

ASPECTOS DA SUPERCONDUTIVIDADE EM SISTEMAS DE DUAS BANDAS

Tese de
MESTRADO

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro

1989

dedico esta tese

ao Lula

AGRADECIMENTOS

Agradeço,

Ao Prof. Oscar Leonel Telles de Menezes por ter me orientado nesta tese e por ter sido sempre tão receptivo às minhas solicitações.

Aos meus pais por serem maravilhosos.

Aos amigos Jú e João, Marco Aurélio, Zé Luiz, Gerson, Moacir, Lena, Guido, e muitos outros que fizeram parte desta caminhada, me dando tanto carinho e atenção.

A Deborah por eu ter tido a felicidade de sua amizade na passagem de sua vida.

A Luiz Reis por ter me auxiliado na parte computacional.

Em especial ao Lula, sempre me ajudando, tirando minhas dúvidas, dividindo minhas angústias, e me mostrando os caminhos mais fáceis.

RESUMO

Neste trabalho estudamos alguns aspectos da supercondutividade em sistemas de duas bandas superpostas.

Utilizamos o modelo proposto por Suhl, Matthias e Walker (SMW).

Na Teoria BCS são determinadas algumas razões, cujos valores são ditos universais. Nós mostramos que os sistemas de duas bandas, quando tratados no mesmo regime de acoplamento fraco, apresentam valores de $2\Delta(0)/k_B T_C$ distintos daqueles. Tais valores foram encontrados em supercondutores a altas temperaturas críticas e em sistemas de férmions pesados.

Introduzimos a hibridização ao modelo de duas bandas e calculamos os "gaps" de energia similares aos obtidos no modelo SMW, com o intuito de compararmos o caso hibridizado com o não hibridizado.

SUMÁRIO

agradecimentos

resumo

sumário

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

- 1.1 - *Breve Histórico sobre a Supercondutividade* 1
- 1.2 - *Estruturação do Texto* 4

CAPÍTULO 2 - ALGUNS RESULTADOS DA TEORIA BCS

- 2.1 - *Introdução* 6
- 2.2 - *Formulação da Teoria BCS* 7
- 2.3 - *Dependência do "Gap" de Energia com a Temperatura* 15
- 2.4 - *Temperatura Crítica* 17

CAPÍTULO 3 - MODELO DE DUAS BANDAS SUPERPOSTAS

- 3.1 - *Introdução* 19
- 3.2 - *O Modelo de Puth, Matthias e Walker* 20
- 3.3 - *Aproximação "Tight Binding"* 24
- 3.4 - *Caso Geral* 35

CAPÍTULO 4 - MODELO DE DUAS BANDAS COM HIBRIDIZAÇÃO

- 4.1 - *Introdução* 44
- 4.2 - *Modelo* 45
- 4.3 - *Estado Singlete* 50
- 4.4 - *"Gap" de Energia* 56

CONCLUSÃO 65

APÊNDICE A 68

BIBLIOGRAFIA E REFERÊNCIAS 72

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 BREVE HISTÓRICO SOBRE A SUPERCONDUTIVIDADE

A Supercondutividade foi descoberta em 1911 [1], pelo físico holandês Heike Karmelinh Onnes (1853-1926), ao estudar a resistividade de certos materiais puros a baixas temperaturas. Onnes observou que na temperatura de liquefação do hélio (4.2K), a resistência elétrica de uma amostra de mercúrio caía bruscamente para 10^{-6} omhs. Logo depois, em 1913 [2], ele verificou que estes materiais, que foram denominados de supercondutores, voltavam ao seu estado de condutância normal caso fosse aplicada uma corrente elétrica suficientemente alta. No entanto em 1916, F. B. Silabe [3] mostrou que a quebra do estado supercondutor era devido ao efeito do campo magnético associado à corrente elétrica.

Os materiais supercondutores não se caracterizam simplesmente por possuírem resistividade nula a baixas temperaturas. Em 1933 [4], os físicos alemães W. Meissner e R. Ochsenfeld observaram que quando aplicado um campo magnético sobre uma amostra no estado supercondutor, as linhas de campo da indução magnética não penetravam no material, ou seja, o estado supercondutor comporta-se como um diamagnético perfeito. Este efeito ficou conhecido como "Efeito Meissner-Ochsenfeld".

Em 1950 [5] e [6], observou-se o "Efeito Isotópico". na qual a temperatura crítica de um supercondutor varia com a razão inversa da potência 1/2 da massa isotópica, ou seja:

$$T_c M^{1/2} = \text{constante}$$

Fröhlich [7], no mesmo ano, propôs uma teoria para explicar este efeito, onde a interação dos elétrons com a vibração da rede do cristal exerceria papel principal. Essa interação é denominada de *interação elétron-fónon*.

Em 1953 [8] surge a constatação experimental que os supercondutores possuem um "*gap*" de energia, isto é, um intervalo de energia proibido para acomodar elétrons, localizado entre o estado fundamental supercondutor e o primeiro estado excitado.

J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer [9], em 1957, desenvolveram uma bem sucedida teoria microscópica conhecida como a *Teoria BCS*. Nela, eles conseguiram descrever adequadamente tanto o "*gap*" de energia quanto o Efeito Isotópico.

Já em 1960 [10] surge o "*Efeito de Tunelamento*", descoberto por Glaver. Este efeito consiste de um elétron passar de uma junção condutora para uma supercondutora. Em 1962, B. D. Josephson [11] estudou dois efeitos, *Efeito Josephson DC*, *Efeito Josephson AC*. O primeiro consiste da passagem de uma supercorrente através da junção supercondutor-isolante-supercondutor, sem voltagem aplicada. No segundo efeito, quando é aplicada uma voltagem DC numa junção do mesmo tipo, surgem correntes oscilatórias de rádio frequência.

Recentemente, os físicos J. Bednorz e K.Müller [12], em 1986 anunciaram que as cerâmicas supercondutoras, constituídas por estruturas complexas de bário, lantânio, cobre e oxigênio, possuíam uma temperatura crítica muito elevada, acima de 30K.

A Supercondutividade é um assunto muito vasto e de grande importância tanto na área de pesquisa básica quanto no desenvolvimento científico e tecnológico; este fato está refletido nos vários prêmios Nobel concedidos a essa área da

Física, são eles:

1913 - *H. K. Onnes*

1972 - *J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer*

1973 - *J. Giaever, B. D. Josephson, L. Iaaki*

1987 - *J. Bednorz e K.Müller*

Como podemos observar após este breve histórico, a Supercondutividade é um tema de interesse na Física desde o início do século XX. Até o que se antecede à formulação da Teoria BCS, muitos cientistas perseguiram incessantemente uma trilha para a descrição microscópica deste fenômeno. Em 1979, com a descoberta dos novos materiais supercondutores, entre os sistemas denominados de "*férmions pesados*" [13], despertou atenção, em virtude de suas propriedades supercondutoras anômalas consequência de grandes massas efetivas envolvidas na formação de pares de Cooper. Somente em 1986 surgem as cerâmicas supercondutoras [12], materiais que apresentavam a possibilidade de se obter temperaturas críticas elevadas, implicando numa enorme motivação nesta área de pesquisa. Para estes compostos é suposto que a interação elétron-fónon não exerça mais o papel principal, e neste caso a Teoria BCS não se aplicaria. Mais uma vez, aparecem diversas tentativas para a formulação de uma nova teoria que descreva estes novos supercondutores cerâmicos. Entretanto, até o presente momento, nenhuma destas teorias podem ser consideradas como definitiva [14].

1.2 ESTRUTURAÇÃO DO TEXTO

Esta tese não tem como objetivo tentar explicar quais os mecanismos responsáveis pela supercondutividade a altas temperaturas ou em férmions pesados. Nós aqui abordaremos alguns aspectos da supercondutividade em sistemas de duas bandas superpostas, sempre dentro de uma visão convencional; usaremos uma extensão da Teoria BCS no mesmo regime de acoplamento fraco.

Nosso interesse em estudar esse tipo de modelo vem do fato de que materiais supercondutores tem sido classificados por comparação das razões $2\Delta/k_B T_c$, $\Delta C/\gamma T_c$, dadas na teoria BCS com resultados experimentais obtidos nestes sistemas. Entretanto pode-se observar que mesmo dentro do referencial da Teoria BCS modelos teóricos que levam em conta, por exemplo a presença de duas bandas superpostas na superfície de Fermi implicam em valores das razões diferentes daquelas encontradas na Teoria BCS convencional. Isto corresponde a dizer que uma comparação direta destas razões não seria suficiente para caracterizar regimes de acoplamento forte ou fraco, e invalidar uma aplicação da Teoria BCS.

O texto está estruturada da seguinte forma:

No capítulo 2 fazemos um breve sumário da Teoria BCS [9], nos restringindo ao cálculo do "gap" de energia em função da temperatura e ao cálculo da temperatura crítica do sistema. Para isso utilizamos uma interação elétron-fónon constante, como foi feito originalmente. Esse capítulo servirá de base para os que se seguem.

O capítulo 3 dedicamos ao problema de duas bandas superpostas. Usamos o Modelo de Suhl, Matthias e Walker [15], que

é uma extensão da Teoria BCS. Neste modelo as duas bandas estão acopladas através de um termo interbanda, que pode ser descrito pela criação de um par tipo Cooper numa banda e a destruição de um outro par na outra banda, com um potencial de interação V_{ab} . Quando V_{ab} é nulo, o sistema de equações auto-consistentes se desacopla e obtém-se duas temperaturas críticas distintas. Portanto queremos conhecer o comportamento do sistema quando V_{ab} está presente, sendo porém pequeno o produto dos potenciais interbandas quando comparado com o produto dos potenciais intrabandas. A princípio supomos que as bandas são estreitas e nesse caso, o uso de uma aproximação do tipo "Tight Binding" se faz adequada. Apresentamos alguns resultados numéricos que mostram a variação da temperatura crítica e dos "gaps" de energia para diversos parâmetros. Em seguida tratamos o problema para qualquer tipo de banda, sem aproximações. Aqui encontramos resultados originais, que estão diretamente relacionados a observações em supercondutores a altas temperaturas e também em sistemas de férmions pesados, apesar de termos usado uma teoria convencional num regime de acoplamento fraco. Ao final deste capítulo fazemos uma discussão sobre os nossos resultados e comparamo-os com outros trabalhos publicados neste contexto.

No capítulo 4 introduzimos a hibridização ao modelo de duas bandas. O sentido físico da hibridização é criar, no estado normal, novas bandas com caráter misto. Mostramos analiticamente como a hibridização pode alterar os "gaps" de energia.

Finalmente, apresentamos as conclusões deste trabalho e discutimos possíveis extensões.

CAPÍTULO 2

ALGUNS RESULTADOS DA TEORIA BCS

2.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo faremos um breve sumário da Teoria BCS. De tal maneira a nos prover uma base comparativa para o que se seguirá nos próximos capítulos. Esta teoria é adequada para descrever o estado supercondutor no limite de acoplamento fraco.

Foi de grande importância a descoberta do "Efeito Isotópico" para a formulação da Teoria Microscópica da Supercondutividade. Para descrição deste efeito, Fröhlich [7] sugeriu que a interação primária responsável pelo estado supercondutor seria do tipo elétron-fóton. Então, usando uma teoria perturbativa, ele conseguiu determinar corretamente a dependência da massa isotópica com o campo magnético crítico à zero graus Kelvin.

Partindo do Hamiltoniano de Fröhlich, Bardeen, Cooper e Schrieffer desenvolveram a bem conhecida Teoria BCS [9]. Nela, o estado supercondutor é descrito como uma combinação linear das configurações do estado normal, de maneira que os estados de uma partícula são ocupados aos pares com spins e momentos opostos. Se o estado com momentum k é ocupado em qualquer configuração, então o de momentum $-k$ também o será. Surgirá como decorrência da

interação elétron-fónon uma interação efetiva elétron-elétron, de natureza atrativa entre os elétrons, quando a diferença de energia entre os estados dos elétrons envolvidos for menor do que a frequência de fónon. Neste intervalo de energia supõe-se que a interação atrativa supere a repulsão Coulombiana. Em outras palavras, quando um elétron interage com a rede e a deforma, surge localmente um acúmulo de cargas positivas que atrai um segundo elétron. Portanto, o segundo elétron interage indiretamente com o primeiro via deformação da rede.

A Teoria BCS prevê o surgimento de um intervalo de energia que separa o *estado fundamental* supercondutor dos seus *estados excitados*. Muitas das propriedades termodinâmicas e eletromagnéticas são consequência da presença deste "gap" de energia.

2.2 FORMULAÇÃO DA TEORIA BCS

Para formular a Teoria BCS, Bardeen, Cooper e Schrieffer [9] tomaram a interação elétron-fónon como sendo a principal responsável para a ocorrência da supercondutividade. Tendo partido do Hamiltoniano de Fröhlich:

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} p_{\mathbf{q}}^{\dagger} p_{\mathbf{q}} + iD \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} (p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}$$

(2.2.1)

$\epsilon_{\mathbf{k}}$ - energia cinética dos elétrons livres.

ω_q - frequência dos fónons.

c^\dagger, c - operadores de criação e destruição dos elétrons.

p^\dagger, p - operadores de criação e destruição dos fónons.

D - constante de acoplamento elétron-fónon.

Podemos encarar a interação elétron-fónon como sendo composta por duas partes. O termo $p_{-q}^\dagger c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'}$ e o termo $p_q c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'}$, que estão representados esquematicamente na figura (2.2.1) a) e b) respectivamente:

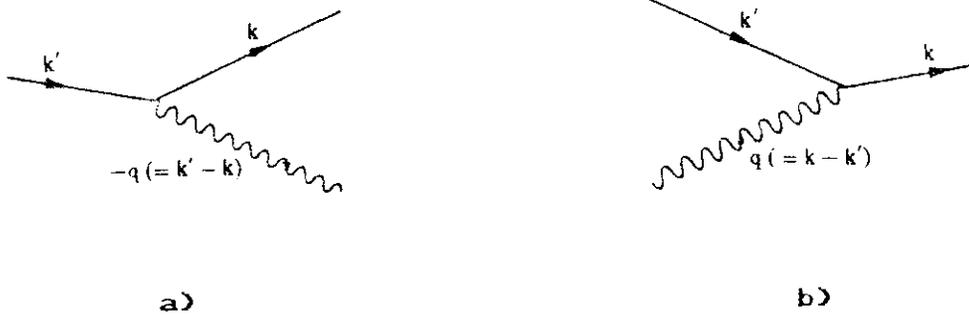


Figura (2.2.1): Um elétron é espalhado de k' para k com:

a) emissão de um fónon com momentum $-q = k' - k$

b) absorção de um fónon com momentum $q = k - k'$.

Queremos expressar a Hamiltoniana de Fröhlich na forma diagonal, para isto usamos uma transformação canônica do tipo:

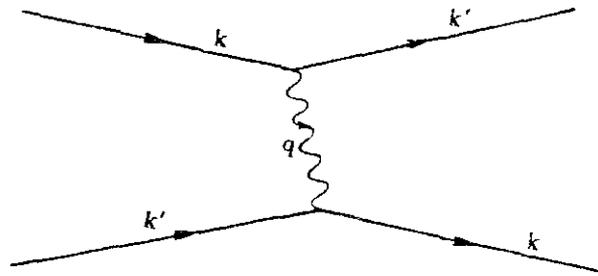
$$H' = e^S H e^{-S}$$

e expandimos em S até segunda ordem, S deve ser escolhido de maneira que o seu comutador com a parte não perturbada de H (H_0), cancele a interação elétron-fónon (H_{e-p}). Então obtemos:

$$H' = H_0 + \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{k} \mathbf{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}', \sigma'} \quad (2.2.2)$$

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = \frac{D^2 \hbar \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})^2 - (\hbar \omega_{\mathbf{q}})^2} \quad (2.2.3)$$

O segundo termo de H' descreve a interação entre os elétrons, que está representada na figura (2.2.2),



Figura(2.2.2): Interação elétron-elétron via um fônon.

Se $|\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}| < \hbar \omega_{\mathbf{q}} \quad (2.2.4)$

a interação elétron-elétron será atrativa.

A condição repulsiva não é de interesse pois corresponde aos estados com energias maiores do que a de Fermi do sistema de elétrons livres. Por isso consideraremos somente o caso (2.2.4).

Faremos um breve parêntesis para explicar porque o estado supercondutor deve ser formado preferencialmente por pares de elétrons que possuem momenta e spins opostos. Isto decorre do Modelo de Cooper [16] para o problema de um par de elétrons

interagentes.

