

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

OS EFEITOS DA HIBRIDIZAÇÃO NO CROSSOVER
BCS-BEC COM INTERAÇÕES INTERBANDAS

Marcos Kelvin Lira de Oliveira

Manaus

2018

MARCOS KELVIN LIRA OLIVEIRA

**OS EFEITOS DA HIBRIDIZAÇÃO NO CROSSOVER BCS-BEC COM
INTERAÇÕES INTER-BANDAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas (UFAM) como requisito necessário para a obtenção do título de Mestre em Física.

Prof. Dr. Igor Tavares Padilha

Orientador

Manaus

2018

Ficha Catalográfica

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

O48o Oliveira, Marcos Kelvin Lira de
Os efeitos da hibridização no crossover BCS-BEC com interações interbandas. / Marcos Kelvin Lira de Oliveira. 2018
89 f.: il. color; 31 cm.

Orientador: Igor Tavares Padilha
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas.

1. supercondutividade. 2. hibridização. 3. crossover. 4. bcs. 5. bec. I. Padilha, Igor Tavares II. Universidade Federal do Amazonas
III. Título

Marcos Kelvin Lira de Oliveira

**OS EFEITOS DA HIBRIDIZAÇÃO NO CROSSOVER BCS-BEC COM
INTERAÇÕES INTER-BANDAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas (UFAM) como requisito necessário para a obtenção do título de Mestre em Física avaliada pela Comissão Julgadora composta pelos membros:

COMISSÃO JULGADORA

Professor Dr. Igor Tavares Padilha
Universidade Federal do Amazonas (UFAM) - Presidente

Professor Dra. Daniela Menegon Trichês
Universidade Federal do Amazonas (UFAM) - Membro

Professor Dr. Francisco Dinóla Neto
Universidade Federal do Amazonas (UFAM) - Membro

Aprovado em 05 de fevereiro de 2018.

Local da defesa: Auditório Prof. José Leitão, Departamento de Física, Setor Norte,
Universidade Federal do Amazonas - Manaus.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer primeiramente à Deus, por tudo, pois sem ele não somos nada;

A minha companheira e também amiga, Paola de Araújo, pelo carinho e fortalecimento em todos os momentos, obrigado;

Aos meus pais, Jucy Fernandes de Lyra e Marco Aurélio Santos de Oliveira, por me oportunizarem a única coisa que ninguém poderá tirar de mim, a educação, obrigado;

Aos meus irmãos, Jackeline e Marcos Vinicius Lyra de oliveira, que mesmo pequenos e sem entender sobre Física me dão muito afeto e alegria, obrigado;

Ao meu orientador, professor Dr. Igor Tavares Padilha, pela enorme força de vontade e apoio, por todos os momentos de ensinamentos e pelo prazer de podermos trabalhar juntos desde o início de minha vida acadêmica, obrigado;

A todos os professores e funcionários do Departamento de Física da UFAM que tive a oportunidade de conhecer quero deixar o meu muito obrigado.

A todos os meus amigos, em especial aos amigos: Douglas Gonçalves, Adriano Carolino, Cássio Macêdo, Marcílio Ramos, Joziano Monteiro, Cláudio Lima, Salomão Costa, Luã Catique, Ozeias Picanço e Henrique Pecinatto por terem transformado essa jornada mais agradável, obrigado;

Ao professor Dr. Francisco Dinóla Neto pela ajuda e confiança, obrigado;

À coordenação da Pós-Graduação em Física, à professora Daniela Menegon, muito obrigado.

À CAPES pelo suporte financeiro, muito obrigado.

RESUMO

Neste trabalho é tratado o comportamento de um sistema supercondutor descrito por um modelo multibandas, sendo isto uma extensão da teoria BCS a qual descreve bem os supercondutores de baixas temperaturas. Uma vez que a mesma se limita ao caso de uma única banda. Será Considerado a interação interbanda, isto é, a interação que se dá entre férmions que apresentam propriedades diferentes, sob a influência da hibridização, avaliando o crossover entre os limites de acoplamento fraco (BCS) até o acoplamento forte (BEC) para simetria tipo s do parâmetro de ordem em $T = 0$. Poranto, o objetivo deste trabalho é estudar a supercondutividade no modelo de duas bandas, com interações interbandas, com o propósito de obter as equações para as amplitudes do *gap* supercondutor e, concomitantemente, avaliar a evolução dos sistemas entre o limite de acoplamentos fracos (BCS) e acoplamentos fortes (BEC) e estimar a influência que a hibridização tem sobre o sistema. Fazendo uso do método das funções de Green de Zubarev, calculamos os parâmetros de ordem supercondutor interbandas e o potencial químico como função da interação, a qual será descrita em termos do comprimento de espalhamento e do número de onda de Fermi, afim de obtermos um estudo completo do sistema. Exploramos as energias de excitação nos dois limites do acoplamento, considerando suas características e vimos que existe uma descontinuidade na amplitude do gap inter-banda. Nossos resultados sugerem que a hibridização V , atua em detrimento da supercondutividade, suprimindo-a, concordando com outros trabalhos, apesar de não ser isso geral, uma vez que alguns trabalhos mostram que V contribui para a supercondutividade até um determinado valor e para outros valores, a destrói. Percebemos também que na interação interbanda temos transições de primeira e segunda ordem e um ponto tricrítico, no qual temos o encontro de uma linha de primeira ordem com uma de segunda ordem. Este trabalho se baseia na tese do Professor Dr. Francisco Dinola.

ABSTRACT

In this work we discuss the behavior of a superconducting system described by a multiband model, so it is an extension of the BCS theory which describes well the low temperature superconductors. We consider the interbanding interaction, that is, the interaction between fermions that present different properties under the influence of hybridization, evaluating the crossover between the weak coupling (BCS) and the strong coupling (BEC) for symmetry type s Order parameter in $T = 0$ and in the presence of a hybridization. However, the objective of this work is to study superconductivity without a two-band model, with interband interactions, with the purpose of obtaining as equations for the superconducting Gaps and, concomitantly, to evaluate a development of the systems between the limit of weak couplings (BCS) and strong couplings (BEC) and estimate an influence that is a hybridization on the system. Using Zubarev's Green function method, we calculate interband superconducting order parameters and chemical potential as a function of the interaction $1/k_F a_s$ in order to obtain a complete study of the system. We explore the energies of excitation at the two limits of the coupling, considering their characteristics and we see that there is a discontinuity in the amplitude of the interband gap. Our results suggest that hybridization V acts at the expense of superconductivity, suppressing it, agreeing with other works, although this is not general, since some works show that V contributes to superconductivity up to a certain value and to other values, destroys it. We also notice that in interband interaction we have first and second order transitions and a tricritical point, in which We have the encounter of a first order line with a second order line.

SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Considerações gerais e motivações	4
2.1	A descoberta da supercondutividade	4
2.2	Teorias da supercondutividade	6
2.3	Supercondutividade em mais de uma banda	10
2.4	O conceito de hibridização	16
2.5	Aplicações tecnológicas da supercondutividade	20
3	Método das funções de Green	26
3.1	A função de Green	26
3.2	Funções retardada, avançada e causal	27
3.3	Equações de Movimento para as Funções de Green	31
3.4	Representação espectral para as funções de correlação temporal	33
3.5	Representações espectrais para as funções de Green avançada e retardada	36
4	Os efeitos da hibridização no <i>crossover</i> BCS-BEC com interações inter-bandas	40
4.1	Modelo	40
4.2	As equações de movimento	43

4.3	Energias de excitação e correlação	51
4.4	<i>crossover</i> BCS-BEC com interações interbandas	57
5	Resultados e considerações finais	66
	Referências Bibliográficas	72

LISTA DE FIGURAS

2.1	Comportamento de materiais supercondutores em alta temperatura feito por um grupo de pesquisadores liderados por Peter Wahl, da Universidade de St. Andrews, na Escócia, 2014.	4
2.2	Plot da resistencia (ohms) pela temperatura (kelvin) do mercúrio em 26 de outubro de 1911 mostrando a transição supercondutora a 4,20 K.	5
2.3	Observação do Efeito Meissner onde (a) é um condutor ideal e (b) é uma esfera supercondutora.	6
2.4	Esquema de uma polarização de rede produzida por elétrons.	8
2.5	Temperatura crítica do supercondutor em função da massa isotópica para o mercúrio Hg para $\zeta = 0,5$. Adaptado: Rohlf	8
2.6	Valores reduzidos da energia do gap $E(T)/E(0)$ em função da temperatura reduzida T/T_c segundo Townsend e o Sutton. A curva sólida representa a teoria bcs.	9
2.7	A evolução cronológica do recorde de temperatura crítica dos materiais supercondutores.	11
2.8	Gap normalizado em função da temperatura. Onde, as linhas contínuas mostram as duas temperaturas críticas do sistema quando o caso intra-banda é considerado. A linha pontilhada é um caso limite de $V_{sd} \ll \sqrt{V_{ss}V_{dd}}$, e neste caso, somente há uma temperatura crítica, a mais alta. . .	14

2.9	Diagrama de fase qualitativo do crossover BCS-BEC como uma função da temperatura T/E_F , normalizada pela energia de Fermi, E_F , e do acoplamento $1/k_F a$ (k_F = vetor de onda de Fermi e a = comprimento de espalhamento)(T_c).	15
2.10	As combinações entre os orbitais atômicos ns e ns formando os quatro híbridos sp^3 com sua orientação espacial tetraédrica sobre o átomo com ângulos de $109^\circ 28'$ entre diferentes híbridos.	17
2.11	Ilustração esquemática da hibridização de duas bandas. Onde: a) Bandas de energia sem hibridização. b) Formação de uma banda híbrida intermediária devido a mistura das bandas s e p.	19
2.12	Diagrama de Linus Pauling mostrando os níveis de energia e seus subníveis	19
2.13	Desenho esquemático da hibridização das camadas de energia para o átomo de carbono neutro, que tem 6 elétrons	20
2.14	Evolução das aplicações dos metais supercondutores ao longo dos anos e perspectivas. Levando em conta os eletrônicos(azul), energia(amarelo), transportes(laranja), indústria(verde) e medicina(ciano).	21
2.15	Imagem de um super equipamento de ressonância magnética nuclear	22
2.16	Desenho esquemático da dinâmica da levitação magnética que ocorre em trens	23
2.17	Esquema da estrutura da maior cabo supercondutor do mundo.	24
2.18	Exemplo de um SQUIDS	24
3.1	Representação da função degrau	29
5.1	Como a função do integrando da equação do gap se comporta	67
5.2	Como a função do integrando da equação do número se comporta	67
5.3	Como a função do gap interbanda varia com α	68

5.4	Como a função de gap interbanda se comporta para diferentes valores de hibridização para $\alpha = 0.5$	69
5.5	Como o potencial químico se comporta para diferentes valores de hibridização para $\alpha = 0.5$	70
5.6	Comparação entre os comportamentos do Gap e do potencial químico em função do parâmetro supercondutor	71

ABREVIATURAS

T_c - Temperatura crítica

H_c - Campo magnético crítico

H_{c1} - Campo magnético crítico 1

H_{c2} - Campo magnético crítico 2

BCS - Teoria sobre supercondutividade

M_{iso} - massa dos seus isótopos

α - Razão entre as massas das bandas

ς - expoente isotópico

BEC - Condensado de Bose-Einstein

HTSC - Supercondutores a alta temperatura crítica

FP - Férmions pesados

Introdução

Um dos fenômenos mais surpreendentes da Física, a supercondutividade, está sendo exaustivamente estudada, pelo fato de ser promissor para aplicações tecnológicas. Embora haja um largo avanço teórico e experimental nessa área de pesquisa, como a teoria BCS, ainda não há uma teoria completa que descreva bem todos os supercondutores. Sabe-se que a resistividade elétrica de muitos metais e ligas cai de repente a zero quando a amostra é resfriada a uma temperatura suficientemente baixa, muitas vezes a uma temperatura próxima a do hélio líquido. Este fenômeno foi observado primeiramente por Kamerlingh Onnes em Leiden em 1911, três anos depois que ele fora o primeiro a liquefezer o hélio. O intervalo de temperatura em que ocorre a mudança de resistividade é extremamente estreito. Dizemos que a uma temperatura crítica T_c as amostras sofrem uma transição de fase de um estado de resistividade elétrica normal para um estado supercondutor [1] e desse fenômeno surgiu a supercondutividade. Isso se confirmou ao observar que as características dos metais no estado supercondutor são bem diferentes quando consideradas do ponto de vista da aproximação de elétrons independente segundo Ashcroft [2].

A supercondutividade, que é um ramo da Física da Matéria Condensada, é um dos subtemas dos chamados sistemas fortemente correlacionados os quais veem na teoria quântica de sistemas de muitos corpos uma importante ferramenta para o seu entendimento e suas relações. Esse ramo da Física, desde sua descoberta, tem sido um objeto de estudo bastante investigado, pois é uma propriedade famigerada percebida em muitos metais comuns e devido a sua capacidade ou potencial para aplicações tecnológicas. Sistemas teóricos mais complexos feitos para descrever esse fenômeno, que preveem mais bandas de energia, são cada vez mais necessários para a descrição de supercondutores de alta temperatura crítica [3], férmions pesados, geralmente compostos formados por camadas de óxidos de cobre (CuO_2) tendo como vizinhos camadas contendo íons como lantânio (La), bário (Ba) e etc.

A aplicação desses materiais exige que o custo benefício seja muito observado, por isso, cresce progressivamente a procura por materiais supercondutores com o menor gasto de energia possível, logo tem se buscado por mecanismos ou sistemas que alterem a formação dos supercondutores em busca de materiais que possam se tornar supercondutores a altas temperaturas críticas. Um desses mecanismos é a hibridização que pode reforçar ou até mesmo acabar com a supercondutividade, como são mostrados em alguns trabalhos, inclusive atuais [4], se mostrando um interesse contemporâneo. Os sistemas multibandas tem como principal característica a hibridização, ou seja, mistura dos orbitais das partículas, e esses sistemas são interessantes, pois se aproximam cada vez mais da realidade indo de duas bandas até modelos mais complexos e mais atuais com mais bandas [5], [6]. Levando em conta que essa hibridização pode ser simétrica ou antissimétrica no espaço real ou no espaço dos momentos, essa simetria também tem sido explorada em muitos trabalhos recentes, por exemplo em [7] [8].

No laboratório da Universidade de Havard foi feito um experimento que rendeu a publicação de um trabalho com alegações a respeito de uma amostra de hidrogênio metálico [9], no início de 2017. Essa amostra metálica é uma fase do hidrogênio que é permitida chegar sob condições específicas, com altíssimas pressões por exemplo, teria diversas aplicações, uma delas na área da supercondutividade. E como apontado por Ascroft em 1968 [10], essa fase metálica do hidrogênio pode se transformar em um supercondutor a uma temperatura ambiente por conta do forte acoplamento entre os elétrons mais "livres" e as vibrações da rede (fônons). Além desses trabalhos, outras pesquisas acerca da influência da pressão na supercondutividade tem mostrado como podemos ter materiais supercondutores a altas temperaturas, esses exemplos mostram a importância de incorporar a pressão no Hamiltoniano do sistema quando feita a previsão teórica desses sistemas, uma vez que a hibridização pode ser ajustada por alguns fatores externos, e um deles é a pressão externa aplicada.

Segundo Troyan [11] podemos ver que o hidreto de enxofre sob pressões altíssimas, aproximadamente 1,5 milhões de atmosferas, conduz eletricidade com resistência nula a uma temperatura de 233 K , maior valor encontrado até hoje batendo o recorde anterior de 133 K em pressão ambiente de um óxido de mercúrio, bário, cálcio e cobre. Com essa visão a hibridização será explorada nesse trabalho o qual está organizado da seguinte

forma: No Capítulo 2 serão abordadas as fases do desenvolvimento científica que serviram de plano de fundo para as qualidades do Hamiltoniano proposto para multi-bandas, onde esses modelos são usados para estudar a supercondutividade através da teoria BCS. O foco desse capítulo é dar uma justificativa para a adoção dos modelos multi-bandas para estudar a supercondutividade, mostrando suas vantagens.

No Capítulo 3 apresentamos as ferramentas imprescindíveis para a análise do Hamiltoniano proposto, a qual a técnica definida será o uso do método das funções de Green (as equações de movimento das funções de Green) que é uma estratégia interessante para ser utilizada em sistemas que possuam correlações.

No Capítulo 4 será estudado o crossover BCS-BEC utilizando o modelo de duas bandas. Adotamos o método das funções de Green para descrever os efeitos da hibridização no crossover supercondutor com interações atrativas inter-bandas apenas. Será feita também uma breve discussão sobre a hibridização crítica V_c que destrói a supercondutividade nesses sistemas.

No capítulo 5 serão apresentados os resultados deste trabalho com a obtenção das curvas de uma função do gap em função acoplamento, como o gap varia com a hibridização e como que o potencial químico varia com a hibridização por fim, as conclusões e as aspirações deste trabalho.

