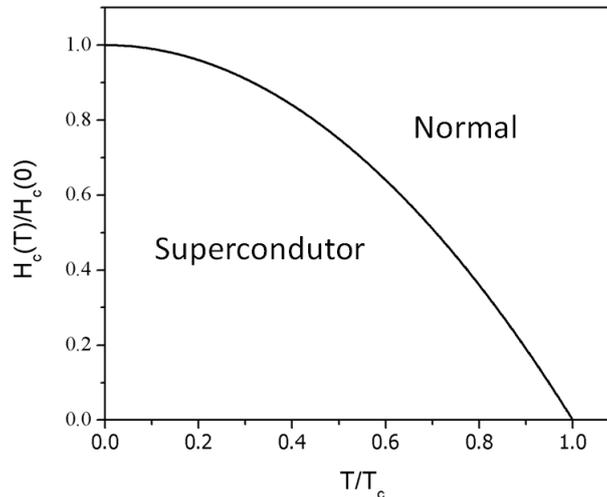


Figura 1.6: Variação do campo magnético crítico H_c com a temperatura, com duas regiões representando os estados normal (região externa à curva) e supercondutor (região interna à curva). Fonte: Tinkhan (1996) [5].

1.2.3 Efeito Meissner

Na subseção anterior vimos que um campo magnético forte pode destruir o estado supercondutor. Agora veremos mais um comportamento dos supercondutores, que está associado também ao campo magnético aplicado, conhecido como efeito Meissner. No ano de 1933, Meissner e Ochsenfeld descobriram que os supercondutores são capazes de bloquear completamente o campo magnético em seu interior. Isso só acontece enquanto a temperatura é menor que a temperatura crítica. Caso se aplique um campo maior que o campo crítico, o estado supercondutor é destruído, dando origem ao fenômeno conhecido como efeito Meissner [11]. Esse efeito foi comprovado experimentalmente, e as observações mostraram que realmente B é nulo no interior do supercondutor.

De forma simples podemos verificar que os supercondutores são diamagnetos perfeitos, partimos da definição que

$$\vec{B} = \mu \vec{H}. \quad (1.3)$$

No interior do supercondutor $\vec{B} = \vec{0}$. Se o campo externo \vec{H} não é nulo, significa que μ é nulo. Portanto os supercondutores são diamagnetos perfeitos.

Uma outra importante conclusão é que resistência nula não implica em $B = 0$ no supercondutor, pois como

$$\vec{E} = \rho \vec{J}, \quad (1.4)$$

se $\rho = 0$, então $\vec{E} = \vec{0}$. Por outro lado, como

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.5)$$

então,

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0}. \quad (1.6)$$

Isso não significa que o campo magnético \vec{B} seja nulo, uma vez que a expressão acima garante apenas que ele seja constante. Concluímos, assim, que a resistividade ser nula não implica o efeito Meissner, mas o contrário sim.

Todos os supercondutores apresentam o efeito Meissner, mas existe uma diferença para alguns, devido essa diferença os supercondutores podem ser classificados de duas formas, como veremos a seguir.

Supercondutores tipo I

Nos supercondutores identificados como tipo I não há presença de fluxo magnético no interior do supercondutor enquanto o campo magnético é menor que o valor crítico H_c , é o que acabamos de ver no efeito Meissner. Segundo Kittel [16], “Os supercondutores de tipo I não apresentam campos críticos H_c muito fortes, de modo que os supercondutores deste tipo não possuem aplicações técnicas úteis na construção dos enrolamentos de ímãs supercondutores”.

Supercondutores tipo II

Como observado no início desta seção, o efeito Meissner consiste na expulsão total do fluxo magnético do interior do supercondutor enquanto o supercondutor é submetido a um campo magnético inferior ao campo crítico H_c . No caso dos supercondutores tipo II [12, 13, 14], esta situação ocorre em duas etapas. A primeira etapa está associada a exclusão total do fluxo magnético que ocorre enquanto o campo for inferior a um valor que designamos por H_{c1} , como ocorre nos supercondutores tipo I. Entretanto, no caso do supercondutor tipo II, embora o fluxo magnético tenha sido expulso do seu interior, ele continua no estado supercondutor. Na segunda etapa, continua-se crescendo o campo magnético externo até atingir um valor denotado por H_{c2} , a partir do qual o estado supercondutor é eliminado

completamente. Embora a verificação experimental desse comportamento seja simples, a abordagem matemática desenvolvida por Abrikosov é bastante complexa [12]. Na figura (1.7) apresentamos um diagrama característico do fluxo magnético B em função do campo magnético externo H para os supercondutores tipo I e II. Para o tipo I, o fluxo magnético é nulo até o campo magnético atingir o valor H_c , a partir do qual o estado supercondutor é destruído. Para o tipo II o fluxo magnético é nulo até o campo magnético externo alcançar o valor H_{c1} . A partir desse valor o material continua no estado supercondutor, embora o fluxo magnético no seu interior não seja nulo. O estado supercondutor é destruído completamente apenas quando o campo externo atinge um valor maior, denotado por H_{c2} , o que confere aos supercondutores do tipo II maior aplicabilidade tecnológica.

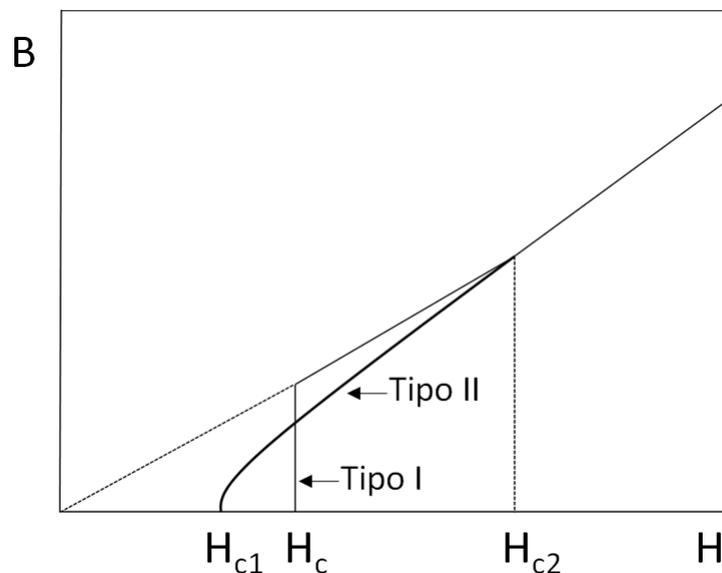


Figura 1.7: Fluxo magnético no interior dos supercondutores do tipo I e do tipo II. No supercondutor tipo I existe um campo magnético externo H_c abaixo do qual o fluxo magnético interno é nulo. No caso do supercondutor tipo II, o fluxo magnético é totalmente nulo para campo externo menor que H_{c1} , apresentado o efeito Meissner, com o material no estado supercondutor. Entretanto, existe um intervalo $H_{c1} < H < H_{c2}$ em que o sistema apresenta simultaneamente as características de metal normal e de supercondutor. Para $H > H_{c2}$ o sistema encontra-se completamente no estado normal. Fonte: Tinkhan (1996) [5].

Na figura (1.8) apresentamos os campos magnéticos H_{c1} e H_{c2} em função da temperatura, com ambos nulos em T_c . Existe uma região entre as duas curvas onde coexistem os estados normal e supercondutor simultaneamente, que chamamos de estado misto.

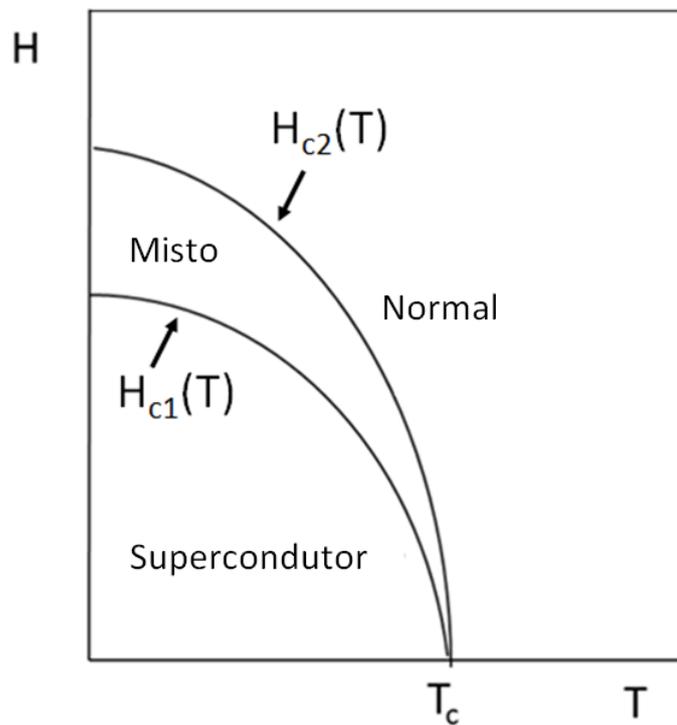


Figura 1.8: O campo magnético externo H_{c1} e H_{c2} em função da temperatura T . Existe uma região entre as curvas $H_{c1}(T)$ e $H_{c2}(T)$ em que coexistem simultaneamente o estado normal e o estado supercondutor, identificado na figura como estado misto. Fonte: Tinkhan (1996) [5].

1.2.4 Estrutura Cristalina

Estudos experimentais a respeito da estrutura cristalina dos supercondutores a temperaturas abaixo da temperatura crítica, como a cristalografia de raio-X, têm demonstrado que a rede cristalina não sofre deformações estruturais na passagem do estado normal para o supercondutor [6]. Portanto, o estado supercondutor não está associado a mudanças na estrutura dos materiais.

1.2.5 Calor específico eletrônico

Embora não ocorra uma transição de fase estrutural na passagem do estado normal para o estado supercondutor ao reduzirmos a temperatura a um valor menor que T_c , o que seria observada pela medida do calor específico, devido às alterações nos estados dos elétrons de condução dos supercondutores, o calor específico desses materiais apresenta um comportamento diferenciado ao atingir aquela temperatura, como pode-se observar na figura (1.9).

Nos metais normais o calor específico varia com a temperatura de acordo com a seguinte expressão:

$$C_v = \gamma T + AT^3, \quad (1.7)$$

onde γ está associado aos elétrons de condução e A às vibrações da estrutura do material. No estado supercondutor o calor específico é escrito como

$$\frac{C_v}{\gamma T_c} = 2,37 \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-1,76T_c/T} \quad (1.8)$$

O termo exponencial que aparece na equação (1.8) é uma característica de sistemas com um gap na energia. No próximo capítulo veremos como surge esse gap por meio da teoria BCS.

1.2.6 Bandas proibidas

É sabido que as bandas de energia em um sólido, como por exemplo um metal ou um isolante, decorrem da interação dos elétrons com a rede, nos supercondutores essas bandas são resultado direto da relação com a superfície de Fermi. A teoria mostra que essas lacunas de energia de alguma forma dependem da temperatura, e que ao atingir o valor T_c tendem a se anular.

Na figura (1.10), o círculo preenchido representa a superfície de Fermi que está a uma distância 2Δ do estado supercondutor.

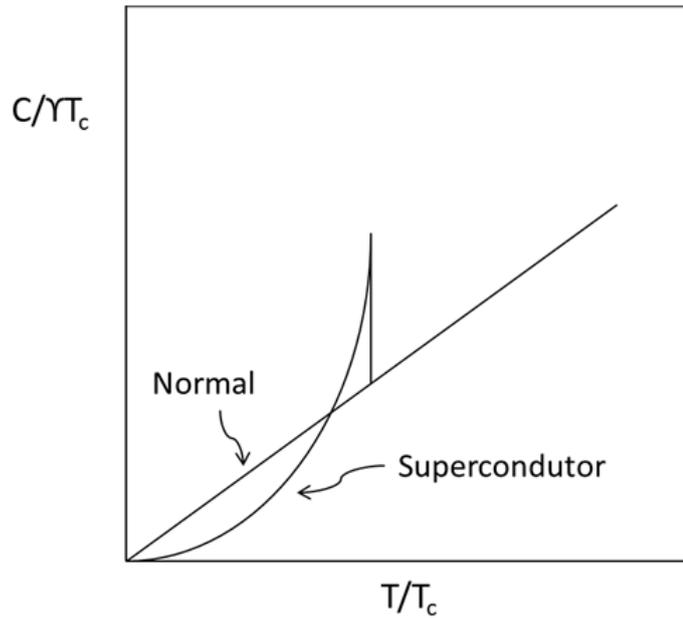


Figura 1.9: Esboço do calor específico correspondente a um material no estado normal e no estado supercondutor para temperaturas muito baixas. Para o estado normal o calor específico varia linearmente com a temperatura. Por outro lado, para um material que tem a propriedade de supercondutor, para temperaturas maiores que a temperatura crítica comporta-se como um metal normal. Baixando a temperatura, ao atingir a temperatura crítica T_c , o calor específico sofre uma descontinuidade e cai exponencialmente para zero devido à criação do gap no nível de Fermi. Fonte: Tinkhan (1996) [5].

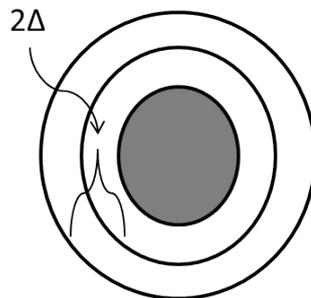


Figura 1.10: Lacuna de energia associada a superfície de Fermi. Fonte: Autoria própria (2015).