Cooper descreve um sistema de gás de elétrons livres, no qual um único par é formado em consequência da atração entre seus elétrons, tornando com isto, a energia do estado fundamental menor. Os níveis de energia do gás de elétrons livres são preenchidos de acordo com o princípio de Exclusão de Pauli até uma certa energia ϵ_F , a Energia de Fermi. Entretanto este estado fundamental se torna instável na presença de uma interação atrativa entre um par de elétrons. Exceto esses dois elétrons, que possuem coordenadas r_1 e r_2 , todos os demais elétrons do sistema continuam acomodados em níveis de energia inferiores a ϵ_F .

Para descrever o comportamento desse par vamos construir sua função de onda espacial $\Psi(r_1, r_2)$,

$$\Psi(r_1, r_2) = \exp i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2) = \exp i(K \cdot R + k_r \cdot \rho) \quad (2.2.5)$$

$\rho = r_1 - r_2$ é a coordenada relativa.

$k_r = (k_1 - k_2)$ é o momentum relativo.

$R = (r_1 + r_2)/2$ é a coordenada do centro de massa (CM).

$K = (k_1 + k_2)/2$ é o momentum do centro de massa.

Por conveniência nos situaremos no referencial do CM, logo $K=0$, então $k_1 = k$ e $k_2 = -k$. Se expandirmos em série de Fourier, temos:

$$\Psi(r_1, r_2) = \sum_{k > k_F} a_k \exp(i k_r \cdot \rho) = \sum_{k > k_F} a_k \exp(i k \cdot r_1) \exp(-i k \cdot r_2)$$

Podemos pensar como uma superposição de configurações tal que em cada configuração é definida um par de elétrons com momentum k e $-k$.

Pares de elétrons que possuem momenta e spins opostos são chamados de "Pares de Cooper".

O estado supercondutor é formado por um conjunto de pares de Cooper, de forma que podemos aplicar este resultado no Hamiltoniano (2.2.2).

Tendo adotado a seguinte notação:

$$c_{k', \uparrow}^\dagger \equiv c_{k'}^\dagger, \quad c_{-k', \downarrow}^\dagger \equiv c_{-k'}^\dagger ;$$

Então chegamos ao Hamiltoniano BCS:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + c_{-\mathbf{k}}^\dagger c_{-\mathbf{k}}) - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{-\mathbf{k}}^\dagger c_{-\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \quad (2.2.7)$$

O sinal negativo da interação elétron-fónon foi colocado explicitamente em (2.2.7), e $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ é positivo.

Adotaremos aqui um tratamento diferente daquele seguido originalmente pelos autores da Teoria BCS, que aplicaram um método variacional para determinar o mínimo da energia. Usaremos, um método baseado no trabalho de Bogoliubov [17], aplicaremos as transformações canônicas que dão origem as quasi-partículas ou como também são chamadas, aos "bogoliubons".

Diagonalizaremos (2.2.7) através das transformações de Bogoliubov-Valatin [17-18], definindo novos operadores:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (2.2.8.a)$$

$$\gamma_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$$

com seus hermitianos conjugados:

$$\gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}} \quad (2.2.8.b)$$

$$\gamma_{-\mathbf{k}}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}$$

As funções $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ são escolhidos reais para que os novos operadores preservem as relações de anticomutação dos férmions. Então $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ devem obedecer as seguintes regras:

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

$$u_{\mathbf{k}} = u_{-\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad v_{\mathbf{k}} = -v_{-\mathbf{k}}$$

para que $[\gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \gamma_{\mathbf{k}'}] = [\gamma_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, \gamma_{-\mathbf{k}'}] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$

$$[\gamma_{\mathbf{k}}, \gamma_{\mathbf{k}'}] = [\gamma_{\mathbf{k}}, \gamma_{-\mathbf{k}'}] = [\gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \gamma_{-\mathbf{k}'}^{\dagger}] = 0$$

Substituindo (2.2.8.a) e (2.2.8.b) em (2.2.7) obtemos a Hamiltoniana transformada:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} [2v_{\mathbf{k}}^2 + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (m_{\mathbf{k}} + m_{-\mathbf{k}}) + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \gamma_{-\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}})] - \\ & - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} (1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}'}) (1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}}) + \\ & u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} (1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}'}) (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\gamma_{-\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{k}}^{\dagger})] + O(4) \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

onde: $m_{\mathbf{k}} = \gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}}$ e $m_{-\mathbf{k}} = \gamma_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{k}}$

Os termos de quarta ordem $O(4)$ podem ser desprezados, pois contribuem pouco para um estado fundamental tipo de Cooper. Já que, por enquanto estamos somente interessados no estado fundamental na temperatura absoluta, que é constituído de estados ocupados até o nível de Fermi ϵ_F e desocupados acima, o operador número, $m_{\mathbf{k}}$, atuando neste vácuo é, por definição, nulo (ϵ_F é adotado como origem das energias). Devemos impôr em (2.2.9) que os termos não diagonais sejam identicamente nulos. Obtemos assim a seguinte equação:

$$2 \epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} = 0 \quad (2.2.10)$$

Como $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ são dependentes é conveniente reescrevê-los em termos de uma única variável $x_{\mathbf{k}}$, tal que:

$$u_{\mathbf{k}} = (1/2 - x_{\mathbf{k}})^{1/2} \quad v_{\mathbf{k}} = (1/2 + x_{\mathbf{k}})^{1/2} \quad (2.2.11)$$

e definimos uma quantidade:

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (1/4 - x_{\mathbf{k}'}^2)^{1/2} \quad (2.2.12)$$

Substituímos (2.2.11) em (2.2.10) e em seguida (2.2.12), obtemos:

$$x_{\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{2} / (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)^{1/2} \quad (2.2.13)$$

Substituímos (2.2.13) em (2.2.12) e tem-se uma equação transcendental para $\Delta_{\mathbf{k}}$:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = 1/2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2)^{1/2}} \quad (2.2.14)$$

Mais adiante identificaremos que a quantidade definida em (2.2.12) é o "gap" de energia entre o estado fundamental supercondutor e o seu primeiro estado excitados. Para resolvermos (2.2.14) precisamos conhecer o potencial $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$.

Assim como foi feito originalmente na Teoria BCS, utilizaremos um potencial constante e positivo, tal que:

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} V & |\epsilon_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{fora deste intervalo} \end{cases} \quad (2.2.15)$$

onde $\hbar\omega_D$ é a energia de Debye.

Em consequência do potencial ser constante, $\Delta_{\mathbf{k}}$ também o será. Podemos, agora, resolver (2.2.14). Passamos o somatório em \mathbf{k}' para uma integral na energia, e supomos que a densidade de estados do estado normal é constante. Esta aproximação justifica-se já que consideramos uma pequena faixa de energia entorno do nível de Fermi, onde a variação da densidade de estados é suposta desprezível.

Então, o "gap" de energia à $T=0K$ é:

$$\Delta = 2 \hbar\omega_D \exp[-1/VD(\epsilon_F)] \quad (2.2.16)$$

Onde $D(\epsilon_F)$ é a densidade de estados no nível de Fermi.

Em (2.2.16) tomamos o limite de *acoplamento fraco*, $VD(\epsilon_F) \ll 1$, esta aproximação mostra-se adequada em grande parte dos supercondutores.

2.3 DEPENDÊNCIA DO "GAP" DE ENERGIA COM TEMPERATURA

Vamos generalizar os resultados obtidos anteriormente para temperaturas diferentes de zero. Neste caso, teremos excitações térmicas e existirá uma probabilidade diferente de zero de encontrarmos uma quasi-partícula em um estado acima do fundamental. De forma que devemos introduzir a função distribuição de Fermi-Dirac que dará a ocupação média das quasi-partículas em cada estado.

O procedimento para encontrar o "gap" de energia em uma temperatura finita será igual ao que foi feito para $T=0K$, os mesmos passos de (2.2.9) à (2.2.14) sendo que agora os operadores números terão suas médias quânticas, $\langle m_{\mathbf{k}} \rangle$ e $\langle m_{-\mathbf{k}} \rangle$, substituídas por suas médias térmicas, ou seja, pela função distribuição de Fermi-Dirac $f(E_{\mathbf{k}})$.

$$f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\exp(E_{\mathbf{k}} / k_B T) + 1} \quad (2.3.1)$$

onde $E_{\mathbf{k}}$ é a energia necessária para excitar uma quasi-partícula.

No estado normal a energia de Fermi é tomada como origem das energia $\epsilon_F = 0$. Obtemos:

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = 1/2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}(T)}{[\varepsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2(T)]^{1/2}} [1 - 2f(E_{\mathbf{k}'})] \quad (2.3.2)$$

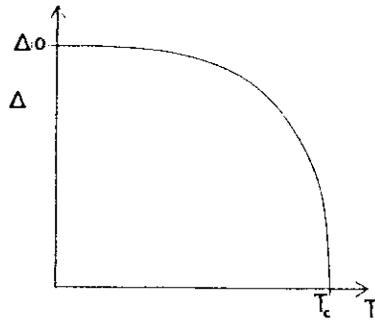
Para encontrarmos a expressão da menor energia de excitação de uma quasi-partícula, derivamos o valor médio da energia obtida do Hamiltoniano diagonalizado em função do número médio de quasi-partículas e encontramos:

$$E_{\mathbf{k}} = [\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2(T)]^{1/2} \quad (2.3.3)$$

Substituindo (2.3.3) em (2.3.2) e explicitando a função $f(E_{\mathbf{k}'})$, o "gap" de energia dependente da temperatura também pode ser escrito da seguinte forma:

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = 1/2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}(T)}{[\varepsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2(T)]^{1/2}} \tanh \left[(\varepsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2(T))^{1/2} / 2k_B T \right] \quad (2.3.4)$$

A variação do "gap" com a temperatura está representada na figura (2.3.1), podemos notar que quando o sistema passa da fase supercondutora para a fase normal ocorre uma transição de fase de 2^a ordem. Pois o "gap" de energia, o parâmetro de ordem do sistema, varia continuamente de seu valor máximo em módulo em $T=0$ até o seu valor nulo em $T=T_c$, como é característico em tais transições.



Figura(2.3.1): gráfico do "gap" de energia em função da temperatura

2.4 TEMPERATURA CRÍTICA

A temperatura na qual ocorre uma mudança de fase no sistema, é dita *temperatura crítica* do sistema (T_c). Nesta temperatura o parâmetro de ordem anula-se; portanto, no nosso caso, o "gap" de energia será nulo nesta temperatura. Calcularemos T_c usando mais vez o simples modelo para o potencial $V_{k,k'}$ definido em (2.2.15). Aplicando as mesmas argumentações já descritas anteriormente, (2.3.4) em T_c reduz-se à:

$$V D(\epsilon_F) \int_0^{(\hbar\omega_D / 2K_B T_c)} x^{-1} \tanh(x) dx = 1 \quad (2.4.1)$$

integrando (2.4.1) por partes, temos:

$$[\ln x \tanh x]_0^{(\hbar\omega_D / 2K_B T_c)} - \int_0^{(\hbar\omega_D / 2K_B T_c)} \operatorname{sech}(x) \ln(x) dx = 1 / VD(\epsilon_F) \quad (2.4.2)$$

No limite de *acoplamento fraco* $\hbar\omega_D \gg 2k_B T_c$, podemos aproximar a $\tanh(\hbar\omega_D/2k_B T_c)$ para 1. A integral de (2.4.2) neste limite tem o valor de $\ln 0.44$, então T_c é dado como:

$$T_c = \frac{1.14 \hbar\omega_D}{k_B} \exp [-1 / VD(\epsilon_F)] \quad (2.4.3)$$

E a razão:

$$r = \frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} \cong 3.53 \quad (2.4.4)$$

Da equação (2.4.3) podemos entender o *Efeito Isotópico* para metais de não-transição. Dois isótopos com as mesmas propriedades eletrônicas mas com diferentes massas iônicas m , têm diferentes frequências de Debye, que por sua vez são proporcionais a $m^{-1/2}$. Este resultado é geral, e vem do fato que a equação de movimento de um íon é da forma, $m d^2x/dt^2 = F$, onde F é uma força restauradora independente da massa. Portanto a equação (2.4.3) prediz que $T_c \sim m^{-1/2}$. Entretanto em muitos outros supercondutores o efeito isotópico não é traduzido através deste resultado.

A Teoria BCS calcula muitas outras funções termodinâmicas, como por exemplo a *energia livre*, *entropia*, *calor específico*, etc, determina também a *função de onda* do estado fundamental e dos estados excitados supercondutores. No entanto, como não será de interesse para o que se segue, não extenderemos mais este capítulo, podemos sugerir duas referências [19] e [20] para um estudo mais detalhado.

CAPÍTULO 3

MODELO DE DUAS BANDAS SUPERPOSTAS

3.1 - INTRODUÇÃO

O modelo de duas bandas superpostas foi proposto por Suhl, Matthias e Walker [15] (SMW), em 1959, para descrever o estado supercondutor dos metais de transição.

O Hamiltoniano SMW é uma extensão do utilizado na Teoria BCS [9] usual. A Teoria BCS considera que a supercondutividade pode ser descrita em uma única banda do cristal. No modelo de SMW supõe-se que a supercondutividade ocorre em duas bandas distintas que estão superpostas na energia de Fermi. O objetivo foi de descrever os efeitos em metais de transição puros pois sabia-se que o espalhamento s-d contribue consideravelmente ao aumento da resistividade no estado normal. O modelo SMW considera os termos de interação do Hamiltoniano como sendo provenientes do processo de emissão e reabsorção de um fónon. De tal forma que quando um elétron da banda s ou um elétron da banda d emite um fónon, imediatamente um outro elétron da banda s ou da banda d reabsorverá este fónon. Este processo é descrito através de duas interações *intra*banda e *inter*banda.

A *interação intra*banda ocorre quando um par de Cooper é criado e destruído numa mesma banda. A *interação inter*banda ocorre quando um par de Cooper é criado numa banda e destruído na outra, não ocorrendo portanto, neste modelo, formação de pares constituídos por elétrons de bandas diferentes, também denominados de pares híbridos.

3.2 - O MODELO SUHL, MATTHIAS e WALKER

O Hamiltoniano do modelo de SMW para quaisquer duas bandas superpostas a e b:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}a} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}b} b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} - V_{aa} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} \\
 & - V_{bb} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'} - V_{ab} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'} + \text{h.c.})
 \end{aligned}
 \tag{3.2.1}$$

Foi usada a mesma convenção do capítulo anterior:

$$\begin{aligned}
 a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger &= a_{\mathbf{k}}^\dagger \\
 a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= a_{\mathbf{k}}^\dagger
 \end{aligned}$$

Os dois primeiros termos de (3.2.1) descrevem as energias cinéticas da banda a e da banda b, os demais termos são responsáveis pelas interações intrabanda a-a e b-b e interbanda a-b, onde V_{aa} , V_{bb} , e V_{ab} representam as energias efetivas resultantes da presença da interação intra ou interbanda e a interação repulsiva Coulombiana.

Tal como na teoria BCS, os somatórios sobre os momenta estão limitados a uma faixa de energia entorno da energia de Fermi, da ordem da energia de Debye.