Considerações gerais e motivações

2.1 A descoberta da supercondutividade

A supercondutividade é uma área relativamente nova com o seu centenário sido comemorado no ano de 2011 e por isso ainda há muitos mistérios que orbitam esse fenômeno, mas a ciência pode estar próxima de resolver um dos maiores mistérios da física de estados sólidos. Um time internacional de pesquisadores conseguiu registrar imagens em escala atômica da estrutura magnética no composto original de um supercondutor não convencional, o que pode lançar luzes sobre o comportamento de materiais supercondutores em alta temperatura como mostrado na fig. 2.1 [12] O fenômeno da supercondutividade foi

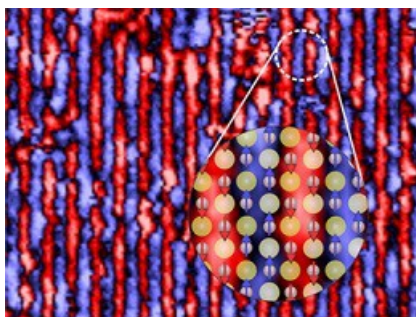


Figura 2.1 - Comportamento de materiais supercondutores em alta temperatura feito por um grupo de pesquisadores liderados por Peter Wahl, da Universidade de St. Andrews, na Escócia, 2014.

descoberta em 1911, pelo Físico holandês Heike Kamerlingh Onnes, quando estudava a condutividade elétrica dos metais a baixas temperaturas, isso deve ter sido devido a grande disputa entre H. K. Onnes e J. Dewar, em meados do século XX, para conseguir atingir o zero absoluto, usando a liquefação dos gases, a qual foi vencida por H. K. Onnes em 1908. Usando o seu conhecimento sobre liquefação dos gases, ele verificou que a resistividade do mercúrio descia subitamente, e aparentemente ia a zero, quando estava a uma temperatura próxima de 4,20 K [13], de acordo com a figura 2.2 [1]. A explicação deste fenômeno considera a ocorrência de uma transição de fase em que o mercúrio passa de um estado com comportamento elétrico normal, ou seja, resistivo, a um estado super-

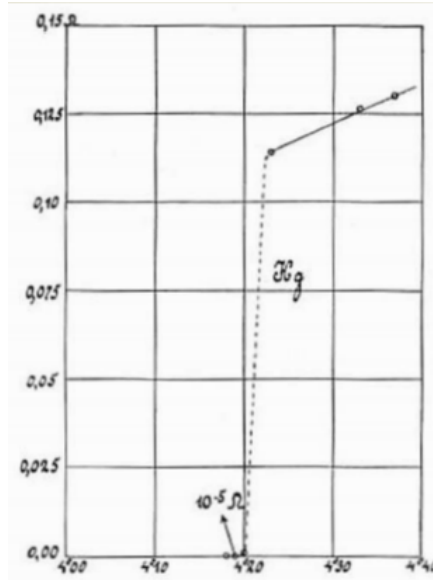


Figura 2.2 - Plot da resistancia (ohms) pela temperatura (kelvin) do mercúrio em 26 de outubro de 1911 mostrando a transição supercondutora a 4,20 K.

condutor, onde a resistência elétrica é nula. E em 1913, Onnes recebeu o prêmio Nobel por suas investigações sobre as propriedades da matéria a baixas temperaturas que levaram à produção do hélio líquido. Ainda esse ano verificou-se que o chumbo, também, se tornava supercondutor, embora fosse abaixo de uma temperatura de 7,2 K. Em meados de 1914, H. K. Onnes verificou que o estado supercondutor era destruído se o material fosse submetido a um campo magnético acima do que ficou conhecido como campo magnético crítico H_c [13] mostrando em princípio que a SC e o magnetismo são antagônicos. Até então entendia-se que os comportamentos magnéticos de um condutor perfeito eram os mesmos para os supercondutores, no entanto, em 1933 foi descoberta uma outra característica dos supercondutores, que o diferenciavam dos condutores perfeitos, a qual consistia na expulsão do fluxo magnético no interior da parte maciça de um supercondutor como pode ser visto na fig.2.3 [14] que ficou conhecido como Efeito Meissner [15]. Logo, a supercondutividade é observada por meio do desaparecimento da resistividade elétrica quando o material é submetido a uma temperatura abaixo de uma temperatura crítica T_c , além disso o material no estado supercondutor expulsa as linhas de campo magnético externo. Dessa maneira, existe o estado supercondutor se a temperatura do sistema for mantida aquém de T_c e o campo magnético externo abaixo de H_c , para uma classe de supercondutores, chamados de supercondutores do tipo I [16]. No entanto, foi descoberto uma nova classe de supercondutores, conhecidos como supercondutores do tipo II [16], onde nesses supercondutores temos a presença de dois tipos de campos críticos: o primeiro

(H_{c1}) é onde as linhas de campo magnético entram no material através de ilhas normais e vórtices supercondutores, enquanto que o resto do material permanece supercondutor; e o segundo campo H_{c2} que é forte o suficiente para fazer todo o material ficar no estado normal.

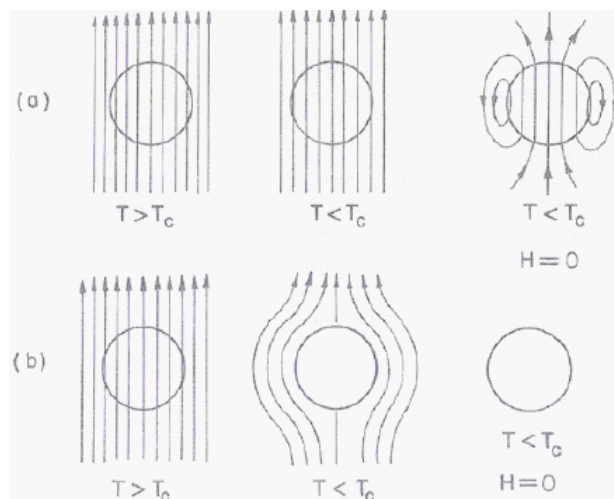


Figura 2.3 - Observação do Efeito Meissner onde (a) é um condutor ideal e (b) é uma esfera supercondutora.

Apesar de todo o esforço e estudo por meio de experimentações da comunidade científica da época, além dos próprios esforços de Onnes o entendimento desse sistema não era trivial e durante anos tentou-se entender o motivo, o por que e o que levaria o sistema a ter esse comportamento tão abrupto, seria preciso uma caminhada de quase 50 anos para entendermos uma parte desse processo.

2.2 Teorias da supercondutividade

Essa modificação de comportamento do material é compreendida como uma mudança de fase, que pode ser entendida por meio de uma transformação nas propriedades termodinâmicas do sistema como resposta a uma variação contínua dos parâmetros externos, a saber: temperatura, pressão, e etc. Uma primeira teoria, que surgiu para explicação de fenômenos ligados a supercondutividade, foi a proposta por dois alemães: os irmãos London, uma teoria fenomenológica que busca explicar o Efeito Meissner e apresenta um novo parâmetro: o comprimento de penetração de London [17], logo depois, essa teoria foi ampliada e refinada pelos russos Ginzburg e Landau os quais formularam uma teoria também fenomenológica para o entendimento das propriedades termodinâmicas da transição do estado normal para o supercondutor e, através desta teoria eles introduziram, assim

como os irmãos London, uma nova grandeza, o comprimento de coerência, que mede a variação espacial do parâmetro de ordem [18], o que trouxe à tona um caráter quântico da supercondutividade.

Mas, essas não foram as únicas teorias que surgiram para a explicação deste fenômeno. Necessitava-se de uma teoria mais formal, robusta e que apresentasse uma formulação fundamental para uma compreensão mais geral do fenômeno da Supercondutividade. E uma teoria, microscópica, formal que surgiu para descrever a supercondutividade foi proposta somente em 1957, quase 50 anos após a sua descoberta, pelos físicos J. Bardeen, L. Cooper e J. R. Schrieffer [19]. Eles descreveram o estado fundamental supercondutor através de uma função de onda de elétrons emparelhados chamados de pares de Cooper, onde a interação atrativa entre elas seria mediada pela vibração da rede cristalina conhecida como fônons, essa teoria ficou conhecida como "teoria BCS" e foi bem sucedida explicando grande parte das propriedades supercondutores, como por exemplo, a descontinuidade no calor específico, sua dependência exponencial com a temperatura e o surgimento do *gap* de energia no espectro de excitações. Essa teoria propunha que quando o elétron se propagava pelo cristal a deformação o acompanhava como na fig.2.4 [20], resultando em um acúmulo de cargas positivas que acabava por atrair outro elétron. Assim, dois elétrons poderiam se atrair via deformação local, intermediada por um fônon associado à deformação da rede - esse fônon criaria uma espécie de estado ligado entre dois elétrons que, como já fora mencionada, se chama par de Cooper.

Com essa teoria também foi possível obter de forma satisfatória as temperaturas críticas para uma boa quantidade de supercondutores que mais tarde foram chamados de supercondutores convencionais, apesar, é claro, de que a teoria não encontra o valor exato da temperatura crítica, mas fornece parâmetros com os quais podemos encontrar essa temperatura. Nesses supercondutores que chamamos de convencionais, o *gap* de energia é isotrópico no espaço dos momentos k , ou seja, possui mesma fase e magnitude em todas as direções. Essa simetria do *gap* é conhecida como sendo o estado de emparelhamento isotrópico onda s , alguns trabalhos de ressonância magnética nuclear (RMN) indicaram que o estado emparelhado é singlete [21], fazendo uma restrição aos possíveis candidatos à simetria de emparelhamento entre ser tipo onda s ou tipo onda d . Experimentos mostram que a temperatura crítica dos supercondutores varia com a massa isotópica, então algo

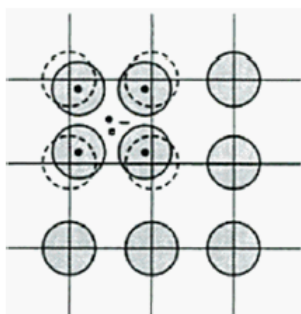


Figura 2.4 - Esquema de uma polarização de rede produzida por elétrons.

que deu mais crédito para a teoria BCS, do ponto de vista das interações via fônons, foi a confirmação desse efeito isotópico observado no mercúrio em 1950 [22].

Percebe-se que há uma relação entre a massa dos isótopos do mercúrio (M_{iso}) - e não somente dele - e a T_c desse material supercondutor, sendo visto que $M_{iso}^{\alpha} T_c = cte$ [23] como mostrado na fig.2.5 [24]. O expoente isotópico (ζ) predito para alguns supercondutores como: mercúrio (Hg), chumbo (Pb) e zinco (Zn); vale (ζ) $\approx 1/2$. Em outros sistemas como os supercondutores de alta temperatura crítica, não é observado o efeito isotópico, esses novos materiais [25] apresentam um mecanismo de emparelhamento não-convencional indicando que os fônons poderiam não estar envolvidos no mecanismo do emparelhamento desses materiais.

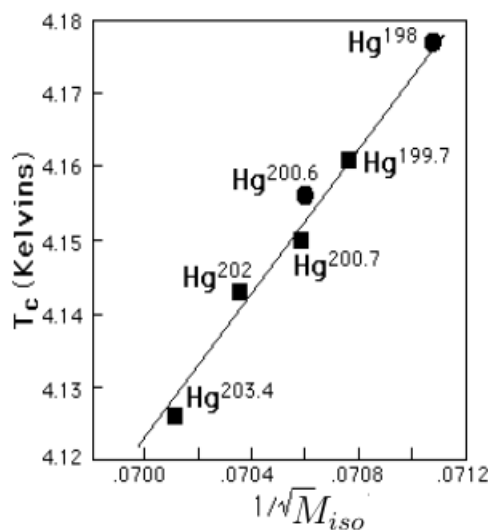


Figura 2.5 - Temperatura crítica do supercondutor em função da massa isotópica para o mercúrio Hg para $\zeta = 0,5$. Adaptado: Rohlf

A complexidade das propriedades eletrônicas dos cupratos supercondutores, por exemplo, de alta temperatura crítica tem dificultado o desenvolvimento de uma teoria

microscópica segundo Pureur [26], pois mostram uma anisotropia forte, devido a densidade de corrente crítica e o campo magnético os quais são muito diferentes em comparação ao plano a, b e a direção c . Essa anisotropia está relacionada com a ausência de elétrons na última camada do cobre, conhecido como *mecanismo de lacunas*. Os supercondutores de alta temperaturas críticas mostram uma temperatura crítica maior do que 30K, que é o maior valor previsto pela teoria BCS [27], e também mostra um comprimento de coerência ε_0 muito pequeno em relação aos supercondutores comuns descritos pela teoria BCS. Se por um lado em um supercondutor convencional a T_c próxima de 10K o comprimento de coerência é da ordem de $\varepsilon_0 \sim 5000 \text{ \AA}$, por outro nos supercondutores de alta temperatura crítica é observado que $\varepsilon_0 \sim 10 \text{ \AA}$. Por isso, esses materiais não convencionais revelam alto campo crítico e estão em um regime intermediário entre grandes pares de Cooper tipo BCS e o limite onde os férmions envolvidos estão fortemente ligados, o que pode ocasionar um condensado de Bose-Einstein, desses "bósons efetivos" e vários trabalhos se mostram declinados a entender esse fenômenos em diferentes estruturas [28] [29].

Isto mostra um interesse em estudar a evolução desse condensado de Bose-Einstein, analisando as mudanças que ocorrem no sistema ao passo que a interação entre férmions passa do limite de acopamentos fracos para acopamentos fortes. Logo, apesar da teoria BCS conseguir explicar muito bem supercondutores convencionais como mostrado da na fig. 2.6, para supercondutores não convencionais será necessário uma teoria ou uma adaptação na teoria BCS que englobe também os supercondutores de alta temperatura crítica.

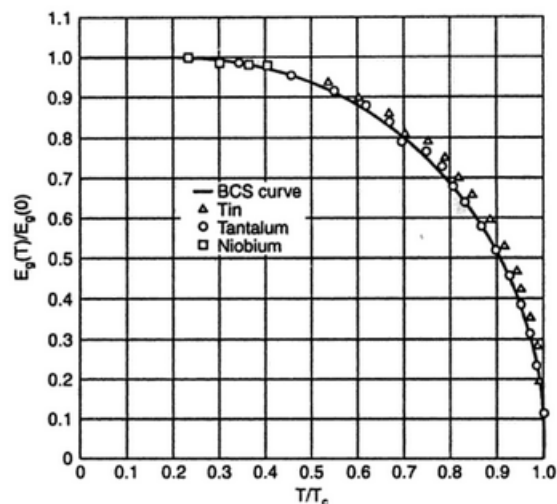


Figura 2.6 - Valores reduzidos da energia do gap $E(T)/E(0)$ em função da temperatura reduzida T/T_c segundo Townsend e o Sutton. A curva sólida representa a teoria bcs.

Como pode ser observado na fig. 2.6 temos uma descrição quase exata da teoria BCS para a variação do gap de energia para com a temperatura crítica de materiais, como descritos, estanho, titânio e nióbio, porém quando tentamos descrever como se comportam materiais que tem um temperatura crítica superior a 30 K, como por exemplo, sistema de férmions pesados, ligas cerâmicas e etc. a teoria começa a falhar, isso por que agora nesses sistemas temos outros fatores que não foram incluídos na teoria BCS.

2.3 Supercondutividade em mais de uma banda

Até quase 80 anos após a descoberta da supercondutividade o material supercondutor com maior T_c era o Nb_3Ge com $T_c = 23,2K$. Mas em 1986, K. A. Muller e J. G. Bednorz, em Zurique na suíça, anunciaram a descoberta de compostos cerâmicos (La, Ba, Cu, O) com temperatura crítica acima de 30K [25] e a partir da publicação desse artigo iniciava-se um novo período com descobertas de supercondutores contendo peróxido de cobre, e outro material bastante estudado foi o diboreto de magnésio com T_c maior que 40 K [30]. E um ano posterior a descoberta de Muller e Bednorz [25], na Universidade Houston, Paul Chu em colaboração com Mag Kang Wu da Universidade do Alabama [31] descobriram um composto simples e de baixo custo de fabricação, o YBCO, que se torna supercondutor a temperatura de 92K, valor acima do ponto de liquefação do nitrogênio. Como pode ser visto na fig.2.7 [26] há, então, uma evolução na obtenção de materiais com temperatura crítica cada vez maiores o que é benéfico do ponto de vista financeiro uma vez que transformar esses materiais em supercondutores será uma tarefa cada vez mais barata, por que se baseará no resfriamento com o uso de nitrogênio.

O problema dos supercondutores de alta temperatura crítica é que não são bem definidos pela teoria BCS a qual se limitava a temperatura de 30 K. Esses materiais apresentam alto campo críticos estando em um regime intermediário entre grandes pares de Cooper tipo BCS e o limite onde os férmions envolvidos estão fortemente ligados enejando em um condensado de Bose-Einstein, desses bósons efetivos. E como já dito, daí surge o interesse em estudar a evolução do condensado de Bose-Einstein, analisando as mudanças que ocorrem no sistema à medida que a interação entre os férmions passam do limite de acoplamentos fracos para acoplamentos fortes como feito por Leggett, 1980

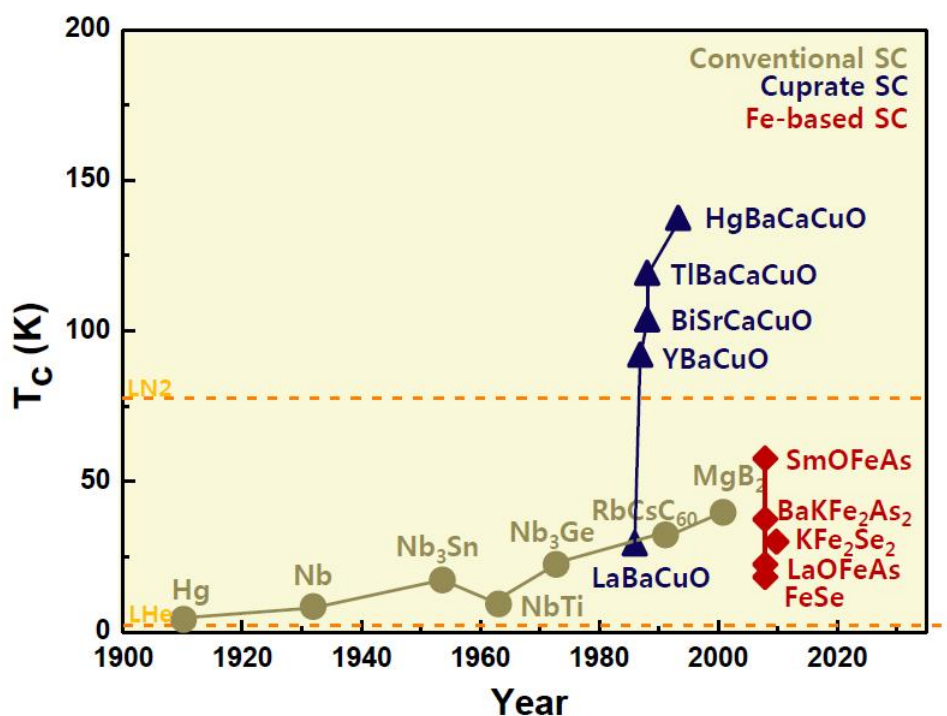


Figura 2.7 - A evolução cronológica do recorde de temperatura crítica dos materiais supercondutores.

e outros [32], [33]. Uma proposta que concordasse com alguns dados experimentais a cerca das propriedades super condutoras do MgB₂ é dada por Nagamatsu [30], onde é considerado um modelo do tipo BCS de duas bandas cujo mecanismo de pareamento é por meio de fônons e com interações inter-banda. Este trabalho revelou que este tipo de pareamento inter-banda é relevante na caracterização de um modelo para esta espécie de material.

Mas, uma teoria abrangente surgiu, dois anos depois da teoria BCS, pelos físicos, Suhl, Mathias e Walker [34] que a generalizaram para sistemas com sobreposição de bandas, surgindo assim o primeiro modelo de sistemas multibandas, neste caso de duas bandas. O modelo proposto por eles levou em conta a formação de pares eletrônicos entre bandas diferentes, interação inter-banda, e de pares eletrônicos de uma mesma banda, intra-banda. O objetivo era avaliar sistemas supercondutores mais realistas, complexos e completos, formados por duas bandas eletrônicas que interagem. Dessa forma o Hamilto-

niano proposto por eles tem a seguinte estrutura:

$$H = \sum_k (\epsilon_k^s c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_k^d d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma}) - g_{ss} \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - g_{dd} \sum_{kk'} d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} - g_{sd} \sum_{kk'} (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger d_{-k\downarrow} d_{k\uparrow} - d_{k'\uparrow}^\dagger d_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) \quad (2.1)$$

sendo ϵ_k^s e ϵ_k^d as energias cinéticas das bandas s e d , com $c_{k\sigma}(c_{k\sigma}^\dagger)$ e $d_{k\sigma}(d_{k\sigma}^\dagger)$ os correspondentes operadores de aniquilação (criação). Além disso, g_{ss} e g_{dd} são as interações atrativas efetivas na mesma banda, e g_{sd} é uma interação inter-banda atrativa, que se diferencia da usual intra-banda por ser mediada entre elétrons itinerantes das bandas s e d . Em um contexto mais amplo, o Hamiltoniano enunciado por eles descreve duas bandas que se misturam, e o seu propósito é descrever elementos de cruzamento que apresentem uma resistividade influenciada pelo espalhamento entre elétrons itinerantes dos níveis s - d . Esse mesmo tipo de interação inter-banda, foi adotada por Iskin e Sá de Melo [35] para tratar da superfluidez em sistemas de duas bandas variando o limite de interações, indo do limite BCS ao BEC.