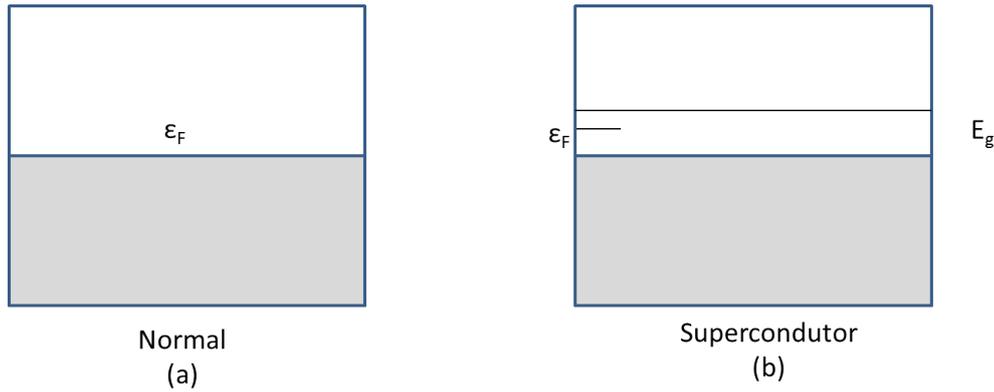


Figura 1.11: Em (a) temos a banda de condução do estado normal e em (b) a banda proibida para o estado supercondutor. Fonte: Autoria própria (2015).

Na figura (1.11), em (b) observamos claramente a separação entre o estado fundamental e o estado das quase partículas (partículas que estão em estados mais energéticos) do supercondutor.

1.2.7 Condutividade Térmica

Quando tocamos na madeira ou em um pedaço de metal, ambos a uma temperatura de por exemplo 290 K, a nossa percepção é que o material metálico está a uma temperatura menor que a madeira. Essa percepção ocorre pelo fato de os metais serem bons condutores térmicos, e a madeira não. Isso se deve aos elétrons livres do metal (na madeira os elétrons estão fortemente ligados aos seus átomos), e a interação dos mesmos com a rede. A diferença na estrutura eletrônica dos materiais influencia na sua condutividade térmica. A densidade de corrente térmica é dada por

$$\vec{J} = \kappa \vec{\nabla} T, \quad (1.9)$$

onde κ é a condutividade térmica do material, que varia de material para material. Quanto maior o valor de κ melhor condutor térmico o material é. Entretanto, quando os materiais atingem o estado supercondutor, diminui o número de elétrons próximos da superfície de Fermi, o que produz uma menor interação dos elétrons de condução com a rede, reduzindo a condutividade térmica em baixas temperaturas, como apresentado na figura (1.12) para o caso do chumbo (Pb).

1.2.8 Efeito Isótopo

Esse efeito foi descoberto por Maxwell e também por Reynolds no ano de 1950 [17]. Verificou-se experimentalmente que a temperatura crítica (T_c) depende da massa isotópica

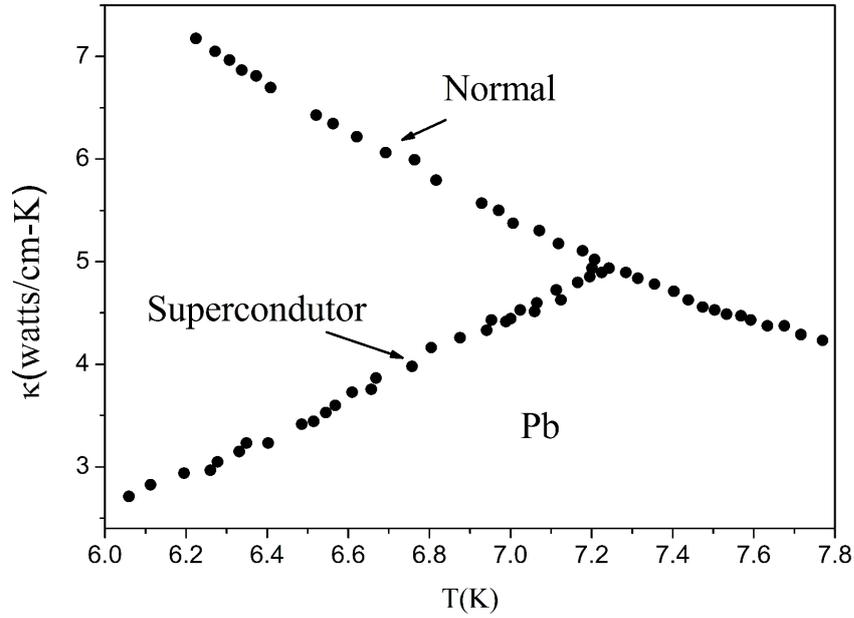


Figura 1.12: Condutividade térmica do chumbo (κ) em função da temperatura T . Os pontos na parte superior indicam o estado normal e os pontos na parte inferior representam o estado supercondutor. Verifica-se que no estado supercondutor o chumbo apresenta baixa condutividade térmica. Fonte: Adaptado do trabalho original de Watson e Graham [15].

dos elementos químicos que constituem o material, que matematicamente pode ser representada pela expressão

$$M^\alpha T_c = \text{constante}, \quad (1.10)$$

onde M é a massa isotópica e α um parâmetro do material que é aproximadamente 0,5.

A tabela 1.2 apresenta aos valores de α de alguns materiais. Verifica-se que no Ru e no Zr $\alpha = 0$, representando ausência do efeito isotópico nesses materiais. Essa ausência foi explicada em termos da estrutura de bandas eletrônicas do Ru e do Zr (Kittel, p. 362) [16].

A verificação experimental da dependência da temperatura crítica em relação à massa isotópica dos elementos químicos que constituem o supercondutor é uma forte evidência da importância da interação dos elétrons de condução com a rede cristalina, conhecida como interação elétron-fonon, para explicar a origem da fase supercondutora dos materiais.

Tabela 1.2: Valores experimentais de α em $M^\alpha T_c = \text{const.}$, M é a massa isotópica. Fonte: (Kittel, p. 362) [16].

Substância	α	\pm	$\Delta\alpha$	Substância	α	\pm	$\Delta\alpha$
Zn	0,45	\pm	0,05	Ru	0,00	\pm	0,05
Cd	0,32	\pm	0,07	Os	0,15	\pm	0,05
Sn	0,47	\pm	0,02	Mo	0,33		
Hg	0,50	\pm	0,03	Nb ₃ Sn	0,08	\pm	0,02
Pb	0,49	\pm	0,02	Mo ₃ Ir	0,33	\pm	0,03
Tl	0,61	\pm	0,10	Zr	0,00	\pm	0,05

Capítulo 2

Teoria BCS

2.1 Introdução

Até o presente momento verificamos algumas propriedades peculiares dos supercondutores. Definimos a supercondutividade como um estado da matéria e sabemos que esse estado não está associado com deformações ou alterações na rede cristalina do material. Entretanto, ainda falta responder o motivo de um material tornar-se supercondutor abaixo de uma certa temperatura crítica. Se seguirmos as datas mencionadas no capítulo anterior, iremos notar que em todas as descobertas havia uma grande concentração de pesquisadores dedicados a aprofundar os conhecimentos em torno das linhas de pesquisa em volga. Para ser mais específico, quando por exemplo estavam trabalhando na liquefação dos gases, a maioria dos cientistas se concentrava em liquefazer mais e mais gases. Quando se descobriu a supercondutividade, um grande número de pesquisadores concentrava-se em encontrar mais materiais supercondutores. A busca pela compreensão do processo que leva à supercondutividade foi uma caminhada longa e difícil. Surgiram várias tentativas de natureza teórica com um grande número de especulações para descrever satisfatoriamente o estado supercondutor. Embora existissem teorias que explicassem algumas propriedades, nenhuma era capaz de satisfazer totalmente todas as necessidades da supercondutividade. Finalmente, em 1957, Bardeen, Cooper e Schrieffer publicam um novo trabalho onde expuseram a teoria milagrosa, aplicando a mecânica quântica em nível microscópico, levando à determinação com grande elegância e precisão das propriedades macroscópicas dos supercondutores. Essa teoria passou a ser conhecida pelas iniciais de seus nomes, a famosa teoria BCS. Desde a descoberta da supercondutividade até a formulação da teoria BCS passaram-se 46 anos.

2.2 Interação elétron-rede

No interior dos materiais, em nível microscópico, os elétrons que se encontram livres, pertencendo ao que chamamos de banda de condução, podem colidir com os íons que compõem a rede cristalina, o que resulta em uma resistência ao seu movimento. Além dessas colisões pode ocorrer também colisões com impurezas devido a presença de átomos de outros elementos químicos que não são os do próprio material, ou colisões com deformações da própria rede, o que pode levar a um aumento da resistividade do material. Nas colisões com os íons da rede existe transferência de energia do elétron para rede e vice-versa. A essas interações chamamos de interações elétron-rede. Em razão dessas interações a rede cristalina vibra criando estados coletivos, ou quase partículas, denominadas fônons. Dizemos então que a interação elétron-rede pode originar a emissão ou absorção dessas quase partículas – os fônons, daí o motivo de também chamarmos a essas interações de interações elétron-fônons.

O primeiro passo para entender a origem microscópica da supercondutividade foi dado por Frohlich no ano de 1950. Em seus comentários havia uma demonstração que as interações entre a rede cristalina e os elétrons poderiam formar ligações entre os elétrons. Em seguida tem-se Bardeen, falando que é possível que haja mudança no comportamento dos elétrons se estes interagirem com a rede cristalina. Parece absurdo dizer que os elétrons podem formar ligações, pois os mesmos são cargas de sinais opostos e, conforme a física clássica, esse tipo de carga tende a se repelir instantaneamente. Entretanto isso ocorre quando temos duas cargas isoladas. Frohlich e Bardeen introduzem a rede cristalina como mediadora dessa interação indireta elétron-elétron.

Cooper mostrou que a nuvem eletrônica de Fermi é instável frente a formação de pelo menos um par de elétrons acoplados, independente da forma da força de interação fraca, desde que seja atrativa [18].

A rede cristalina é formada por íons que são portadores de cargas positivas. Quando os elétrons passam nas proximidades dos íons, devido à atração das cargas positivas (íons) com as negativas (elétrons), a rede pode ser distorcida como mostrado esquematicamente na figura (2.1).

Observa-se esquematicamente na figura (2.1) que a densidade de cargas positivas em volta dos elétrons aumenta. Essa variação repentina pode provocar vibrações na rede cristalina, forçando a rede emitir um fônon. Esse, por sua vez, depende do tempo de retorno da rede à posição inicial, ou seja, pode ser demorado ou não. O interessante é que estando outro elétron na região onde ocorreu a deformação da rede, ele sentirá essa distorção, sofrendo uma atração pelos íons positivos da rede. Como a inércia dos íons é superior à inércia dos elétrons, a repulsão entre os elétrons será inferior à atração pelos íons, permitindo que os dois elétrons sejam atraídos indiretamente um pelo outro,

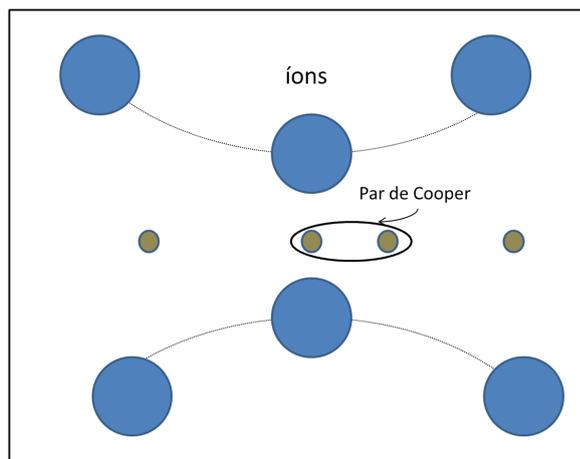


Figura 2.1: Quando um elétron passa através da rede cristalina, em razão da interação atrativa entre elétron e íon, os íons são atraídos por esse elétron. Em consequência disso, o elétron seguinte passando pela mesma região da rede é atraído diretamente pelos íons que se deslocaram devido a passagem do primeiro elétron. Aquele (o elétron seguinte) acompanha as deformações da rede cristalina formadas ao longo da trajetória deste (o primeiro elétron). Assim, indiretamente os elétrons se atraem, intermediados pela rede cristalina, formando um par de elétrons, conhecido como par de Cooper. Fonte: Autoria própria (2015).

intermediados pela rede cristalina, formando os pares de elétrons conhecidos como pares de Cooper. Assim podemos dizer que, nessa situação, os elétrons se “atraem”.

De forma pictórica pode-se fazer uma analogia da interação elétron-elétron, que forma o par de Cooper, por meio da deformação da rede cristalina, com uma bola de boliche rolando sobre um colchão de água. Ao se movimentar, a bola de boliche produz deformações no colchão. Ao acrescentarmos uma segunda bola de bilhar, esta será sugada para o interior da deformação, movimentando-se ao logo dos sulcos deixados pela primeira bola, seguindo-a enquanto esta se movimenta na superfície do colchão. Os sulcos deixados no colchão pela primeira bola de bilhar, atraindo a segunda bola, analogamente à rede cristalina, corresponde às deformações da rede cristalina produzida pelo primeiro elétron, que é seguido pelo segundo elétron devido à sua atração pelos íons que se deslocaram, deformando a rede cristalina. Essa analogia está representada pela figura (2.2).

2.3 Pares de Cooper

Em 1956, Cooper mostrou que se dois elétrons se atraem, mesmo com uma energia bem pequena, a energia do par assim formado é menor que a energia de Fermi [18]. Isso significa que um par de elétrons atraindo-se entre si podem formar um par ligado. O estado fundamental de um gás de elétrons, se não for levado em consideração a interação

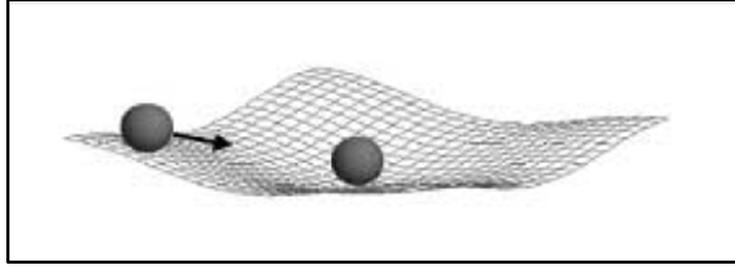


Figura 2.2: Analogia da formação dos pares de Cooper, devido à deformação da rede cristalina pelos elétrons que se movem através da mesma, com o movimento de duas bolas de bilhar sobre um colchão de água. Quando se lança uma primeira bola sobre o colchão de água, ela se movimentando formando sulcos que canalizam o movimento de uma segunda bola lançada sobre o colchão, deixando a impressão que ambas formam um par de bolas de bilhar que se atraem, ao mesmo tempo que se movimentam ao longo do colchão. Fonte: RBF (1998) [6].

coulombiana entre eles, é representado pela esfera de Fermi. Energeticamente os elétrons preenchem todos os estados até um valor do momento linear chamado momento de Fermi, representado por \vec{k}_F , correspondendo à energia de Fermi $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$. Acima dessa energia os estados encontram-se desocupados. Ao estudar um par de dois elétrons que se atraem com um potencial negativo bem pequeno, Cooper supôs que os elétrons de condução não interagem coulombicamente entre si, mas tão somente pela obediência ao princípio de exclusão de Pauli. Ao adicionar dois elétrons, à temperatura zero, ao mar de elétrons de condução, também a interação dos elétrons do par injetado com os elétrons de condução ocorrerá somente através do princípio da exclusão de Pauli [18].