Para diagonalizar (3.2.1) introduzimos uma transformação do tipo de *Bogoliubov-Valatin* [18]:

$$\begin{aligned}
 a_{\mathbf{k}\uparrow} &= \cos(\theta_{\mathbf{k}}/2)e_{\mathbf{k}\uparrow} + \sin(\theta_{\mathbf{k}}/2)e_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\
 a_{\mathbf{k}\downarrow} &= \cos(\theta_{\mathbf{k}}/2)e_{\mathbf{k}\downarrow} - \sin(\theta_{\mathbf{k}}/2)e_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\
 b_{\mathbf{k}\uparrow} &= \cos(\varphi_{\mathbf{k}}/2)f_{\mathbf{k}\uparrow} + \sin(\varphi_{\mathbf{k}}/2)f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\
 b_{\mathbf{k}\downarrow} &= \cos(\varphi_{\mathbf{k}}/2)f_{\mathbf{k}\downarrow} - \sin(\varphi_{\mathbf{k}}/2)f_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger
 \end{aligned}
 \tag{3.2.2}$$

Substituindo o conjunto de transformações (3.2.2) em (3.2.1), e impondo que os termos não diagonais sejam identicamente nulos, resultamos nas seguintes equações:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}a} \sin \theta_{\mathbf{k}} - [V_{ab}D + V_{aa}S] \cos \theta_{\mathbf{k}} = 0 \tag{3.2.3.a}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}b} \sin \varphi_{\mathbf{k}} - [V_{bb}D + V_{ab}S] \cos \varphi_{\mathbf{k}} = 0 \tag{3.2.3.b}$$

onde:

$$S = 1/2 \sum_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} [1 - 2 f(E_{\mathbf{k}a})] \tag{3.2.4.a}$$

$$D = 1/2 \sum_{\mathbf{k}} \sin \varphi_{\mathbf{k}} [1 - 2 f(E_{\mathbf{k}b})] \tag{3.2.4.b}$$

onde $f(E_{\mathbf{k}\eta})$ é a função distribuição de Fermi-Dirac, denota o número médio de quasi-partículas na banda η , com energia $E_{\mathbf{k}\eta}$, tal que $\eta = \underline{a}$ ou \underline{b} . As energias das quasi-partículas escrevem-se como:

$$E_{\mathbf{k}a} = (\varepsilon_{\mathbf{k}a}^2 + \Delta_a^2)^{1/2} \tag{3.2.5.a}$$

$$E_{\mathbf{k}b} = (\varepsilon_{\mathbf{k}b}^2 + \Delta_b^2)^{1/2} \tag{3.2.5.b}$$

onde Δ_a e Δ_b são os "gaps" de energias das bandas \underline{a} e \underline{b} .

Os "gaps" de energia são escritos como:

$$\Delta_a = V_{ab} D + V_{aa} S \quad (3.2.6.a)$$

$$\Delta_b = V_{ab} S + V_{bb} D \quad (3.2.6.b)$$

Podemos escrever (3.2.3.a) de outra forma:

$$\tan \theta_{\mathbf{k}} = (V_{ab} D + V_{aa} S) / \epsilon_{\mathbf{k}a} \quad (3.2.7)$$

substituindo (3.2.6.a) em (3.2.7), temos:

$$\tan \theta_{\mathbf{k}} = \Delta_a / \epsilon_{\mathbf{k}a} \quad \text{logo,}$$

$$\sin \theta_{\mathbf{k}} = \Delta_a / (\epsilon_{\mathbf{k}a}^2 + \Delta_a^2)^{1/2} \quad (3.2.8)$$

Substituímos (3.2.8) em (3.2.4.a), e da mesma forma que fizemos no capítulo anterior, transformamos o somatório nos momenta numa integral em energia, surgindo assim a densidade de estados N_a para banda a , que é tomada como constante entorno da energia de Fermi. Explicitando $f(E_{\mathbf{k}a})$, chegamos a:

$$S = N_a \Delta_c F_a(T) \quad (3.2.9.a)$$

Onde:

$$F_a(T) = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\tanh [(\epsilon_a^2 + \Delta_a^2)^{1/2} / 2k_B T]}{(\epsilon_a^2 + \Delta_a^2)^{1/2}} d\epsilon$$

(3.2.10.a)

De maneira análoga ao que foi feito com as equações relativas a banda a, obtemos para a banda b:

$$D = N_b \Delta_b F_b(T) \quad (3.2.9.b)$$

onde N_b é a densidade de estados da banda b entorno do nível de Fermi, e

$$F_b(T) = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\tanh [(\epsilon_b^2 + \Delta_b^2)^{1/2} / 2k_B T]}{(\epsilon_b^2 + \Delta_b^2)^{1/2}} d\epsilon \quad (3.2.10.b)$$

Substituindo o par de equações (3.2.9) nas expressões dos "gaps" de energia (3.2.6), surgem duas equações simultâneas para Δ_a e Δ_b :

$$\Delta_a [1 - V_{aa} N_a F_a(T)] = \Delta_b V_{ab} N_b F_b(T) \quad (3.2.11.a)$$

$$\Delta_b [1 - V_{bb} N_b F_b(T)] = \Delta_a V_{ab} N_a F_a(T) \quad (3.2.11.b)$$

Estamos interessados em analisar as mudanças nas propriedades supercondutoras quando consideramos a interação interbanda na presença das interações intrabandas.

Para resolver o sistema de equações (3.2.11), introduzimos uma aproximação do tipo "Tight-Binding" (TB) [21].

3.3 - APROXIMAÇÃO "TIGHT-BINDING"

Nem todos os elétrons num metal participam da condução elétrica, alguns fazem parte das camadas eletrônicas que estão fortemente ligadas aos íons, portanto nem tomando conhecimento do caráter metálico. No entanto os elétrons que estão em camadas parcialmente completas têm um comportamento intermediário entre estes elétrons fortemente ligados e os elétrons livres, participando efetivamente da condução eletrônica. Neste sentido a aproximação TB se faz pertinente a tais elétrons que surgem principalmente das camadas-d parcialmente cheias e pertencentes aos metais de transição.

Os elétrons tipo d ou f podem possuir pouca mobilidade, neste caso a superposição de suas funções de onda forma um pacote bem localizado, dando origem a uma banda estreita.

Na aproximação TB os acoplamentos elétron-fónons são proporcionais as larguras das bandas [21].

Definindo um novo parâmetro:

$$\lambda_{\eta} \equiv V_{\eta\eta} N_{\eta} \quad (3.3.1)$$

onde λ_{η} é interação efetiva elétron-fónon relativa a banda η .

Substituindo (2.2.3) em (3.3.1) e tomando:

$$|\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}| \ll \hbar\omega_{\mathbf{q}}$$

Temos,

$$\lambda_{\eta} \cong \frac{D^2 N_{\eta}}{\hbar \omega_D} \quad (3.3.2)$$

O sinal negativo já está explicitado na eq.(3.2.1).

Admitindo que a densidade de estados é constante, e supondo que temos um elétron por banda de energia, podemos tomá-la como inversamente proporcional a largura de banda W_{η} . Então (3.3.2) tem-se:

$$\lambda_{\eta} \cong W_{\eta} / \hbar \omega_D \quad (3.3.3)$$

O acoplamento elétron-fónon D é tomado como proporcional a largura de banda [21].

Definindo também :

$$R \equiv W_{\eta} / W_{\eta'} = \lambda_{\eta} / \lambda_{\eta'} \quad (3.3.4)$$

onde R é a razão entre as larguras de bandas.

Introduziremos um outro parâmetro K , tal que:

$$V_{ab} \equiv K (V_{aa} V_{bb})^{1/2} \quad (3.3.5)$$

Reduzimos assim, para três o número de parâmetros do sistema (K , R , e λ_a), se fixarmos a energia de Debye.

Dividindo a equação (3.2.11.a) por (3.2.11.b), obtemos:

$$[1 - V_{aa} N_a F_a(T)] [1 - V_{bb} N_b F_b(T)] = V_{ab}^2 N_a N_b F_a(T) F_b(T) \quad (3.3.6)$$

Em T_c os "gaps" se anulam ficando $F_a(T_c) = F_b(T_c) = F(T_c)$,

então (3.3.6) em $T=T_c$ torna-se uma equação quadrática em $F(T_c)$.

$$R \lambda_a^2 (1 - K^2) F^2(T_c) - \lambda_a (R + 1) F(T_c) + 1 = 0 \quad (3.3.7)$$

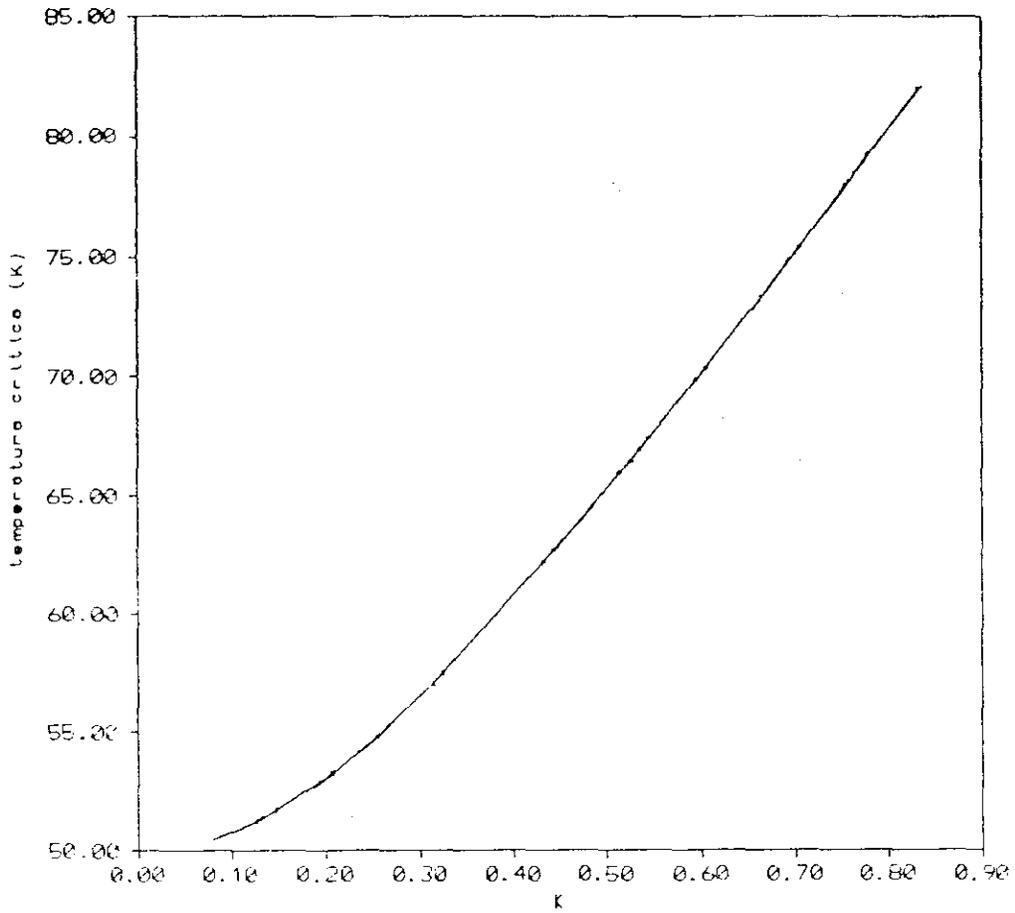
Tendo sido usado os parâmetros definidos anteriormente.

No estudo do modelo SMW foi determinado analiticamente a temperatura crítica, tendo sido adotado o limite de acoplamento fraco para resolver a integral $F(T_c)$. Aqui, calcularemos a integral numericamente para determinação de T_c .

Se em (3.3.7) fizermos nula a interação entre as bandas a e b , ou seja $K=0$, obteremos duas temperaturas críticas distintas. Como se tivéssemos dois sistemas supercondutores separados, um sendo descrito pelos elétrons da banda a e o outro pelos elétrons da banda b . Esta situação foi apresentada por SMW [15]. Se $V_{ab} \neq 0$, (3.3.7) teremos duas temperaturas críticas como solução, entretanto somente uma é fisicamente aceitável [22]. Pois a menor energia livre do sistema está associada a maior T_c . Uma vez atingida esta temperatura, o sistema passará inteiramente para o estado supercondutor e neste permanecerá para qualquer temperatura abaixo dessa T_c . Esta afirmação pode ser vista através dos gráficos $\Delta_\eta \times T_c$ que mostraremos mais adiante.

Por esses motivos é interessante analisarmos o comportamento dos "gaps" de energia e da temperatura crítica quando colocamos uma pequena interação interbanda, $K \ll 1$, ou seja, $V_{ab}^2 \ll V_{aa} V_{bb}$.

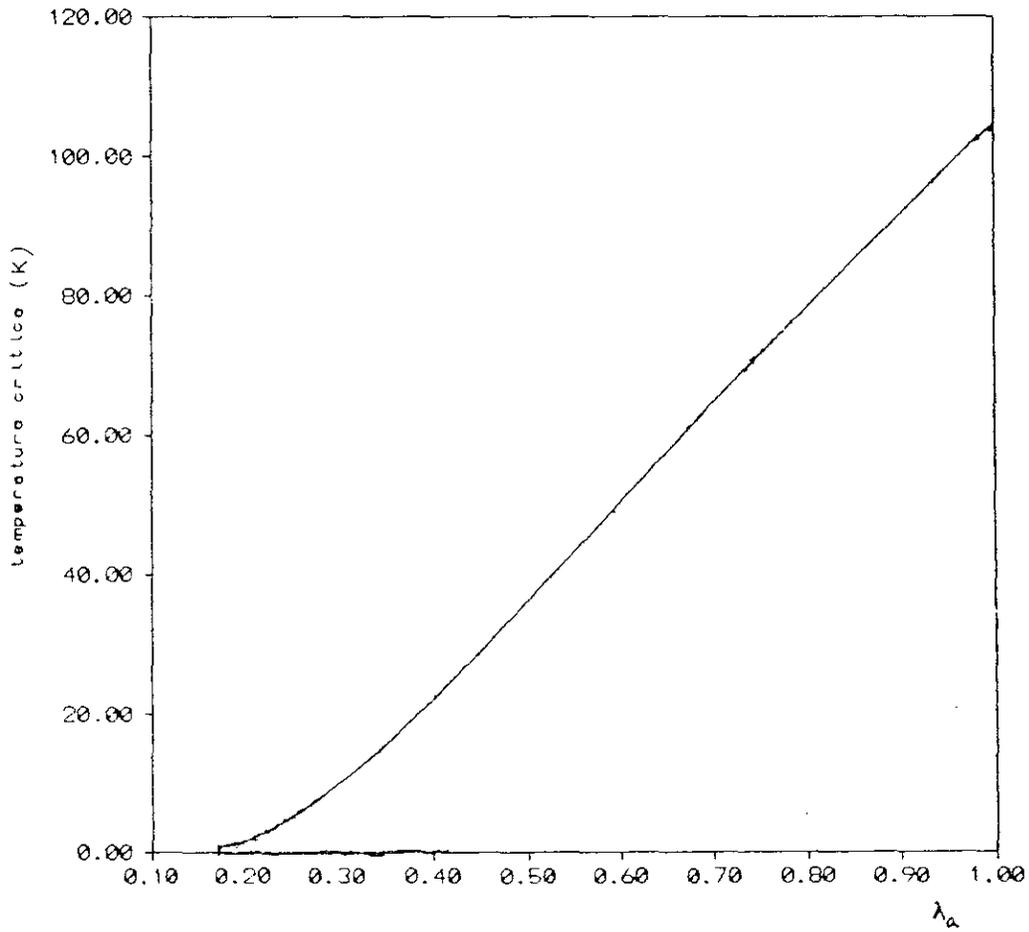
Os gráficos à seguir mostram a variação da T_c versus os três parâmetros definidos acima.



Figura(3.3.1) - Gráfico T_c X κ

$R=0.5$ e $\lambda_a=0.6$

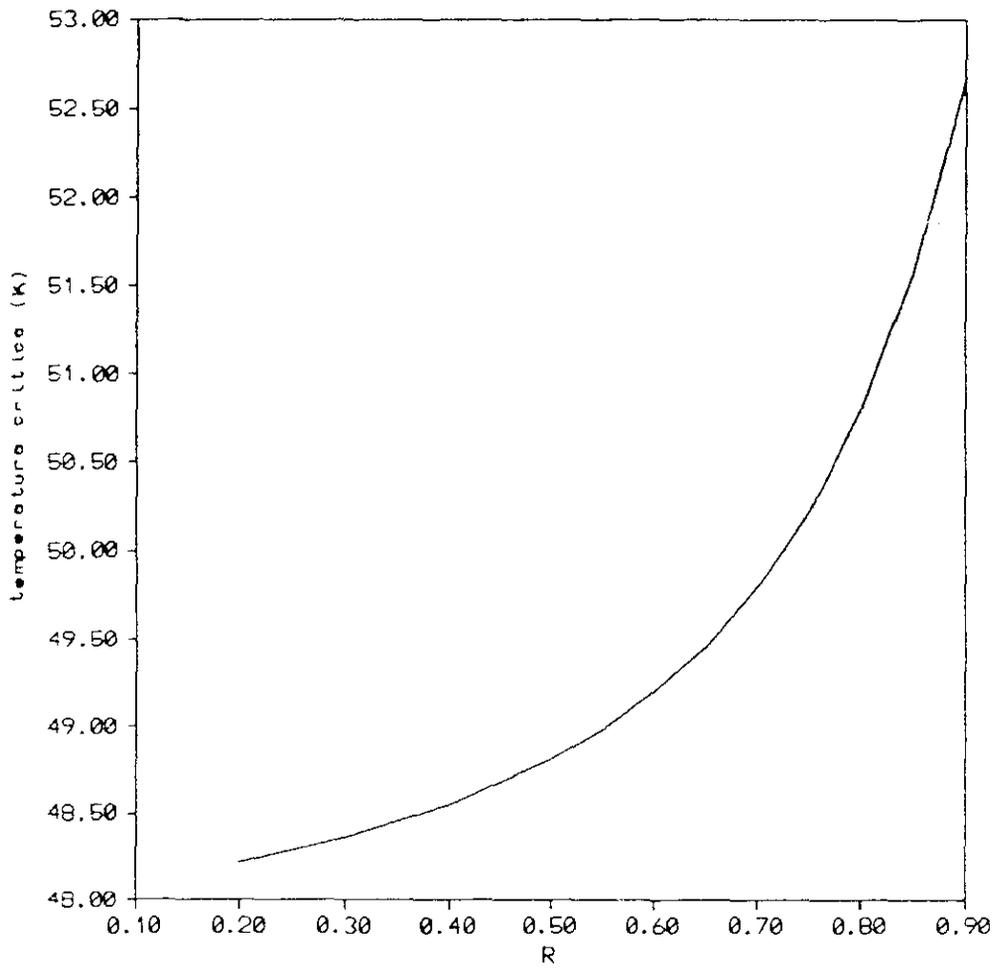
Quanto maior a interação interbanda V_{ab} , mais elevada será a T_c .