Um dos principais resultados deste modelo é a existência de dois gaps de energia, que teriam sua origem na diferença entre as densidades de estados das bandas s e d , podendo, no caso limite de que as interações $V_{ss} = V_{dd} = 0$ (caso interbanda) e que as densidades sejam iguais, os dois gaps de energia se colapsam fazendo com que o sistema venha a ter somente um gap como mostrado na fig. 2.7, resultado igual ao proposto pela teoria BCS. Sob as mesmas considerações do caso limite acima, uma mesma relação para T_c do caso BCS é encontrada por Mathias [34].

Dentro do contexto das interações interbandas, uma outra forma de emparelhamento não-usual foi abordada por Liu e Wilczek [36] e por Caldas [37]. O modelo Liu e Wilczek que é basicamente descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{LWC} = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - g \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \quad (2.2)$$

Onde a e b são dois gêneros de partículas, em que a relação de dispersão é parabólica ($\epsilon_k^\alpha = \frac{k^2}{2m_\alpha}$) e o objetivo deles era avaliar o emparelhamento entre férmions de gases atômicos. O aparelhamento ocorre entre gêneros de férmions com diferentes estruturas de bandas, em

que os vetores de Fermi, na superfície de Fermi, não são iguais no limite de acoplamentos fracos. Eles mostraram que a fase BCS desaparece de forma descontínua a temperatura nula, conforme o mismatch entre os vetores de Fermi aumenta atingindo um valor crítico, indicando ter encontrado um sistema que contém ambos estados coexistindo: superfluido e líquido de Fermi (Normal). As excitações relacionadas a cada estado seriam com e sem gap, respectivamente. Esse comportamento foi encarado como um novo estado da matéria, cujas interações de emparelhamento criam um gap no interior da esfera de Fermi mantendo sua superfície sem gap. Porém, Caldas, com o objetivo de analisar os limites de validade das propostas feitas por eles mostrou de maneira geral que a fase BCS nesses sistemas com emparelhamento interbanda desaparece de maneira descontínua indicando uma transição de primeira ordem para $T = 0$. Além disso, foi visto que o possível novo estado da matéria de Liu e Wilczek é energeticamente instável, correspondendo a máximos na energia livre, sendo desfavorável a ser um estado fundamental do sistema. Com isso, podemos ver que as formas de interação atrativa para o emparelhamento em sistemas multi-bandas são da forma intra-banda e inter-banda. Assim podemos resumir as interações atrativas sendo da forma descrita por \mathcal{H}_{int}

$$\mathcal{H}_{int} = \mathcal{H}_{intra} + \mathcal{H}_{inter} \quad (2.3)$$

Um outro ingrediente que não pode faltar na descrição desses sistemas supercondutores a altas temperaturas críticas (HTSC) e fermions pesados (FP) é a repulsão Coulombiana entre os elétrons. Nos FP, a repulsão Coulombiana entre dois elétrons se mostra relevante devido a sua magnitude. Nos HTSC também se observa relevância do potencial repulsivo. Nesses supercondutores, as camadas de CuO₂ possuem um número ímpar de elétrons por célula unitária. Com isso, o Cu se encontra na configuração, na distribuição de Pauli, d^9 , com um buraco. Assim, para colocar dois elétrons no mesmo íon de Cu, irá existir uma forte repulsão Coulombiana (U). Nesses sistemas HTSC, se a magnitude da repulsão domina as escalas de energias sendo maior do que a energia do movimento dos elétrons, o estado fundamental é um isolante no caso de um elétron (buraco) por sítio.

É visto assim, que o potencial repulsivo tende a evitar o emparelhamento local. Como consequência, a simetria do gap nesses sistemas dificilmente é da forma onda s isotrópica, podendo então ser da forma s estendida ou d, fortes evidências experimentais e teóricas concluíram que a simetria do emparelhamento nos HTSC é do tipo onda d [38],

esse sistema junto com o efeito do campo magnético foi estudo por Gomes, 2005 [39], embora não seja o foco do nosso trabalho mas é importante que se saiba que existe.

Tanto os férmions pesados quanto os HTSC pertencem aos chamados sistemas eletrônicos fortemente correlacionados, ou SCES [40].

Recentemente Moreo e colaboradores [41] usaram a supercondutividade em sistemas multibandas no contexto dos compostos de Fe [42], os pnictídeos, em que enfatizou-se a importância da interação interbanda. Os cálculos mostraram o aparecimento de três regimes devido à interação interbanda: 1) O estado normal, em que o estado fundamental não é supercondutor; 2) um estado supercondutor exótico, onde uma das bandas apresenta gap no nível de Fermi e a outra não e 3) um estado supercondutor, semelhante ao BCS. A existência de supercondutividade exótica também foi estudada por Liu e Wilczek [36] em átomos frios e na cromodinâmica quântica. Em resumo, um modelo de duas bandas é bem indicado para sistemas que possuam elétrons de pelo menos dois orbitais atômicos distintos coexistindo em sua superfície de Fermi, como por exemplo em sistemas fortemente correlacionados, férmions pesados e até supercondutores orgânicos. Em supercondutores de óxidos de cobre (cupratos) atribui-se às altas temperaturas críticas atingidas por esses materiais, a interação elétron-fônon em duas bandas.

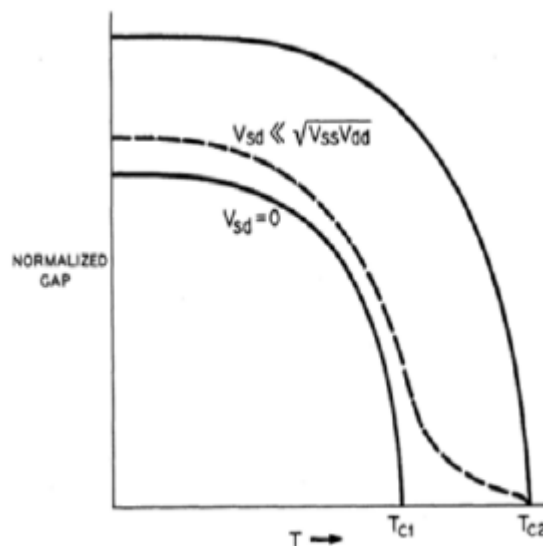


Figura 2.8 - Gap normalizado em função da temperatura. Onde, as linhas contínuas mostram as duas temperaturas críticas do sistema quando o caso intra-banda é considerado. A linha pontilhada é um caso limite de $V_{sd} \ll \sqrt{V_{ss}V_{dd}}$, e neste caso, somente há uma temperatura crítica, a mais alta.

Recentemente têm emergido um interesse novo no que se refere ao aproveitamento

dos conceitos e das ideias com a tentativa de explicar os HTSC [43], [43] e [44], embora essa evolução de sistemas tenha sido estudada há algum tempo [45]. Nos últimos anos, progressos importantes se fizeram para compreender a evolução suave entre os regimes de acoplamento fraco e forte estando a uma temperatura de transição [[46]], explorando-se a termodinâmica desses sistemas com simetria tipo onda d [[46]] e também os supercondutores com simetria tipo onda s [[47]]. Experimentalmente falando, uma grande contribuição, para o interesse nesses sistemas, vem da transição de fase em átomos frios [[48]], uma vez que nesses sistemas é possível ajustar a intensidade do acoplamento dos pares.

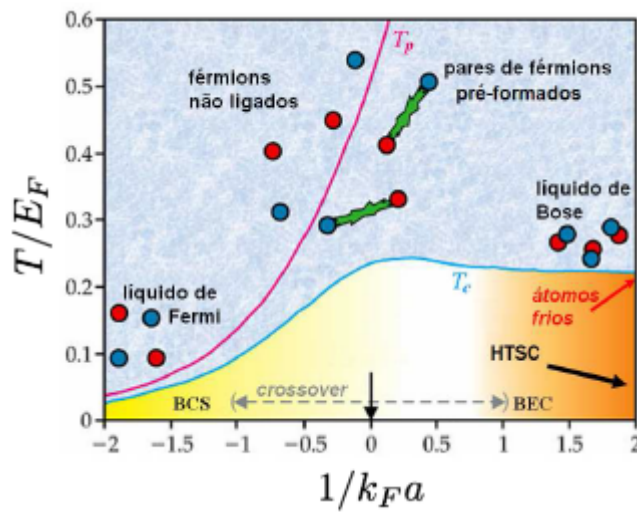


Figura 2.9 - Diagrama de fase qualitativo do crossover BCS-BEC como uma função da temperatura T/E_F , normalizada pela energia de Fermi, E_F , e do acoplamento $1/k_F a$ (k_F = vetor de onda de Fermi e a = comprimento de espalhamento) (T_c).

Na fig. 2.9 [49] mostra um esquema da evolução do limite BCS com grandes pares de Cooper para o limite BEC com as partículas fortemente ligadas, onde foi adotado $k_B = 1$ para a energia de Fermi justificando que a razão T/E_F é adimensional. É observado que quando se vai do limite de acoplamentos fracos para acoplamentos fortes acontece uma variação suave e contínua entre os sistemas físicos. É perceptível que há uma mudança na forma em que a temperatura depende da intensidade da interação, se nós avaliarmos a intensidade do gap supercondutor a temperatura nula. A amplitude depende exponencialmente da interação no limite BCS, fato o qual já foi constatado pela teoria BCS usual. No entanto, a amplitude apresenta uma dependência em lei de potências com a interação no limite de acoplamentos fortes. É uma caracterização do crossover entre os limites BCS e BEC da supercondutividade essa mudança de comportamento. A razão $1/k_F a_s$ descreve a interação atrativa para sistemas com simetria tipo onda s, com

k_F representando o vetor de onda de e a_s o comprimento de espalhamento das ondas s. Essa renormalização é necessária, pois, quando é acessado o regime de grandes vetores de onda, no limite ultravioleta, elimina problemas de divergências nas integrais. O crossover ocorre na região que compreende $-1 < 1/k_F a_s < +1$ nessa configuração. Então, o limite BCS é obtido no momento em que $1/k_F a_s \rightarrow -\infty$, e o limite BEC a partir do momento que $1/k_F a_s \rightarrow +\infty$. Repara-se na fig. 2.9, que no limite supercondutor BCS existe uma temperatura crítica T_c onde a supercondutividade é suprimida pela quebra dos pares de Cooper e isso é devido às excitações térmicas. No caso de um supercondutor de Bose, associado ao limite de acoplamento forte, existem duas temperaturas características: uma é a temperatura crítica (T_c), que tende a não depender da intensidade do acoplamento. A outra, significativamente mais elevada, é a temperatura associada a decomposição do par devido a excitação térmica (T_p). A (T_p) está ligado ao gap de pares pré-formados, contudo não supercondutores.

Esse fato poderia relacionar a existência do pseudo-gap nos HTSC como uma manifestação dos pares pré-formados [50], e com isso a linha de (T_p) na fig. 2.9 estaria relacionada com a linha que limita a observação do pseudo-gap, vista nos diagramas de fases dos supercondutores de alta temperatura crítica [51].

2.4 O conceito de hibridização

Como pôde ser visto, modelos descritos pelo Hamiltoniano da teoria BCS, descrevem a supercondutividade por todo espectro de interações atrativas dos pares de Cooper. Tal modelo para simetria s é ideal para descrever alguns metais puros supercondutores, algumas ligas e os sistemas de átomos frios, onde é observada a ocorrência dos BEC's. Porém, para outros sistemas supercondutores baseados em ligas e estruturas mais complexas, como os já abordados HTSC e FP, tal modelo não é suficiente para descrever suas propriedades não-convencionais observadas experimentalmente. Esses materiais possuem propriedades físicas peculiares devido às interações que acontecem entre os elétrons de diferentes bandas eletrônicas, que se distinguem uma das outras pela sua largura e pela forma a qual os elétrons são afetados nas mesmas. Com isso, são adotados modelos multi-bandas para descrever esses compostos, possibilitando estudar sistemas supercondutores complexos. Geralmente são adotadas duas bandas, porém, são acrescentados ao modelo

outros parâmetros baseados na fenomenologia. Esses parâmetros podem ser comparados com observáveis experimentais, que agem diretamente na supercondutividade. Essas multi bandas consideradas podem trazer mais elementos ao nosso sistema, como por exemplo, a hibridização.

O conceito de hibridização emergiu como uma tentativa de explicação para a ocorrência de quatro ligações covalentes idênticas em moléculas, como o CH_4 , para as quais as órbitas atômicas do átomo central envolvidos nas ligações não apresentam a mesma simetria. No exemplo citado, as órbitas atômicas do carbono envolvidos nas quatro ligações com os átomos de hidrogênio são: $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$. Segundo tal conceito, as ligações covalentes não são formadas necessariamente por órbitas atômicas puras, mas por órbitas atômicas hibridizadas [52]. Na figura 2.10 [53] pode-se ver uma ilustração de como se forma uma banda híbrida do tipo sp com uma energia intermediária entre as bandas s e p e a combinação linear entre as quatro órbitas atômicas de valência dos elementos do grupo IV origina quatro estados híbridos cujas funções e orientação no espaço. Para que

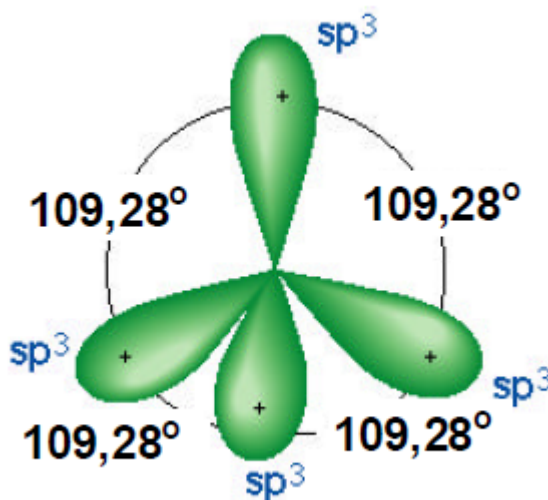


Figura 2.10 - As combinações entre os orbitais atômicos ns e ns formando os quatro híbridos sp^3 com sua orientação espacial tetraédrica sobre o átomo com ângulos de $109^\circ 28'$ entre diferentes híbridos.

algumas ligações químicas possam acontecer, alguns de seus orbitais precisam passar por um processo de hibridização, entretanto, nos sistemas físicos que estamos interessados como os supercondutores, a hibridização pode ser entendida como um parâmetro externo que possa ser controlado, via pressão ou dopagem, e desempenha um papel que permita a mistura das bandas de energia de interesse. Com adição deste parâmetro, é possível expressar um complemento ao modelo de duas bandas da supercondutividade tornando o

sistema tratado de um modo mais realístico.

Para um caso mais simples do modelo de duas bandas, é considerado que haja somente a formação de pares de Cooper em uma das bandas e um termo da hibridização que mistura os estados das duas bandas. Essa seria uma simplificação válida para um modelo Tight-Binding [54]. Com esse estudo pode-se mostrar que há uma relação (de competição) entre o gap superconductor e a hibridização. Como dito anteriormente, consegue-se controlar a hibridização através da pressão externa aplicada, onde estudos mostram que conforme aumenta-se a pressão no sistema, a resposta é um acréscimo na hibridização [55]. Muitos trabalhos experimentais sugerem que alguns materiais sujeitos a pressões aplicadas podem ter sua temperatura de transição aumentada [56], outros discutem o efeito da pressão sobre a temperatura de transição em supercondutores de alta temperatura crítica [57] [58].

Esses sistemas cujo emparelhamento Cooper descrito pela teoria BCS não é o único observado, ocorrendo, por exemplo, em sistemas supercondutores onde os vetores de Fermi referentes às partículas interagentes situam-se em diferentes localizações da superfície de Fermi, devido a coexistência de diferentes quase-partículas em torno desta. Este fenômeno ocorre em sistemas cujo estado fundamental, por exemplo, é do tipo FFLO [59], onde o mismatch entre as bandas, com diferentes orientações de spin, é produzida pela ação de um campo magnético externo. Isto também ocorre em sistemas de átomos frios, onde a separação é devido ao diferente número de férmions interagentes [60]. Além disso este comportamento também pode aparecer no interior de estrelas de nêutrons devido ao emparelhamento de diferentes números de quarks up e down, podendo gerar uma supercondutividade de cor [61], [62].

No artigo de Huang, 2007 [63], realizam-se cálculos para encontrarem a temperatura crítica como função da hibridização, e também concluem que o termo de mistura de um corpo (esse é o termo que faz o papel da hibridização no Hamiltoniano) causa uma renormalização na densidade de estados, que leva a um aumento da mesma na banda estreita e gera um acréscimo na temperatura de transição. Com este estudo pode-se entender melhor a correlação entre a supercondutividade em metais de transição e a existência de uma alta densidade de estados no nível de Fermi, mostrando que a banda d é de fundamental importância na supercondutividade destes sistemas. Em sistemas metálicos

multibandas, como compostos inter-metálicos e férmions-pesados, elétrons vindos de diferentes orbitais coexistem em torno de uma mesma superfície de Fermi, uma vez que estes elétrons possuem diferentes massas efetivas ou ocorrem em diferentes números por átomo, existe uma separação natural dos vetores de onda de Fermi destas quase-partículas. Os metais de transição são caracterizados pela sobreposição de duas bandas: a do tipo d, estreita e com grande densidade de estados, e a do tipo s, larga e com pouca densidade de estados. A fig. 2.11 mostra a hibridização entre as bandas s e p formando um estado hibridizado *sp*

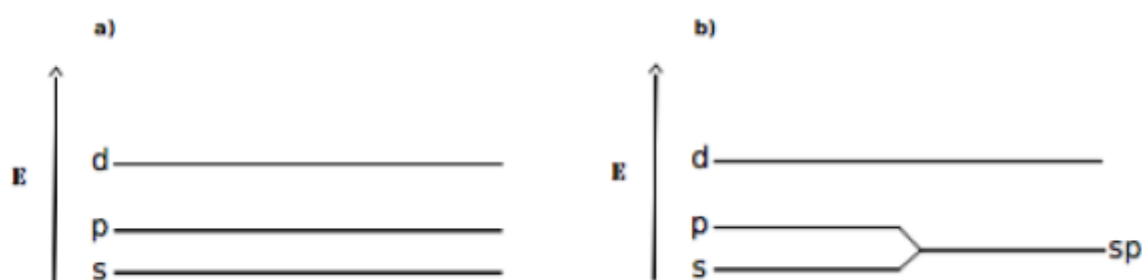


Figura 2.11 - Ilustração esquemática da hibridização de duas bandas. Onde: a) Bandas de energia sem hibridização. b) Formação de uma banda híbrida intermediária devido a mistura das bandas s e p.

Os níveis de energia de um átomo podem ser descritos por um conjunto de números quânticos. O primeiro deles, "n", é o número quântico principal, e outro, "l", o número quântico azimutal e está condicionado a n com a dependência de que l varia de 0 até $n - 1$, conforme o diagrama de Pauling 2.12.