A teoria BCS [9] mostra que os pares de Cooper tem maior possibilidades de serem formados em estados dados por:

$$\left(\vec{k}\uparrow, -\vec{k}\downarrow \right), \quad (2.1)$$

com a função de onda descrita como

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \quad (2.2)$$

Considerando que os elétrons são partículas indistinguíveis, obedecendo a estatística de Fermi-Dirac, a função de onda total deve ser anti-simétrica. Portanto, antissimetrizando a equação (2.2) segundo o determinante de Slater para duas partículas, obtemos duas funções de onda de dois elétrons possíveis, uma singlete ($\psi^{(S)}$) e outra tripleto ($\psi^{(T)}$), como segue:

$$\psi^{(S)} = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) \cos[\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] [\chi_1(\uparrow)\chi_2(\downarrow) - \chi_2(\uparrow)\chi_1(\downarrow)] \quad (2.3)$$

$$\psi^{(T)} = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) \text{sen}[\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] [\chi_1(\uparrow)\chi_2(\downarrow) + \chi_2(\uparrow)\chi_1(\downarrow)] \quad (2.4)$$

Como desejamos uma interação atrativa entre os elétrons que formam o par de Cooper, e como a dependência cossenoidal da função de onda em $(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ permite uma probabilidade maior de um elétron do par se encontrar mais próximo do outro, esperamos que a função de onda associada com a menor energia seja da forma

$$\psi_0(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \sum_{\vec{k} > k_F} g(\vec{k}) [\cos \vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] [\chi_1(\uparrow)\chi_2(\downarrow) - \chi_2(\uparrow)\chi_1(\downarrow)] \quad (2.5)$$

Consideremos agora a adição de um par de elétrons ao mar de elétrons que constituem a banda de condução. Como todos os níveis de energia estão ocupados até o nível de Fermi ε_F , devido ao princípio de exclusão de Pauli os elétrons do par de Cooper somente podem ocupar níveis de energia acima daquele nível. Portanto, as energias de cada elétron do par de Cooper ε_k devem ser maiores que ε_F ($\varepsilon_k > \varepsilon_F$)

Para um par de elétrons independentes, isto é, não interagentes entre si nem com os elétrons da banda de condução, a equação de Schrödinger é escrita como

$$H_0 \psi_0 = \frac{-\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2) \psi_0 = 2\varepsilon_{\vec{k}} \psi_0 \quad (2.6)$$

onde $\varepsilon_{\vec{k}} > \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, os operadores gradiente $\vec{\nabla}_1$ e $\vec{\nabla}_2$ atuam nas coordenadas dos elétrons 1 e 2, respectivamente. Na presença da interação somente entre os elétrons do par de Cooper, $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, a equação de Schrödinger passa a ser escrita como

$$H_0 \psi_0 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \psi_0 = E \psi_0 \quad (2.7)$$

Inserindo a equação (2.5) na equação (2.7), chega-se a seguinte expressão:

$$2\varepsilon_{\vec{k}} g(\vec{k}) + \sum_{\vec{k}' > k_F} g(\vec{k}') V_{\vec{k}, \vec{k}'} = E g(\vec{k}), \quad (2.8)$$

onde $V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \langle e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | V | e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \rangle$ e $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ é a distância entre os dois elétrons do par de Cooper. Na figura (2.3) apresentamos os pares de Cooper no estado $(\vec{k}', -\vec{k}')$ sendo espalhados para o estado $(\vec{k}, -\vec{k})$.

Devido a dificuldade de fazer uma análise para um potencial $V_{\vec{k}, \vec{k}'}$ genérico, Cooper propôs uma aproximação em que $V_{\vec{k}, \vec{k}'} = -V$ no intervalo $-\hbar\omega_c \leq \varepsilon \leq \hbar\omega_c$ e nulo fora

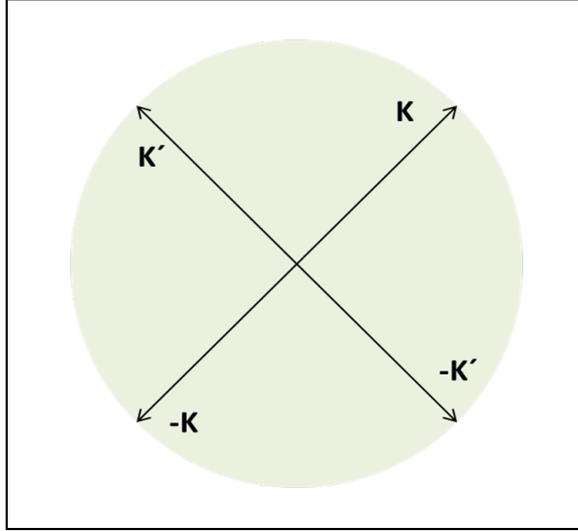


Figura 2.3: Pares de Cooper, antes e depois do espalhamento. Fonte: Autoria própria (2015).

deste intervalo, como mostra a figura (2.4), onde $\hbar\omega_c$ é uma energia de corte.

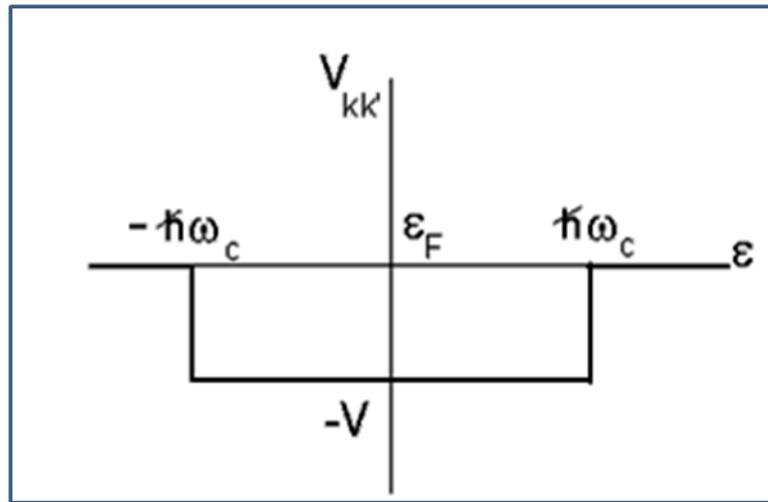


Figura 2.4: Aqui observamos o intervalo de energia em que $V_{\vec{k},\vec{k}'} = -V$. Fonte: IX Escola CBPF (2012) [10].

Substituindo o valor do potencial $V_{\vec{k},\vec{k}'} = -V$ na equação (2.8) e transformando a soma em uma integral, obtemos

$$E = 2\varepsilon_F - 2\hbar\omega_c e^{\frac{-2}{\rho(0)V}}, \quad (2.9)$$

onde $\rho(0)$ representa a densidade de estados no nível de Fermi para cada spin.

Os pares de Cooper são formados com energia dada pela equação (2.9). Nessa equação o segundo termo passa a ser significativo quando a densidade de estados e a energia de

corte passam a ser altos. Caso contrário o termo dominante é o primeiro. O que também podemos concluir dessa equação é que a energia do sistema será cada vez menor se mais e mais pares forem formados.

2.4 O estado fundamental BCS

2.4.1 A função de onda BCS

Na seção anterior mostramos que os pares de Cooper apresentavam funções de onda anti-simétricas. Consideremos apenas um par de dois elétrons interagindo fracamente entre si, sem interagirem com os demais elétrons da banda de condução com energia próximo à energia de Fermi, a não ser via o princípio da exclusão. Agora iremos verificar como trataremos a anti-simetria considerando um número N de pares de Cooper.

No estudo a seguir vamos continuar considerando que os elétrons dos pares de Cooper interagem apenas entre si, dentro do mesmo par, mas não interagem com os elétrons de pares diferentes ou com os demais elétrons da banda de condução. Tratando-se de elétrons, a função de onda de cada par anti-simétrica, obedecendo à estatística de Fermi-Dirac, ou seja, obedecendo o princípio de exclusão de Pauli. A função de onda de N partículas constituídas pelo conjunto de $N/2$ pares de Cooper no estado fundamental pode ser escrita como

$$|\psi_F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)\rangle = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle |\psi(\vec{r}_3, \vec{r}_4)\rangle \dots |\psi(\vec{r}_{N-1}, \vec{r}_N)\rangle \quad (2.10)$$

onde $\psi(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ representa a função de onda de um par de Cooper, que são as mesmas para todos os pares, mudando apenas as coordenadas das partículas que os constitui.

A função de onda acima pode ser compactada se usarmos a linguagem de segunda quantização, o que faz a equação (2.10) ser representada da seguinte maneira:

$$|\psi_F\rangle = \prod_{\vec{k}=\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N} |\psi_{\vec{k}}\rangle, \quad (2.11)$$

com

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = u_{\vec{k}}|00\rangle + v_{\vec{k}}|11\rangle. \quad (2.12)$$

Nessa equação $|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1$, $|v_{\vec{k}}|^2$ é a probabilidade do par $(\vec{k}\uparrow, -\vec{k}\downarrow)$ estar ocupado e $|u_{\vec{k}}|^2 = 1 - |v_{\vec{k}}|^2$ é a probabilidade de não estarem ocupado. Na forma compacta da segunda quantização a equação (2.12) é escrita como

$$\psi_{\vec{k}} = (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) |\psi_0\rangle, \quad (2.13)$$

na qual $|\psi_0\rangle$ simboliza o estado de vácuo, identificado como o estado em que não existe partículas presentes.

Substituindo a equação (2.13) na equação (2.11), o estado fundamental da teoria BCS terá a seguinte forma

$$|\psi_F\rangle = \prod_{\vec{k}=\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) |\psi_0\rangle \quad (2.14)$$

onde $c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger$ e $c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger$ representam os operadores criação de um elétron com momento \vec{k} e spin para cima e um elétron com momento $-\vec{k}$ e spin para baixo, respectivamente, obedecendo as seguintes relações de anticomutação fermiônicas:

$$\{c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.15)$$

$$\{c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{k}'\sigma'}\} = \{c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger, c_{\vec{k}\sigma}^\dagger\} = 0, \quad (2.16)$$

onde σ refere-se ao spin.

2.4.2 Método variacional

Conhecida a estrutura da função de onda do estado fundamental, nesta seção determinaremos o gap no nível de Fermi, devido à criação dos pares de Cooper, utilizando o método variacional, apresentado originalmente na teoria BCS [9]. Este método exige um pouco de esforço matemático, dependendo da auto-função que se deseja minimizar a energia correspondente. No caso do estado fundamental, desejamos encontrar o menor valor possível para a energia que será chamada de energia do estado fundamental. O método proporciona encontrar parâmetros, que por sua vez podem ser associados a essa energia mínima.

No método variacional minimizamos o valor esperado em relação ao estado fundamental $|\psi_F\rangle$ do operador $H - \mu N_{op}$, fazendo

$$\delta \langle \psi_F | H - \mu N_{op} | \psi_F \rangle = 0, \quad (2.17)$$

onde H é o operador Hamiltoniano da teoria BCS [9], dado por

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow}, \quad (2.18)$$

N_{op} é o operador número

$$N_{op} = \sum_{\vec{k}, \sigma} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} \quad (2.19)$$

e μ o potencial químico, que passa a ser a origem das energias cinéticas dos elétrons de condução. O primeiro termo do Hamiltoniano da equação (2.18) representa a energia cinética dos elétrons de condução e o segundo termo o potencial efetivo atrativo entre os elétrons dos pares de Cooper.