Figura(3.3.2)- Gráfico T_c X λ_a

$R=0.5$ e $K=0.1$

Fixada uma pequena interação interbanda, vemos que à medida que a interação intrabanda aumenta maior será T_c .

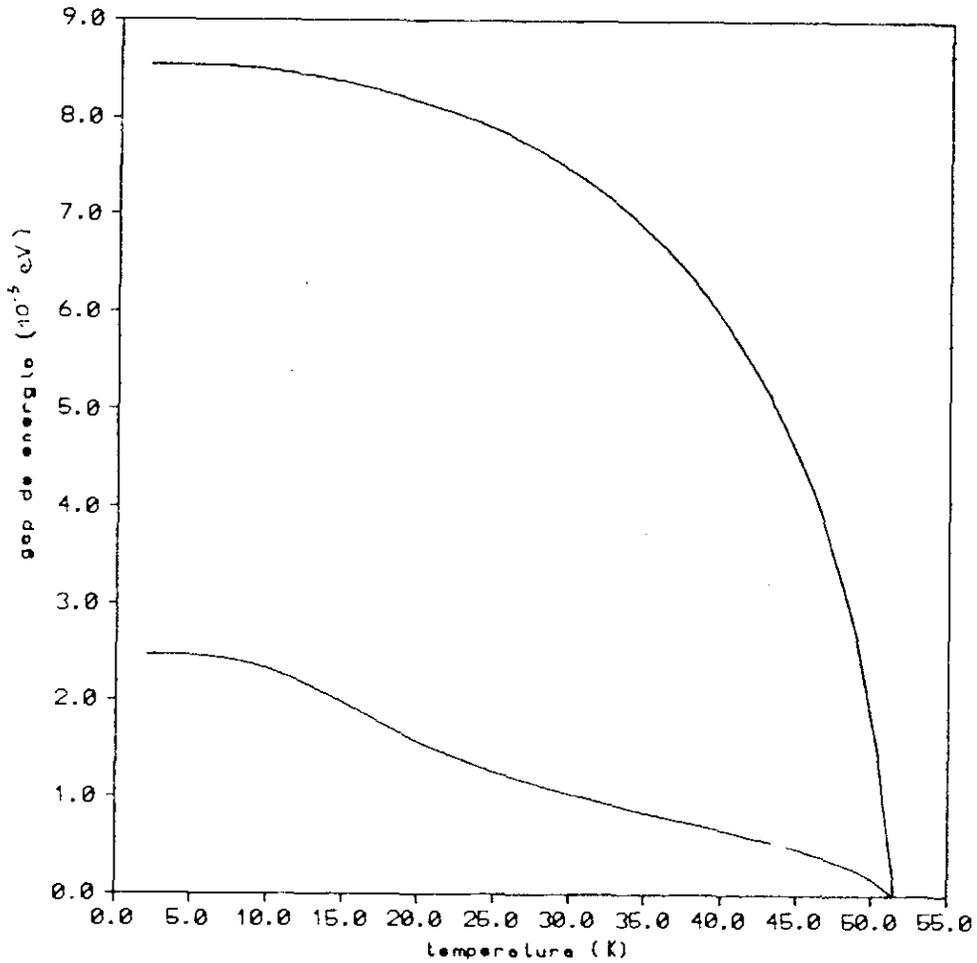


Figura(3.3.3) - Gráfico T_c X R

$$K=0.1 \text{ e } \lambda_a=0.6$$

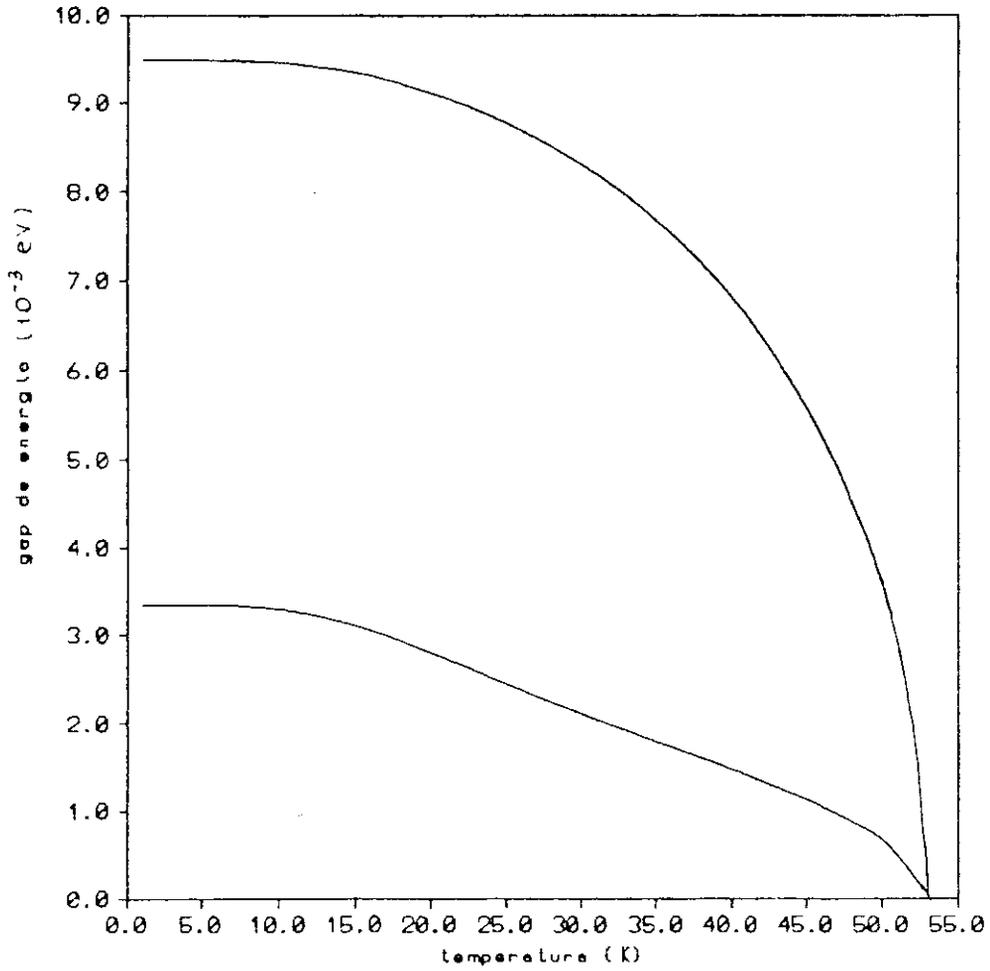
A medida que a largura da banda mais estreita vai se igualando a da mais larga, T_c sofre uma leve elevação.

Os gráficos a seguir mostram como os "gaps" de energia variam com a temperatura. Neles, podemos constatar a presença de uma única temperatura crítica quando a interação interbanda está presente, mesmo que esta seja muito pequena. O "gap" de maior energia está associado ao maior λ .



Figura(3.3.4)- Gráfico "gaps" de energia a e b X temperatura

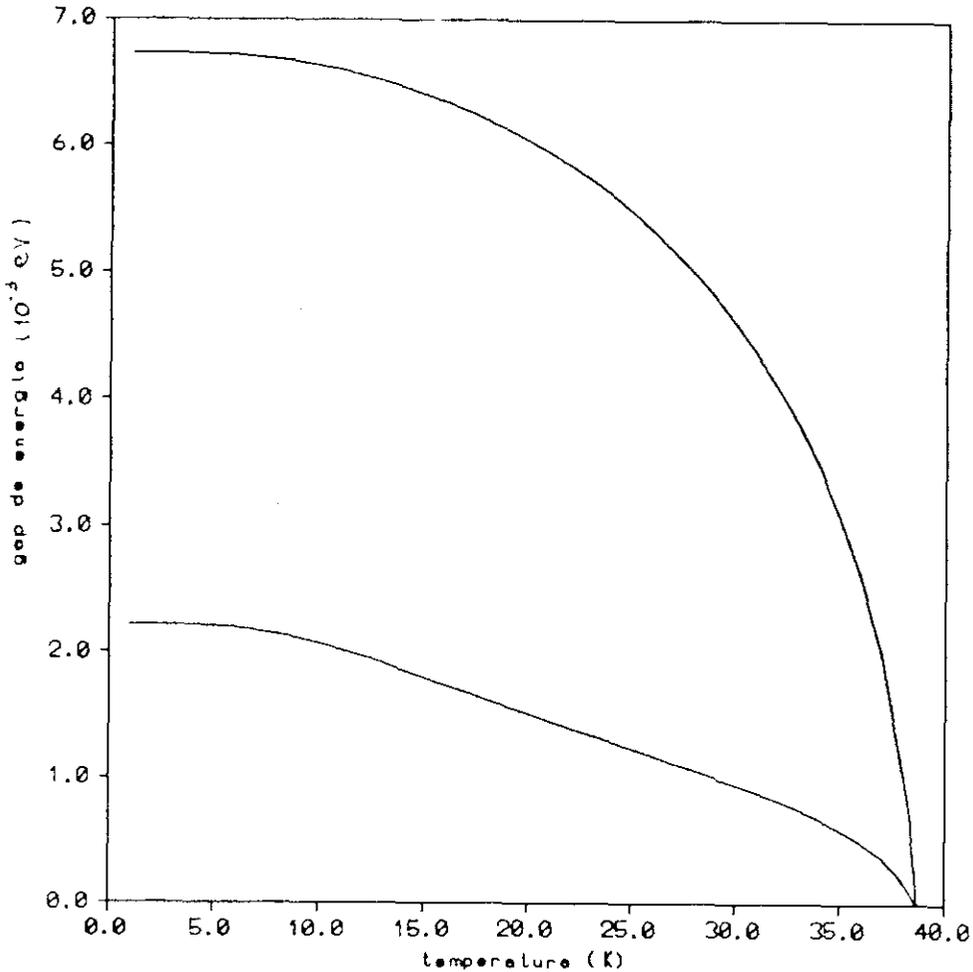
$$R=0.5, K=0.1, \lambda_a=0.6$$



Figura(3.3.5) - "gaps" de energia a e b X temperatura

$$R=0.5, K=0.2, \lambda_{\alpha}=0.6$$

Comparamos este gráfico com o da fig (3.3.4), notamos que com o aumento do valor de K, que traduz um acréscimo na interação interbanda, os "gaps" de energia em T=0K aumentaram.



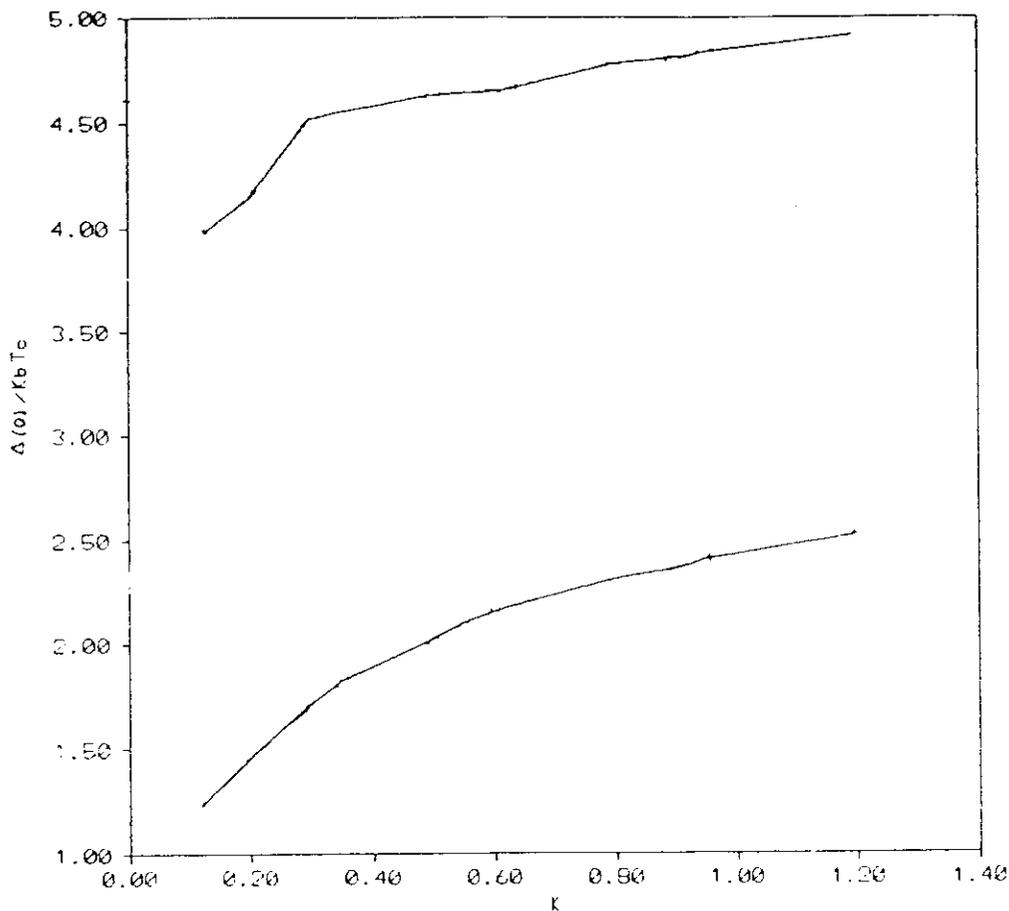
Figura(3.3.6) - Gráfico "gaps" de energia \underline{a} e \underline{b} X Temperatura

$$R=0.5, K=0.1, \lambda_a=0.5$$

Comparando este gráfico com o da fig(3.3.5), observamos que com a diminuição do valor da interação efetiva intrabanda λ_a os "gaps" de energia, tanto \underline{a} quanto o \underline{b} , diminuem em $T=0K$. Podendo ser visto como consequência da diminuição da densidade de estados em face a um decréscimo no número de elétrons que participam do estado supercondutor, ou pela diminuição de V_{ad} .



Por fim o gráfico da figura (3.3.7) mostra como a razão $r_{\eta} = 2\Delta_{\eta}(0)/k_B T_c$, tanto para o "gap" a quanto para o "gap" b, variam com a interação interbanda, que é determinada pelo parametro K.



Figura(3.3.7) - Gráfico $2\Delta_{a,b}(0)/k_B T_c$ X K

R=0.5, $\lambda_a=0.6$

Na condição $V_{ab} < (V_{aa} V_{bb})^{1/2}$, ou seja, $0 < K < 1$ o maior valor da razão para o "gap" a fica entorno de 5.0 e o da banda b , entorno de 2.5.

Quando $K=0$, uma das razões tende para o valor BCS, que é 3.5, e a outra se anula, significando que retornamos ao caso de uma única banda supercondutora.

Agora vamos considerar o problema para dois tipos quaisquer de bandas superpostas. Para isto não adotaremos a aproximação TB pois esta é apropriada somente para o caso de bandas estreitas, nos quais os elétrons possuem pouca mobilidade. Além disto também estamos interessados na possibilidade de obtermos as razões $2\Delta(0)/k_B T_c$ superiores aquelas encontradas na figura (3.3.7) [23].