K =	$1s^2$			
L =	$2s^2$	$2p^6$		
M =	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	
N =	$4s^2$	$4p^6$	$4d^{10}$	$4f^{14}$
O =	$5s^2$	$5p^6$	$5d^{10}$	$5f^{14}$
P =	$6s^2$	$6p^6$	$6d^{10}$	
Q =	$7s^2$	$7p^6$		

Figura 2.12 - Diagrama de Linus Pauling mostrando os níveis de energia e seus subníveis

Em matéria condensada, sistemas supercondutores (SC) multibandas são suscetí-

veis a pressão externa e em muitos casos esta os leva ao estado normal metálico através de um ponto crítico quântico superconductor (SQCP). Existem poucos mecanismos que podem produzir esse tipo de transição de fase. O mais conhecido é através de impurezas magnéticas, contudo este não parece ser o caso em sistemas que são levados ao estado normal por aplicação de pressão externa. Aqui, foi proposto conforme segue tese do professor Dinola um mecanismo alternativo que associa o aumento da hibridização a aplicação da pressão externa, pois para sistemas de matéria condensada, a pressão externa modifica o overlap das funções de onda devido a deformação da rede e conseqüentemente varia sua hibridização. Portanto, esse conceito de hibridização é de fundamental entendimento, pois leva a compreensão de várias disposições atômicas em um átomo como por exemplo no gás metano. O carbono também apresenta hibridização nos seus níveis de energia como mostra a figura 2.13

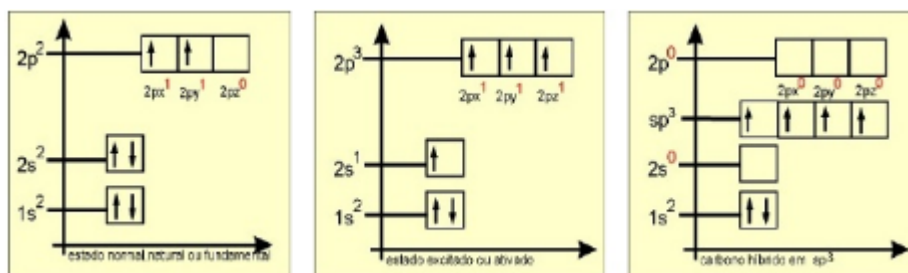


Figura 2.13 - Desenho esquemático da hibridização das camadas de energia para o átomo de carbono neutro, que tem 6 elétrons

Com isso, as observações aqui feitas, servem para localizar o leitor sobre os principais objetivos no desenvolvimento deste trabalho. Neste, estudaremos a supercondutividade por meio de um modelo tipo Hubbard de duas bandas. O desenvolvimento dos capítulos deste trabalho está dividido da seguinte forma: será analisada inicialmente a influência da hibridização no crossover BCS-BEC. Após isso, será adotado nos cálculos a aproximação BCS para tratar o limite de grandes intensidades da hibridização nas energias de excitações e nos diagramas de fases do sistema com os quais poderemos aferir como ocorre esta transição e em quais condições.

2.5 Aplicações tecnológicas da supercondutividade

As pesquisas em supercondutividade tem se tornado um dos campos mais intensos em pesquisas físicas, principalmente no que diz respeito às aplicações tecnológicas, estas

crecem mais a cada ano, como mostra a figura 2.14, Fonte: Dados ISIS. Pensando nisso apresentaremos algumas aplicações que envolvem a supercondutividade.

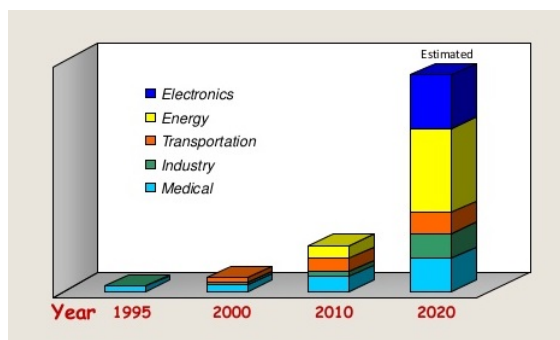


Figura 2.14 - Evolução das aplicações dos metais supercondutores ao longo dos anos e perspectivas. Levando em conta os eletrônicos(azul), energia(amarelo), transportes(laranja), indústria(verde) e medicina(ciano).

As aplicações com supercondutores podem ser em grande e em pequena escala e, em geral, se relacionam a construções de dispositivos para circuitos eletrônicos, no entanto sua aplicação na indústria ainda é baixa, porquanto alguns fatores causam resistência a sua utilização como: altos custos na produção, baixa confiabilidade, difícil reprodução, técnicas complexas de resfriamento e etc. Eletroímãs magnéticos e fios supercondutores de alta temperatura crítica, entre outros, são exemplos de aplicações. A técnica de PIT, powder in tube, é usada para a formação dos cupratos supercondutores, onde o processo é feito reduzindo-se o material a um pó e embutindo o mesmo em um tubo de metal no qual será feito um processo de perfilação que sai na forma de um fio. Em seguida a amostra passa por um processo de recozimento a alta temperatura. No entanto, devido às fracas ligações entre a aleatoriedade orientacional das ligações e os grãos a corrente crítica é degradada, tornando os cupratos supercondutores não muito atraentes para as aplicações tecnológicas [64], uma das primeiras aplicações da supercondutividade imaginadas por H.K. Onnes fora a fabricação de um forte eletroímã supercondutor. Embora os supercondutores do tipo I tenham sido os primeiros a serem descobertos (apresentando pequeno H_c e T_c), a partir de 1930 pode-se construir fortes eletroímãs supercondutores segundo [65], com a descoberta dos supercondutores do tipo II. Campos magnéticos fortes podem ser produzidos por esses tipos de equipamentos, podendo ser superior a 20T, sendo principalmente usado na ressonância magnética nuclear [66] (RMN) 2.15.

Gordon T. Danby e James R.Powell do Laboratório Nacional de Brookhaven expuseram que bobinas supercondutoras poderiam ser usadas na produção de campo magnético



Figura 2.15 - Imagem de um super equipamento de ressonância magnética nuclear

com o intuito de levitar trens a comunidade científica por volta dos anos 60. Contudo, só começaram a produzir os primeiros protótipos de trens maglev, magnetic levitation, na Alemanha e no Japão, cerca de 10 anos após a sua teorização, e como o projeto já estava bastante avançado tornou-se inviável para aquele momento utilizar os materiais supercondutores. Hoje em dia existem quatro tipos de levitação magnética: por repulsão magnética, atração magnética, indução magnética e a supercondutora. Esses tipos de levitação só puderam ser devidamente explorados a partir do final do século XX com a chegada de novos materiais magnéticos e pastilhas supercondutoras de alta temperatura crítica, como a liga YBCO. Os novos supercondutores de alta temperatura crítica podem ser resfriados com nitrogênio líquido (cuja temperatura de ebulição é de 77K) o que torna o custo da refrigeração muito caro, não tão caro quanto o hélio líquido, mas bem caro. No Brasil, construíram-se linhas em modelo reduzido - o protótipo brasileiro, Maglev cobra, possui formato oval com 30 metros de extensão e guia linear formada por ímãs permanentes de Neodímio-Ferro-Boro ($NdFeB$) compondo o circuito magnético (interagindo com os supercondutores) para levitação. O componente fundamental do veículo é a "base de levitação", onde se apoiam os módulos de passageiros e estão situados os criostatos (em azul), mostrado na fig. 2.16, no interior dos quais se encontram os supercondutores, refrigerados com nitrogênio em estado líquido. Na parte central encontram-se as bobinas que são alimentadas com energia elétrica e permite a movimentação do veículo através de um motor linear instalado na via de transporte.

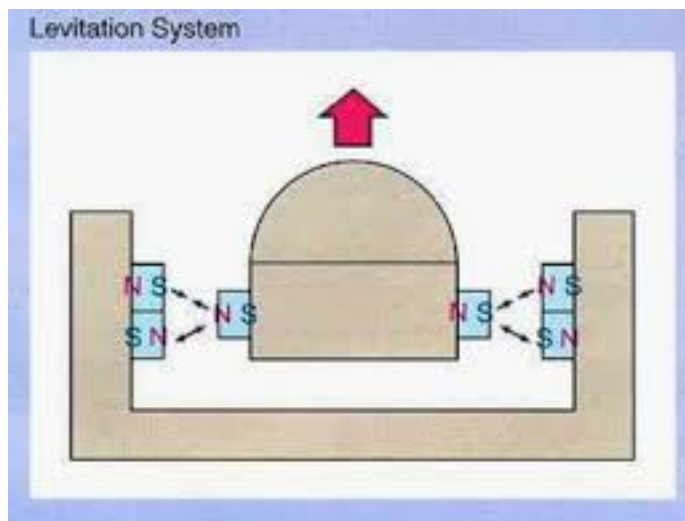


Figura 2.16 - Desenho esquemático da dinâmica da levitação magnética que ocorre em trens

Já o material MgB_2 é o mais promissor com relação às aplicações tecnológicas, por que a densidade de correntes elétrica não se deterioram tanto com a granularidade. Ademais, ainda hoje são utilizados os fios supercondutores de Nb_3Sn , $NbZr$ e NbT em hospitais, como também, em laboratório de pesquisa os quais usam equipamentos de ressonância magnética [67]. O maior cabo supercondutor do mundo foi lançado em 30 de abril de 2014 na Alemanha unindo duas subestações da cidade de Essen. O cabo supercondutor tem cerca de 1km de extensão e foi projetado para uma capacidade de transmissão de 40MW, sendo este formado por seções concêntricas operando a 10kV conforme Fig. 2.17. Fonte: <nexans.com.br>, abastecendo 10.000 domicílios, esta instalação foi a primeira a usar um sistema de proteção contra sobrecargas com um limitador de corrente. Os custos desse projeto e da pesquisa ultrapassam os 13,5 milhões de Euros. Embora necessite de um resfriamento a $-200^\circ C$, toda essa malha de distribuição de energia de alta eficiência exige muito menos espaço do que as redes elétricas atuais, o que é importante em áreas densamente ocupadas, como as regiões centrais das grandes cidades. Além disso, a possibilidade de falhas e a necessidade de manutenção, segundo os engenheiros alemães, são muito menores. Essa é uma solução mais barata em comparação a cabos de cobre de média tensão, pois o menor custo do cobre é cancelado pela perda na rede, que é muito maior. Para a mesma espessura, o cabo supercondutor transportar 100 vezes mais energia do que o cobre, virtualmente sem perda de energia.

Um exemplo de aplicação tecnológica são os SQUIDS (2.18) que é um dispositivo supercondutor de interferência quântica, onde esse equipamento eletrônico é formado

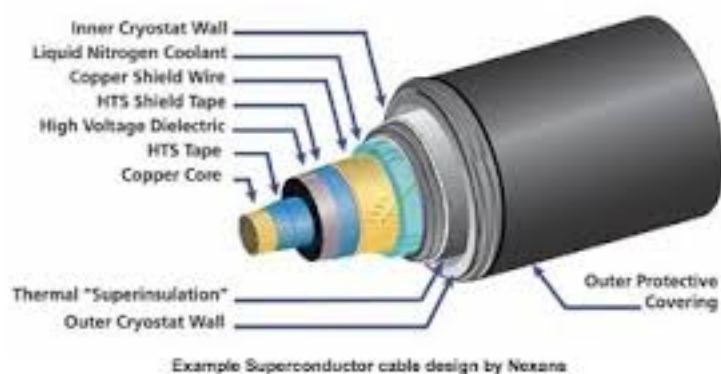


Figura 2.17 - Esquema da estrutura da maior cabo supercondutor do mundo.

por um anel supercondutor ligado a um circuito elétrico no qual ao circular pelo anel supercondutor a corrente induz um fluxo magnético, o qual atravessa a área encerrada pelo anel, e quando é aplicado, externamente, um campo magnético a corrente elétrica é modulada com período equivalente a um quantum do fluxo magnético do dispositivo, logo o SQUID é utilizado principalmente para detectar a presença de pequenos campos magnéticos e a sua principal aplicação envolve computação quântica, ressonância nuclear magnética (RNM), dispositivos lógicos muito rápidos e outros. Na medicina, por exemplo, pode-se usar o SQUID para detectar os campos magnéticos gerados pela corrente elétrica durante a atividade elétrica do cérebro. Apesar do nível satisfatório que a ele-

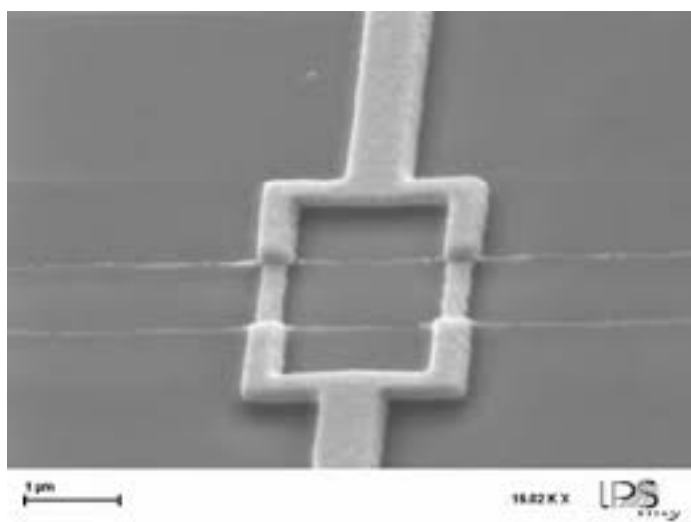


Figura 2.18 - Exemplo de um SQUIDS

trônica convencional atingiu, apresenta alguns problemas que podem ser resolvido com a utilização de um SQUID ou de junções Josephson. O acoplamento de supercondutores e semicondutores nem sempre é factível, principalmente por conta da não compatibilidade

térmica destes dois tipos de materiais diminui as possibilidades da utilização conjunta dos circuitos semicondutores com circuitos supercondutores. Contudo, como já mencionado, o alto valor a se pagar, neste caso o preço da liquefação do hélio ou do nitrogênio, dificultam a sua utilização em larga escala.

Método das funções de Green

3.1 A função de Green

Sabe-se que o formalismo das funções de Green teve início com o trabalho teórico de um físico e matemático George Green, inglês, que nasceu em Nottingham em 14 de julho de 1793 [68]. Esse trabalho, que foi originalmente um estudo das formas de resolução das equações de Laplace e Poisson com diversas condições de contorno, tinha originalmente uma ampla formulação para resolver uma variedade de problemas de autovalor de operadores lineares e equações não-homogêneas correspondentes. As funções de Green surgem em diferentes áreas da Física (Matéria Condensada, eletrostática, Física de Partículas dentre outras) e nesses casos as funções de Green estão relacionadas com a influência que um ponto do espaço exerce sobre outro, podendo ser que essa influencia seja de qualquer interação fundamental (eletromagnética, gravitacional e etc.) [69]. Na Física teórica temos várias classes de funções de Green, a diferença reside na maneira que consideramos os valores médios dos produtos de operadores que aparecem. Se essa média for declarada sobre um ensemble estatístico, temos as funções de Green da mecânica estatística ou termodinâmica, e representam uma técnica muito adequada na análise de sistemas de partículas em interação. Ainda salientamos que na grande maioria das situações basta que consideremos as funções que dependam de dois tempos, retardada e avançada.

O método das funções de Green retardada e avançada, que depende de dois tempos e temperaturas, foi introduzido por Bogoliubov e Tyablikov em 1959 [70], e logo esse método se tornou famoso para a descrição teórica em mecânica estatística quântica e física do estado sólido. Sendo elas muito úteis, pois são uma técnica bem adequada na análise de sistemas de partículas em interatuantes. Com isso, a partir das funções de Green podemos expressar a resposta de um sistema mecânico a uma perturbação externa,

bem como, obter as energias de excitação do sistema.

As funções de Green em mecânica estatística são generalizações adequadas do conceito de funções de correlação e, são definidas como o valor médio de um produto de variáveis (ou operadores) dinâmicas que representam a alteração do valor médio de um deles devido à mudança da perturbação. Assim, pode-se considerar na mecânica estatística, como na teoria quântica de campos, diferentes tipos de funções de Green, como por exemplo: a função de Green de tempo duplo causal ($G_{AB}^c(t, t')$), ou as funções de Green retardada ($G_{AB}^r(t, t')$) e avançada ($G_{AB}^a(t, t')$), em que A e B são dois operadores quaisquer e por comodidade daqui em diante a notação usada será $G_c(t, t')$ para a função de Green de tempo duplo causal, $G_r(t, t')$ para a função de Green retardada e $G_a(t, t')$ para a função de Green avançada.

Uma outra importante aplicação do método das funções de Green reside no fato de podermos encontrar a densidade de estados generalizada, que permite a obtenção da densidade de partículas $\langle \eta_k \rangle_T$, a energia potencial total, também, a energia cinética total $\langle E_c \rangle$, e, $\langle H \rangle_T$ a energia total para um sistema em interação. Como também somos capazes de obter a intensidade espectral. Portanto, neste capítulo iremos apresentar as ferramentas matemáticas que serão necessárias para o desenvolvimento deste trabalho, onde essas funções se baseiam no trabalho de Dimitri Zubarev acerca das "funções de Green de tempo duplo na física estatística" [71], e também no livro de Hugo Nazareno "Mecânica estatística e funções de Green", 2010 [72].

3.2 Funções retardada, avançada e causal

Podemos encontrar na Teoria quântica de Campos e em Mecânica Estatística, assim como em outros campos da matéria condensada e, conseqüentemente, da Física, diversos tipos de funções de Green, podendo sê-las a função de Green causal de duplo tempo $G_c(t, t')$ definida em termos do valor médio do produto de operadores, ou as funções de Green avançada e retardada, $G_a(t, t')$ e $G_r(t, t')$, respectivamente.

A funções de Green causal $G_c(t, t')$ avançada $G_a(t, t')$ e retardada $G_r(t, t')$ podem ser definida segundo Zubarev, 1960 da seguinte maneira:

$$G_c(t, t') = \langle \langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle \rangle_c = -i \langle T \{ \hat{A}(t), \hat{B}(t') \} \rangle \quad (3.1)$$

$$G_a(t, t') = \langle \langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle \rangle_a = i\theta(t' - t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_\eta \rangle \quad (3.2)$$

$$G_r(t, t') = \langle \langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle \rangle_r = -i\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_\eta \rangle \quad (3.3)$$

onde $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \eta\hat{B}\hat{A}$ é o comutador ou anticomutador dos operadores \hat{A} e \hat{B} . A letra η é tomada como positiva ou negativa conforme for mais conveniente para a situação. Normalmente se escolhe o sinal positivo se \hat{A} e \hat{B} são operadores do tipo Bose (para bósons, $\eta = 1$ e a relação será de comutação) e sinal negativo, se eles são operadores do tipo Fermi (para férmions, $\eta = -1$ e a relação será de anticomutação). Nestas definições, aparecem as relações $\langle \hat{A}\hat{B} \rangle$ e $\langle \hat{B}\hat{A} \rangle$ que são os valores médios estatístico do produto de operadores, e essa média é feita sobre o ensemble grão-canônico.