Usando as equações (2.11) e (2.18) obtemos o valor esperado

$$\langle \psi_F | H - \mu N_{op} | \psi_F \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^2 + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'}, \quad (2.20)$$

onde $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu$. Agora vamos minimizar a equação (2.20) com o seguinte vínculo:

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1. \quad (2.21)$$

Com essa condição podemos definir $\theta_{\vec{k}}$ de maneira que

$$u_{\vec{k}} = \text{sen} \theta_{\vec{k}} \quad (2.22)$$

$$v_{\vec{k}} = \text{cos} \theta_{\vec{k}} \quad (2.23)$$

e a equação (2.20) passa a ser escrita como

$$\begin{aligned} \langle \psi_F | H - \mu N_{op} | \psi_F \rangle &= 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} (\text{cos} \theta_{\vec{k}})^2 + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \text{sen} \theta_{\vec{k}} \text{cos} \theta_{\vec{k}} \text{sen} \theta_{\vec{k}'} \text{cos} \theta_{\vec{k}'} \\ &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} [1 + \text{cos} (2\theta_{\vec{k}})] + \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \text{sen} (2\theta_{\vec{k}}) \text{sen} (2\theta_{\vec{k}'}) \end{aligned} \quad (2.24)$$

Por questão de mera praticidade no processo de minimização da energia, vamos fazer a seguinte mudança de variável $\vec{k} \rightarrow \vec{q}$ na equação acima, que passa a ser escrita como

$$\langle \psi_F | H - \mu N_{op} | \psi_F \rangle = \sum_{\vec{q}} \xi_{\vec{q}} [1 + \text{cos} (2\theta_{\vec{q}})] + \frac{1}{4} \sum_{\vec{q}, \vec{k}'} V_{\vec{q}, \vec{k}'} \text{sen} (2\theta_{\vec{q}}) \text{sen} (2\theta_{\vec{k}'}). \quad (2.25)$$

Desenvolvendo a derivada parcial em relação a $\theta_{\vec{k}}$, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{\vec{k}}} \langle \psi_F | H - \mu N_{op} | \psi_F \rangle = -2\xi_{\vec{k}} \text{sen} (2\theta_{\vec{k}}) + \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \text{cos} (2\theta_{\vec{k}}) \text{sen} (2\theta_{\vec{k}'}). \quad (2.26)$$

Da equação acima, o valor esperado $\langle \psi_F | H - \mu N_{op} | \psi_F \rangle$ será mínimo quando

$$-2\xi_{\vec{k}} \text{sen}(2\theta_{\vec{k}}) + \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \cos(2\theta_{\vec{k}}) \text{sen}(2\theta_{\vec{k}'}) = 0. \quad (2.27)$$

Tirando $\cos(2\theta_{\vec{k}})$ de dentro do somatório em \vec{k}' , encontramos

$$\begin{aligned} 2\xi_{\vec{k}} \text{sen}(2\theta_{\vec{k}}) &= \cos(2\theta_{\vec{k}}) \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \text{sen}(2\theta_{\vec{k}'}) \\ \tan(2\theta_{\vec{k}}) &= \frac{1}{2\xi_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \text{sen}(2\theta_{\vec{k}'}) . \end{aligned} \quad (2.28)$$

Agora vamos fazer as seguintes definições:

$$\Delta_{\vec{k}} = -\sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \text{sen}(2\theta_{\vec{k}'}) \quad (2.29)$$

e

$$E_{\vec{k}} = (\Delta_{\vec{k}}^2 + \xi_{\vec{k}}^2)^{1/2}. \quad (2.30)$$

A relação entre as duas equações acima é dada por

$$\Delta_{\vec{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{E_{\vec{k}'}} , \quad (2.31)$$

ou

$$\Delta_{\vec{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{\sqrt{\Delta_{\vec{k}'}^2 + \xi_{\vec{k}'}^2}} , \quad (2.32)$$

esta equação é conhecida como condição de auto-consistência. Para $V_{\vec{k},\vec{k}'}$, Cooper sugeriu o seguinte modelo:

$$V_{\vec{k},\vec{k}'} = \begin{cases} -V & \text{se } |\xi_{\vec{k}}| \text{ e } |\xi_{\vec{k}'}| \leq \hbar\omega_c \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.33)$$

onde V é uma constante positiva. Em razão disso, inserindo a equação (2.33) na equação (2.32), podemos concluir que o somatório do lado direito dessa equação não depende de \vec{k} , sendo portanto constante, escreve-se também

$$\Delta_{\vec{k}} = \begin{cases} \Delta & \text{se } |\xi_{\vec{k}}| < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{se } |\xi_{\vec{k}}| > \hbar\omega_c \end{cases} , \quad (2.34)$$

onde Δ é uma constante. Como nesse modelo $\Delta_{\vec{k}} = \Delta$, no intervalo $|\xi_{\vec{k}}| < \hbar\omega_c$ e zero

fora desse intervalo, a equação (2.32) fica

$$\Delta = \frac{V}{2} \sum_{\vec{k}'} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{k}'}^2}}, \quad (2.35)$$

ou seja,

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\vec{k}'}^2}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} \frac{1}{E_{\vec{k}'}}. \quad (2.36)$$

Substituindo somatório em \vec{k}' da equação acima por uma integral na energia, obtemos

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\omega_c}^{\hbar\omega_c} \frac{\rho(\xi)}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} d\xi, \quad (2.37)$$

onde $\rho(\xi)$ é a densidade de estados próximo do nível de Fermi. Supondo que a densidade de estado varia lentamente com a energia nas proximidades da energia de Fermi ($\xi = 0$) e que no limite de acoplamento fraco “ $\rho(0)V \ll 1$ ” temos

$$\Delta \approx 2\hbar\omega_c \exp\left(\frac{-1}{\rho(0)V}\right). \quad (2.38)$$

Agora, conhecendo Δ , podemos calcular $u_{\vec{k}}$ e $v_{\vec{k}}$. Substituindo a equação (2.38) na equação (2.28) e usando as equações (2.22) e (2.23), com $\Delta_{\vec{k}} = \Delta$, encontramos as relações

$$\begin{aligned} \tan(2\theta_{\vec{k}}) &= -\frac{\Delta}{\xi_{\vec{k}}} \\ 2u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} &= 2\text{sen}(\theta_{\vec{k}})\cos(\theta_{\vec{k}}) = \text{sen}(2\theta_{\vec{k}}) = \frac{\Delta}{E_{\vec{k}}} \\ v_{\vec{k}}^2 - u_{\vec{k}}^2 &= \cos^2(\theta_{\vec{k}}) - \text{sen}^2(\theta_{\vec{k}}) = \cos(2\theta_{\vec{k}}) = -\frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}. \end{aligned}$$

Da última das equações acima com o vínculo $u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1$ concluímos que

$$v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right) = \left[1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{(\Delta^2 + \xi_{\vec{k}}^2)^{1/2}}\right] \quad (2.39)$$

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right) = \left[1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{(\Delta^2 + \xi_{\vec{k}}^2)^{1/2}}\right] \quad (2.40)$$

Capítulo 3

Hamiltoniano de Rashba

O efeito Rashba pode ser verificado de duas maneiras: por geração espontânea de campo elétrico na interface da junção de dois materiais ou em razão da aplicação de um campo elétrico externo. Na primeira maneira, ao se fazer a junção de dois materiais de forma a compor, por exemplo, o que se chama de ligas semicondutoras, verifica-se que a geometria espacial da rede cristalina dos materiais é alterada. Devido a essa situação, naturalmente pode surgir algum gradiente de potencial e automaticamente um campo elétrico na interface da junção. Dependendo da sua intensidade, o campo elétrico pode causar distorções a função de onda e conseqüentemente a quebra da simetria das bandas eletrônicas. Na segunda maneira de verificar o efeito Rashba, aplica-se um campo elétrico externo no material, resultando, de forma geral, em alterações na função de onda e conseqüentemente nos estados de energia e nos gaps. Neste trabalho analisaremos o efeito Rashba em um supercondutor clássico sem nos preocuparmos com a forma de produção do campo elétrico que dá origem à interação spin-órbita de Rashba.

Na análise a seguir vamos considerar um gás de elétrons não interagentes bidimensional, que pode estar distribuído na interface de uma junção entre dois materiais [20], como mostramos pictoricamente na figura (3.1). Um elétron em movimento em um campo elétrico está submetido a forças eletrostáticas e também às influências relativísticas relacionadas a interação spin-órbita (SO) [21], chamadas também de acoplamento spin-órbita. Devido ao seu movimento numa região de campo elétrico, o elétron livre sofrerá também os efeitos de um campo magnético, que por sua vez interagirá com o momento orbital eletrônico.

O Hamiltoniano que representa um elétron em movimento em um campo elétrico, \vec{E} , é escrito como [21]

$$H_{SO} = -\frac{\mu_B}{2mc^2}(\vec{p} \times \vec{E}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (3.1)$$

onde m é a massa do elétron livre, μ_B é o magneton de Bohr, c é a velocidade da luz no

vácuo, \vec{p} é o operador momento, $\vec{\sigma}$ é escrito em termos das matrizes de Pauli. Dependendo do campo elétrico aplicado ao sistema de elétrons em movimento, e no caso dos gradientes de potenciais que surgem, os efeitos representados pelo Hamiltoniano (3.1) tornam-se bastante significativos [22].

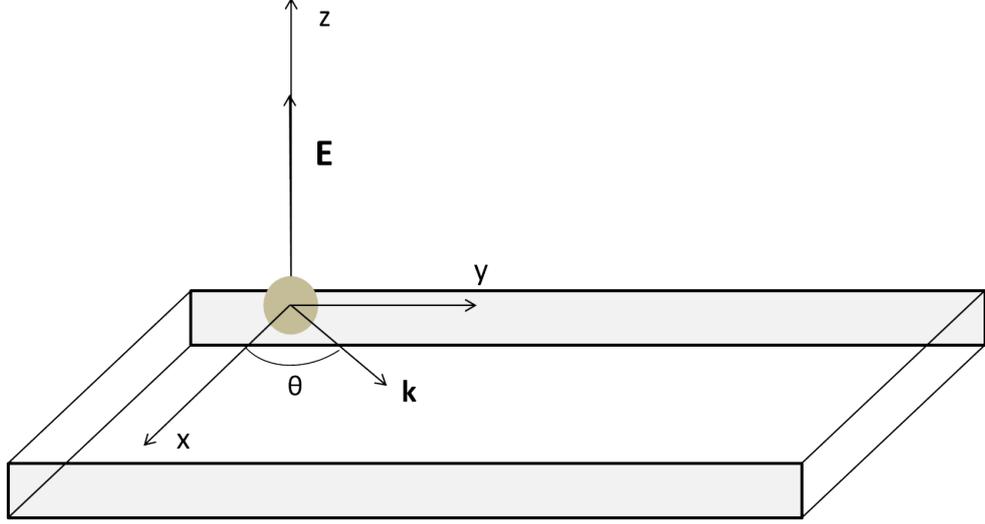


Figura 3.1: Partícula livre transitando sob o efeito de um Campo elétrico. Fonte: Autoria própria (2015).

Na figura (3.1), o elétron livre move-se no plano xy e sob ele atua uma campo elétrico perpendicular a esse plano. O momento \vec{p} será escrito em termos das suas componentes p_x e p_y na forma

$$\vec{p} = p_x \hat{x} + p_y \hat{y}, \quad (3.2)$$

onde \hat{x} e \hat{y} são os vetores unitários nas direções dos eixos x e y , respectivamente, e o campo elétrico na direção z perpendicular ao plano do movimento dos elétrons é escrito como

$$\vec{E} = E_0 \hat{z}. \quad (3.3)$$

Substituindo a (3.3) na (3.1), escreve-se o Hamiltoniano de Rashba como se segue:

$$H_{SO} = \frac{\mu_B E_0}{2mc^2} (\vec{p} \times \hat{z}) \cdot \vec{\sigma} \quad (3.4)$$

O termo que acompanha o produto escalar entre o vetor $(\vec{p} \times \hat{z})$ e o vetor $\vec{\sigma}$ é chamado de constante de Rashba [22], ou seja:

$$\alpha = \frac{\mu_B E_0}{2mc^2} \quad (3.5)$$

Desenvolvendo o produto vetorial misto acima, o Hamiltoniano (3.4) toma a forma:

$$H_{SO} = \alpha(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (3.6)$$

onde σ_x e σ_y são as matrizes de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Vamos escrever o Hamiltoniano dado pela equação (3.6) na forma da segunda quantização. Iniciaremos este processo escrevendo os correspondentes operadores dos momentos p_x e p_y em mecânica quântica como a seguir:

$$p_x \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.9)$$

$$p_y \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad (3.10)$$

Substituindo as projeções (3.9) e (3.10) na equação (3.6), o Hamiltoniano H_{SO} adquire a seguinte forma:

$$H_{SO} = -i\hbar\alpha \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (3.11)$$

Ao substituírmos as matrizes de Pauli na equação (3.11) chegamos a:

$$H_{SO} = \hbar\alpha \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Definimos o operador quântico de campo $\psi_\mu^\dagger(\vec{r})$ [23] na forma:

$$\psi_\mu^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}\mu}^\dagger \quad (3.13)$$

e

$$\psi_\mu(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}\mu} \quad (3.14)$$

onde $\psi_\mu^\dagger(\vec{r})$ ($\psi_\mu(\vec{r})$) cria (destrói) um elétron com spin μ na posição \vec{r} .

O Hamiltoniano da interação spin-órbita de Rashba em segunda quantização é obtido da relação

$$H_R = \int d\vec{r} \psi_\mu^\dagger(\vec{r}) H_{SO} \psi_\mu(\vec{r}) \quad (3.15)$$

ou, usando a equação (3.12),

$$H_R = \hbar\alpha \int d\vec{r} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) & \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\downarrow}(\vec{r}) - i \frac{\partial}{\partial y} \psi_{\downarrow}(\vec{r}) \\ -\frac{\partial}{\partial x} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) - i \frac{\partial}{\partial y} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Desenvolvendo as operações matriciais acima, chegamos a seguinte equação

$$H_R = \hbar\alpha \int d\vec{r} \left(\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\downarrow}(\vec{r}) - i \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial y} \psi_{\downarrow}(\vec{r}) - \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) - i \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial y} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) \right) \quad (3.17)$$

A equação (3.17) é uma equação integro-diferencial, e suas derivadas podem ser encontradas, como segue abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{\mu}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} i k_x e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}\mu} \quad (3.18)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial y} \psi_{\mu}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} i k_y e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}\mu} \quad (3.19)$$

Na equação (3.17), cada termo do lado direito pode ser integrado levando em consideração a ortogonalidade das funções envolvidas, as propriedades do delta de Kronecker e os resultados obtidos nas equações (3.18) e (3.19). Assim, as integrais da equação (3.17) são escritas como se segue:

$$\int d\vec{r} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\downarrow}(\vec{r}) = - \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} i k_x c_{\vec{k}\downarrow} \quad (3.20)$$

$$\int d\vec{r} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial y} \psi_{\downarrow}(\vec{r}) = - \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} i k_y c_{\vec{k}\downarrow} \quad (3.21)$$

$$\int d\vec{r} \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) = - \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\downarrow}^{\dagger} i k_x c_{\vec{k}\uparrow} \quad (3.22)$$

$$\int d\vec{r} \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial y} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) = - \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\downarrow}^{\dagger} i k_y c_{\vec{k}\uparrow} \quad (3.23)$$

Substituindo as equações (3.20), (3.21), (3.22) e (3.23) na equação (3.17), obteremos a relação esperada:

$$H_R = \hbar\alpha \sum_{\vec{k}} \left[c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} (-i k_x - k_y) c_{\vec{k}\downarrow} + c_{\vec{k}\downarrow}^{\dagger} (i k_x - k_y) c_{\vec{k}\uparrow} \right]$$

Ainda podemos escrever $\alpha_R = \hbar\alpha$, o que nos dará a seguinte equação

$$H_R = \alpha_R \sum_{\vec{k}} \left[c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger (-ik_x - k_y) c_{\vec{k}\downarrow} + c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger (ik_x - k_y) c_{\vec{k}\uparrow} \right] \quad (3.24)$$

Definindo $k_y = k \cos \theta$ e $k_x = k \sin \theta$, os termos entre parênteses na equação (3.24), podem ser escritos como

$$-ik_x - k_y = -k e^{i\theta} \quad (3.25)$$

e

$$ik_x - k_y = -k e^{-i\theta}. \quad (3.26)$$

Assim, a equação (3.24) passa a ser escrita como

$$H_R = -\alpha_R \sum_{\vec{k}} k \left[e^{i\theta} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} + e^{-i\theta} c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} \right] \quad (3.27)$$

O modelo de Rashba representado pelo Hamiltoniano na forma da segunda quantização representado pela equação (3.27) será utilizado neste trabalho para estudar o efeito de Rashba nos materiais supercondutores descritos pelo Hamiltoniano BCS.