Através de diferentes técnicas experimentais constatou-se valores grandes desta razão. Como por exemplo num estudo sobre o espectro de fotoemissão a alta resolução no Bi-Sr-Ca-Cu-O [24], onde foi apresentado o valor da razão entorno de 8.0 ± 1.4 . Também podemos citar medidas de NMR e NQR no composto de Y-Ba-Cu-O [25], onde é encontrado os valores 4.3 e 9.3 para os sítios de CU1 e CU2, respectivamente.

Nos sistemas de férmions pesados também encontrou-se valores anormais desta razão [26].

O modelo de duas bandas superpostas também foi aplicado para entender as propriedades supercondutoras dos metais de transição na presença de impurezas não-magnéticas [27, 28]. Ao modelo SMW foram adicionados termos associados aos potenciais gerados pela presença de impurezas.

3.4 CASO GERAL

Reescrevendo (3.3.6) em $T=T_c$ e em $T=0K$, temos, respectivamente:

$$[1 - V_{aa} N_a F(T_c)] [1 - V_{bb} N_b F(T_c)] = V_{ab}^2 N_a N_b F^2(T_c) \quad (3.4.1.a)$$

$$[1 - V_{aa} N_a F_a(0)] [1 - V_{bb} N_b F_b(0)] = V_{ab}^2 N_a N_b F_a(0) F_b(0) \quad (3.4.1.b)$$

tal que,

$$F_a(T_c) = F_b(T_c) = F(T_c) = \int_0^s (\tanh x) / x \, dx \quad (3.4.2)$$

$$s = \hbar \omega_D / 2k_B T_c \quad (3.4.3)$$

$$F_\eta(0) = \ln[4s/r_\eta + (4s/r_\eta)^2 + 1]^{1/2} \quad (3.4.4)$$

$$r_\eta = 2\Delta_\eta(0) / k_B T_c \quad (3.4.5)$$

onde η podendo representar a banda a ou b

Fixando os valores das razões r_η a partir de dados experimentais, procuramos encontrar, para um dado s , para quais valores dos acoplamentos intra e interbanda temos soluções do sistema acima.

Dividindo (3.4.1.a) por (3.4.1.b), obtemos a seguinte relação:

$$\lambda_b = \lambda_a \left\{ \frac{F_a(0) [F(T_c) - F_b(0)]}{F_b(0) [F_a(0) - F(T_c)]} \right\} + \left\{ \frac{F_a(0) F_b(0) - F^2(T_c)}{F(T_c) F_b(0) [F_a(0) - F(T_c)]} \right\} \quad (3.4.6)$$

onde:

$$\lambda_a = V_{aa} N_a$$

$$\lambda_b = V_{bb} N_b$$

Entretanto admitindo a interação V_{ab} real, o lado direito de (3.4.1.a e b) é sempre positivo, este fato acarreta que as soluções aceitáveis de (3.4.6) satisfazem um dentre os conjuntos de desigualdades abaixo:

$$i) \left\{ \begin{array}{l} \lambda_a > 1/F(T_c) \\ \lambda_a > 1/F_a(0) \end{array} \right. \quad e \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda_b > 1/F(T_c) \\ \lambda_b > 1/F_b(0) \end{array} \right.$$

$$ii) \left\{ \begin{array}{l} \lambda_a < 1/F(T_c) \\ \lambda_a < 1/F_a(0) \end{array} \right. \quad e \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda_b < 1/F(T_c) \\ \lambda_b < 1/F_b(0) \end{array} \right.$$

$$iii) \left\{ \begin{array}{l} \lambda_a > 1/F(T_c) \\ \lambda_a < 1/F_a(0) \end{array} \right. \quad e \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda_b > 1/F(T_c) \\ \lambda_b < 1/F_b(0) \end{array} \right.$$

$$iv) \left\{ \begin{array}{l} \lambda_a < 1/F(T_c) \\ \lambda_a > 1/F_a(0) \end{array} \right. \quad e \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda_b < 1/F(T_c) \\ \lambda_b > 1/F_b(0) \end{array} \right.$$

Por exemplo se utilizarmos as medidas encontradas no composto de $Ba_2YCu_3O_7$ [29] para as razões r_η onde $r_a=8.3$ e $r_b=2.4$, obtemos os resultados abaixo:

s	$F_a(0)$	$F_b(0)$	$F(T_c)$
50	3.87	5.12	4.73
20	2.96	4.20	3.81
10	2.28	3.51	3.12

Discutirmos abaixo, por simplicidade, somente o caso em que $s=50$.

Para tais valores as desigualdades aceitas como solução são aquelas pertencentes aos conjuntos i) e ii).

Feita esta análise, o espaço de soluções fisicamente aceitáveis da equação (3.4.6) é a reta da figura (3.4.1), exceto pelo intervalo $0.21 < \lambda_a < 0.26$. Tal intervalo corresponde aos valores negativos de $\lambda_{ab}^2 = V_{ab}^2 N_a N_b$ apresentados na figura (3.4.2).

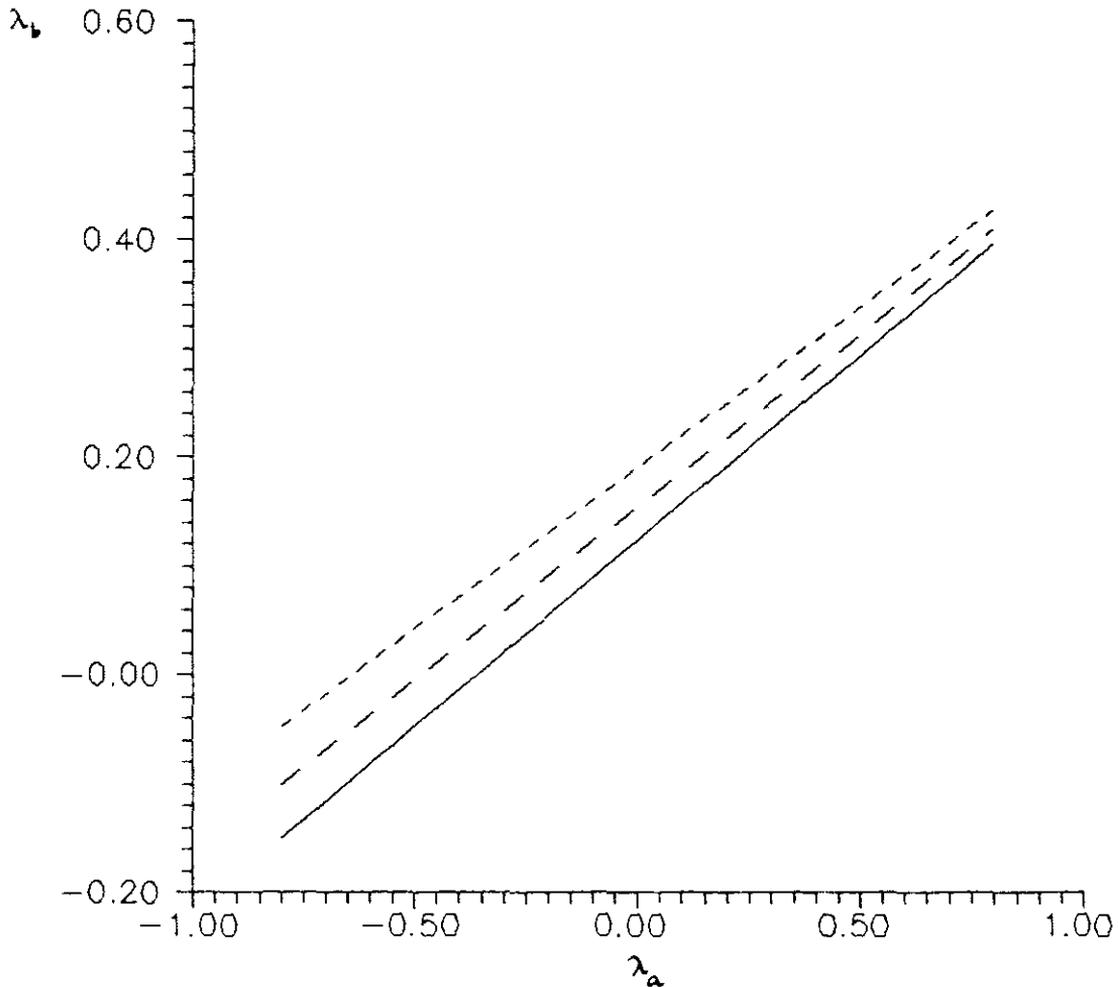


Figura (3.4.1) - Gráfico λ_b X λ_a
 $s=50$ (—), $s=20$ (---), $s=10$ (-----)

$$r_a = 8.3, r_b = 2.4$$

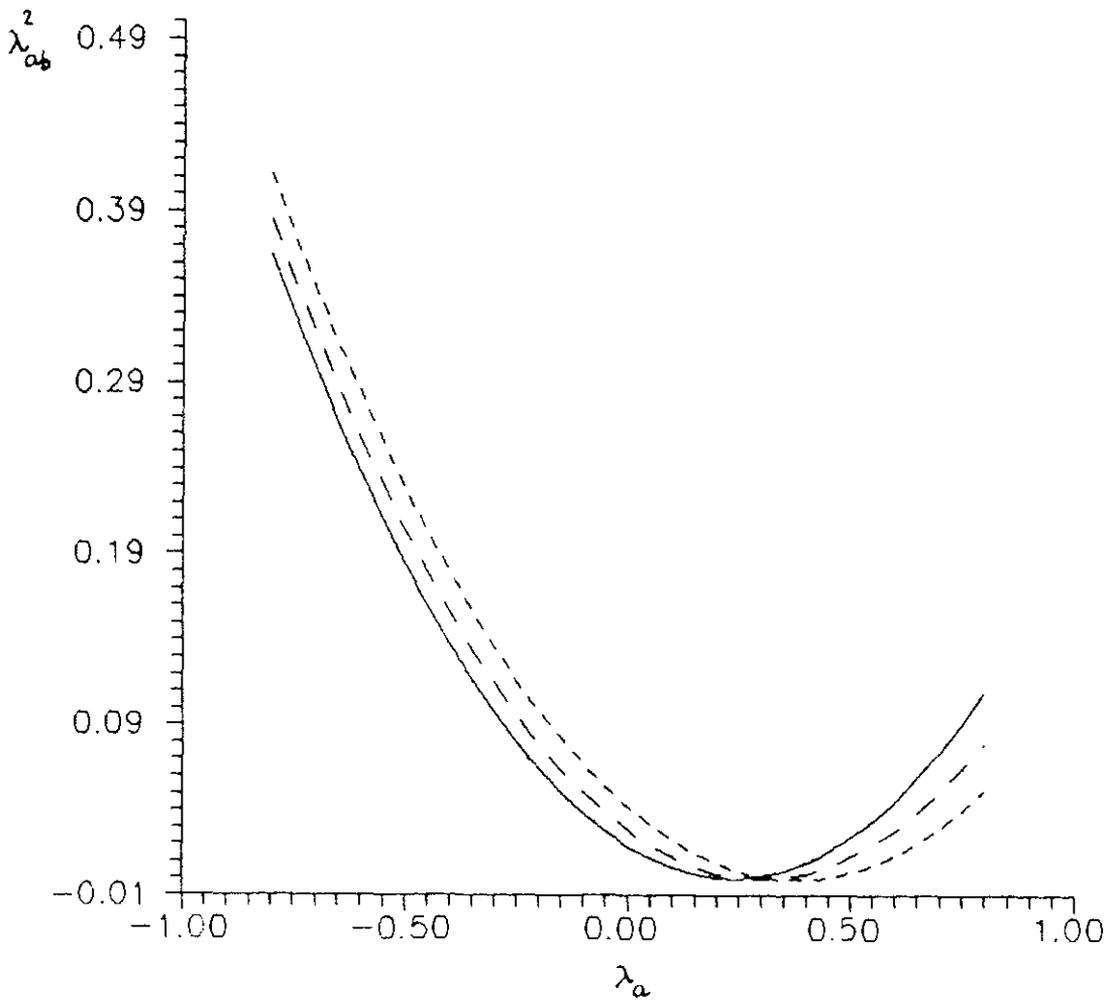


Figura (3.4.2) - Gráfico $\lambda_{ab}^2 \times \lambda_a$
 $s=50$ (-----), $s=20$ (- - -), $s=10$ (———)

$r_a = 8.3$, $r_b = 2.4$

O gráfico da figura (3.4.1) pode ser dividido em três partes. A partir da esquerda, a primeira região situa-se quando λ_a e λ_b são negativos, e da maneira como escrevemos o Hamiltoniano (3.2.1) quando o sinal da interação é negativo significa que esta é repulsiva. Na segunda região λ_a é repulsiva e λ_b é atrativa, e na última ambas as interações são atrativas.

Da maneira como obtivemos estes resultados, o sinal da interação V_{ab} não aparece explicitamente na equação (3.4.1), pois esta sempre surge ao quadrado.

O fato de termos banda repulsiva e banda atrativa supercondutores foi tratado há muito tempo atrás por Kondo [30] que usou o modelo SMW com uma interação efetiva intrabanda atrativa, as outras interações repulsivas. Ele demonstrou que o estado supercondutor pode surgir somente por conta da interação atrativa numa banda. Kondo observou também, que a temperatura de transição aumenta na medida que a densidade de estados da banda repulsiva cresce entorno do nível de Fermi.

A figura (3.4.3), apresenta o comportamento de λ_{ab}^2 num dado intervalo de r_b , para isto fixamos $r_a=8.3$ e $\lambda_a=0.4$, para diversos valores de s .

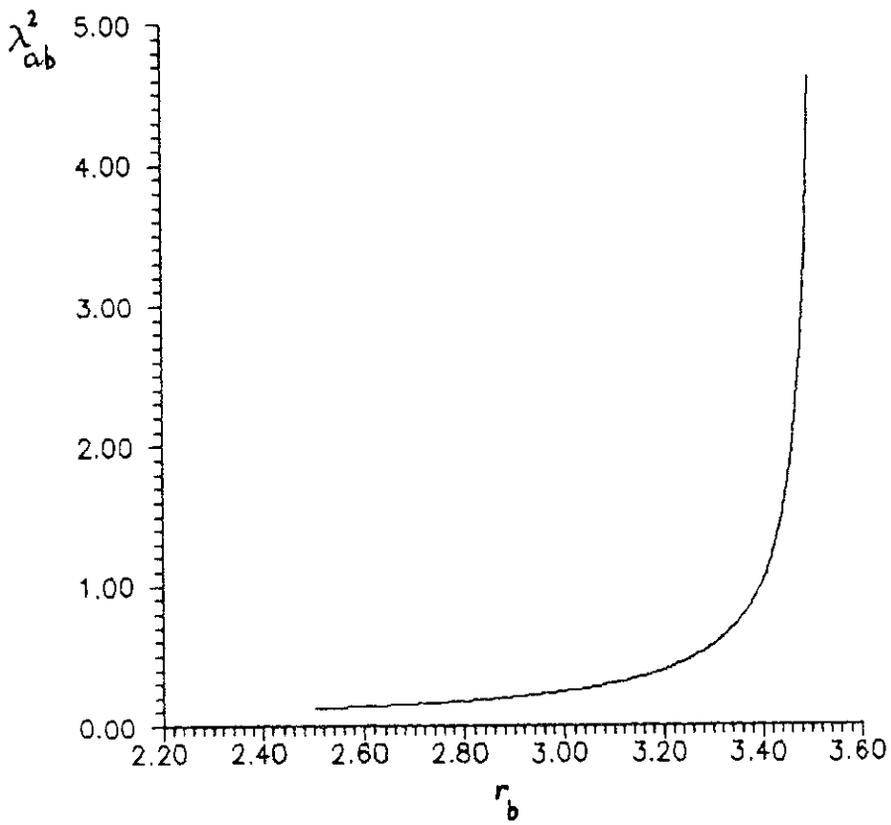


Figura (3.4.3) - Gráfico λ_{ab}^2 X r_b
 $s=50$ (—) , $\lambda_c = 0.4$
 $r_a = 8.3$

Vemos que o gráfico da fig.(3.4.3) apresenta uma divergência entorno do valor 3.5, que é o resultado no modelo BCS.

Isto confirma que: num sistema de duas bandas não é possível encontrarmos resultados BCS, caso a interação interbanda esteja presente.

A dependência de λ_b versus r_b exibe a mesma divergência, e o mesmo comportamento apresentado na figura (3.4.3).