Entende-se por ensemble como uma coleção de sistemas físicos, definidos nas mesmas condições macroscópicas e idênticos entre si, os quais estão nos diferentes microestados acessíveis. O ensemble grão-canônico possui um volume definido em contato com uma fonte térmica com a qual também pode trocar partículas. E o ensemble grão-canônico tem a sua média definida em termos do traço (soma dos elementos da diagonal principal de uma matriz) deste produto, então o valor médio estatístico de um operador \hat{Z} é dado por

$$\langle \hat{Z} \rangle = \frac{Tr(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{Z})}{\Pi} \quad (3.4)$$

onde

$$\Pi = Tr(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}) \quad (3.5)$$

é a função de grão-partição. O parâmetro β é definida como $\beta = \frac{1}{k_B T}$, em que k_B é a constante de Boltzmann, T representa a temperatura absoluta e μ é o potencial químico, devido a troca de partículas, que é dado pela variação da energia E do sistema em função da variação do número total de partículas N .

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N} \quad (3.6)$$

Faz muito sentido aplicar o ensemble grão-canônico quando o número total de partículas precisa ser levado em consideração e, também, o número de ocupação dos diferentes estados são independentes. Observe que a dependência temporal dos operadores fica explicada por trabalharmos na representação de Heisenberg, o qual entende que os operadores (ob-

serváveis) evoluem com o tempo diferente do tratamento utilizado por schrodinger onde é a função de onda que evolui com o tempo, sendo assim sua equação de movimento é satisfeita por estes operadores, de tal modo que

$$\widehat{A}(t) = e^{\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}} \widehat{A} e^{-\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}} = e^{i\widehat{H}t} \widehat{A} e^{-i\widehat{H}t} \quad (3.7)$$

uma vez tomado $\hbar = 1$ podemos definir $\widehat{\mathcal{H}}$ como

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{H} - \mu\widehat{N} \quad (3.8)$$

sabendo que \widehat{H} é o operador Hamiltoniano independente do tempo por causa da sua simetria e \widehat{N} , o operador número total de partículas do sistema. A função degrau ou função de Heaveside, também está contida nas funções de Green e aquela é definida da seguinte forma: $\theta(t) = 0$, para $t < 0$ e $\theta(t) = 1$, para $t > 0$, conforme mostra a fig.3.1, e derivando essa função em $t = 0$, sua derivada tende ao infinito em zero ($t = 0$) e é nula para $t \neq 0$, caracterizado como uma função delta de Dirac, seguindo o seguinte padrão:

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \delta(t) \quad (3.9)$$

e

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t) dt \quad (3.10)$$

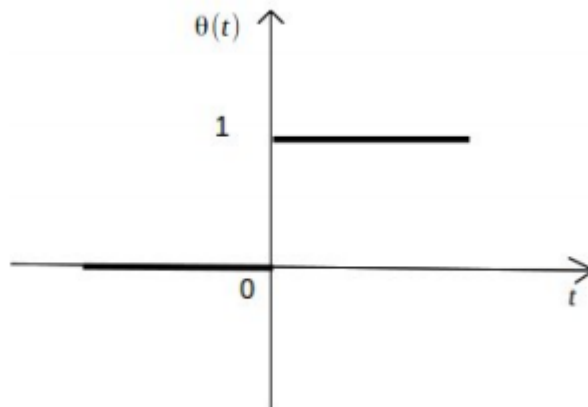


Figura 3.1 - Representação da função degrau

Ainda temos, na função de Green causal, o operador de ordenamento temporal \widehat{T} , de sorte que

$$\widehat{T}\{\widehat{A}(t), \widehat{B}(t')\} = \widehat{A}(t)\widehat{B}(t')$$

para uma valor de $t > t'$ e

$$\widehat{T}\{\widehat{A}(t), \widehat{B}(t')\} = \eta\widehat{B}(t')\widehat{A}(t)$$

para um outro valor $t < t'$ ou até mesmo:

$$\widehat{T}\{\widehat{A}(t), \widehat{B}(t')\} = \theta(t - t')\widehat{A}(t)\widehat{B}(t') + \eta\theta(t' - t)\widehat{B}(t')\widehat{A}(t) \quad (3.11)$$

Por conta da função degrau, essas funções de Green (causal, avançada e retardada) não são definidas para $t = t'$, e essas funções Green dependem de t e t' mediante a diferença $t - t'$, por isso podemos afirmar que

$$\langle \widehat{A}(t)\widehat{B}(t') \rangle \equiv F_{AB}(t - t')$$

onde F_{AB} é uma função qualquer que relaciona os dois operadores o qual será explicitado mais adiante. Dessa forma as funções de Green dependem do tempo e da temperatura em mecânica estatística, de tal forma que, quando a temperatura vai a zero, nas equações nas equações das Funções de Green (causal, avançada e retardada), recairemos nas funções de Green de teoria de campo médio, onde estas são as funções de Green causais de tempo múltiplo:

$$G_C(\vec{X}_1 t_1, \dots, \vec{X}_n t_n, \dots, \vec{X}'_n t'_n) \equiv \langle 0 | \widehat{T} \{ \psi(\vec{X}_1 t_1) \cdots \psi(\vec{X}_n t_n) \psi^\dagger(\vec{X}'_1 t'_1) \psi^\dagger \cdots \psi^\dagger(\vec{X}'_n t'_n) | 0 \rangle$$

sendo \widehat{T} é o operador de ordenamento temporal, já definido anteriormente, e $|0\rangle$ é o estado fundamental do sistema. Já os termos $\psi(\vec{X}_n t_n)$ e $\psi^\dagger(\vec{X}'_n t'_n)$, na verdade, são funções de campo na segunda quantização na representação de Heisenberg

$$\psi(\vec{X}, t) = \sum_k a_k(t) \varphi_k(\vec{X})$$

e

$$\psi^\dagger(\vec{X}, t) = \sum_k a_k^\dagger(t) \varphi_k^*(\vec{X})$$

Usando a_k e a_k^\dagger como operadores de aniquilação e criação, $\varphi_k(\vec{X})$ é um conjunto ortogonal completo de funções de uma partícula. A função de Green causal está definida para qualquer valor não-nulo de $t - t'$. Dessa forma, a função de Green avançada é definida apenas para $t < t'$ e corresponde a uma informação que foi emitida em um tempo t' e, esta, é recebida no instante t , antecedente a t' , mostrando, assim, um problema na interpretação física, sendo, portanto uma ferramenta matemática que pode ser usada, eventualmente, como artifício de cálculo em alguma situação. Por outro lado, a função de Green retardada é definida somente para $t > t'$ e simboliza uma informação que foi enviada no tempo t' a qual foi recebida no instante t , após t' . Estas funções são oportunamente aplicadas em estatística quântica para problemas os quais envolvem sistemas de muitas partículas que interagem entre si. Os operadores \hat{A} e \hat{B} podem ser de tipos diversos, tais como os operadores de aniquilação ou criação e seus produtos, operador densidade, dentre outros. As condições de contorno do problema são determinantes para a escolha dos operadores \hat{A} e \hat{B} .

3.3 Equações de Movimento para as Funções de Green

Levando em conta que as funções de Green dependem do tempo por meio da diferença $t - t'$, podemos introduzir expansões em autoestados que representam um conjunto completo de soluções para as funções de Green, ou seja, podemos através de uma transformada de Fourier [73] passar da dependência temporal para o espaço das frequências e descrever seu espectro. Os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t)$, estão escritos na representação de Heisenberg, por isso, satisfazem a equação do movimento:

$$i \frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}] = \hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t) \quad (3.12)$$

em que $\hat{A}(t)$ é um operador qualquer que depende do tempo e $\hat{\mathcal{H}}$ é o hamiltoniano do sistema representado pela equação 3.8 . Então, podemos encontrar a variação da função

de Green avançada de modo que teremos:

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_a(t, t')}{dt} &= i\frac{d}{dt}\langle\langle\hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_a \\
&= i\frac{d}{dt}\{i\theta(t' - t)\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle\} \\
&= -\frac{d\theta(t' - t)}{dt}\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle - \theta(t' - t)\left\langle\left[\frac{d\hat{A}(t)}{dt}, \hat{B}(t')\right]\right\rangle \\
&= -\frac{d\theta(t' - t)}{dt}\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + i\theta(t' - t)\left\langle\left[(\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)), \hat{B}(t')\right]\right\rangle \\
&= \delta(t - t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \theta(t' - t)\langle[(\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)), \hat{B}(t')]\rangle \\
&= \delta(t - t')\langle[\hat{A}(t)\hat{B}(t')]\rangle + \langle\langle\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_a \tag{3.13}
\end{aligned}$$

Lembrando que $\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{H}]$. E de modo semelhante podemos fazer o mesmo procedimento para as outras funções de Green, onde verificaremos que as três equações satisfazem a seguinte relação geral:

$$G_i = i\frac{d\langle\langle\hat{A}(t), \hat{B}(t')\rangle\rangle_i}{dt} = \delta(t - t')\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_i + \langle\langle\{\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)\}; \hat{B}(t')\rangle\rangle_i \tag{3.14}$$

com $i = \{a, r, c\}$.

com os índices i representando as Funções de Green avançada, retardada e causal, respectivamente. As funções de Green depois da igualdade da equação acima ($\langle\langle\{\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)\}; \hat{B}(t')\rangle\rangle$) são, geralmente, de ordem mais alta do que as quais deram origem para as mesmas, o que será entendido mais a frente na aplicação do nosso trabalho. As equações da 3.14 são exatas e as soluções deste grupo de equações são muito complicadas, no entanto, pode-se, por algum método aproximativo, desacoplar o grupo de equações decorrente de 3.14, ou seja, reduzi-las a um conjunto finito de equações, método aproximativo este que será usado neste trabalho.

Podemos definir a transformada de Fourier por:

$$G_i(E) = \mathcal{F}\{G_i(t - t')\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_i(t - t')e^{iE(t-t')}d(t - t') \tag{3.15}$$

e a sua inversa por

$$G_i(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_i(E)e^{-iE\tau}dE \tag{3.16}$$

lembrando que a função delta de Dirac é definida como:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt} dE \quad (3.17)$$

Se nós Derivarmos a equação inversa da transformada de Fourier da função de green

$$i \frac{dG_i(t)}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} EG_i(E) e^{-iEt} dE \quad (3.18)$$

e compará-la com as equações da transformada de Fourier e sua respectiva inversa, temos que

$$EG_i(E) = \mathcal{F} \left\{ \frac{idG_i(t)}{dt} \right\} \quad (3.19)$$

Tomando a transformada de Fourier da equação da derivada da função de Green, obtemos

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{idG_i(t)}{dt} \right\} = \mathcal{F} \{ \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \} + \mathcal{F} \{ \langle \langle \{ \hat{A}(t) \hat{H} - \hat{H} \hat{A}(t) \}; B(t') \rangle \rangle_i \} \quad (3.20)$$

e assim, tem-se

$$E \langle \langle A; B \rangle \rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{\eta} \rangle + \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_E \quad (3.21)$$

e podemos escrevê-la em termos da frequência

$$\omega \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \langle \{A, B\} \rangle + \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_{\omega} \quad (3.22)$$

A equação 3.22 é a conhecida equação de movimento da função de Green entre os operadores A e B ($\omega \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega}$) que será muito usada nesse trabalho, e observando que os termos gerais de comutação (ou anticomutação) foram - e serão - substituídos definitivamente por uma anticomutação, uma vez que iremos trabalhar com férmions e não com bósons.

3.4 Representação espectral para as funções de correlação temporal

Denominamos função de correlação temporal as médias sobre o ensemble grão-canônico do produto de operadores, os quais estão representados na notação de Heisenberg, ou seja,

$$F_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle \quad (3.23)$$

$$F_{AB}(t - t') = \langle A(t)B(t') \rangle \quad (3.24)$$

e, diferentemente das funções de Green (c,a,r) que não estão bem definidas para $t = t'$ devido ao fator $\theta(t - t')$, as funções de correlação temporal são bem definidas até mesmo nesse ponto. Como já fora mencionado obter as representações espectrais das funções de correlação temporal é muito importante. Logo, Seja $|\nu\rangle$ o autovetor do Hamiltoniano H e E_ν seu correspondente autovalor podemos denotar o auto estado de modo que:

$$\hat{\mathcal{H}}|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle \quad (3.25)$$

Deste modo, teremos para a função de correlação temporal:

$$\begin{aligned} F_{BA}(t - t') &= \langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle = \frac{1}{\Pi} \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{B}(t')\hat{A}(t)\} \\ &= \frac{1}{\Pi} \sum_{\nu} \langle \nu | e^{i\hat{\mathcal{H}}t'} \hat{B} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'} e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{A} e^{i\hat{\mathcal{H}}t} | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} \\ &= \frac{1}{\Pi} \sum_{\mu, \nu} \langle \nu | \hat{B} | \mu \rangle \langle \mu | \hat{A} | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} e^{i(E_\nu - E_\mu)(t - t')} \\ &= \frac{1}{\Pi} \sum_{\mu, \nu} \langle \nu | \hat{A} | \mu \rangle \langle \mu | \hat{B} | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} e^{i(E_\nu - E_\mu)(t - t')} e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)} \end{aligned} \quad (3.26)$$

em que escrevemos os operadores $A(t)$ e $B(t')$ na representação de Heisenberg como na equação no início eq.3.12 e Π é a função de grão-partição, também introduzimos o operador unitário $\sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu|$ que, claramente, não muda o resultado e invertemos os termos sobre os quais se fazem as somas sem perda de generalidade. Portanto, podemos fazer o mesmo para $F_{AB}(t - t')$:

$$\begin{aligned} F_{AB}(t - t') &= \langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{\Pi} \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{A}(t)\hat{B}(t')\} \\ &= \frac{1}{\Pi} \sum_{\nu} \langle \nu | e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{A} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} e^{i\hat{\mathcal{H}}t'} \hat{B} e^{i\hat{\mathcal{H}}t'} | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} \\ &= \frac{1}{\Pi} \sum_{\nu, \mu} \langle \nu | \hat{A} | \mu \rangle \langle \mu | \hat{B} | \nu \rangle e^{-\beta E_\nu} e^{i(E_\nu - E_\mu)(t - t')} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Assim, podemos afirmar que existe uma relação entre as funções de correlação temporal, de tal sorte que:

$$F_{BA}(t - t') = F_{AB}(t - t') e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)} \quad (3.28)$$

Agora, vamos introduzir a transformada de Fourier $J_{AB}(\omega)$, de tal modo que

$$\langle B(t')A(t) \rangle = F_{BA}(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA(\omega)} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (3.29)$$

A função $J_{BA}(\omega)$ é conhecida como intensidade espectral, e sua forma pode ser obtida fazendo a transformada inversa de Fourier da equação acima dada por:

$$J_{BA}(\omega) = J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(t - t') e^{i\omega(t-t')} dt \quad (3.30)$$

Fazendo uma mudança de variável, $\tau = t - t'$, de modo que $dt = d\tau$ e usando a equação 3.30 teremos:

$$\begin{aligned} J_{BA(\omega)} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{BA}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{\Pi} \frac{1}{2\pi} \sum_{\mu, \nu} \langle \mu | \hat{B} | \nu \rangle \langle \nu | \hat{A} | \mu \rangle e^{-\beta E_{\mu}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[E_{\mu} - E_{\nu} - \omega]\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{\Pi} \sum_{\mu, \nu} \langle \mu | \hat{B} | \nu \rangle \langle \nu | \hat{A} | \mu \rangle e^{-\beta E_{\mu}} \delta(E_{\mu} - E_{\nu} - \omega) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Um ponto interessante acerca da função de intensidade espectral J_{BA} é que ela só está definida para os pontos de frequências tais que $E_{\mu} - E_{\nu} = \omega$, ou seja, nas excitações do sistema $J_{BA}(\omega) = J_{AB}(\omega)$ e a partir deste momento nos referiremos à intensidade espectral por $J(\omega)$. Assim, somos capazes de encontrar a representação espectral para $F_{AB}(t - t')$ e, conseqüentemente, para $F_{BA}(t - t')$

$$F_{AB}(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (3.32)$$

e

$$F_{BA}(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (3.33)$$

em que as equações 3.32 e 3.33 são as representações espectrais requeridas para as funções de correlação temporal, onde $J(\omega)$ é a densidade espectral da função $F_{BA}(t, t')$.

3.5 Representações espectrais para as funções de Green avançada e retardada

Consideraremos agora as representações espectrais para as funções de Green. Podemos obtê-las por meios das representações espectrais para as funções de correlação temporal. Podemos introduzir as componentes de Fourier destas através de:

$$G_r(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E) e^{-iE\tau} dE \quad (3.34)$$

Lembrando que $\tau = t - t'$ e $G_r(E)$ é a componente de Fourier da função de Green retardada. Usando a definição de $G_r(t - t')$, podemos obter as suas transformadas como:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau) e^{iE\tau} d\tau \quad (3.35)$$

Substituindo na equação acima a definição para a função de Green retardada, obtemos

$$\begin{aligned} G_r(E) &= -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(\tau) \left(\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega\tau} d\omega - \eta \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \right) e^{iE\tau} d\tau \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (3.36)$$

Representaremos a função θ na forma integral $\theta(t)$. E como já foi mostrado na equação 3.10, podemos escrever esta função descontínua em termos da função delta de Dirac, onde

$$\theta(\tau) = \int_{-\infty}^{\tau} \delta(\tau') d\tau' = \int_{-\infty}^{\tau} e^{\epsilon\tau'} \delta(\tau') d\tau' \quad (3.37)$$

em que $\epsilon \rightarrow 0(\epsilon > 0)$

Mas uma das representações para a função delta de Dirac é

$$\delta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iX\tau} dX \quad (3.38)$$

Desta maneira, $\theta(\tau)$, ficará como:

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iX\tau}}{X + i\epsilon} dX \quad (3.39)$$

Observa-se que a função definida assim tem as mesmas propriedades da função descontínua $\theta(\tau)$. Também, devemos considerar X como uma variável complexa que será resolvida pelo método dos resíduos [74]. Então iremos substituir a equação 3.39 na equação 3.36 e ficaremos com a relação,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-\omega)\tau} \theta(\tau) d\tau &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX}{X+i\epsilon} 2\pi \delta(E-\omega-X) \\ &= \frac{i}{E-\omega+i\epsilon} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Desta maneira, $G_r(E)$ transforma-se em:

$$G_r(E) = \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega + i\epsilon}, \quad \epsilon \rightarrow 0^+ \quad (3.41)$$

Analogamente, obtemos a componente de Fourier $G_a(E)$ para a função de Green avançada, ou seja,

$$G_a(E) = \frac{i}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta)}{E - \omega - i\epsilon}, \quad \epsilon \rightarrow 0^+ \quad (3.42)$$

Assim as equações para $G_r(E)$ e $G_a(E)$ podem ser reescritas de uma maneira única:

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\epsilon} \quad (3.43)$$

em que os índices r e a correspondentes aos sinais $+$ e $-$, respectivamente.