Capítulo 4

Hamiltoniano do Modelo

4.1 Introdução

No segundo capítulo fez-se uma breve abordagem sobre a teoria BCS, com a descrição do seu respectivo Hamiltoniano. No terceiro capítulo escreveu-se o Hamiltoniano de Rashba na forma da segunda quantização, denotado por H_R . Analisou-se também como pode ocorrer a formação dos pares de Cooper, devido à interação atrativa entre dois elétrons, intermediados pelos fônons, originados da deformação da rede cristalina pela passagem dos elétrons de condução. A seguir, escrevemos o Hamiltoniano para os supercondutores de acordo com a teoria BCS [9] como

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^* c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.1)$$

onde o operador $c_{\vec{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{\vec{k}\sigma}$) cria (destrói) um elétron de condução com energia $\varepsilon_{\vec{k}}$ e spin σ . O primeiro termo da equação (4.1) está associado à energia cinética dos pares de Cooper, sendo denotado da seguinte forma:

$$H_c = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \quad (4.2)$$

O segundo termo refere-se ao potencial atrativo dos pares de Cooper que dão origem ao Hamiltoniano BCS, escrito como,

$$H_{BCS} = - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^* c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.3)$$

onde

$$\Delta_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle, \quad (4.4)$$

e $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ representa a interação elétron-elétron intermediada pelos fonons da rede.

Agora vamos introduzir ao Hamiltoniano do supercondutor, conforme a teoria BCS, a interação de Rashba, cujo Hamiltoniano é dado pela equação (3.27):

$$H_R = -\alpha_R \sum_{\vec{k}} k \left[e^{i\theta} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} + e^{-i\theta} c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} \right] \quad (4.5)$$

Neste capítulo estudaremos o comportamento de um supercondutor que obedece a teoria BCS na presença de interações spin-órbita de Rashba. Assim, o Hamiltoniano do modelo será escrito como

$$H = H_c + H_R + H_{BCS}. \quad (4.6)$$

ou, de forma expandida,

$$H = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} - \alpha_R \sum_{\vec{k}} k (e^{i\theta} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} + e^{-i\theta} c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}) - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^* c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.7)$$

4.2 Diagonalização do Hamiltoniano

No presente capítulo utilizaremos o método das transformações canônicas, que consiste em avaliar a evolução temporal do operador em questão por meio de uma equação de evolução dinâmica, o que nos permitirá encontrar os autovetores de energia e seus respectivos autovalores associados ao Hamiltoniano dado pela equação (4.7).

A diagonalização do Hamiltoniano representado pela equação (4.7) será realizada em dois passos, conforme descrito a seguir. No primeiro passo diagonalizamos inicialmente apenas o Hamiltoniano constituído pelos estados da banda de condução e o Hamiltoniano de Rashba,

$$H_1 = H_c + H_R. \quad (4.8)$$

No segundo passo escrevemos o Hamiltoniano H_{BCS} na base em que H_1 é diagonal e diagonalizamos nesta nova base o Hamiltoniano do modelo dado pela equação (4.7), escrito na forma

$$H = H_1 + H_{BCS} \quad (4.9)$$

4.2.1 Primeiro passo

Inicialmente diagonalizaremos o Hamiltoniano H_1 constituído pelo Hamiltoniano da banda de condução H_c e o Hamiltoniano de Rashba H_R , escrito como

$$H_1 = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} - \alpha_R \sum_{\vec{k}} k (e^{i\theta} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} + e^{-i\theta} c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow}) \quad (4.10)$$

Agora usaremos a equação de movimento de Heisenberg (deduzidas a partir das propriedades do operador de evolução temporal [19]), definida como

$$i \frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\sigma} = -[H_1, c_{\vec{k}\sigma}] \quad (4.11)$$

Desenvolveremos a equação acima inicialmente para spin para cima (\uparrow), escrevendo

$$-i \frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\uparrow} = [H_1, c_{\vec{k}\uparrow}] \quad (4.12)$$

ou

$$-i \frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\uparrow} = [H_1, c_{\vec{k}\uparrow}] = [H_c, c_{\vec{k}\uparrow}] + [H_R, c_{\vec{k}\uparrow}] \quad (4.13)$$

Para simplificar, resolvemos $[H_c, c_{\vec{k}\uparrow}]$ separadamente. Levando em consideração as relações de comutação e anti-comutação,

$$[H_c, c_{\vec{k}\uparrow}] = H_c c_{\vec{k}\uparrow} - c_{\vec{k}\uparrow} H_c \quad (4.14)$$

resulta em

$$[H_c, c_{\vec{k}\uparrow}] = -\varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.15)$$

Agora, resolvemos separadamente $[H_R, c_{\vec{k}\uparrow}]$, que é dado pela seguinte relação

$$[H_R, c_{\vec{k}\uparrow}] = H_R c_{\vec{k}\uparrow} - c_{\vec{k}\uparrow} H_R \quad (4.16)$$

Substituindo o valor de H_R e usando novamente as relações de comutação e anti-comutação, obtemos

$$[H_R, c_{\vec{k}\uparrow}] = \alpha_R k e^{i\theta} c_{\vec{k}\downarrow} \quad (4.17)$$

Usando os mesmos procedimentos para $[H_c, c_{\vec{k}\downarrow}]$ e $[H_R, c_{\vec{k}\downarrow}]$, chegamos na seguinte relação

$$[H_c, c_{\vec{k}\downarrow}] = -\varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\downarrow} \quad (4.18)$$

e

$$[H_R, c_{\vec{k}\downarrow}] = \alpha_R k e^{-i\theta} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.19)$$

Substituindo as equações (4.15), (4.17), (4.18) e (4.19) na (4.11), obtemos duas equações diferenciais acopladas:

$$-i\dot{c}_{\vec{k}\uparrow} = -\varepsilon_{\vec{k}}c_{\vec{k}\uparrow} + \alpha_R k e^{i\theta} c_{\vec{k}\downarrow} \quad (4.20)$$

e

$$-i\dot{c}_{\vec{k}\downarrow} = -\varepsilon_{\vec{k}}c_{\vec{k}\downarrow} + \alpha_R k e^{-i\theta} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.21)$$

Devido aos movimentos de vibração da rede cristalina, as equações acima possuem formas similares a forma das equações dos osciladores harmônicos acoplados [24]. Logo, para desacoplar as equações supomos que:

$$c_{\vec{k}\sigma}(t) = e^{-i\lambda t} c_{\vec{k}\sigma} \quad (4.22)$$

Substituindo a equação (4.22) nas equações (4.20) e (4.21), encontramos

$$-\lambda c_{\vec{k}\uparrow} = -\varepsilon_{\vec{k}}c_{\vec{k}\uparrow} + \alpha_R k e^{i\theta} c_{\vec{k}\downarrow} \quad (4.23)$$

e

$$-\lambda c_{\vec{k}\downarrow} = -\varepsilon_{\vec{k}}c_{\vec{k}\downarrow} + \alpha_R k e^{-i\theta} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.24)$$

Notamos agora duas equações algébricas (4.23) e (4.24) que, para que não admitirem a solução trivial, devem obedecer a condição

$$\begin{vmatrix} (z + \lambda) & b \\ b^* & (z + \lambda) \end{vmatrix} = 0, \quad (4.25)$$

onde $z = -\varepsilon_{\vec{k}}$ e $b = \alpha_R k e^{i\theta}$.

Resolvendo a (4.25), encontramos os seguintes autovalores de energia

$$\xi_{\vec{k}\pm} = \varepsilon_{\vec{k}} \pm \alpha_R k, \quad (4.26)$$

correspondentes aos seguintes autovetores:

$$a_{\vec{k}\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{\vec{k}\uparrow} \pm e^{-i\theta} c_{\vec{k}\downarrow} \right), \quad (4.27)$$

que formam a nova base $\{a_{\vec{k},\eta}\}$ na qual o Hamiltoniano H_1 passa a ser escrito, tomando a forma

$$H_1 = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}\eta} a_{\vec{k}\eta}^\dagger a_{\vec{k}\eta}, \quad (4.28)$$

em que $\xi_{\vec{k}\eta}$ é a energia das quase partículas descritas pelos operadores criação (destruição) $a_{\vec{k}\eta}^\dagger$ ($a_{\vec{k}\eta}$), $\eta = \pm$ e os operadores $a_{\vec{k}\eta}$ obedecem às regras de anti-comutação de Fermi-Dirac.

4.2.2 Segundo Passo

Continuando o processo de diagonalização do Hamiltoniano H , representado pela equação (4.7), acrescentamos ao Hamiltoniano H_1 , dado pela equação (4.28), o Hamiltoniano H_{BCS} ,

$$H = H_1 + H_{BCS} \quad (4.29)$$

ou seja, vamos diagonalizar o Hamiltoniano,

$$H = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}\eta} a_{\vec{k}\eta}^\dagger a_{\vec{k}\eta} - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^* c_{-\vec{k}\uparrow} c_{\vec{k}\downarrow} \quad (4.30)$$

na base $\{a_{\vec{k}\eta}\}$, na qual foi escrito o Hamiltoniano H_1 .

Da equação (4.27), podemos encontrar os operadores $c_{\vec{k}\uparrow}$ e $c_{\vec{k}\downarrow}$ em termos dos operadores $a_{\vec{k}\eta}$, que serão dados por:

$$c_{\vec{k}\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{\vec{k}+} + a_{\vec{k}-})$$

e

$$c_{\vec{k}\downarrow} = \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}} (a_{\vec{k}+} - a_{\vec{k}-})$$

Ao substituírmos os operadores acima na equação (4.30), escreveremos o Hamiltoniano em função dos operadores $a_{\vec{k}\eta}$ da seguinte forma

$$H = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}\eta} a_{\vec{k}\eta}^\dagger a_{\vec{k}\eta} - \sum_{\vec{k}} \bar{\Delta}_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}+}^\dagger a_{-\vec{k}+}^\dagger - a_{\vec{k}+}^\dagger a_{-\vec{k}-}^\dagger + a_{\vec{k}-}^\dagger a_{-\vec{k}+}^\dagger - a_{\vec{k}-}^\dagger a_{-\vec{k}-}^\dagger \right) - \sum_{\vec{k}} \bar{\Delta}_{\vec{k}}^* \left(a_{-\vec{k}+} a_{\vec{k}+} + a_{-\vec{k}+} a_{\vec{k}-} - a_{-\vec{k}-} a_{\vec{k}+} - a_{-\vec{k}-} a_{\vec{k}-} \right) \quad (4.31)$$

onde

$$\bar{\Delta}_{\vec{k}} = -\frac{e^{-i\theta}}{2} \Delta_{\vec{k}} \quad (4.32)$$

Agora vamos diagonalizar o Hamiltoniano dado pela equação (4.31), na base $\{a_{\vec{k}\eta}\}$, fazendo a seguinte substituição de notação: $+\rightarrow\uparrow$ e $-\rightarrow\downarrow$.