Situaremos nossos resultados dentro do contexto atual de outros trabalhos publicados nesta linha.

Wladimir Kresin [31] estudou o comportamento da razão $r=2\Delta(0)/k_B T_c$ para os casos dos supercondutores que possuem somente um "gap" de energia, e para aqueles que possuem múltiplos "gaps". Alguns dos seus comentários fundamentam nossos resultados.

Os supercondutores com um só "gap" são caracterizados pela razão r , se r for maior que o valor BCS, então isto traduz a manifestação dos efeitos do acoplamento forte na interação elétron-fónon. De forma que essa razão está diretamente ligada com o acoplamento elétron-fónon λ , no limite de acoplamento forte $\lambda \gg 1$. A partir destas considerações, aplicando a Teoria de Eliashberg, ele mostra que r satura na medida que λ cresce, atingindo um limite máximo entorno de 13. Kresin justifica este resultado ressaltando que no limite de acoplamento fraco, quando $\lambda \leq 1$ também encontra-se um valor universal, o valor BCS.

Depois ele faz uma análise qualitativa do comportamento dos supercondutores com múltiplos gaps, chegando à conclusão que estes materiais não são caracterizados pelos valores das razões r podendo diferir drasticamente do valor BCS tanto na aproximação de acoplamento fraco quanto forte. Ou seja, dentro de um mesma aproximação pode-se encontrar simultaneamente uma razão maior que

a BCS e a outra menor.

Esta afirmação está em inteira concordância com os nossos resultados observados acima.

Já Carbotte e outros [32], usando a Teoria de Eliashberg, num regime de acoplamento forte, mostra que é possível obter um intervalo de valores de r que compreende desde o valor BCS até próximo de 9, em materiais com uma única banda supercondutora.

Ji-hai Xi [33] estendeu o modelo de duas bandas à região de acoplamento forte. Utilizando o formalismo da Teoria de Eliashberg obteve o valor de 1.9 para uma banda e 5.2 para a outra.

Recentemente, K. Yamaji e S. Abe [34] investigaram um modelo supercondutor com múltiplas bandas num regime de acoplamento fraco, e determinaram que para atingir valores das razões superiores a 6.0 era necessário empregar no mínimo três bandas idênticas, conseguindo então alcançar resultados próximos a 8.0.

Tanto Yamaji quanto Kresin afirmaram que somente os supercondutores a altas temperaturas críticas se fazem capazes de mostrar as estruturas de múltiplos "gaps".

Konsin e al. [35] propuseram que as altas temperaturas críticas sejam consequência das interações interbandas.

Nossos resultados vêm a completar este quadro. Mostramos que para um sistema de duas bandas superpostas quando a interação interbanda está presente, mesmo dentro de um regime de acoplamento fraco, conseguimos atingir valores superiores a 6.0, e por conseguinte bem superiores ao valor BCS. Com estes cálculos comprovamos as expectativas de Kresin, e complementamos o trabalho de Ji-hai Xi, onde ele mostra que é possível obter valores

distintos do BCS usando o modelo de duas bandas num regime de acoplamento forte, e nós, dentro deste ângulo, exibimos o mesmo resultado, porém, usando acoplamento fraco.

CAPÍTULO 4

MODELO DE DUAS BANDAS COM HIBRIDIZAÇÃO

4.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo continuaremos o estudo do modelo de duas bandas superpostas, porém, agora introduziremos a hibridização entre os estados eletrônicos. O sentido físico da hibridização é considerar a probabilidade de um elétron com momentum k passar de uma banda a para uma outra banda b . Essa mistura não se faz sobre um átomo do metal, pode ser entendida como um orbital a de um átomo do cristal se superpondo com um orbital b de outro átomo vizinho.

O modelo de duas bandas com hibridização pode ser aplicado para explicar anomalias em sistemas de férmions pesados [36].

Mesmo adotando o mecanismo convencional para descrever a supercondutividade, a presença da hibridização acarreta uma variação do "gap" de energia em relação ao momentum k [37]. Esta dependência do "gap" de energia torna-se importante quando uma das bandas exibe pouca delocalização.

4.2 MODELO

A hamiltoniana que usaremos para descrever os efeitos de hibridização em supercondutores é composta por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_f + \mathcal{H}_{e-f} \quad (4.2.1)$$

onde

$$\mathcal{H}_e = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}a} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}b} b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \Lambda_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (4.2.2)$$

\mathcal{H}_e descreve as interações eletrônicas.

Os dois primeiros termos de (4.2.2) correspondem as energias cinéticas das bandas a e b. Supõe-se que as funções de onda correspondente a a e b, tem simetria par sob uma inversão no espaço dos momenta.

$\Lambda_{\mathbf{k}}$ é a hibridização.

$$\mathcal{H}_f = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{q}} \quad (4.2.3)$$

onde \mathcal{H}_f é a energia dos fónons.

$f_{\mathbf{q}}^\dagger, f_{\mathbf{q}}$ são os operadores de criação e de destruição de fónons.

$$\mathcal{H}_{e-f} = \sum_{e, e'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} \epsilon_{e, e'}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (f_{\mathbf{q}} + f_{-\mathbf{q}}^\dagger) e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger e_{\mathbf{k}, \sigma'} \quad (4.2.4)$$

Esta é a parte de \mathcal{H} que descreve a interação elétron-fónon, generalizando-se o Hamiltoniano de Fröhlich.

e, e' denotam os estados eletrônicos \underline{a} e \underline{b} .

$\varepsilon_{e, e'}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$ é o acoplamento elétron-fóton que envolve o espalhamento dos elétrons e e e' , e dependente dos momenta.

Primeiro iremos diagonalizar a parte (4.2.2), com o objetivo de redefinirmos as energias de cada banda, de maneira que o novo Hamiltoniano eletrônico tenha a mesma forma daquele quando não havia a hibridização. Para tal aplicamos as transformações canônicas que se seguem. O cálculo para determinar estas transformações encontra-se no apêndice A.

$$a_{\mathbf{k}\sigma} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} - v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.2.5)$$

$$b_{\mathbf{k}\sigma} = v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} + u_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}\sigma}$$

onde

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{[\Lambda_{\mathbf{k}}^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}\underline{a}} - E_{\mathbf{k}}^{\alpha})^2]^{1/2}} \quad (4.2.6)$$

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{E_{\mathbf{k}}^{\alpha} - \varepsilon_{\mathbf{k}\underline{a}}}{[\Lambda_{\mathbf{k}}^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}\underline{a}} - E_{\mathbf{k}}^{\alpha})^2]^{1/2}} \quad (4.2.7)$$

tal que

$$E_{\mathbf{k}}^{\alpha(\beta)} = \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}\underline{a}} + \varepsilon_{\mathbf{k}\underline{b}})}{2} \mp \sqrt{\left[\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\underline{a}} - \varepsilon_{\mathbf{k}\underline{b}}}{2}\right]^2 + \Lambda_{\mathbf{k}}^2} \quad (4.2.8)$$

São as energias efetivas do novo Hamiltoniano eletrônico associadas aos estados α e β .

Então a parte eletrônica diagonalizada reduz-se à:

$$\mathcal{H}_e = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}}^{\alpha} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}}^{\beta} \beta_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.2.9)$$

Agora aplicaremos o par de transformações (4.2.5) em (4.2.4) e reagruparemos os termos de forma conveniente, e assim chegamos ao novo Hamiltoniano elétron-fóton :

$$\mathcal{H}_{e-f} = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma, \sigma'} \gamma_{\nu, \nu'}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (f_{\mathbf{q}} + f_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \nu_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \nu_{\mathbf{k}, \sigma'} \quad (4.2.10)$$

ν, ν' denotam os estados α e β .

Os acoplamentos elétron-fóton são redefinidos e passam a ser escritos como:

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\alpha}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} &= \xi_{aa}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} + \xi_{bb}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} + \xi_{ab}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} + \xi_{ba}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} \\ \gamma_{\beta\beta}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} &= \xi_{aa}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} + \xi_{bb}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} - \xi_{ab}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} - \xi_{ba}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} \\ \gamma_{\alpha\beta}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} &= -\xi_{aa}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} + \xi_{bb}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} + \xi_{ab}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} - \xi_{ba}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} \\ \gamma_{\beta\alpha}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} &= -\xi_{aa}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} + \xi_{bb}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} - \xi_{ab}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}, v_{\mathbf{k}}} + \xi_{ba}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}, u_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (4.2.11)$$

Em lugar de aplicarmos uma transformação canônica e expandirmos até segunda ordem, método adotado no capítulo 2, usaremos a técnica do *Operador Deslocamento* para desacoplar os elétrons dos fónons. Para tal definimos o operador

$$A_q = \sum_{r,r'} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{r,r'}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} \quad (4.2.12)$$

E definimos o operador deslocamento

$$p_q^\dagger = f_q^\dagger + A_q / \hbar\omega_q \quad (4.2.13)$$

Substituindo (4.2.13) em (4.2.3) e em (4.2.10), tal que o Hamiltoniano dos fónons reescreve-se como:

$$\mathcal{H}_f = \sum_q \hbar\omega_q p_q^\dagger p_q \quad (4.2.14)$$

E finalmente obtemos a parte que descreve as interações atrativa elétron-elétron

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{e-e} = & - \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{1}{\hbar\omega_q} [\gamma_{\alpha\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma} a_{-\mathbf{k},\sigma'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}\sigma'} + \\ & + \gamma_{\alpha\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^\dagger a_{-\mathbf{k}\sigma'} + \\ & + \gamma_{\alpha\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma} a_{-\mathbf{k},\sigma'}^\dagger a_{-\mathbf{k}\sigma'} + \\ & + \gamma_{\alpha\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}\sigma'} + \\ & + \gamma_{\beta\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} a_{-\mathbf{k},\sigma'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}\sigma'} + \\ & + \gamma_{\beta\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^\dagger a_{-\mathbf{k}\sigma'} + \\ & + \gamma_{\beta\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} a_{-\mathbf{k},\sigma'}^\dagger a_{-\mathbf{k}\sigma'} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \gamma_{\beta\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\alpha\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} \alpha_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\alpha\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\alpha\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} \alpha_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\alpha\alpha}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\beta\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}\sigma} \alpha_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\beta\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\beta\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\alpha\alpha}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}\sigma} \alpha_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \\
 & + \gamma_{\beta\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\beta\beta}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger} + \text{h.c.} \dagger
 \end{aligned}$$

(4.2.15)

Este cálculo, aplica-se somente aos estados eletrônicos que são invariantes sob uma inversão no espaço dos \mathbf{k} , exemplo: sistemas onde as bandas superpostas são do tipo s-d [38-39]. Para sistemas que possuem inversão ímpar, como d-f ou p-d, implicariam em levarmos em conta no modelo as seguintes relações:

$$\Lambda_{\mathbf{k}} = P_n P_{n'} \Lambda_{-\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad \gamma_{nn'}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} = -P_n P_{n'} \gamma_{nn'}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}}$$

Por exemplo, no caso de estados f e d temos: $P_d=1$ e $P_f=-1$.

Estamos considerando todas as possíveis interações interbandas podendo ter além daquelas apresentadas no modelo SMW, pares de Cooper formados por elétrons pertencentes a bandas distintas. No total temos quatorze interações interbandas e duas intrabandas.

Após estas transformações chegamos ao Hamiltoniano total, que é composto por (4.2.9), (4.2.14) e (4.2.15).

4.3 ESTADO SINGLETE

Se queremos considerar somente o caso singlete devemos impôr que a função de onda total para o tripleto seja nula. No estado singlete a função de onda de spin é anti-simétrica e a função de onda espacial é simétrica tal que a função de onda total é anti-simétrica. Para este caso tomaremos em (4.2.15), os termos com $\sigma = -\sigma'$.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_f +$$

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{k}'} \left\{ \Omega_{\alpha\beta\alpha\beta}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left[\langle \alpha_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger, \alpha_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \rangle \beta_{\mathbf{k}\uparrow} \beta_{-\mathbf{k}\downarrow} + \langle \alpha_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger, \alpha_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger \rangle \beta_{\mathbf{k}\downarrow} \beta_{-\mathbf{k}\uparrow} \right] \right.$$

$$\left. + \Omega_{\alpha\beta\beta\beta}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left[\langle \alpha_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger, \beta_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \rangle \beta_{\mathbf{k}\uparrow} \beta_{-\mathbf{k}\downarrow} + \langle \alpha_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger, \beta_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger \rangle \beta_{\mathbf{k}\downarrow} \beta_{-\mathbf{k}\uparrow} \right] \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + \Omega_{\beta\alpha\beta\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \left[\langle \beta_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \beta_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \beta_{-\mathbf{k},\downarrow} + \langle \beta_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \beta_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \rangle \alpha_{\mathbf{k},\downarrow} \beta_{-\mathbf{k},\uparrow} \right] \\
 & + \Omega_{\alpha\alpha\alpha\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \left[\langle \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \beta_{-\mathbf{k},\downarrow} + \langle \alpha_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \alpha_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \rangle \alpha_{\mathbf{k},\downarrow} \beta_{-\mathbf{k},\uparrow} \right] \\
 & + \Omega_{\alpha\alpha\beta\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \left[\langle \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \beta_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \beta_{-\mathbf{k},\downarrow} + \langle \alpha_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \beta_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \rangle \alpha_{\mathbf{k},\downarrow} \beta_{-\mathbf{k},\uparrow} \right] \\
 & \qquad \qquad \qquad + \text{h. c.} \quad \left. \vphantom{\Omega_{\beta\alpha\beta\beta}^{\mathbf{k},\mathbf{q}}} \right\} \quad (4.3.1)
 \end{aligned}$$

onde

$$\Omega_{r_1 r_2 r_3 r_4}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} = \frac{\gamma_{r_1 r_2}^{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{r_3 r_4}^{-\mathbf{k},-\mathbf{q}}}{\hbar \omega_{\mathbf{q}}} \quad (4.3.2)$$

Como consequência as funções de correlação satisfazem a seguinte relação [38]:

$$\langle r_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, r_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle = - \langle r_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, r_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \rangle \quad (4.3.3)$$

Substituímos (4.3.3) em (4.3.1), de forma que no estado singleto o Hamiltoniano total reduz-se a:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 - \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\alpha\alpha\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} - \alpha_{\mathbf{k},\downarrow} \alpha_{-\mathbf{k},\uparrow}) + \right. \\
 \Delta_{\beta\beta\mathbf{k}} (\beta_{\mathbf{k},\uparrow} \beta_{-\mathbf{k},\downarrow} - \beta_{\mathbf{k},\downarrow} \beta_{-\mathbf{k},\uparrow}) + \Delta_{\beta\alpha\mathbf{k}} (\beta_{\mathbf{k},\uparrow} \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} - \beta_{\mathbf{k},\downarrow} \alpha_{-\mathbf{k},\uparrow}) + \\
 \left. \text{h. c.} \right] \quad (4.3.4)
 \end{aligned}$$

Onde:

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\alpha\alpha}^{\alpha\alpha} &= \Delta_{\alpha\alpha}^{\alpha\alpha} + \Delta_{\alpha\alpha}^{\alpha\beta} + \Delta_{\alpha\alpha}^{\beta\alpha} + \Delta_{\alpha\alpha}^{\beta\beta} \\
 \Delta_{\beta\beta}^{\beta\beta} &= \Delta_{\beta\beta}^{\alpha\alpha} + \Delta_{\beta\beta}^{\alpha\beta} + \Delta_{\beta\beta}^{\beta\alpha} + \Delta_{\beta\beta}^{\beta\beta} \\
 \Delta_{\beta\alpha}^{\beta\alpha} &= 2 \left(\Delta_{\beta\alpha}^{\alpha\alpha} + \Delta_{\beta\alpha}^{\alpha\beta} + \Delta_{\beta\alpha}^{\beta\alpha} + \Delta_{\beta\alpha}^{\beta\beta} \right)
 \end{aligned}
 \tag{4.3.5}$$

são os "gaps" de energias em sistema de duas bandas com hibridização.

Foi definida a seguinte quantidade:

$$\Delta_{\alpha\beta}^{\beta\alpha} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \Omega_{\alpha\beta}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{\langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\uparrow}) \psi_{\beta}^{\dagger}(-\mathbf{k}'_{\downarrow}) - \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\downarrow}) \psi_{\beta}^{\dagger}(-\mathbf{k}'_{\uparrow}) \rangle}{2}
 \tag{4.3.6}$$

Para chegarmos em (4.3.4) foi usado que $\Delta_{\beta\alpha}^{\beta\alpha} = \Delta_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}$, cuja a demonstração se faz à seguir.