Até então foi considerado E como uma quantidade real, mas podemos estender os resultados para que as funções de Green avançada e retardada as quais sejam analiticamente contínua no plano complexo de E . Sendo assim, teremos

$$G(E) = \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta)}{E - \omega} = \begin{cases} G_a(E), & \text{se } \text{Im } E < 0, \\ G_r(E), & \text{se } \text{Im } E > 0. \end{cases} \quad (3.44)$$

Podemos ver que a função $G_r(E)$ pode ser analiticamente contínua estendida ao semiplano superior do plano complexo $\text{Im}(E) > 0$, bem como $G_a(E)$ pode ser analiticamente contínua dentro do semiplano inferior do plano complexo $\text{Im}(E) < 0$, ambas possuindo uma singularidade sobre o eixo real, que representam as excitações do sistema. Dessa forma, $G(E)$ será considerada como uma função única existindo concomitantemente em dois ramos, uma no semiplano inferior e a outra no semiplano superior dos valores complexos de

E. Vejamos como isso pode acontecer:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_a(\tau) e^{iE\tau} d\tau \quad (3.45)$$

com $G_a(\tau) = 0$ para $\tau > 0$.

Tomando $E = \alpha + i\beta$, com o β sendo negativo, teremos:

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 G_a(\tau) e^{i(\alpha+i\beta)\tau} d\tau = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 G_a(\tau) e^{i\alpha\tau} e^{-\beta\tau} d\tau \quad (3.46)$$

Podemos, semelhantemente, analisar a função $G_r(E)$

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau) e^{iE\tau} d\tau \quad (3.47)$$

com $G_r(\tau) = 0$ para $\tau < 0$. Tomando $E^+ = \alpha + i\beta$, com o β sendo positivo, teremos:

$$G_r(E^+) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau) e^{i(\alpha+i\beta)\tau} d\tau = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau) e^{i\alpha\tau} e^{-\beta\tau} d\tau \quad (3.48)$$

Sabendo qual é o valor de $G(E)$ pode-se obter a densidade espectral $J(\omega)$ da relação

$$G(E^+) - G(E^-) = G(E + i\epsilon) - G(E - i\epsilon) \quad (3.49)$$

em que $E^\pm = E \pm i\epsilon$ o que nos resulta em:

$$G(E^+) - G(E^-) = \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta)}{E^+ - \omega} - \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta)}{E^- - \omega} \quad (3.50)$$

e para resolvermos a equação acima usaremos a identidade de Dirac dada por:

$$\frac{1}{Y \pm i\epsilon} = P \left(\frac{1}{Y} \right) \mp i\pi\delta(Y) \quad (3.51)$$

onde $\epsilon \rightarrow 0^+$, Y é uma variável real e P representa o valor principal na integração sobre Y . De fato, se tomarmos a diferença entre as equações

$$\begin{aligned} G(E^+) - G(E^-) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\epsilon} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\epsilon} \\ &= -i(e^{\beta E} - \eta) J(E) \end{aligned} \quad (3.52)$$

e podemos, então, escrever a seguinte relação para $J(\omega)$:

$$J(\omega) = i \frac{G(E^+) - G(E^-)}{e^{\beta\omega} - \eta} = i \frac{G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)}{e^{\beta\omega} - \eta} \quad (3.53)$$

Com este resultado, podemos escrever a função de correlação temporal $F_{BA}(t - t')$ da seguinte maneira

$$F_{BA}(t - t') = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(E^+) - G(E^-)}{e^{\beta\omega} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (3.54)$$

Deste modo, o conhecimento da função de Green permite obter a função de correlação. Em nosso sistema iremos considerar que $t = t'$, e na maioria dos casos $G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon) = \text{Im}(G(\omega))$, logo podemos reescrever a função de correlação acima como:

$$\langle B(0)A(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_{FD}(\omega) \text{Im}(\langle\langle A, B \rangle\rangle_{\omega}) \quad (3.55)$$

onde f_{FD} representa a função distribuição de Fermi-Dirac. Observemos que na equação 3.55 temos do lado esquerdo uma correlação entre dois operadores que como já foi dito pode ser qualquer operador. Devemos ter em mente também que estamos trabalhando com férmions e não com bósons. Do lado direito desta equação temos uma integral que, geralmente, não é trivial e nem solúvel analiticamente, mas sim numericamente. Do lado direito, também, temos uma função de fermi-dirac que depende da frequência. Logo após a a função de fermi-dirac temos o imaginário da função de Green entre os operadores A e B , no espectro dos momenta.

A equação 3.55 é também conhecida como Teorema do Salto, e será bastante utilizada para trabalharmos nosso sistema, porquanto, uma vez conhecido o propagador de Green, conseguiremos encontrar a correlação desejada.

Os efeitos da hibridização no *crossover* BCS-BEC com interações interbandas

4.1 Modelo

Após discussões a respeito de modelos, suas características, suas influências, suas abrangências - suas limitações e suas aplicações - e principalmente sua efetividade, será apresentado um modelo simplificado do proposto por Dinola, 2011 [75], o qual poderá compreender as características dos modelos citados anteriormente. Portanto, neste capítulo pretende-se investigar a Física por detrás do *crossover* BCS-BEC e sua pertinência para a Física da matéria condensada usando um modelo multi-banda tipo Hubbard, que é mais conveniente para entender sistemas contendo férmions pesados ou o novo grupo de supercondutores do tipo ferro-pnictídeo (*FeAs*) [76].

Conceberemos um modelo de duas bandas onde as *quasi*-partículas possuem massas efetivas distintas. Uma dessas bandas está associada a banda estreita das *quasi*-partículas pesadas e a banda larga está ligada aos elétrons de condução não correlacionados. Essa espécie de modelo é ideal para descrever compostos de *Ce*, *Yb* e *U* (cério, itérbio e urânio, respectivamente), onde a banda estreita é composta por camadas não preenchidas dos elétrons da órbita *f* e a banda larga representa as *quasi*-partículas das órbitas *s*, *p* ou *d*. No cenário dos pnictídeos de ferro, a banda estreita é formada pelos elétrons da banda *f*.

Estudaremos um modelo, levando em conta as interações interbandas além da hibridização, no entanto as origens microscópicas dessas interações não são o nosso foco, uma vez que diferentes fatores podem ser protagonistas e representá-las, como por exemplo em supercondutores convencionais elas podem ter origens nos fônons, como indica o

efeito isotópico nesses materiais. E o principal fundamento relacionado a explicitação da hibridização no Hamiltoniano o qual será introduzido é que esse pode ser manipulado, diretamente, pela pressão externa. O efeito mais importante da hibridização de fato é transferir quasipartículas entre as diferentes bandas renormalizadas, Apesar de ser possível que a magnitude da interação dependa dela. Para a supercondutividade intra-banda, que geralmente domina nos metais [34], o efeito da hibridização é enfraquecer a interação atrativa e fortuitamente destruir o estado supercondutor.

Em resumo, o nosso objetivo é estudar a supercondutividade no modelo de duas bandas, com interações interbandas, com o propósito de obter as equações para as amplitudes do *gap* supercondutor e, concomitantemente, avaliar a evolução dos sistemas entre o limite de acoplamentos fracos (BCS) e acoplamentos fortes (BEC) e estimar a influência que a hibridização tem sobre o sistema.

Então, para tratar o problema será introduzido o modelo e a seguir serão calculadas as equações de movimento para as funções de Green das equações do gap e do número e por fim o comportamento das propriedades de interesse. Portanto, para dar início ao trabalho apresentamos o Hamiltoniano que modela o sistema.

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}) - g_{ab} \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k (a_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}) \quad (4.1)$$

onde $a_{k\sigma}^\dagger (a_{k\sigma})$ e $b_{k\sigma}^\dagger (b_{k\sigma})$ são os operadores de criação (aniquilação) dos elétrons da banda a e da banda b , respectivamente, V é o termo de hibridização e g_{ab} é o termo de interação atrativo inter-banda. A energia cinética das partículas é dada pelas relações de dispersão (ϵ_k^a e ϵ_k^b). Como já foi dito, os mecanismos por trás das interações atrativas não serão o foco deste trabalho, mas que fique claro a necessidade de tal termo para a existência da SC. Faremos uma aproximação de campo médio tipo BCS do modelo, desacoplaremos o termo de muitos corpos analisando correlações 2 a 2. Portanto, usaremos o seguinte procedimento, para operadores genéricos \hat{A} e \hat{B}

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B} - \langle \hat{A}\hat{B} \rangle + \langle \hat{A}\hat{B} \rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle + (\hat{A}\hat{B} - \langle \hat{A}\hat{B} \rangle) = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle + \delta(\hat{A}\hat{B})$$

onde, o termo $(\hat{A}\hat{B} - \langle \hat{A}\hat{B} \rangle)$ representa a flutuação em torno da média, agora sendo escrito de uma maneira mais resumida como $\delta(\hat{A}\hat{B})$ e esse termo é importante pois ele será o foco

da nossa aproximação. No entanto, precisaremos usar a seguinte relação:

$$\langle \widehat{A}\widehat{B} \rangle = \langle \widehat{A} \rangle \widehat{B} + \widehat{A} \langle \widehat{B} \rangle - \langle \widehat{A} \rangle \langle \widehat{B} \rangle$$

Agora respeitando as regras estabelecidas acima, embora modifiquemos o sistema para um sistema de 4 operadores genéricos quaisquer, teremos, analogamente:

$$\begin{aligned} \widehat{M}\widehat{N}\widehat{O}\widehat{P} &= \widehat{M}\widehat{N}\widehat{O}\widehat{P} + \langle \widehat{M}\widehat{N}\widehat{O}\widehat{P} \rangle - \langle \widehat{M}\widehat{N}\widehat{O}\widehat{P} \rangle \\ &= \widehat{M}\widehat{N}\widehat{O}\widehat{P} + \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \widehat{O}\widehat{P} + \widehat{M}\widehat{N} \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle - \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle - (\langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \widehat{O}\widehat{P} + \widehat{M}\widehat{N} \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle - \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle) \\ &= \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \widehat{O}\widehat{P} + \widehat{M}\widehat{N} \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle - \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle + (\widehat{M}\widehat{N} - \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle) (\widehat{O}\widehat{P} - \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle) \\ &= \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \widehat{O}\widehat{P} + \widehat{M}\widehat{N} \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle - \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle + \delta(\widehat{M}\widehat{N})\delta(\widehat{O}\widehat{P}) \end{aligned} \quad (4.2)$$

A aproximação reside no fato de considerarmos que as flutuações são extremamente pequenas, afinal queremos saber com maior certeza o valor de nossas observáveis, logo um produto de duas flutuações pequenas pode ser desprezado, uma vez que se traduz em um valor ainda menor. Porquanto,

$$\widehat{M}\widehat{N}\widehat{O}\widehat{P} \approx \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \widehat{O}\widehat{P} + \widehat{M}\widehat{N} \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle - \langle \widehat{M}\widehat{N} \rangle \langle \widehat{O}\widehat{P} \rangle \quad (4.3)$$

Agora, usando a eq. 4.3 podemos reescrever o termo de muitos corpos como:

$$\begin{aligned} &g_{ab} \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \approx \\ &\approx g_{ab} \sum_{kk'\sigma} \left[\langle a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger \rangle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} + a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle - \langle a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger \rangle \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle \right] \\ &\approx g_{ab} \sum_{kk'\sigma} \left[\langle b_{-k'-\sigma} a_{k'\sigma} \rangle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} + a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle - \langle b_{-k'-\sigma} a_{k'\sigma} \rangle \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle \right] \\ &\approx g_{ab} \sum_{kk'\sigma} \langle b_{-k'-\sigma} a_{k'\sigma} \rangle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} + g_{ab} \sum_{kk'\sigma} \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger + \\ &\quad - g_{ab} \sum_{kk'\sigma} \langle b_{-k'-\sigma} a_{k'\sigma} \rangle \langle b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle \\ &\approx \Delta_{ab} \sum_{kk'\sigma} b_{-k-\sigma} a_{k\sigma} + \Delta_{ab} \sum_{kk'\sigma} a_{k'\sigma}^\dagger b_{-k'-\sigma}^\dagger - \frac{(\Delta_{ab})^2}{g_{ab}} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Agora substituiremos a eq. 4.4 na eq. 4.1 então teremos o nosso modelo, já feita a aproximação de campo médio e, por simplicidade e simetria do número de onda quanto a

paridade, suprimiremos o índice de spin, logo ficaremos com:

$$\hat{H} = \sum_k (\epsilon_k^a a_k^\dagger a_k + \epsilon_k^b b_k^\dagger b_k) - \Delta_{ab} \sum_k (a_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_{-k} a_k) + \sum_k V_k (a_k^\dagger b_k + b_k^\dagger a_k) + \frac{\Delta_{ab}^2}{g_{ab}} \quad (4.5)$$

onde o gap supercondutor é representado pelo termo:

$$\Delta_{ab} = g_{ab} \sum_k \langle b_{-k} a_k \rangle. \quad (4.6)$$

Para obtermos o Gap precisaremos calcular primeiramente a equação de correlação, a qual pode ser obtida a partir da equação 3.55 que aplicando no nosso caso ficará,

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \int d\omega f(\omega) \text{Im} \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle \quad (4.7)$$

As funções de Green, por sua vez, podem ser obtidas a partir da equação de movimento eq.3.22, onde, se aplicada ao nosso problema resultará em

$$\omega \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \langle \{a_k, b_{-k}\} \rangle + \langle \langle [a_k, H], b_{-k} \rangle \rangle \quad (4.8)$$

podemos observar que a equação de movimento acima está relacionada com a equação de movimento de um comutador do Hamiltoniano, portanto como já mencionado, essas equações resultaram em outras equações de movimentos que deverão ser solucionadas ou postas uma em função da outra. Faremos esses passos a seguir de forma mais detalhada.

4.2 As equações de movimento

Objetivamente temos que, para determinar o gap supercondutor precisamos da equação de correlação entre os operadores b_{-k} e a_k que pode ser obtido pela eq.4.7 e por sua vez para termos essa correlação precisamos da função de Green entre os mesmos operadores que pode ser obtido através da eq. 4.8. Então para obtermos as equações do parâmetro de ordem supercondutor inter-banda e do número, serão calculadas as equações de movimento para os propagadores $\langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle$, $\langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle$, $\langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle$, $\langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle$. Para calculá-las foi utilizada a expressão geral para a equação de movimento das funções de

Green para férmions dada por:

$$\omega\langle\langle A, B \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi}\langle\{A, B\}\rangle + \langle\langle[A, H], B\rangle\rangle \quad (4.9)$$

onde A e B são operadores fermiônicos e H é o Hamiltoniano do sistema, e por A e B serem operadores do tipo férmions, sempre que aparecerem os anti comutadores entre eles só há duas possibilidades, ou será zero ou será o delta de dirac entre eles, ou seja:

$$\{b_k, b_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \quad (4.10)$$

$$\{b_k, b_{k'}\} = \{b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger\} = 0 \quad (4.11)$$

$$\{a_{k'}^{(\dagger)}, b_{k'}^{(\dagger)}\} = 0 \quad (4.12)$$

o mesmo serve para os operadores a_k e $a_{k'}^\dagger$ e qualquer outra formação será nula. Assim, calculando $\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle$ por meio da relação:

$$\omega\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle = \langle\langle[a_k, H], b_{-k}\rangle\rangle + \frac{1}{2\pi}\langle\{a_k, b_{-k}\}\rangle \quad (4.13)$$

Na primeira equação de movimento será tomado o cuidado para calculá-la levando em consideração a maioria dos passos e a medida que for se repetindo o procedimento não se fará necessário a mesma riqueza de detalhes. Podemos ver que na equação 4.13 temos a média de anti-comutador que será nulo segunda a eq. 4.12, por isso para essa primeira equação de movimento será preciso calcular explicitamente apenas o comutador que aparece, e este será,

$$\begin{aligned} [a_k, H] &= [a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] + [a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] - [a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] \\ &+ [a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] + [a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] + [a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] \end{aligned} \quad (4.14)$$

para ficar mais didático iremos resolver separadamente todos os termos que aparecem no comutador acima. O primeiro termo a direita da igualdade acima vale:

$$\begin{aligned}
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a [a_k, a_{k'}^\dagger a_{k'}] \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a ([a_k, a_{k'}^\dagger] a_{k'} + a_{k'}^\dagger [a_k, a_{k'}]) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a (a_k a_{k'}^\dagger a_{k'} - \cancel{a_{k'}^\dagger a_k a_{k'}} + \cancel{a_{k'}^\dagger a_k a_{k'}} - a_{k'}^\dagger a_k a_{k'}) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a (a_k a_{k'}^\dagger a_{k'} - a_{k'}^\dagger a_k a_{k'}) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a (a_k a_{k'}^\dagger a_{k'} + a_{k'}^\dagger a_k a_{k'}) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a (a_k a_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k) a_{k'} \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a \{ \cancel{a_k a_{k'}^\dagger} + a_{k'}^\dagger \} a_{k'} \xrightarrow{\delta_{kk'}} \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a \delta_{kk'} a_{k'} \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \epsilon_k^a a_k \tag{4.15}
\end{aligned}$$

Lembrando que o termo $(a_k a_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k)$ é anti-comutador entre os operadores a_k e $a_{k'}^\dagger$ e será tomado como análogo nos outros termos e sempre que mudarmos um operador de lugar com o outro de maneira cíclica mudaremos o sinal da multiplicação. Agora calcularemos

o comutador do segundo termo a direita da igualdade da equação.

$$\begin{aligned}
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b ([a_k, b_{k'}^\dagger b_{k'}]) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b ([a_k, b_{k'}^\dagger] b_{k'} + b_{k'}^\dagger [a_k, b_{k'}]) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b (a_k b_{k'}^\dagger b_{k'} - b_{k'}^\dagger a_k b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_k b_{k'} - b_{k'}^\dagger b_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b (a_k b_{k'}^\dagger b_{k'} - b_{k'}^\dagger b_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b (-b_{k'}^\dagger a_k b_{k'} - b_{k'}^\dagger b_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b -b_{k'}^\dagger (a_k b_{k'} + b_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b (-b_{k'}^\dagger) \{a_k, b_{k'}\} \rightarrow 0 \\
[a_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] &= 0
\end{aligned} \tag{4.16}$$

O terceiro termo da equação ficará:

$$\begin{aligned}
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} ([a_k, a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger]) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} ([a_k, a_{k'}^\dagger] b_{-k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger [a_k, b_{-k'}^\dagger]) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger - a_{k'}^\dagger a_k b_{-k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k b_{-k'}^\dagger - a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger a_k) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger - a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger a_k) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k b_{-k'}^\dagger) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k) b_{-k'}^\dagger \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} \{a_k, a_{k'}^\dagger\} b_{-k'}^\dagger \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} \delta_{kk'} b_{-k'}^\dagger \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] &= \Delta_{ab} b_{-k}^\dagger
\end{aligned} \tag{4.17}$$

É perceptível que a dinâmica é simples, porém trabalhosa, exatamente por isso que suprimiremos cada vez mais passos, como no procedimento acima que não deixamos claro quais

foram os termos que se cancelaram, no entanto fica claro quais são os termos simétricos que se anulam. O próximo termo da equação 4.14 será:

$$\begin{aligned}
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} ([a_k, b_{-k'} a_{k'}]) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} ([a_k, b_{-k'}] a_{k'} + b_{-k'} [a_k, a_{k'}]) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_k b_{-k'} a_{k'} - b_{-k'} a_k a_{k'} + b_{-k'} a_k a_{k'} - b_{-k'} a_{k'} a_k) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_k b_{-k'} a_{k'} - b_{-k'} a_{k'} a_k) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} (-b_{-k'} a_k a_{k'} - b_{-k'} a_{k'} a_k) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} -b_{-k'} (a_k a_{k'} + a_{k'} a_k) \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= \Delta_{ab} \sum_{k'} -b_{-k'} \{a_k, a_{k'}\} \\
[a_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] &= 0
\end{aligned} \tag{4.18}$$