Usando a equação de movimento de Heisemberg para os operadores $a_{\vec{k}\sigma}$, encontramos as relações:

$$i\frac{\partial}{\partial t}a_{\vec{k}\uparrow} = -[H, a_{\vec{k}\uparrow}]$$

$$[H, a_{\vec{k}\uparrow}] = -\xi_{\vec{k}\uparrow}a_{\vec{k}\uparrow} - \bar{\Delta}_{-\vec{k}}a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - \bar{\Delta}_{\vec{k}}a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger$$

$$i\dot{a}_{\vec{k}\uparrow} = \xi_{\vec{k}\uparrow}a_{\vec{k}\uparrow} + \left(\bar{\Delta}_{-\vec{k}} + \bar{\Delta}_{\vec{k}}\right)a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \quad (4.33)$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger = -[H, a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger]$$

$$[H, a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger] = \xi_{\vec{k}\uparrow}a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger + \bar{\Delta}_{\vec{k}}^*a_{\vec{k}\downarrow} + \bar{\Delta}_{-\vec{k}}^*a_{\vec{k}\downarrow}$$

$$i\dot{a}_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger = -\xi_{\vec{k}\uparrow}a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger - \left(\bar{\Delta}_{\vec{k}}^* + \bar{\Delta}_{-\vec{k}}^*\right)a_{\vec{k}\downarrow} \quad (4.34)$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = -[H, a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger]$$

$$[H, a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger] = \xi_{\vec{k}\downarrow}a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - \bar{\Delta}_{-\vec{k}}^*a_{\vec{k}\uparrow} - \bar{\Delta}_{\vec{k}}^*a_{\vec{k}\uparrow}$$

$$i\dot{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = -\xi_{\vec{k}\downarrow}a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + \left(\bar{\Delta}_{-\vec{k}}^* + \bar{\Delta}_{\vec{k}}^*\right)a_{\vec{k}\uparrow} \quad (4.35)$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}a_{\vec{k}\downarrow} = -[H, a_{\vec{k}\downarrow}]$$

$$[H, a_{\vec{k}\downarrow}] = -\xi_{\vec{k}\downarrow}a_{\vec{k}\downarrow} + \bar{\Delta}_{-\vec{k}}a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger + \bar{\Delta}_{\vec{k}}a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger$$

$$i\dot{a}_{\vec{k}\downarrow} = \xi_{\vec{k}\downarrow}a_{\vec{k}\downarrow} - \left(\bar{\Delta}_{-\vec{k}} + \bar{\Delta}_{\vec{k}}\right)a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger \quad (4.36)$$

Voltando a notação $\uparrow \equiv (+)$ e $\downarrow \equiv (-)$, considerando $\bar{\Delta}_{-\vec{k}} = \bar{\Delta}_{\vec{k}}$ (trata-se de um módulo), as equações (4.33), (4.34), (4.35) e (4.36) podem ser agrupadas como segue:

$$\begin{aligned}
i\dot{a}_{\vec{k}+} &= \xi_{\vec{k}+} a_{\vec{k}+} + 2\overline{\Delta}_{\vec{k}} a_{-\vec{k}-}^\dagger + 0a_{-\vec{k}+}^\dagger + 0a_{\vec{k}-} \\
i\dot{a}_{-\vec{k}-}^\dagger &= 2\overline{\Delta}_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}+} - \xi_{\vec{k}-} a_{-\vec{k}-}^\dagger + 0a_{-\vec{k}+}^\dagger + 0a_{\vec{k}-} \\
i\dot{a}_{-\vec{k}+}^\dagger &= 0a_{\vec{k}+} + 0a_{-\vec{k}-}^\dagger - \xi_{\vec{k}+} a_{-\vec{k}+}^\dagger - 2\overline{\Delta}_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}-} \\
i\dot{a}_{\vec{k}-} &= 0a_{\vec{k}+} + 0a_{-\vec{k}-}^\dagger - 2\overline{\Delta}_{\vec{k}} a_{-\vec{k}+}^\dagger + \xi_{\vec{k}-} a_{\vec{k}-}
\end{aligned} \tag{4.37}$$

Na forma matricial a equação (4.37) é escrita como

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a_{\vec{k}+} \\ a_{-\vec{k}-}^\dagger \\ a_{-\vec{k}+}^\dagger \\ a_{\vec{k}-} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_{\vec{k}+} & 2\overline{\Delta}_{\vec{k}} & 0 & 0 \\ 2\overline{\Delta}_{\vec{k}}^* & -\xi_{\vec{k}-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\xi_{\vec{k}+} & -2\overline{\Delta}_{\vec{k}}^* \\ 0 & 0 & -2\overline{\Delta}_{\vec{k}} & \xi_{\vec{k}-} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{\vec{k}+} \\ a_{-\vec{k}-}^\dagger \\ a_{-\vec{k}+}^\dagger \\ a_{\vec{k}-} \end{bmatrix}, \tag{4.38}$$

que representa um sistema de blocos de matrizes independentes, que podem ser diagonalizadas separadamente. Novamente é necessário desacoplar equações. Para isso tomaremos a dependência temporal de $a_{\vec{k}\eta}(t)$ na forma

$$a_{\vec{k}\eta}(t) = e^{-i\lambda t} a_{\vec{k}\eta} \tag{4.39}$$

Procedendo à diagonalização do primeiro bloco de matriz (4.38), e já consideramos a dependência temporal dos respectivos operadores, escrevemos

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a_{\vec{k}+} \\ a_{-\vec{k}-}^\dagger \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_{\vec{k}+} & 2\overline{\Delta}_{\vec{k}} \\ 2\overline{\Delta}_{\vec{k}}^* & -\xi_{\vec{k}-} \end{bmatrix}, \tag{4.40}$$

de onde obtemos os seguintes autovalores de energia

$$E_{(+)(\pm)} = \alpha_R k \pm \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \tag{4.41}$$

Diagonalizando o segundo bloco,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a_{-\vec{k}+}^\dagger \\ a_{\vec{k}-} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\xi_{\vec{k}+} & -2\overline{\Delta}_{\vec{k}}^* \\ -2\overline{\Delta}_{\vec{k}} & \xi_{\vec{k}-} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{-\vec{k}+}^\dagger \\ a_{\vec{k}-} \end{bmatrix}, \tag{4.42}$$

encontramos os seguintes autovalores de energia

$$E_{(-)(\pm)} = -\alpha_R k \pm \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \tag{4.43}$$

Vamos determinar os autovetores correspondentes aos autovalores $E_{(+)(\pm)}$, para isso,

$$\begin{bmatrix} E_{(+)(\pm)} - \xi_{\vec{k}+} & 2\overline{\Delta}_{\vec{k}} \\ 2\overline{\Delta}_{\vec{k}}^* & E_{(+)(\pm)} + \xi_{\vec{k}-} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 0 \tag{4.44}$$

Depois de encontrado os autovetores de energia, impomos algumas condições sobre eles, de modo que podemos escrevê-los em função de novos operadores $\gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}$, que terão suas propriedades discutidas um pouco mais a frente, ao fazermos as relações inversas, temos o seguinte resultado

$$\gamma_{\vec{k}(+)(+)} = \vartheta_{\vec{k}} a_{\vec{k}+} - \mu_{\vec{k}} a_{-\vec{k}-}^\dagger \quad (4.45)$$

e

$$\gamma_{\vec{k}(+)(-)} = \mu_{\vec{k}} a_{\vec{k}+} + \vartheta_{\vec{k}} a_{-\vec{k}-}^\dagger \quad (4.46)$$

Agora determinaremos os autovetores correspondentes aos autovalores $E_{(-)(\pm)}$, fazendo igual ao processo anterior,

$$\begin{bmatrix} E_{(-)(\pm)} + \xi_{\vec{k}+} & -2\overline{\Delta_{\vec{k}}}^* \\ -2\overline{\Delta_{\vec{k}}} & E_{(-)(\pm)} - \xi_{\vec{k}-} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 0, \quad (4.47)$$

após normalizar e compactar, encontramos

$$\gamma_{\vec{k}(-)(+)} = \mu_{\vec{k}}^* a_{-\vec{k}+}^\dagger + \vartheta_{\vec{k}} a_{\vec{k}-} \quad (4.48)$$

e

$$\gamma_{\vec{k}(-)(-)} = \vartheta_{\vec{k}} a_{-\vec{k}+}^\dagger - \mu_{\vec{k}} a_{\vec{k}-} \quad (4.49)$$

O conjunto composto pelas equações (4.45), (4.46), (4.48), (4.49) é resultado das relações inversas de um conjunto de equações dos operadores $a_{\vec{k}\eta}$, que são conhecidos como *transformações de Bogoliubov* [26]. Em resumo, temos as seguintes relações:

$$E_{(+)(+)} = \alpha_R k + \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} \quad (4.50)$$

$$\gamma_{\vec{k}(+)(+)} = \vartheta_{\vec{k}} a_{\vec{k}+} - \mu_{\vec{k}} a_{-\vec{k}-}^\dagger \quad (4.51)$$

$$E_{(+)(-)} = \alpha_R k + \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} \quad (4.52)$$

$$\gamma_{\vec{k}(+)(-)} = \mu_{\vec{k}} a_{\vec{k}+} + \vartheta_{\vec{k}} a_{-\vec{k}-}^\dagger \quad (4.53)$$

$$E_{(-)(+)} = -\alpha_R k + \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} \quad (4.54)$$

$$\gamma_{\vec{k}(-)(+)} = \mu_{\vec{k}}^* a_{-\vec{k}+}^\dagger + \vartheta_{\vec{k}} a_{\vec{k}-} \quad (4.55)$$

$$E_{(-)(-)} = -\alpha_R k - \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \quad (4.56)$$

$$\gamma_{\vec{k}(-)(-)} = \vartheta_{\vec{k}} a_{-\vec{k}+}^\dagger - \mu_{\vec{k}} a_{\vec{k}-} \quad (4.57)$$

onde

$$\vartheta_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.58)$$

e

$$\mu_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.59)$$

Finalmente, na base $\{\gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}\}$ o Hamiltoniano H passa a ser escrito como

$$H = \sum_{\vec{k}} \sum_{\eta_1, \eta_2} E_{\vec{k},\eta_1,\eta_2} \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}^\dagger \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}, \quad (4.60)$$

onde $E_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}$ representa a energia das quasi-partículas, $\gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}$ são operadores que obedecem às regras de anticomutação de Fermi-Dirac, escrito em termos dos operadores $a_{\vec{k}\eta}$, e η_1 e η_2 podem assumir dois valores, $\eta_1 = \pm$ e $\eta_2 = \pm$.

Capítulo 5

Resultados e Discussão

A partir dos resultados obtidos no quarto capítulo, no presente capítulo determinaremos o gap do supercondutor em função da temperatura e do parâmetro de Rashba α_R , bem como as propriedades termodinâmicas do modelo estudado.

5.1 Determinação do Gap $\Delta_{\vec{k}}$

Nesta seção calcularemos o efeito da interação de Rashba, representada pelo parâmetro α_R , sobre o gap $\Delta_{\vec{k}}$ da teoria BCS, dado pela equação (4.4):

$$\Delta_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle. \quad (5.1)$$

Vamos escrever a equação (5.1) na base $\{\gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}\}$ em que o Hamiltoniano H , dado pela equação (4.60), é diagonal. Portanto, escrevendo $\langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle$ em termos de $\langle \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}^\dagger \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2} \rangle$, com $\eta_1, \eta_2 = \pm$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle &= -\frac{1}{2} \left[\mu_{\vec{k}}^* \vartheta_{\vec{k}} \langle \gamma_{\vec{k}(+)(+)}^\dagger \gamma_{\vec{k}(+)(+)} \rangle - \vartheta_{\vec{k}}^* \mu_{\vec{k}} \langle \gamma_{\vec{k}(+)(-)}^\dagger \gamma_{\vec{k}(+)(-)} \rangle \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} \left[\vartheta_{\vec{k}}^* \mu_{\vec{k}} \langle \gamma_{\vec{k}(-)(-)}^\dagger \gamma_{\vec{k}(-)(-)} \rangle + \mu_{\vec{k}}^* \vartheta_{\vec{k}} \langle \gamma_{\vec{k}(-)(+)}^\dagger \gamma_{\vec{k}(-)(+)} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Como o Hamiltoniano H , dado pela equação (4.60), é diagonal na base $\{\gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}\}$, o termo $\langle \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}^\dagger \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2} \rangle$ representa o número de ocupação das quase partículas definidas por aquele Hamiltoniano. Assim, a distribuição de Fermi-Dirac $f(E_{\vec{k}\mu\nu})$ correspondente à energia $E_{\vec{k}\mu\nu}$ [27], onde $\mu = \pm$ e $\nu = \pm$, é dada por

$$f(E_{\vec{k}\mu\nu}) = \langle \gamma_{\vec{k}\mu\nu}^\dagger \gamma_{\vec{k}\mu\nu} \rangle = \frac{1}{\exp(\beta E_{\vec{k}\mu\nu}) + 1}$$

Substituindo $\langle \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2}^\dagger \gamma_{\vec{k},\eta_1,\eta_2} \rangle$ por $f(E_{\vec{k}\mu\nu})$ na equação (5.2), teremos:

$$\langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle = \frac{1}{2} \mu_{\vec{k}} \vartheta_{\vec{k}} [f(E_{\vec{k}-+}) - f(E_{\vec{k}+-}) + f(E_{\vec{k}++}) - f(E_{\vec{k}--})] \quad (5.3)$$

Inserimos na equação (5.3) os autovalores de energia encontrados no segundo passo da diagonalização feita no capítulo 4, e considerando que $\xi_{\vec{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}$, obtemos a seguinte relação

$$\langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{-\vec{k}'\uparrow} \rangle = \frac{1}{2} \mu_{\vec{k}} \vartheta_{\vec{k}} \left[-\tanh\left(\frac{\beta(\alpha_R k - \xi_{\vec{k}})}{2}\right) + \tanh\left(\frac{\beta(\alpha_R k + \xi_{\vec{k}})}{2}\right) \right] \quad (5.4)$$

Substituindo a equação (5.4) na equação (5.1), escrevemos

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \mu_{\vec{k}'} \vartheta_{\vec{k}'} \left[-\tanh\left(\frac{\beta(\alpha_R k' - \xi_{\vec{k}'})}{2}\right) + \tanh\left(\frac{\beta(\alpha_R k' + \xi_{\vec{k}'})}{2}\right) \right] \quad (5.5)$$

Fazendo a aproximação da teoria BCS em que $V_{\vec{k}\vec{k}'} = -V$ e $\Delta_{\vec{k}} = \Delta$, associada à condição em que

$$\mu_{\vec{k}} \vartheta_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta_{\vec{k}}}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}}, \quad (5.6)$$

obtida do produto da equação (4.58) pela equação (4.59), finalmente chegamos à relação de auto-consistência com o acoplamento de Rashba:

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}} \left[-\tanh\left(\frac{\beta(\alpha_R k - \xi_{\vec{k}})}{2}\right) + \tanh\left(\frac{\beta(\alpha_R k + \xi_{\vec{k}})}{2}\right) \right] \quad (5.7)$$

Nota-se na equação acima (5.7) que quando fazemos $\alpha_R = 0$, caímos na situação de auto consistência de um supercondutor sem a contribuição de Rashba. Portanto, uma transformação canônica do Hamiltoniano BCS pode nos levar aos mesmos resultados que a abordagem variacional, mas com a vantagem de simplificar as manipulações com estados excitados.