De (4.3.6) temos $\Delta_{\alpha\beta}^{\beta\alpha}$, levando \mathbf{k} em $-\mathbf{k}$ e vice-versa,

obtemos:

$$\Delta_{\alpha\beta}^{\beta\alpha} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \Omega_{\beta\alpha}^{-\mathbf{k}, -\mathbf{q}} \frac{\langle \psi_{\beta}^{\dagger}(-\mathbf{k}'_{\uparrow}) \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\downarrow}) - \psi_{\beta}^{\dagger}(-\mathbf{k}'_{\downarrow}) \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\uparrow}) \rangle}{2}
 \tag{4.3.7}$$

Através de (4.2.17) segue-se:

$$\Omega_{\beta\beta\alpha\alpha}^{k,q} = \frac{\gamma_{\beta\beta}^{k,q} \gamma_{\alpha\alpha}^{-k,-q}}{\hbar \omega_q}$$

e

$$\Omega_{\beta\beta\alpha\alpha}^{-k,-q} = \frac{\gamma_{\beta\beta}^{-k,-q} \gamma_{\alpha\alpha}^{k,q}}{\hbar \omega_q}$$

Por outro lado, temos:

$$\Omega_{\alpha\alpha\beta\beta}^{k,q} = \frac{\gamma_{\alpha\alpha}^{k,q} \gamma_{\beta\beta}^{-k,-q}}{\hbar \omega_q}$$

Então:

$$\Omega_{\alpha\alpha\beta\beta}^{k,q} = \Omega_{\beta\beta\alpha\alpha}^{-k,-q} \tag{4.3.8}$$

Substituindo (4.3.8) em (4.3.7), comutando os operadores chegamos a:

$$\Delta_{\beta\alpha}^{\alpha\beta} = \Delta_{\alpha\beta}^{\beta\alpha}$$

Da mesma forma, obtemos:

$$\Delta_{\beta\alpha}^{\beta\alpha} = \Delta_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}$$

$$\Delta_{\beta\alpha}^{\alpha\alpha} = \Delta_{\alpha\beta}^{\alpha\alpha}$$

$$\Delta_{\beta\alpha}^{\beta\beta} = \Delta_{\alpha\beta}^{\beta\beta}$$

O Hamiltoniano (4.3.4) pode ser resolvido usando uma transformação do tipo da de Bogoliubov [17]:

$$\gamma_{ik} = A_{1ik} \alpha_{k\uparrow} + A_{2ik} \beta_{k\uparrow} + A_{3ik} \alpha_{-k\downarrow}^\dagger + A_{4ik} \beta_{-k\downarrow}^\dagger$$

Tal que os coeficientes A_{ji} , $i=1$ a 4 , são determinados pela seguinte equação secular:

$$[\gamma_{ik}, H] = \lambda_i \gamma_{ik}$$

que pode ser expressa na forma:

$$\sum_j M_{ijk} A_{jik} = \lambda_{ik} A_{lik}$$

M pode ser escrita na forma matricial:

$$M = \begin{bmatrix} E^\alpha & 0 & 2\Delta_{\alpha\alpha} & \Delta_{\beta\alpha} \\ 0 & E^\beta & -\Delta_{\beta\alpha} & 2\Delta_{\beta\beta} \\ 2\Delta_{\alpha\alpha}^\dagger & -\Delta_{\beta\alpha}^\dagger & -E^\alpha & 0 \\ \Delta_{\beta\alpha}^\dagger & 2\Delta_{\beta\beta}^\dagger & 0 & -E^\beta \end{bmatrix} \quad (4.3.9)$$

O próximo passo será a diagonalização de (4.3.9); temos como objetivo obter as energias das quasi-partículas e os respectivos "gaps" de energia.

4.4 "GAP" DE ENERGIA

Suporemos que não há possibilidade de formação de pares de elétrons de bandas distintas, no intervalo de energia da ordem da energia de Debye. Acarretando colocarmos na matriz (4.3.9) $\Delta_{\beta\alpha} = 0$. As energias das quasi-partículas são:

$$\varepsilon_{1(2)} = \pm \sqrt{(E^\alpha)^2 + (2\Delta_{\alpha\alpha})^2} \quad (4.4.1.a)$$

$$\varepsilon_{3(4)} = \pm \sqrt{(E^\beta)^2 + (2\Delta_{\beta\beta})^2} \quad (4.4.1.b)$$

As transformações canônicas que diagonalizam (4.3.9) neste caso particular são:

$$\alpha_{\mathbf{k}\uparrow} = c_1 \zeta_{1\mathbf{k}} + c_2 \zeta_{2\mathbf{k}} \quad (4.4.2.a)$$

$$\beta_{\mathbf{k}\downarrow} = c_3 \zeta_{3\mathbf{k}} + c_4 \zeta_{4\mathbf{k}} \quad (4.4.2.b)$$

$$\alpha_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = -c_1 X_+^\alpha \zeta_{1\mathbf{k}} - c_2 X_-^\alpha \zeta_{2\mathbf{k}} \quad (4.4.2.c)$$

$$\beta_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = -c_3 X_+^\beta \zeta_{3\mathbf{k}} - c_4 X_-^\beta \zeta_{4\mathbf{k}} \quad (4.4.2.d)$$

$\zeta_{i\mathbf{k}}$ são os operadores das quasi-partículas.

onde

$$X_{\pm}^{\alpha} = \frac{E^{\alpha}}{2\Delta_{\alpha\alpha}} \pm \sqrt{\left[\frac{E^{\alpha}}{2\Delta_{\alpha\alpha}}\right]^2 + 1} \quad (4.4.3.a)$$

$$X_{\pm}^{\beta} = \frac{E^{\beta}}{2\Delta_{\beta\beta}} \pm \sqrt{\left[\frac{E^{\beta}}{2\Delta_{\beta\beta}}\right]^2 + 1} \quad (4.4.3.b)$$

$$|c_{1(2)}| = \sqrt{1 + (X_{\pm}^{\alpha})^2} \quad (4.4.4.a)$$

$$|c_{3(4)}| = \sqrt{1 + (X_{\pm}^{\beta})^2} \quad (4.4.4.b)$$

Os "gaps" de energia são expressos por (4.3.5), e neste caso reduzem-se a:

$$\begin{aligned} \Delta_{\alpha\alpha}^{\mathbf{k}} &= \Delta_{\alpha\alpha}^{\alpha\alpha} + \Delta_{\alpha\alpha}^{\beta\beta} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \Omega_{\alpha\alpha\alpha\alpha}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{\langle \alpha_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} - \alpha_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \rangle}{2} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \Omega_{\beta\alpha\beta\alpha}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{\langle \beta_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} - \beta_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \rangle}{2} \end{aligned} \quad (4.4.5.a)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{\beta\beta}^{\mathbf{k}} &= \Delta_{\beta\beta}^{\beta\beta} + \Delta_{\beta\beta}^{\alpha\alpha} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \Omega_{\alpha\beta\alpha\beta}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{\langle \alpha_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} - \alpha_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \rangle}{2} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \Omega_{\beta\beta\beta\beta}^{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{\langle \beta_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} - \beta_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} \rangle}{2} \end{aligned} \quad (4.4.5.b)$$

Substituímos as relações (4.4.2) em (4.4.5.a e b), e após alguma manipulação algébrica conseguimos escrever os "gaps" de energia explicitamente:

$$\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}',q} \Omega_{\alpha\alpha\alpha\alpha}^{\mathbf{k},q} \frac{\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\alpha})^2 + (2\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}'})^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\alpha})^2 + (2\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}'})^2}}{2k_B T} \right] + \sum_{\mathbf{k}',q} \Omega_{\beta\alpha\beta\alpha}^{\mathbf{k},q} \frac{\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\beta})^2 + (2\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}'})^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\beta})^2 + (2\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}'})^2}}{2k_B T} \right] \quad (4.4.6.a)$$

$$\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}',q} \Omega_{\beta\beta\beta\beta}^{\mathbf{k},q} \frac{\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\beta})^2 + (2\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}'})^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\beta})^2 + (2\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}'})^2}}{2k_B T} \right] + \sum_{\mathbf{k}',q} \Omega_{\alpha\beta\alpha\beta}^{\mathbf{k},q} \frac{\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\alpha})^2 + (2\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}'})^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{(E_{\mathbf{k}'}^{\alpha})^2 + (2\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}'})^2}}{2k_B T} \right] \quad (4.4.6.b)$$

Substituímos as relações (4.2.11) em (4.4.6 a e b) e obtemos:

$$\Delta_{\alpha\alpha}_{\mathbf{k}} = L A_{\mathbf{k}} + M B_{\mathbf{k}} \quad (4.4.7.a)$$

$$\Delta_{\beta\beta}_{\mathbf{k}} = -L C_{\mathbf{k}} - M D_{\mathbf{k}} \quad (4.4.7.b)$$

onde

$$\begin{aligned}
 A_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\hbar\omega_D} \left[\epsilon_{aa}^{\mathbf{k},q} u_{\mathbf{k}} + \epsilon_{ab}^{\mathbf{k},q} v_{\mathbf{k}} \right]^2 \\
 B_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\hbar\omega_D} \left[\epsilon_{bb}^{\mathbf{k},q} v_{\mathbf{k}} + \epsilon_{ab}^{\mathbf{k},q} u_{\mathbf{k}} \right]^2 \\
 C_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\hbar\omega_D} \left[\epsilon_{aa}^{\mathbf{k},q} v_{\mathbf{k}} - \epsilon_{ab}^{\mathbf{k},q} u_{\mathbf{k}} \right]^2 \\
 D_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\hbar\omega_D} \left[\epsilon_{bb}^{\mathbf{k},q} u_{\mathbf{k}} - \epsilon_{ab}^{\mathbf{k},q} v_{\mathbf{k}} \right]^2
 \end{aligned}
 \tag{4.4.8}$$

$$L = \sum_{\mathbf{k}} \left[\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 \Delta_{\alpha\alpha_{\mathbf{k}}} - \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 \Delta_{\beta\beta_{\mathbf{k}}} \right]
 \tag{4.4.9.a}$$

$$M = \sum_{\mathbf{k}} \left[\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 \Delta_{\alpha\alpha_{\mathbf{k}}} - \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 \Delta_{\beta\beta_{\mathbf{k}}} \right]
 \tag{4.4.9.a}$$

onde

$$\vartheta_{\eta_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{\sqrt{(E_{\mathbf{k}}^{\eta})^2 + (2\Delta_{\eta\eta_{\mathbf{k}}})^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{(E_{\mathbf{k}}^{\eta})^2 + (2\Delta_{\eta\eta_{\mathbf{k}}})^2}}{2k_B T} \right]
 \tag{4.4.10}$$

tal que η pode ser α ou β .

Como estamos tratando o caso singlete, temos $\Delta_{\eta\eta_{\mathbf{k}}} = \Delta_{\eta\eta_{-\mathbf{k}}}$

então:

$$\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left[\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} \Delta_{\alpha\alpha_{\mathbf{k}}} + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} \Delta_{\beta\beta_{\mathbf{k}}} \right] = 0$$

Substituímos as eqs.(4.4.7) em (4.4.9), depois dividimos (4.4.9.a) por (4.4.9.b) de forma a eliminar L e M, obtemos:

$$\begin{aligned} & \left[1 - \sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 A_{\mathbf{k}} + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 C_{\mathbf{k}} \right) \right] \left[1 - \sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 B_{\mathbf{k}} + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 D_{\mathbf{k}} \right) \right] = \\ & = \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 A_{\mathbf{k}} + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 C_{\mathbf{k}} \right) \right] \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 B_{\mathbf{k}} + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 D_{\mathbf{k}} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.4.11)$$

Observe que esta equação tem a mesma estrutura que a (3.3.6), que descreve o modelo de SMW. Aqui também o problema pode ser soluto da mesma maneira como foi feito para o modelo SMW, pois como parâmetros também temos duas razões e a energia de Debye. Entretanto a complexidade dos cálculos numéricos aumentaram bastante, devido a dependência em \mathbf{k} que a hibridização introduz. De forma que mesmosem fazer exautivos cálculos numéricos tentaremos fazer uma análise simplificada desta equação, com o intuito de evidenciar a importância da hibridização.

Vamos considerar o caso em que somente o espalhamento interbanda esteja presente, então $\xi_{aa}^{\mathbf{k},q} = \xi_{bb}^{\mathbf{k},q} = 0$ e $\xi_{ab}^{\mathbf{k},q} \neq 0$ e seja constante. (4.4.11) se reduz a:

$$\begin{aligned} & \left[1 - \left[\frac{\xi_{ab}^2}{\hbar\omega_D} \right] \sum_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 \right) \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} \right) \right]^2 = \\ & = \left(\frac{\xi_{ab}^2}{\hbar\omega_D} \right)^2 \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 \right) \right] \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}}^2 + \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}}^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (4.4.12)$$

Quando introduzimos uma pequena hibridização entre as bandas a e b, estas homotéticas e centradas na mesma energia, os estados ortogonalizados α e β ficam separados por uma pequena energia, pode ser inferido da figura (4.4.1).

Na eq.(4.4.1) os termos porporcionais a $u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2$ contribuem somente no centro da zona de Brillouin [40], sendo nulos para valores de \mathbf{k} afastados, isto no caso da hibridização ser pequena, então é razoável desprezá-los. Obtem-se:

$$1 = \left(\frac{g_{ab}^2}{\hbar\omega_D} \right)^2 \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} + (\vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} - \vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}}) u_{\mathbf{k}}^4 \right) \right] \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} + (\vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} - \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}}) u_{\mathbf{k}}^4 \right) \right] \quad (4.4.13)$$

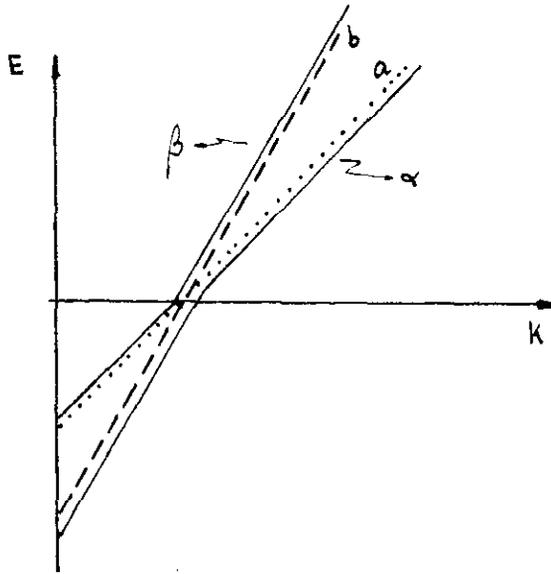
Usamos $u_{\mathbf{k}}^4 + v_{\mathbf{k}}^4 \cong 1$, como consequência de desprezarmos termos com $u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2$

Para uma hibridização significativamente pequena a função $u_{\mathbf{k}}^4$ tem valor aproximadamente 1 para os \mathbf{k} até o meio da zona de Brillouin, e é nula para valores de \mathbf{k} maiores. Então:

$$1 = \left(\frac{g_{ab}^2}{\hbar\omega_D} \right)^2 \left(\sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_m} \vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} + \sum_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_m} \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} \right) \left(\sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_m} \vartheta_{\beta_{\mathbf{k}}} + \sum_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_m} \vartheta_{\alpha_{\mathbf{k}}} \right) \quad (4.4.14)$$

onde \mathbf{k}_m refere-se \mathbf{k} do meio da zona de Brillouin.

Esta equação é válida para qualquer temperatura.



Figura(4.4.1):gráfico de energia bandas ortogonalizadas α e β em função dos momenta k

Passamos os somatórios em k para integrais em energia. Pelo fato da hibridização considerada ser pequena podemos aproximar as densidades de estados das bandas α e β por:

	N_α	N_β
$\epsilon > 0$	N_a	N_b
$\epsilon < 0$	N_b	N_a

onde N_a e N_b são as densidades de estados das bandas a e b .

Os "gaps" de energia também apresentam uma dependência explícita nos momentos k , devido a presença da hibridização. Entretanto como foi visto por Menezes e Aligia [37,41], esta dependência para pequenos valores da hibridização está restrita a região do meio da zona de Brillouin; portanto podemos imaginar que as contribuições mais importantes excluam esta pequena região. Então podemos supor os "gaps" de energia são constantes nesta região. Implicando a inferirmos os valores das integrais de forma análoga a obtida no modelo de SMW.