O quinto e penúltimo termo será:

$$\begin{aligned}
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'})] &= \sum_{k'} V_{k'} ([a_k, a_{k'}^\dagger b_{k'}]) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'})] &= \sum_{k'} V_{k'} ([a_k, a_{k'}^\dagger] b_{k'} + a_{k'}^\dagger [a_k, b_{k'}]) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger b_{k'} - a_{k'}^\dagger a_k b_{k'} + a_{k'}^\dagger a_k b_{k'} - a_{k'}^\dagger b_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger b_{k'} - a_{k'}^\dagger b_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger b_{k'} + a_{k'}^\dagger a_k b_{k'}) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} (a_k a_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger a_k) b_{k'} \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} \{a_k, a_{k'}^\dagger\} b_{k'} \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} \delta_{kk'} b_{k'} \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] &= V_k b_k
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Por fim, o último termo que precisamos será calculado e teremos os seis termos do comutador completo e ficará da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} [a_k, b_{k'}^\dagger a_{k'}] \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} ([a_k, b_{k'}^\dagger] a_{k'} + b_{k'}^\dagger [a_k, a_{k'}]) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} (a_k b_{k'}^\dagger a_{k'} - b_{k'}^\dagger a_k a_{k'} + b_{k'}^\dagger a_k a_{k'} - b_{k'}^\dagger a_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} (a_k b_{k'}^\dagger a_{k'} - b_{k'}^\dagger a_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} (-b_{k'}^\dagger a_k a_{k'} - b_{k'}^\dagger a_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} -b_{k'}^\dagger (a_k a_{k'} + a_{k'} a_k) \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= \sum_{k'} V_{k'} -b_{k'}^\dagger \{a_k, a_{k'}\} \\
[a_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] &= 0
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Porquanto, substituindo todos os termos calculados acima na equação 4.14 três são nulos, mas três não são, logo teremos mais três termos e a equação do comutador se tornará:

$$\begin{aligned}
\omega \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle &= \epsilon_k^a \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle + V_k \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle \\
(\omega - \epsilon_k^a) \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle &= -\Delta_{ab} \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle + V_k \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle \\
(\omega - \epsilon_k^a) \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle + \Delta_{ab} \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle - V_k \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle &= 0
\end{aligned} \tag{4.21}$$

A equação 4.21 indica três função de Green entre dois operadores cada uma e podemos observar que temos correlação entre outros operadores que não tínhamos inicialmente, portanto iremos realizar o mesmo procedimento acima para encontrarmos as outras equações de correlações. Primeiramente, encontraremos a correlação que aparece no segundo termo da eq. 4.21 utilizando as equações de movimento da função de Green, levando em consideração que dessa vez o anti-comutador não se anulará conforme a eq. 4.12:

$$\omega \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle = \langle \langle [b_{-k}^\dagger, H], b_{-k} \rangle \rangle + \frac{1}{2\pi} \langle \langle \{b_{-k}^\dagger, b_{-k}\} \rangle \rangle \tag{4.22}$$

O comutador ficará

$$\begin{aligned}
[b_{-k}^\dagger, H] &= [b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] + [b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] - [b_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] \\
&+ [b_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] + [b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] + [b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] \quad (4.23)
\end{aligned}$$

e os termos do comutador, levando em consideração o procedimento e o rigor tomado para obtermos a primeira função de Green, ficarão:

$$[b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] = 0 \quad (4.24)$$

$$[b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] = \epsilon_k^b (-b_{-k}^\dagger) \quad (4.25)$$

$$[b_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] = 0 \quad (4.26)$$

$$[b_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] = \Delta_{ab} a_k \quad (4.27)$$

$$[b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] = V_k - a_{-k}^\dagger \quad (4.28)$$

$$[b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] = 0 \quad (4.29)$$

Portanto a eq. 4.23, depois das devidas substituições, ficará:

$$\begin{aligned}
(\omega + \epsilon_k^b) \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle &= -\Delta_{ab} \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle - V_k \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle + \frac{1}{2\pi} \\
(\omega + \epsilon_k^b) \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle &+ \Delta_{ab} \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle + V_k \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \quad (4.30)
\end{aligned}$$

na eq. 4.30 o primeiro termo já foi calculado na eq. 4.9, mas o segundo e o terceiro não. Calculando, primeiramente, a correlação do segundo termo:

$$\omega \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle = \langle \langle [a_{-k}^\dagger, H], b_{-k} \rangle \rangle + \frac{1}{2\pi} \langle \{a_{-k}^\dagger, b_{-k}\} \rangle \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned}
[a_{-k}^\dagger, H] &= [a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] + [a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] - [a_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] \\
&+ [a_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] + [a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] + [a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] \quad (4.32)
\end{aligned}$$

Os termos do comutador calculados analogamente ao que foi calculado anteriormente ficarão:

$$[a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] = \epsilon_k^a (-a_{-k}^\dagger) \quad (4.33)$$

$$[a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] = 0 \quad (4.34)$$

$$[a_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] = 0 \quad (4.35)$$

$$[a_{-k}^\dagger, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] = \Delta_{ab} (-b_k) \quad (4.36)$$

$$[a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] = 0 \quad (4.37)$$

$$[a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] = V_k (-b_{-k}^\dagger) \quad (4.38)$$

$$(\omega + \epsilon_k^a) \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle + V_k \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle = 0 \quad (4.39)$$

A equação de correlação acima possui termos que ainda não conhecemos, por isso precisaremos calcular essa correlação.

$$\omega \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle = \langle \langle [b_k, H], b_{-k} \rangle \rangle + \frac{1}{2\pi} \langle \{b_k, b_{-k}\} \rangle \quad (4.40)$$

Mais uma vez, pela definição do anti-comutador, o último termo será zero

$$\begin{aligned} [b_k, H] &= [b_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] + [b_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] - [b_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] \\ &+ [b_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] + [b_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] + [b_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] \end{aligned} \quad (4.41)$$

Podemos calcular os termos do comutador separadamente:

$$[b_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'}] = 0 \quad (4.42)$$

$$[b_k, \sum_{k'} \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}] = \epsilon_k^b b_k \quad (4.43)$$

$$[b_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger] = \Delta_{ab} -a_{-k}^\dagger \quad (4.44)$$

$$[b_k, \Delta_{ab} \sum_{k'} b_{-k'} a_{k'}] = 0 \quad (4.45)$$

$$[b_k, \sum_{k'} V_{k'} a_{k'}^\dagger b_{k'}] = 0 \quad (4.46)$$

$$[b_k, \sum_{k'} V_{k'} b_{k'}^\dagger a_{k'}] = V_k a_k \quad (4.47)$$

Portanto, a equação final ficará,

$$(\omega - \epsilon_k^b) \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle - V_k \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle = 0 \quad (4.48)$$

Se observarmos todas as equações: 4.21, 4.30, 4.39 e 4.47 poderemos ver que as funções de Green que aparecem nas mesmas se repetem nas equações e por isso podemos fazer um sistema.

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_k^a) \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle + \Delta_{ab} \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle - V_k \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle &= 0 \\ (\omega + \epsilon_k^b) \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle + \Delta_{ab} \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle + V_k \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} \\ (\omega + \epsilon_k^a) \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle + V_k \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle &= 0 \\ (\omega - \epsilon_k^b) \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle - V_k \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Então só precisamos resolver este sistema e encontrar os termos que são importantes para o nosso trabalho, contudo fazer este cálculo não será simples, precisaremos de um método adequado para resolvê-lo, e para tentar diminuir a complexidade deste cálculo substituiremos os termos por letras para diminuir a notação

4.3 Energias de excitação e correlação

Utilizaremos a regra de Cramer para resolver esse sistema e como já foi mencionado, para ficar menos carregado, substituiremos os termos por letras. Lembrando-se da eq. 4.7 podemos observar que a equação a qual nos interessa é a que traz o valor do termo A .

$$A = \langle \langle a_k, b_{-k} \rangle \rangle \quad (4.49)$$

$$B = \langle \langle b_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle \quad (4.50)$$

$$C = \langle \langle a_{-k}^\dagger, b_{-k} \rangle \rangle \quad (4.51)$$

$$D = \langle \langle b_k, b_{-k} \rangle \rangle \quad (4.52)$$

A partir da definição acima as equações ficaram:

$$(\omega - \epsilon_k^a)A + \Delta_{ab}B + 0C - V_kD = 0 \quad (4.53)$$

$$\Delta_{ab}A + (\omega + \epsilon_k^b)B + V_kC + 0D = \frac{1}{2\pi} \quad (4.54)$$

$$0A + V_kB + (\omega + \epsilon_k^a)C - \Delta_{ab}D = 0 \quad (4.55)$$

$$-V_kA + 0B - \Delta_{ab}C + (\omega - \epsilon_k^b)D = 0 \quad (4.56)$$

De acordo com o sistema de equações acima poderemos reescrevê-lo a forma matricial:

$$\begin{pmatrix} (\omega - \epsilon_k^a) & \Delta_{ab} & 0 & -V_k \\ \Delta_{ab} & (\omega + \epsilon_k^b) & V_k & 0 \\ 0 & V_k & (\omega + \epsilon_k^a) & -\Delta_{ab} \\ -V_k & 0 & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2\pi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.57)$$

Segundo a regra de Cramer o valor de A pode ser obtido a partir da razão entre os determinantes de uma matriz α_x definida eq. 4.58 pelo determinante de uma matriz α definida por eq. 4.59, os quais são discriminados a frente:

$$\alpha = \begin{pmatrix} (\omega - \epsilon_k^a) & \Delta_{ab} & 0 & -V_k \\ \Delta_{ab} & (\omega + \epsilon_k^b) & V_k & 0 \\ 0 & V_k & (\omega + \epsilon_k^a) & -\Delta_{ab} \\ -V_k & 0 & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^b) \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{ab} & 0 & -V_k \\ \frac{1}{2\pi} & (\omega + \epsilon_k^b) & V_k & 0 \\ 0 & V_k & (\omega + \epsilon_k^a) & -\Delta_{ab} \\ 0 & 0 & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^b) \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

Agora, para calcularmos o valor de A , pois ele é o termo que nos interessa, precisaremos encontrar o determinante de α e α_x , para isso usaremos a regra do cofator para calcular os determinantes dessas matrizes:

$$\det\alpha = \begin{vmatrix} (\omega - \epsilon_k^a) & \Delta_{ab} & 0 & -V_k \\ \Delta_{ab} & (\omega + \epsilon_k^b) & V_k & 0 \\ 0 & V_k & (\omega + \epsilon_k^a) & -\Delta_{ab} \\ -V_k & 0 & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^b) \end{vmatrix} \quad (4.60)$$

$$\det\alpha = a_{11}A_{11} + a_{12}A_{12} + a_{13}A_{13} + a_{14}A_{14} \quad (4.61)$$

Na equação acima o termo a_{13} é zero, logo não será necessário calcular a parcela A_{13} , pois quando multiplicada por zero será nula mesmo. Lembrando que pela regra do cofator o termo A_{ij} vale: $A_{ij} = (-1)^{i+j}D_{ij}$ em que D_{ij} é o determinante da matriz original eliminando ao mesmo tempo a i -ésima linha e a j -ésima coluna. Dessa forma os termos A_{11} , A_{12} e A_{14} valem, respectivamente:

$$A_{11} = (-1)^{1+1}D_{11} = 1^2 \begin{vmatrix} (\omega + \epsilon_k^b) & V_k & 0 \\ V_k & (\omega + \epsilon_k^a) & -\Delta_{ab} \\ 0 & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^b) \end{vmatrix} \quad (4.62)$$

$$A_{11} = \omega^3 - \omega\epsilon_k^{b^2} + \omega^2\epsilon_k^a - \epsilon_k^{b^2}\epsilon_k^a\omega - \omega\Delta_{ab}^2 - \epsilon_k^b\Delta_{ab}^2 - V_k^2\omega + V_k^2\epsilon_k^b \quad (4.62)$$

$$A_{12} = (-1)^{1+2}D_{12} = -1^3 \begin{vmatrix} \Delta_{ab} & V_k & 0 \\ 0 & (\omega + \epsilon_k^a) & -\Delta_{ab} \\ -V_k & -\Delta_{ab} & (\omega - \epsilon_k^b) \end{vmatrix}$$

$$A_{12} = \Delta_{ab}^3 - \Delta_{ab}\omega^2 - \Delta_{ab}\omega\epsilon_k^a + \Delta_{ab}\omega\epsilon_k^b + \Delta_{ab}\epsilon_k^a\epsilon_k^b + V_k^2\Delta_{ab} \quad (4.63)$$

$$A_{14} = (-1)^{1+4}D_{14} = (-1)^5 \begin{vmatrix} \Delta_{ab} & (\omega + \epsilon_k^b) & V_k \\ 0 & V_k & (\omega + \epsilon_k^a) \\ -V_k & 0 & -\Delta_{ab} \end{vmatrix}$$

$$A_{14} = \Delta_{ab}^2(V_k) + \omega^2V_k + \omega\epsilon_k^bV_k + \omega\epsilon_k^aV_k + \epsilon_k^b\epsilon_k^aV_k - V_k^3 \quad (4.64)$$

De posse dos cofatores o determinante pode ser calculado pela eq. 4.61 e ficará:

$$\det\alpha = \omega^4 - (\epsilon_k^{b2} + \epsilon_k^{a2} + 2\Delta_{ab}^2 + 2V_k^2)\omega^2 + [\epsilon_k^b\epsilon_k^a + (\Delta_{ab}^2 - V_k^2)]^2 \quad (4.65)$$

O determinante acima, por simplicidade, será escrito em função das raízes dessa equação, por isso, tomaremos como variável o termo ω . Como pode observar acima a equação em função de ω é uma equação do quarto grau e não temos grau ímpar, logo resolveremos como se fosse uma equação biquadrática, usando $\omega^2 = \lambda$, dessa forma poderemos resolver a equação para λ utilizando a fórmula de Bhaskara que, após aplicação desta, chegaremos às raízes da equação para λ :

$$\lambda = y \pm \sqrt{z}$$

onde:

$$y = \frac{(\epsilon_k^{b2} + \epsilon_k^{a2})}{2} + (\Delta_{ab}^2 + V_k^2) \quad (4.66)$$

e

$$z = \left[\frac{(\epsilon_k^{b2} + \epsilon_k^{a2})}{2} + (\Delta_{ab}^2 + V_k^2) \right]^2 - [\epsilon_k^b\epsilon_k^a + (\Delta_{ab}^2 - V_k^2)]^2 \quad (4.67)$$

Assim, poderemos encontrar as raízes para ω , as quais serão:

$$\omega = \pm \sqrt{y \pm \sqrt{z}} \quad (4.68)$$

Logo as raízes serão: $\omega_1 = +\sqrt{y + \sqrt{z}}$; $\omega_2 = +\sqrt{y - \sqrt{z}}$; $\omega_3 = -\sqrt{y + \sqrt{z}}$; $\omega_4 = -\sqrt{y - \sqrt{z}}$. Olhando para as raízes podemos verificar que:

$$\omega_1 = -\omega_3 \quad (4.69)$$

$$\omega_2 = -\omega_4 \quad (4.70)$$

Sendo importante dizer que essas são as energias de excitação do sistema. Como o determinante de α ficará no denominador é mais interessante que escrevamos, não α , mas sim o inverso dele. Portanto, poderemos escrever o determinante em função das raízes usando frações parciais e este poderá ficar da forma da equação abaixo:

$$\frac{1}{\det(\alpha)} = - \left[\frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{\omega + \omega_1} - \frac{1}{\omega - \omega_1} \right) + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{\omega - \omega_2} - \frac{1}{\omega + \omega_2} \right) \right] \quad (4.71)$$

Assim como fizemos no determinante de α faremos o mesmo procedimento para calcular o determinante de α_x , que, suprimindo-se os cálculos por analogia a α , resultará em:

$$\det \alpha_x = \frac{-\Delta_{ab}}{2\pi} [(\omega + E)^2 - F] \quad (4.72)$$

Onde:

$$E = \frac{(\epsilon_k^a - \epsilon_k^b)}{2} \quad (4.73)$$

$$F = \left[\left(\frac{\epsilon_k^a - \epsilon_k^b}{2} \right)^2 + \epsilon_k^a \epsilon_k^b - V_k^2 + \Delta_{ab}^2 \right]^{1/2} \quad (4.74)$$

Agora de posse das equações dos determinantes e utilizando a regra de crammer poderemos encontrar a equação de correlação do gap inter-bandas.

Usando as equações dos determinantes calculados anteriormente termos a função

de Green para os termos requeridos:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle &= \frac{\Delta_{ab}}{2\pi} [(\omega + E)^2 - F^2] \left[\frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \\ &\left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{\omega + \omega_1} - \frac{1}{\omega - \omega_1} \right) + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{\omega - \omega_2} - \frac{1}{\omega + \omega_2} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.75)$$

Observando a eq. 4.7 podemos calcular o gap. Mas, primeiramente teremos que calcular o imaginário da eq. 4.75 o qual, implicitando-se alguns passos, e utilizando a relação do valor principal de Cauchy [77]:

$$\frac{1}{\omega - \omega' \pm i\xi} = P \left(\frac{1}{\omega - \omega'} \right) \mp i\pi\delta(\omega - \omega')$$

ficará:

$$\begin{aligned} Im \left[\langle\langle a_k, b_{-k} \rangle\rangle \right] &= \frac{\Delta_{ab}}{4} [(\omega + E)^2 - F^2] \left[\frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \\ &\left[\frac{1}{\omega_1} (\delta(\omega + \omega_1) - \delta(\omega - \omega_1)) + \frac{1}{\omega_2} (\delta(\omega - \omega_2) - \delta(\omega + \omega_2)) \right] \end{aligned} \quad (4.76)$$

Agora com todas as partes calculadas podemos encontrar a equação de correlação (4.7) calculadas podemos substituí-las o que nos permitirá calcular a equação do gap de acordo com a eq. 4.7, nesta equação teremos que fazer uma integral onde usaremos algumas definições da integral da função delta e finalmente teremos a equação de correlação entre os operadores b_{-k} e a_k ,

$$\begin{aligned} \langle b_{-k} a_k \rangle &= \left[\frac{\Delta_{ab}}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \\ &\left\{ \frac{1}{\omega_1} \left[\tanh \left(\frac{\omega_1 \beta}{2} \right) (\omega_1^2 + E^2 - F^2) \right] - \frac{1}{\omega_2} \left[\tanh \left(\frac{\omega_2 \beta}{2} \right) (\omega_2^2 + E^2 - F^2) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.77)$$

onde, para chegar na eq. 4.77, foi usado a seguinte relação:

$$f_{FD}(-\omega_1) - f_{FD}(\omega_1) = \tanh \left(\frac{\beta\omega_1}{2} \right) \quad (4.78)$$

$$f_{FD}(-\omega_1) + f_{FD}(\omega_1) = 1 \quad (4.79)$$

e com a eq. 4.77 seremos capazes de calcular a equação do gap supercondutor para o caso inter-banda.