5.1.1 Relação entre o gap e a temperatura

Transformando a soma em \vec{k} (na equação (5.7)) em uma integral em $\varepsilon_{\vec{k}}$, e considerando que no nível de Fermi a densidade de estados é constante e dada por $\rho(\varepsilon_F)$, teremos

$$1 = \frac{V}{4} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon_F)}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \left[-\tanh \left(\frac{\beta(\bar{\alpha}_R \sqrt{\varepsilon_k} - \xi_k)}{2} \right) + \tanh \left(\frac{\beta(\bar{\alpha}_R \sqrt{\varepsilon_k} + \xi_k)}{2} \right) \right], \quad (5.8)$$

onde ω_D é a frequência de Debye, ou seja, a frequência máxima de oscilações, e

$$\bar{\alpha}_R = \alpha_R \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}. \quad (5.9)$$

Da equação (5.8) é possível obter Δ em função da temperatura T , substituindo β por $\frac{1}{k_B T}$. Para isso, vamos considerar a densidade de estados no nível de Fermi constante, ou seja, $\rho(\varepsilon) = \rho(\varepsilon_F)$. Portanto, teremos:

$$1 = \frac{\rho(\varepsilon_F)V}{4} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \left[-\tanh \left(\frac{\beta(\alpha_R k - \xi_k)}{2} \right) + \tanh \left(\frac{\beta(\alpha_R k + \xi_k)}{2} \right) \right] \quad (5.10)$$

No limite da temperatura tender a zero e $\alpha_R = 0$, a equação acima se reduz a

$$1 = \frac{\rho(\varepsilon_F)V}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad (5.11)$$

Após a resolução da integral (5.11) e substituição dos seus respectivos limites de integração, chega-se a seguinte relação

$$\Delta = \frac{2\omega_D}{\exp\left(\frac{1}{\rho(\varepsilon_F)V}\right) - \exp\left(-\frac{1}{\rho(\varepsilon_F)V}\right)} \quad (5.12)$$

No limite do acoplamento fraco, ou seja, $\rho(\varepsilon_F) \ll 1$, a equação acima resulta em:

$$\Delta = 2\omega_D \cdot \exp\left(-\frac{1}{\rho(\varepsilon_F)V}\right). \quad (5.13)$$

A partir dessa equação verificamos a distância energética entre o estado fundamental e o estado excitado.

Voltando à discussão da relação entre o gap e a temperatura, observamos que a equação (5.10), apresenta somente solução numérica, pois o delta se encontra dentro de uma função integro diferencial, que não apresenta solução analítica. Para verificar o comportamento do gap Δ em relação à temperatura, inicialmente faremos a situação mais simples, que é exatamente o material sem o efeito Rashba. Para isso tomaremos $\alpha_R = 0$, que resulta no gráfico apresentado na figura (5.1). Notamos que os valores do gap tendem a diminuir com o aumento da temperatura, até atingir o valor zero para temperaturas maiores ou iguais à temperatura crítica T_c . A partir dessa temperatura o estado supercondutor é

destruído.

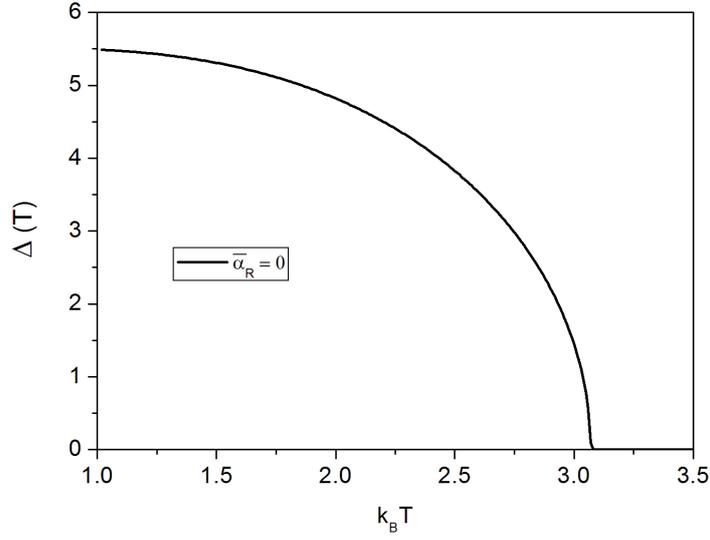


Figura 5.1: Valores de Δ em função da temperatura ($k_B T$) para o caso em que não existe o efeito Rashba, isto é, $\bar{\alpha}_R = 0$. Nesse caso recupera-se os valores obtidos pela teoria BCS. Fonte: Autoria própria (2015).

A figura (5.2) mostra as variações de Δ com a temperatura T para diferentes valores do parâmetro de Rashba, $\bar{\alpha}_R$. Observa-se que quanto maior o valor do parâmetro de Rashba $\bar{\alpha}_R$, menor é o valor da temperatura crítica T_c .

Da figura (5.2) é possível retirar as seguintes relações:

$$\left. \frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = \frac{5.5}{3.07} = 1.78 \right\} \rightarrow \alpha_R = 0.0 \quad (5.14)$$

$$\left. \frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = \frac{5.5}{2.81} = 1.95 \right\} \rightarrow \alpha_R = 1.0 \quad (5.15)$$

$$\left. \frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = \frac{5.5}{2.53} = 2.17 \right\} \rightarrow \alpha_R = 1.4 \quad (5.16)$$

$$\left. \frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = \frac{5.5}{1.74} = 3.16 \right\} \rightarrow \alpha_R = 2.0 \quad (5.17)$$

O resultado apresentado na equação (5.14) está de acordo com o valor esperado teoricamente para supercondutores sem a interação spin-órbita de Rashba [9][5], pois essa razão de energia é o que se espera para supercondutores convencionais. Os valores (5.14) a (5.17), estão relacionados ao desnível entre o calor específico do estado supercondutor e o estado normal, a partir deles é possível verificar numericamente se o desnível aumenta ou diminui com o aumento do parâmetro de Rashba, por isso são importantes.

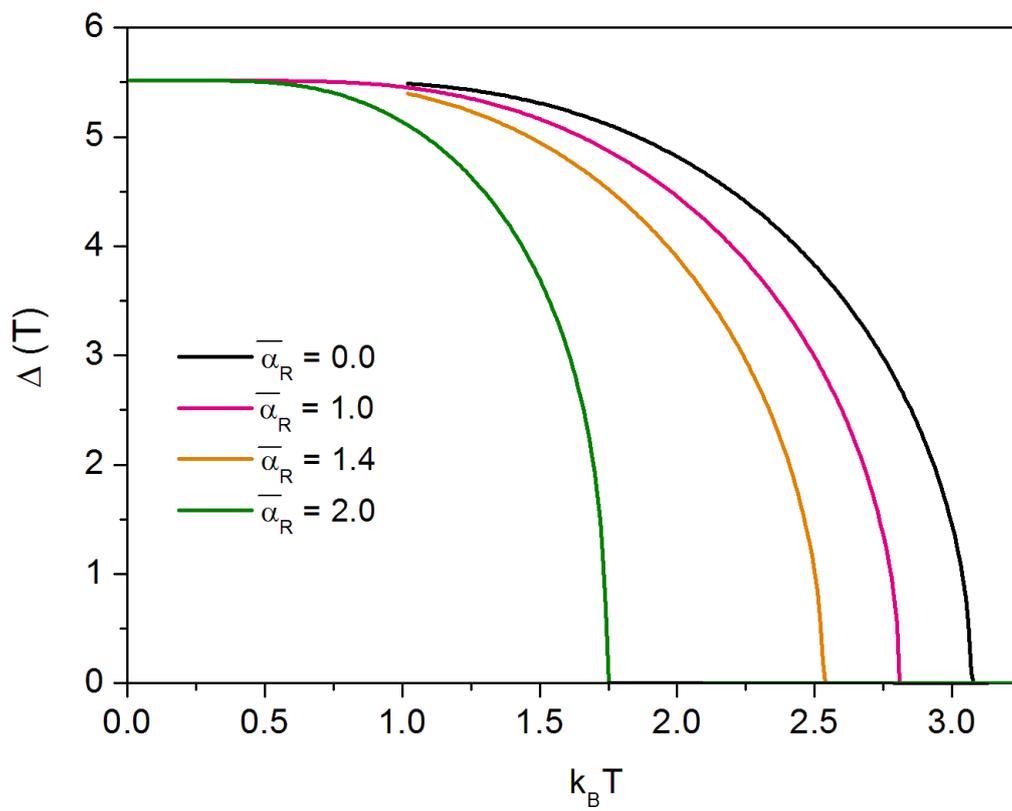


Figura 5.2: Gaps de energia de um supercondutor sob o efeito Rashba. Fonte: Autoria própria (2015).

Devido às alterações na temperatura e nos valores correspondentes aos gaps de energia, as propriedades termodinâmicas do material supercondutor são alteradas, bem como as propriedades magnéticas.

A figura (5.3) mostra um decréscimo na temperatura devido o aumento no parâmetro de Rashba, a linha cheia que acompanha perfeitamente os pontos obtidos teoricamente, foi obtida usando a equação (5.18). A partir de um determinado $\bar{\alpha}_R$ o estado supercondutor é destruído, neste caso o valor do alpha crítico (valor que o estado supercondutor é destruído) é aproximadamente 2.4.

$$\frac{\bar{\alpha}_R}{\bar{\alpha}_{Rc}} = \sqrt{1 - \left(\frac{T_c(\bar{\alpha}_R)}{T_c(\bar{\alpha}_R = 0)} \right)^2} \quad (5.18)$$

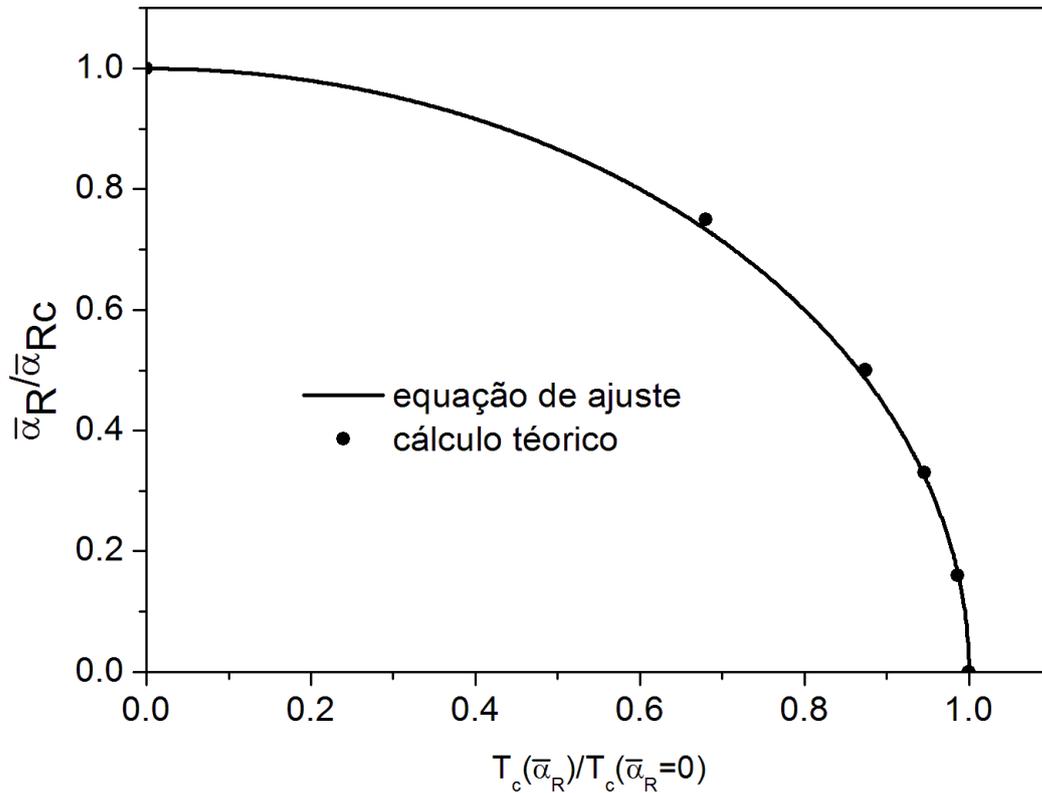


Figura 5.3: Relação entre a constante de Rashba $\bar{\alpha}_R$ e a temperatura crítica T_c de um supercondutor descrito pela teoria BCS. Fonte: Autoria própria (2015).

5.2 Propriedades Termodinâmicas

5.2.1 A descontinuidade do calor específico de um supercondutor

Com $\Delta(T)$ determinado, é possível obter a energia das quasi-partículas $E_{\vec{k}} = \left[\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta(T)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$. Estas energias permitem encontrar o número de ocupação, dado pela função de Fermi $f_{\vec{k}} = (1 + e^{\beta E_{\vec{k}}})^{-1}$, o qual, determina a entropia eletrônica para um gás de fermions. Para um gás de fermions a entropia eletrônica é dada por [5],

$$s_{es} = -2k_B \sum_{\vec{k}} [f_{\vec{k}} \ln f_{\vec{k}} + (1 - f_{\vec{k}}) \ln(1 - f_{\vec{k}})] \quad (5.19)$$

O calor específico pode ser obtido a partir da seguinte definição [29]:

$$c = \beta \left(\frac{\partial s}{\partial \beta} \right) \quad (5.20)$$

Usando a equação (5.20) na equação (5.19), que resulta:

$$c_{es} = 2\beta k \sum_{\vec{k}} -\frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial E_{\vec{k}}} \left(E_{\vec{k}}^2 + \frac{1}{2}\beta \frac{d\Delta^2}{d\beta} \right) \quad (5.21)$$

Quando o $\Delta(T)$ da equação (5.21) vai para zero, o material retorna ao seu estado normal, restando somente o primeiro termo do lado direito da equação, que corresponde ao calor específico no estado normal. Por se tratar de um gás de elétrons [30],

$$c_{en} = \frac{2\pi^2}{3} \rho(0) k_B^2 T = \gamma T \quad (5.22)$$

Como há uma descontinuidade finita em torno da temperatura crítica, passando o primeiro termo equação (5.21) para o lado esquerdo (o que equivale a uma diferença entre o calor específico supercondutor pelo normal) e transformando a soma em uma integral, encontra-se a seguinte relação:

$$\Delta c = (c_{es} - c_{en})_{T_c} = \rho(0) \left(\frac{-d\Delta^2}{dT} \right)_{T_c} \quad (5.23)$$

Para determinar o desnível dado pela equação (5.23), é necessário conhecer o comportamento de $\Delta(T)$ próximo de T_c , o cálculo de ajuste para a queda de $\Delta(T)$ perto de T_c é dado aproximadamente por esse valor:

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1.75 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.24)$$

Usando a aproximação (5.24) para $\Delta(T)$, com $\Delta(0)/k_B T_c$ conhecido, obtem-se:

$$\frac{\Delta c}{\gamma} = \frac{0.46\Delta(0)^2}{k_B^2 T_c} \quad (5.25)$$

A variação do desnível é mostrada na figura (5.4). Para isso foram usados os valores dos gaps de energia e da temperatura, obtidos numericamente.