A partir destas considerações obtem-se de (4.4.14) as equações em $T=0$ e $T=T_c$; respectivamente:

$$1 = \frac{1}{4} \left(\frac{\xi_{ab}^2}{\hbar\omega_D} \right)^2 N_a N_b (F_\alpha(0) + F_\beta(0))^2 \quad (4.4.15)$$

$$1 = \left(\frac{\xi_{ab}^2}{\hbar\omega_D} \right)^2 N_a N_b F^2(T_c)$$

onde $F(T_c)$ e $F_\alpha(0)$, $F_\beta(0)$ são dados por (3.4.2) e (3.4.4), agora η podendo representar a banda α ou β .

Lembramos que as eqs.(3.4.1.a e b) se simplificam para o mesmo caso acima, fazendo $V_{\alpha\alpha} = V_{\beta\beta} = 0$ e $V_{ab} \neq 0$, ficando:

$$1 = V_{ab}^2 N_a N_b F^2(T_c) = V_{ab}^2 N_a N_b F_\alpha(0)F_\beta(0) \quad (4.4.16)$$

Por comparação direta entre as eqs.(4.4.15) e (4.4.16) podemos fazer alguns comentários.

Da mesma forma que no modelo SMW participam duas razões r_a e r_b e a temperatura crítica fica bem definida para uma dada energia de Debye, situação análoga aqui.

Observe que a presença da hibridização favorece a supercondutividade (vide equação (4.4.15)), pois o acoplamento $\left(\frac{g_{ab}^2}{\hbar\omega_D}\right)$ pode ser menor do que V_{ab} face as contribuições quadráticas das integrais F_α e F_β , que estão ausentes no modelo SMW. Esperar-se-ia que a presença de uma fraca hibridização permitiria menores interações interbandas para reproduzir os mesmos valores de r_a e r_b .

Cabe entretanto notar que pouco mais pode ser dito dentro deste quadro excessivamente simplificado. Para valores maiores da hibridização nenhuma das aproximações acima é válida e o afastamento dos estados ortogonalizados α e β torna a passagem de pares de uma face para a outra pouco provável. No entanto este particular exemplo é bastante indicativo da importância da hibridização em problemas de supercondutividade com duas bandas superpostas. Estes resultados vão no mesmo sentido daqueles encontrados no estudo da estabilidade de pares de elétrons em duas bandas em presença de uma fraca hibridização [42], que prevê o aumento do "gap" de energia.

Embora não esteja nos objetivos do presente estudo, acreditamos que uma exaustiva análise numérica do problema deva ser desenvolvida.

CONCLUSÃO

No modelo de SMW a temperatura crítica é dada em termos da energia de Debye, das densidades de estados entorno do nível de Fermi (uma para cada banda), e três interações: duas intrabandas e uma interbanda. Como em todas as expressões as densidades de estados aparecem sempre multiplicadas pelas interações, a temperatura crítica pode ser expressa em função de cinco parâmetros independentes. Devido a este grande número de variáveis comparado com o número de equações disponíveis, que são duas, torna-se difícil encontrar numericamente as regiões das soluções auto-consistentes. No entanto, conseguimos remover esta dificuldade tratando diretamente as razões $2\Delta(0)/k_B T_c$. Com os valores das razões obtidos através de medidas experimentais, procuramos verificar se elas são possíveis soluções do modelo de SMW. Caso tais soluções existam, determinamos em quais intervalos devem estar situados as interações intrabandas e interbanda. Desta forma mostramos que razões maiores do que 6.0 são possíveis de serem obtidas mesmo num regime de acoplamento fraco, contradizendo resultados teóricos anteriores. Dentro do nosso ponto de vista, a tentativa de classificar supercondutores no sentido de serem descritos por uma teoria de acoplamento forte ou fraco, somente através da magnitude de suas razões, não nos parece adequado, particularmente para os supercondutores de altas temperaturas críticas, pois neste caso mais de uma banda [43] contribui com a densidade de estados no nível de Fermi. Mostramos que em sistema de duas bandas podemos obter simultaneamente duas

razões, sendo uma maior e outra menor do que o valor BCS.

No capítulo 4 mostrou-se que mesmo em uma dimensão a hibridização gera uma dependência em k nos "gaps" de energia, através dos acoplamentos elétron-fónon. Há muito tempo constatou-se através de medidas de tunelamento em filmes finos [44] em espécimes puros que em diferentes orientações cristalográficas encontra-se diferentes valores da razão $2\Delta(0)/k_B T_c$, os mesmos calculos podem ser feitos considerando mais de uma dimensão porém a complexidade das equações aumentam bastante.

Como extensão do nosso trabalho seria interessante obter-se numericamente o comportamento dos "gaps" de energia intrabanda e interbanda (calculados analiticamente no capítulo 4) em função do momento k , para diferentes temperaturas. De maneira que através da comparação destes resultados com aqueles obtidos para o modelo SMW no capítulo 3, se poderia mostrar, de forma direta, como a hibridização afeta a temperatura crítica.

Quando supomos que os "gaps" de energia sejam constantes, na verdade estamos admitindo que os acoplamentos elétron-fónon não variavam no espaço dos k ; e com isto a cada banda um valor da razão $2\Delta(0)/k_B T_c$ está associado. Pela presença da hibridização ao modelo de duas bandas, este tipo de consideração não pode mais ser feita, pois neste caso os acoplamentos dependem explicitamente das funções u_k e v_k . A cada banda será associado um conjunto de valores das razões $2\Delta_k(0)/k_B T_c$, porém a razão característica será obtida com o menor "gap" de energia. O que nos leva a concluir, que os valores utilizados no capítulo 3, para as razões se refeririam a uma região do espaço dos k onde u_k e v_k são

constantes.

Seria interessante verificar, nos sistemas com hibridização, se as razões conseguem atingir valores superiores daqueles obtidos no modelo SMW para os mesmos parâmetros das interações elétron-fónon.

A razão do calor específico $\Delta C/\gamma T_c$ em sistemas de duas bandas [45] é menor do que em sistema com uma só banda supercondutora, ou seja menor do que o valor encontrado na teoria BCS que é 1.43. Para estes sistemas a contribuição principal para ΔC provém da banda que tem o maior "gap" de energia, pois esse é proporcional a $d\Delta^2/dT$ na $T=T_c$, todavia as duas bandas contribuem com as suas densidades de estados para o fator γ , aumentando γT_c e consequentemente diminuindo esta razão.

Pelos mesmos motivos descritos acima, quando consideramos sistemas com hibridização, esperamos modificações na razão $\Delta C/\gamma T_c$ em consequência do "gap" de energia apresentar uma dependência em k . É todavia difícil prevêr, sem um estudo numérico detalhado, se o mesmo efeito que acontece no modelo de duas bandas se repetirá neste modelo de duas bandas com hibridização.

APÊNDICE A

Neste apêndice calcularemos as transformações canônicas que diagonalizam a parte eletrônica da hamiltoniana que descreve o modelo de duas bandas com hibridização.

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}a} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}b} b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \Lambda_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (\text{A.1})$$

Os dois primeiros termos descrevem a energia cinética das bandas a e b, respectivamente, e $\Lambda_{\mathbf{k}}$ é a hibridização que é responsável pela mistura dos estados das duas bandas.

Primeiro vamos achar a matriz do operador H, para depois diagonalizá-la.

Seja $|\varphi\rangle = |\varphi_a\rangle|\varphi_b\rangle$ o vácuo das bandas a e b.

Os estados que geram os subespaços a e b, de uma partícula, são:

$$|a_{\mathbf{k}}\rangle = a_{\mathbf{k}}^\dagger |\varphi_a\rangle|\varphi_b\rangle \quad (\text{A.2})$$

$$|b_{\mathbf{k}}\rangle = b_{\mathbf{k}}^\dagger |\varphi_a\rangle|\varphi_b\rangle \quad (\text{A.3})$$

Então;

$$H|a_{\mathbf{k}}\rangle = \epsilon_{\mathbf{k}a} |a_{\mathbf{k}}\rangle + \Lambda_{\mathbf{k}} |b_{\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.4})$$

$$H|b_{\mathbf{k}}\rangle = \Lambda_{\mathbf{k}} |a_{\mathbf{k}}\rangle + \epsilon_{\mathbf{k}b} |b_{\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.5})$$

Sob forma matricial, temos H igual a:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_a & \Lambda \\ \Lambda & \epsilon_b \end{pmatrix} \quad (A.6)$$

[H] é hermitiana logo é diagonalizável e possuem autovalores reais. Esses são escritos da seguinte forma:

$$E^{\alpha(\beta)} = \frac{(\epsilon_a + \epsilon_b)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_a - \epsilon_b}{2}\right)^2 + \Lambda^2} \quad (A.7)$$

De posse dos autovalores, determinamos os autovetores correspondentes que formarão a base ortonormalizada de H.

Usando o método tradicional para encontrar os autovetores, chegamos a:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\epsilon_a - \epsilon_b}{\Lambda}\right)^2}} \begin{pmatrix} 1 & (\epsilon_a - E^\alpha)/\Lambda \\ (\epsilon_a - E^\alpha)/\Lambda & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (A.8)$$

Como esta transformação é unitária, a sua inversa é igual a transposta. Consequentemente o conjunto de transformações canônicas que diagonalizam (A.1) é:

$$|a_{\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}} |\alpha_{\mathbf{k}}\rangle - v_{\mathbf{k}} |\beta_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (\text{A.9})$$

$$|b_{\mathbf{k}}\rangle = v_{\mathbf{k}} |\alpha_{\mathbf{k}}\rangle + u_{\mathbf{k}} |\beta_{\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.10})$$

tal que ,

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{[\Lambda_{\mathbf{k}}^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}a} - E_{\mathbf{k}}^{\alpha})^2]^{1/2}} \quad (\text{A.11})$$

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{E_{\mathbf{k}}^{\alpha} - \epsilon_{\mathbf{k}a}}{[\Lambda_{\mathbf{k}}^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}a} - E_{\mathbf{k}}^{\alpha})^2]^{1/2}} \quad (\text{A.12})$$

BIBLIOGRAFIA E REFERÊNCIAS

- [1] Onnes, H.- Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden 119, 120 (1911).
- [2] Onnes, H.- Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden Suppl. 34b, 55 (1913).
- [3] Silabe, J.- J. Wash. Acad. Sc. 6, 597 (1916).
- [4] Meissner, W. e Ochsenfeld, R.- Naturwissenschaften 21, 787 (1933).
- [5] Maxwell, E.- Phys. Rev. 78, 477 (1950).
- [6] Reynolds, C. A.; Serin, B.; Wright, W. H. e Nesbitt, L. B.- Phys. Rev. 78, 487 (1950).
- [7] Fröhlich, H.- Phys. Rev. 79, 845 (1950).
- [8] Goodmann, B. B.- Proc. Phys. Soc. 66A, 217 (1953).
- [9] Bardeen, J; Cooper, L. N. e Schrieffer, J. R. - Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [10] Glaver, I.- Phys. Rev. Lett. 5, 147 (1960).
- [11] Josephson, B. D.- Phys.Rev.Lett. 1, 251 (1962).
- [12] Müller, K. e Bednorz, J.- Z. Phys.B 64, 189 (1986).
- [13] Steglich, F.; Aarts, J.; Bredl, C. D.; Leke, W.; Merchede, D.; Franz, W. e Schafer, H.-Phys. Rev. Lett. 43, 1892 (1979).
- [14] Ginzburg, V. L.- Phys. Today 42, 9 (1989).
- [15] Suhl, H.; Matthias, B. e Walker, L.- Phys. Rev. Lett. 3,552 (1959).

- [16] Cooper, L.- Phys. Rev. 104, 1189 (1956).
- [17] Bogoliubov, N. N.- Nuovo Cimento 7, 794 (1958).
- [18] Jalatin, J.- Nuovo Cimento 7, 843 (1958).
- [19] Schrieffer, J. R.- "Theory of Superconductivity"- W. A. Benjamin, Inc. Reading, Massachusetts, (1964).
- [20] Taylor, P. L.- "A Quantum Approach to the Solid State", Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1979).
- [21] Friedel, J.; Barisic, S. e Labbe, J.- Phys. Rev. Lett. 25, 919 (1970).
- [22] Soda, T. e Wada, Y.- Prog. Theor. Phys. 36, 1111 (1966).
- [23] Genzel, L.; Wittlin, A.; Bauer, M.; Cardona, M.; Schönheur, E. e Simon, A.- "Phonon Anomalies and Range of Superconducting Energy Gaps from Infrared Studies of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ " - Preprint Max-Planck-Institut für Festkörperforschung (1988).
- [24] Petroff, Y. and al.- " High-resolution photoemission study of low-energy excitation reflecting the superconducting state of Bi-Sr-Ca-Cu-O single crystals" - Preprint (1989).
- [26] Nowack, A.; Heinz, A.; Oster, F.; Wohlleben, D. e Güntherodt, G.- Phys. Rev. B 36, 2436 (1987).
- [25] Mall, M.; Brinkmann, D.; Pauli, L.; Roos, J.; Zimmermann, H. e Hülliger, J.- Phys. Lett. A 124, 112 (1987).
- [27] Sung, C. C. e Wong, V. K.- J. Phys. Chem. Sol. 28, 1933 (1967).
- [28] Chow, W. S.- Phys. Rev. 172, 467 (1968).

- [29] Warren, W. W.; Walstedt, Jr.; Brennert, G. F.; Espinosa, G. P. e Remeika, J. P.-Phys. Rev. Lett. 59, 1860 (1987).
- [30] Kondo, J.- Prog. of Theor. Phys. 29, 1 (1963).
- [31] Kresin, V. Z.- Sol. St. Comm. 63, 725 (1987).
- [32] Carbotte, J. P.; Marsiglio, F. e Arkis, R. - Physica C 153-155, 223 (1988).
- [33] Ji-hai Xi - Sol. St. Comm. 65, 135 (1988).
- [34] Yamaji, K. e Abe, S.- "Multiband Superconductor Model With Exchange-Like Interband Interaction"- Preprint- Interlahec(1988).
- [35] Kosin, P.; Kristoffel, N. e Örd, T.- Phys. Lett. A 129, 339 (1988).
- [36] Wetlege, W.; Entel, P. e Muhlschlegel, P. P.-Z. Phys.B34, 37 (1982)
- [37] Menezes, O. L. T. e Aligia, A. A.- Jap. J. App. Phys. 26, 1291 (1987).
- [38] Aligia, A. A. e Menezes, O. L. T.- "BCS superconductivity in f-d and p-d systems"- a ser publicado, Z.Phys. B - Cond. Matt. (1987)
- [39] Gzychohl, G. e Leder, H. J.- Z. Phys. B - Cond. Matt. 44, 59 (1981).
- [40] Menezes, O. L. T.- Sol. St. Comm. 57, 825 (1986).
- [41] Menezes, O. L. T.- Sol. St. Comm. 56, 799 (1985).

[12] Ochi, M. e Menezes, O. L. T.- relatório do Cnpq (não publicado).

[13] Mattheis, L. F.- Phys.Rev. Lett. 56, 1028 (1987).

[14] Zavaritskii, N. V.- Sov. Phys. JEPT 15, 1260 (1964).

[15] Sung., C. C. e Shen, L. Y. L.- Phys. Lett.19, 104 (1965).

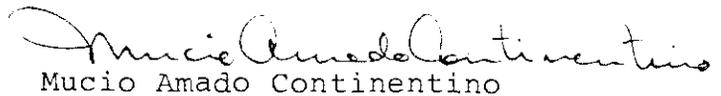
"ASPECTOS DA SUPERCONDUTIVIDADE EM
SISTEMAS DE DUAS BANDAS"

ROSANA BULOS SANTIAGO

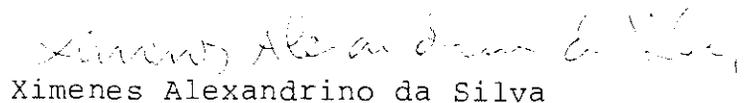
Tese de Mestrado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes Professores:



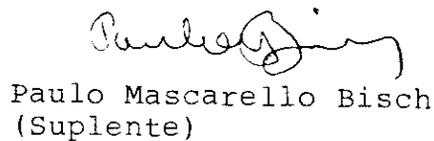
Oscar Leonel Nóbrega Telles de Menezes
(Presidente)



Mucio Amado Continentino



Ximenes Alexandrino da Silva



Paulo Mascarello Bisch
(Suplente)