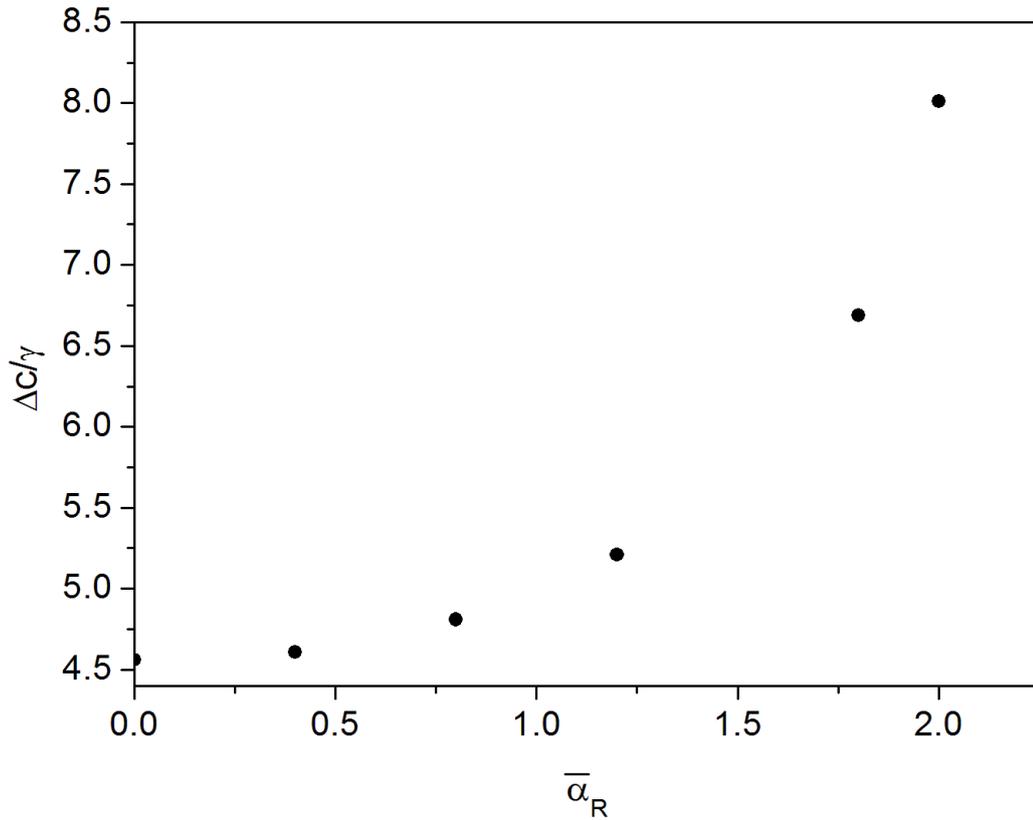


Figura 5.4: Gráfico do desnível entre o calor específico no estado supercondutor pelo calor específico no estado normal em função do alpha de Rashba. Fonte: Autoria própria (2015).

5.2.2 O campo magnético no efeito de transição

A energia livre de Gibbs no estado supercondutor é escrita como [28]:

$$G_{es} = F_{es} + \mu_0 H^2 V \quad (5.26)$$

e na fase normal como:

$$G_{en} = F_{en} + \frac{\mu_0 H^2 V}{2} \quad (5.27)$$

onde G nas equações (5.26) e (5.27) representa a energia de Gibbs. O primeiro termo no lado direito da equação está associado à energia livre de Helmholtz e o segundo termo à energia de magnetização. Observa-se que o segundo termo assume um valor menor no estado normal do que no estado supercondutor, o que se deve à expulsão do campo magnético via efeito Meissner.

No valor crítico do campo, o estado supercondutor é destruído, o que leva $G_{es} = G_{en}$. Logo:

$$F_{es} + \mu_0 H_c^2 V = F_{en} + \frac{\mu_0 H_c^2 V}{2}. \quad (5.28)$$

Dividindo a equação (5.28) pelo volume, chegamos a seguinte relação,

$$f_{en} - f_{es} = \frac{\mu_0 H_c^2}{2} \quad (5.29)$$

Associando a equação (5.23) e a (5.24) a equação (5.29), obtemos o seguinte resultado:

$$f_{en} - f_{es} = 0.23\gamma \left(\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} \right)^2 (T - T_c)^2 = \frac{\mu_0 H_c^2}{2} \quad (5.30)$$

ou

$$\frac{\mu_0 H_c^2}{2} = 0.23\gamma \left(\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} \right)^2 (T - T_c)^2 \quad (5.31)$$

A equação (5.31), mostra que ocorrem mudanças no campo magnético termodinâmico, que no caso dos supercondutores tipo I é exatamente igual ao campo magnético crítico, fisicamente essas mudanças ocorrem porque ao acrescentar a interação spin-órbita, a diferença de energia ($f_{en} - f_{es}$) é alterada.

A figura (5.5), mostra o comportamento do campo crítico próximo da temperatura crítica. As curvas se diferenciam devido a uma mudança na energia interna do sistema.

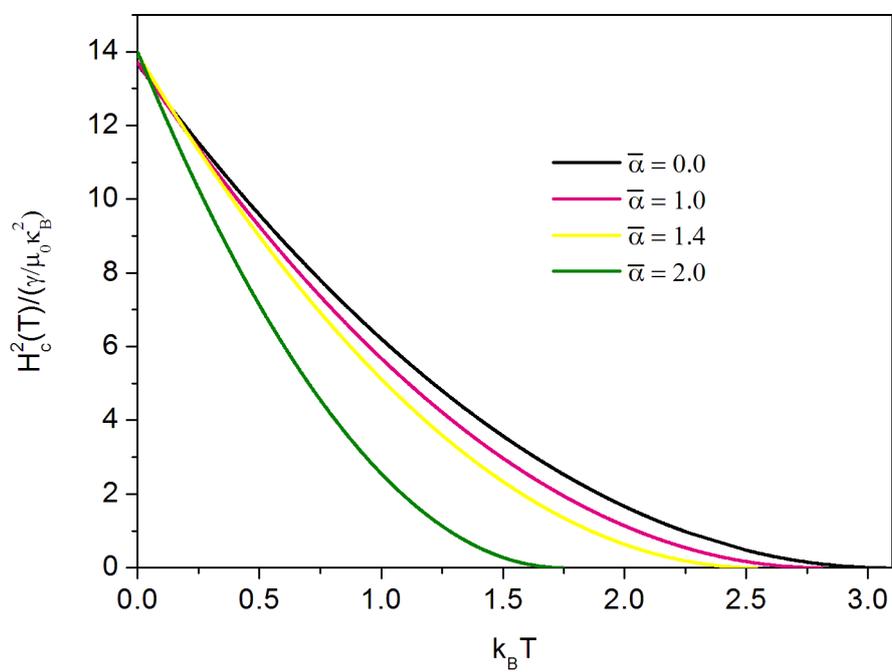


Figura 5.5: Campo magnético crítico em função da temperatura. Fonte: Autoria própria (2015).

Capítulo 6

Conclusões

Nesta dissertação estudou-se as propriedades termodinâmicas de um supercondutor convencional, sobre o efeito da interação spin-órbita de Rashba, o qual é descrito pela teoria BCS. No capítulo 1 foi feita uma breve discussão a respeito das propriedades gerais dos materiais supercondutores e suas respectivas evoluções teóricas. No capítulo 2, estudou-se a teoria BCS, o fenômeno supercondutor, as variações energéticas e, finalmente, apresentado o Hamiltoniano BCS como o mesmo seria utilizado no trabalho.

O capítulo 3 foi destinado a apresentar a interação spin-órbita e, conseqüentemente, mostrar o Hamiltoniano de Rashba de forma compacta que, acoplado ao Hamiltoniano BCS, representa o Hamiltoniano do modelo.

Após a apresentação do Hamiltoniano do modelo, no capítulo 4 foi iniciado o processo de diagonalização, o qual foi dividido em dois passos, com o objetivo de encontrar os autovalores e autovetores de energia, além de verificar as mudanças ocorridas nos valores energéticos do sistema. O capítulo 5 foi escrito com a intenção de mostrar a relação entre o gap de energia e a temperatura, e a partir desses valores, pudemos observar como variava o campo magnético crítico, o calor específico, a própria temperatura crítica e o gap de energia.

Ao final foi possível observar que a razão entre os gaps de energia por $k_B T_c$ é alterada, conseqüentemente altera-se o desnível do calor específico do estado normal pelo estado supercondutor, fugindo assim do comportamento teórico padrão para um supercondutor sem o efeito Rashba (ver equações (5.14), (5.15), (5.16), (5.17)). Observa-se ainda que a medida que o campo elétrico aumenta, via efeito Rashba, a temperatura crítica do material supercondutor convencional vai tendendo a diminuir cada vez mais (ver figura (5.2) e (5.3)), uma observação importante, é que a constante de Rashba α_R tem um valor crítico, acima deste valor o estado supercondutor também é destruído. O resultado físico mais interessante está em torno das mudanças na energia interna do sistema, que diminui visivelmente, conseqüentemente produz mudanças no comportamento do campo

magnético crítico. O desnível do calor específico tende a aumentar, aumentando também a transição de fase do estado normal para o estado supercondutor.

Apêndice A

Unidades

A tabela a seguir mostra algumas unidades de grandezas e constantes utilizadas nesta dissertação.

Tabela A.1: Unidades

símbolo	nome	unidade SI
α_R	constante de Rashba	$\frac{J.s}{kg.m}$
Δ	gap de energia	J
\hbar	constante de Planck	$J.s$
\vec{B}	indução magnética	T
γ	coef. do termo linear	$\frac{J}{mol.K^2}$
μ_0	permeabilidade	$\frac{T.m}{A}$
$k_B T$	energia	J
c	calor específico	$\frac{J}{mol.K}$

As relações $\frac{\Delta c}{\gamma}$, $(f_{en} - f_{es})$ e $\frac{\mu_0 H_c^2}{2}$ apresentam unidades SI.

Referências Bibliográficas

- [1] Jornal homepage: www.elsevier.com/locate/cryogenics.
- [2] H. Kamerlingh Onnes, Leiden Comm. **120b**, **122b**, **124c** (1911).
- [3] Dirk van Delft and Peter Kes, physics today, september (2010).
- [4] The American Physical Society, Series II, vol.16, No.4, p.2 April (2007).
- [5] Tinkhan, Michael. Introduction to superconductivity. segunda edição. New York. Mc Graw-Hill Book Co, republicado (1996).
- [6] F. Ostermann, L.M. Ferreira, C.J.H. Cavalcanti, Rev. Bras. Ens. Fis. **20**, 270 (1998).
- [7] F. London, Superfluids, vol.I, Wiley, New York, 1950.
- [8] V. L. Ginburg and L. D. Landau, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. **20**, 1064 (1950).
- [9] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [10] IX Escola CBPF. Curso supercondutividade. (2012).
- [11] W. Meissner and R. Ochsenfeld, *Naturwissenschaften* **21**, 787 (1933).
- [12] A. A. Abrikosov, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* **32**, 1442 (1957)[*Sov. phys. - JETP* **5**, 1174 (1957)].
- [13] D. Saint-James, G. Sarma, E. J. Tomas, *Type II superconductivity*, Pergamon, (1969).
- [14] P. G. de Gennes, *Superconductivity of metals and alloys*, Benjamin, (1966).
- [15] J. H. P. Watson and G. M. Graham, *The Thermal Conductivity of Pb and Hg near T_c* , *Canadian Journal of Physics*, (1963).
- [16] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 6a. ed., John Wiley and Sons, New York (1986).

- [17] Neeraj Mehta, *Applied Physics for Engineers*, Department of Physics, Banaras Hindu University Varanasi (2011).
- [18] L. N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [19] J. J. Sakurai. *Modern quantum mechanics*. Addison - Wesley (1994).
- [20] B. K. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors* Clarendon. Press. Oxford. (1993).
- [21] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*. Pergamon Press. Oxford, (1991).
- [22] A. V. Moroz and C. H. W. Barnes. *Phys. Rev.* **62**, January (2000).
- [23] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. *Introduction to Many-body quantum theory in condensed matter physics*. Copenhagen, 15 August (2002).
- [24] Symon. Keith R. *Mecânica*. tradução de Gilson Brand Batista- Rio de Janeiro. (1996).
- [25] C. Kittel. *Quantum Theory of Solids*. 2a ed. John Wiley and Sons. Nova York (1987).
- [26] Hebe Queiroz. *O Operador Espalhamento para Férmions num Campo Externo em Thermofield Dynamics*. Tese de doutoramento - UNESP - SP (2002).
- [27] Ivan S. O. e Vitor L. B. de Jesus. *Introdução à física do estado sólido*. 2a. ed. - SP: Editora livraria da Física (2011).
- [28] Pureur Neto, Paulo. *Supercondutividade e materiais supercondutores*. v.1 - Porto Alegre: Instituto de Física - UFRGS (2004).
- [29] Francis W. Sears e Gehard L. Salinger. *Termodinâmica, Teoria Cinética e Termodinâmica Estatística*. 3a.ed. - RJ: Editora Reverté, S. A. - 1978.
- [30] Neil W. Ashcroft e N. David Mermin. *Física do estado sólido*. São Paulo: Cengage Learning - 2011.