4.4 *crossover* BCS-BEC com interações interbandas

De posse da função de correlação de interesse, calcularemos agora a equação do gap auto-consistente para o parâmetro de ordem supercondutor inter-banda. Ao longo de todo esse trabalho, será somente tratado o sistema em temperatura nula $T = 0$ (regime quântico) para ver como a hibridização atua no sistema quando passamos do regime de acoplamento fraco para forte na supercondutividade. Assim, com a relação $\Delta_{ab} = g_{ab} \sum_k \langle b_{-k} a_k \rangle$ calcularemos a equação do gap Δ_{ab} para $T = 0$ com uso da eq. 4.80, onde na situação em que a temperatura tende a zero o termo da tangente hiperbólica tende ao valor unitário. Com essas considerações e substituindo os valores de E e de F das eq. 4.73 e 4.74 na equação 4.77 teremos:

$$\langle b_{-k} a_k \rangle = \left[\frac{\Delta_{ab}}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \left\{ \left[\frac{(\omega_1^2 - \epsilon_k^a \epsilon_k^b + V_k^2 - \Delta_{ab}^2)}{\omega_1} \right] - \left[\frac{(\omega_2^2 - \epsilon_k^a \epsilon_k^b + V_k^2 - \Delta_{ab}^2)}{\omega_2} \right] \right\} \quad (4.80)$$

Para encontrarmos a equação do gap devemos usar a relação 4.7

$$\frac{1}{g_{ab}} = \sum_k \left[\frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \left\{ \left[\frac{(\omega_1^2 - \epsilon_k^a \epsilon_k^b + V_k^2 - \Delta_{ab}^2)}{\omega_1} \right] - \left[\frac{(\omega_2^2 - \epsilon_k^a \epsilon_k^b + V_k^2 - \Delta_{ab}^2)}{\omega_2} \right] \right\} \quad (4.81)$$

Vamos fazer algumas considerações, no que se segue, a respeito da equação do gap e do nosso modelo. Primeiramente será considerado que as bandas são homotéticas, ou seja são diretamente proporcionais por uma constante, da seguinte forma: $\epsilon_k^b = \alpha \epsilon_k^a$.

Outro fator importante é que há uma relação entre as massas das quasi-partículas em cada banda, na banda estreita e na banda larga, e essa relação vale: $\alpha = \frac{m_a}{m_b}$, em que o valor de α geralmente é menor que 1, pois a massa efetiva da banda mais estreita é maior do que a massa efetiva da banda mais larga, aqui sendo representadas pelas bandas b e a , respectivamente.

Vamos considerar a energia da seguinte forma $\epsilon_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$, ou seja, é escolhida como sendo parabólica e μ é o potencial químico devido a troca da partículas entre as bandas estreita e larga, justamente pelo fato da hibridização estar presente no nosso

modelo.

As larguras das bandas serão, assim como as bandas, relacionadas pelo fator α , dado assim $D = \alpha W$, onde W e D se referem as bandas larga (banda a) e estreita (banda b), respectivamente.

É importantíssimo salientar que o número total de partículas é fixo, quer dizer não se altera, logo se somarmos a quantidade de partículas na banda a , n_a , com a quantidade de partículas na banda b , n_b , sempre será o mesmo valor, por mais que as partículas mudem de uma banda para a outra, logo: $N = n_a + n_b = \text{constante}$. E tudo isso é feito para podermos estudar o comportamento da amplitude do gap.

Agora se segue que por definição $\epsilon_k^a \equiv \epsilon = \frac{k^2}{2m} - \mu \Rightarrow \frac{d\epsilon}{dk} = \frac{k}{m} \Rightarrow kdk = md\epsilon$ onde k representa o momento, é importante notar que com essa mudança de variável, temos que os novos limites de integração serão modificados de tal modo que, se $k \rightarrow 0$, $\epsilon \rightarrow -\mu$; e quando $k \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow \infty$. E por sua vez,

$$\frac{k^2}{2m} = \epsilon + \mu \Rightarrow k = \sqrt{2m(\epsilon + \mu)}$$

E com algumas manipulações poderemos reescrever a expressão integral para a equação do gap, no entanto ainda temos um problema de divergência nessa expressão, então antes de reescrevermos vamos tratar desse inconveniente.

A teoria BCS adota um corte natural, para os supercondutores convencionais, para resolver esse problema de divergência, pois nesse caso as interações atrativas são mediadas pelos fônons, e essa atração pode ser limitada em energias menores que a energia de Debye próximo ao nível de Fermi. No entanto, no regime de acoplamentos fortes da supercondutividade, esse corte já não pode ser aceito, uma vez que nesse novo cenário todos os elétrons podem participar na interação, incluindo aqueles fora da camada de energia de Debye. E se for feita toda a soma na nossa expressão geral para o gap, então será encontrada uma divergência que não permite estudar a supercondutividade no regime de acoplamentos fortes via teoria BCS usual. Uma das soluções adotadas na literatura é eliminar essa divergência renormalizando a expressão do gap introduzindo o observável experimental a_s , que é o comprimento de espalhamento das ondas- s . Onde esse parâmetro a_s pode ser positivo ou negativo, e experimentalmente

pode ser observado. Nos trabalhos onde essa renormalização é feita [47] [49], geralmente são tratados sistemas de uma banda de elétrons, e para o qual é utilizada a equação:

$$\frac{m}{4\pi a_s} = -\frac{1}{g_{ab}} + \sum_k f(\alpha) \frac{m}{k^2} \quad (4.82)$$

a qual relaciona o potencial atrativo g_{ab} do sistema de uma banda com a_s além de uma parcela que corrige a divergência ultravioleta na equação do gap. No nosso atual problema de duas bandas, será considerado que essa relação entre o potencial atrativo e a_s permanecerá válida, onde:

$$f(\alpha) = \frac{2}{(1 + \alpha)}$$

O termo $f(\alpha)$ surge pois como devemos fazer a soma em todas os valores de número de onda, quando alcançarmos a região de maior energia (maior número de onda) essa soma irá divergir, ou seja, dizemos que há uma divergência na região do ultravioleta, então renormalizamos a equação do gap para que quando somarmos todos os valores de k sobre apenas a função $f(\alpha)$. Substituindo a eq. 4.82 na eq. 4.81, fazendo algumas manipulações e fazendo uma transformação no somatório, escrito em k , para a forma integral tridimensional, por:

$$\sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k, \quad (4.83)$$

com $d^3k = k^2 \sin(\theta) d(\theta) d(\phi) dk$

dessa forma obtemos uma equação, no entanto não em função do parâmetro g_{ab} , mas em função do parâmetro adimensional $1/k_F a_s$, o qual será a nova constante que mediará a intensidade do acoplamento atrativo do sistema. E efetuando de ante-mão as integrais para as variáveis θ e ϕ que são triviais, a equação ficará:

$$-\frac{1}{k_F a_s} = \int_{-\bar{\mu}}^{\infty} \left\{ \left[\frac{2\sqrt{(x + \bar{\mu})}}{(\bar{\omega}_1^2 - \bar{\omega}_2^2)} \right] \left[\frac{(\bar{\omega}_1^2 - \alpha x^2 + \bar{V}_k^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2)}{2\bar{\omega}_1} - \frac{(\bar{\omega}_2^2 - \alpha x^2 + \bar{V}_k^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2)}{2\bar{\omega}_2} \right] + \right. \\ \left. - \frac{1}{(1 + \alpha)} \frac{1}{\sqrt{(x + \bar{\mu})}} \right\} dk \quad (4.84)$$

Onde os termos com barra em cima estão normalizados pela energia de Fermi E_F .

$$E_F = \frac{k_F^2}{2m}$$

e k_F é o vetor de onda de Fermi. Também definimos uma nova variável de integração que é adimensional.

$$x = \frac{\varepsilon}{E_F} \quad (4.85)$$

Logo, $d\varepsilon = E_F dx$. E lembrando que as energia de excitação também estão normalizadas pela energia de Fermi.

Faremos, igualmente, todo o tratamento que foi feito para a obtenção da equação do gap para encontrarmos a equação do número. Levando em conta que a equação do número é a quantidade de partículas na banda a mais a quantidade de partículas na banda b .

$$N = n_a + n_b \quad (4.86)$$

onde o número de partículas na banda a e na banda b podem ser expressas por:

$$n_a = \langle a_k^\dagger a_k \rangle \quad (4.87)$$

e

$$n_b = \langle b_k^\dagger b_k \rangle \quad (4.88)$$

E como na equação 4.7 a equação da quantidade de partículas na banda a pode ser expressa por:

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f_{FD}(\omega) \text{Im} \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle \quad (4.89)$$

em que o último termo é a função de Green dos operadores a_k^\dagger e a_k . Agora iremos desenvolver a equação de movimento das funções de Green para a equação do número igual ao tratamento feito para a obtenção da equação do gap, mas dessa vez mais resumido. De acordo com a equação de movimento da função de Green:

$$\omega \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \langle \{a_k, a_k^\dagger\} \rangle + \langle \langle [a_k, H], a_k^\dagger \rangle \rangle \quad (4.90)$$

Resolvendo parcela por parcela.

$$[a_k, H] = [a_k, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}) - \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'}) + \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] \quad (4.91)$$

$$[a_k, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'})] = \epsilon_k^a a_k \quad (4.92)$$

$$[a_k, -\Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'})] = -\Delta_{ab} b_{-k}^\dagger \quad (4.93)$$

$$[a_k, \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] = V_k b_k \quad (4.94)$$

$$\frac{1}{2\pi} \langle \{a_k, a_k^\dagger\} \rangle = \frac{1}{2\pi} \quad (4.95)$$

A equação 4.90 resulta em:

$$\omega \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle = \epsilon_k^a \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle + V_k \langle \langle b_k, a_k^\dagger \rangle \rangle + \frac{1}{2\pi} \quad (4.96)$$

Dessa equação iremos encontrar o segundo termo após a igualdade, calculando-o:

$$\omega \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \langle \{b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger\} \rangle + \langle \langle [b_{-k}^\dagger, H], a_k^\dagger \rangle \rangle \quad (4.97)$$

$$[b_{-k}^\dagger, H] = [b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}) - \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'}) + \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] \quad (4.98)$$

$$[b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'})] = -\epsilon_k^b b_{-k}^\dagger \quad (4.99)$$

$$[b_{-k}^\dagger, -\Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'})] = -\Delta_{ab} a_k \quad (4.100)$$

$$[b_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] = -V_k a_{-k}^\dagger \quad (4.101)$$

$$\frac{1}{2\pi} \langle \{b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger\} \rangle = 0 \quad (4.102)$$

O que resulta em:

$$\omega \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle = -\epsilon_k^b \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle - V_k \langle \langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle \quad (4.103)$$

Agora encontraremos outro termo que não conhecemos, a saber:

$$\omega\langle\langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi}\langle\{a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger\}\rangle + \langle\langle [a_{-k}^\dagger, H], a_k^\dagger \rangle\rangle \quad (4.104)$$

onde o comutador será:

$$[a_{-k}^\dagger, H] = [a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}) - \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'}) + \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] \quad (4.105)$$

$$[a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'})] = -\epsilon_k^a b_{-k}^\dagger \quad (4.106)$$

$$[a_{-k}^\dagger, -\Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'})] = +\Delta_{ab} b_k \quad (4.107)$$

$$[a_{-k}^\dagger, \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] = -V_k b_{-k}^\dagger \quad (4.108)$$

$$\frac{1}{2\pi}\langle\{a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger\}\rangle = 0 \quad (4.109)$$

O qual ficará ficará:

$$\omega\langle\langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle\rangle = -\epsilon_k^a \langle\langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle\rangle + \Delta_{ab} \langle\langle b_k, a_k^\dagger \rangle\rangle - V_k \langle\langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle\rangle \quad (4.110)$$

Temos um termo que também não conhecemos nesta equação, que se usando o mesmo procedimento para calculá-lo teremos:

$$\omega\langle\langle b_k, a_k^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi}\langle\{b_k, a_k^\dagger\}\rangle + \langle\langle [b_k, H], a_k^\dagger \rangle\rangle \quad (4.111)$$

$$[b_k, H] = [b_k, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'}) - \Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'}) + \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] \quad (4.112)$$

$$[b_k, \sum_{k'} (\epsilon_{k'}^a a_{k'}^\dagger a_{k'} + \epsilon_{k'}^b b_{k'}^\dagger b_{k'})] = \epsilon_k^b b_k \quad (4.113)$$

$$[b_k, -\Delta_{ab} \sum_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{-k'}^\dagger + b_{-k'} a_{k'})] = \Delta_{ab} a_{-k}^\dagger \quad (4.114)$$

$$[b_k, \sum_{k'} V_{k'} (a_{k'}^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger a_{k'})] = V_k a_k \quad (4.115)$$

$$\frac{1}{2\pi} \langle \{b_k, a_k^\dagger\} \rangle = 0 \quad (4.116)$$

$$\omega \langle \langle b_k, a_k^\dagger \rangle \rangle = \epsilon_k^b \langle \langle b_k, a_k^\dagger \rangle \rangle + \Delta_{ab} \langle \langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle + V_k \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle \quad (4.117)$$

Se organizarmos as quatro equações de movimento calculadas acima teremos:

$$(\omega - \epsilon_k^a) \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle + \Delta_{ab} \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle - V_k \langle \langle b_k, a_k^\dagger \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \quad (4.118)$$

$$(\omega + \epsilon_k^b) \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle + \Delta_{ab} \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle + V_k \langle \langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle = 0 \quad (4.119)$$

$$(\omega + \epsilon_k^a) \langle \langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle b_k, a_k^\dagger \rangle \rangle + V_k \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle = 0 \quad (4.120)$$

$$(\omega - \epsilon_k^b) \langle \langle b_k, a_k^\dagger \rangle \rangle - \Delta_{ab} \langle \langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle - V_k \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle = 0 \quad (4.121)$$

Como foi feito anteriormente, podemos resumir a notação substituindo os termos por letras. então chamando os termos de:

$$A = \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle$$

$$B = \langle \langle b_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle$$

$$C = \langle \langle a_{-k}^\dagger, a_k^\dagger \rangle \rangle$$

$$D = \langle \langle b_k, a_k^\dagger \rangle \rangle$$

Assim como nos casos para calcular a equação do gap, iremos organizar o sistema de equações em matrizes e encontraremos os determinantes das mesmas, por economia subtrairemos as contas dessa parte, pois os cálculos são idênticos aos feitos para a equação do gap, então, se fizermos os determinantes das matrizes de interesse, encontraremos os seguintes, a saber:

$$\det \alpha_x = \frac{1}{2\pi} [\omega^3 + \epsilon_k^b \omega^2 - \gamma \omega - \tau \epsilon_k^a] \quad (4.122)$$

onde:

$$\gamma = (\epsilon_k^b)^2 + V_k^2 + \Delta_{ab}^2 \quad (4.123)$$

e

$$\tau = (\epsilon_k^a \epsilon_k^b + \Delta_{ab}^2 - V_k^2) \epsilon_k^b \quad (4.124)$$

e o determinante de α é idêntico ao da equação 4.71, esse é um fato interessante que o determinante é igual ao calculado anteriormente. Isso se dá pois as raízes desse polinômio

dão o espectro de excitação do sistema, Logo a função de green ficará,

$$\langle\langle a_k, a_k^\dagger \rangle\rangle = \left[\frac{1}{2\pi} [\omega^3 + \epsilon_k^b \omega^2 - \gamma\omega - \tau\epsilon_k^a] \right. \\ \left. \left[\frac{-1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \left[\frac{1}{2\omega_1} \left(\frac{1}{\omega + \omega_1} - \frac{1}{\omega - \omega_1} \right) + \frac{1}{2\omega_2} \left(\frac{1}{\omega - \omega_2} - \frac{1}{\omega + \omega_2} \right) \right] \right] \quad (4.125)$$

E como já foi feito, iremos calcular o imaginário da função de Green obtida, então teremos:

$$Im\langle\langle a_k, a_k^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{2} [\omega^3 + \epsilon_k^b \omega^2 - \gamma\omega - \tau\epsilon_k^a] \left[\frac{-1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \\ \left[\frac{1}{2\omega_1} (\delta(\omega + \omega_1) - \delta(\omega - \omega_1)) + \frac{1}{2\omega_2} (\delta(\omega - \omega_2) - \delta(\omega + \omega_2)) \right] \quad (4.126)$$

e assim utilizando a eq. 4.7 que é a equação de correlação, temos:

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{FD}(\omega) [\omega^3 + \epsilon_k^b \omega^2 - \gamma\omega - \tau\epsilon_k^a] \\ \left[\frac{-1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \right] \left[\frac{1}{\omega_1} (\delta(\omega + \omega_1) - \delta(\omega - \omega_1)) + \frac{1}{\omega_2} (\delta(\omega - \omega_2) - \delta(\omega + \omega_2)) \right] d\omega \quad (4.127)$$

Logo, realizando a integral, o resultado final será:

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\left(\epsilon_k^a \omega_1 - \frac{\tau}{\omega_1} \right) tgh \left(\frac{\omega_1 \beta}{2} \right) - \left(\epsilon_k^a \omega_2 - \frac{\tau}{\omega_2} \right) tgh \left(\frac{\omega_2 \beta}{2} \right) \right] \right\} \quad (4.128)$$

A eq. 4.128 é a equação do número para a banda a que representa a quantidade de partículas na banda a . Agora tomaremos, para obter a equação do número para a banda b , a mesma conduta tomada para encontrar a equação do número para a banda a , portanto tomarei a liberdade de colocar somente o resultado mais importante:

$$\langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left[\left(\epsilon_k^b \omega_1 - \frac{\Upsilon}{\omega_1} \right) tgh \left(\frac{\omega_1 \beta}{2} \right) - \left(\epsilon_k^b \omega_2 - \frac{\Upsilon}{\omega_2} \right) tgh \left(\frac{\omega_2 \beta}{2} \right) \right] \right\} \quad (4.129)$$

onde:

$$\Upsilon = (\epsilon_k^a \epsilon_k^b + \Delta_{ab}^2 - V_k^2) \epsilon_k^a \quad (4.130)$$

Neste momento podemos somar as duas bandas e assim obter a equação para número

total de partículas

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle + \langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left\{ \left(\frac{(\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)(\omega_1^2 - \Delta_{ab}^2 + V_k^2) - \epsilon_k^a \epsilon_k^b (\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)}{\omega_1} \right) \operatorname{tgh} \left(\frac{\omega_1 \beta}{2} \right) - \left(\frac{(\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)(\omega_2^2 - \Delta_{ab}^2 + V_k^2) - \epsilon_k^a \epsilon_k^b (\epsilon_k^a + \epsilon_k^b)}{\omega_2} \right) \operatorname{tgh} \left(\frac{\omega_2 \beta}{2} \right) \right\} \quad (4.131)$$

Todas as condições e definições tomadas para o gap serão repetidas para a equação do número, como por exemplo, a temperatura nula, as bandas homotéticas e etc. Lembrando que a equação do número é dado pela equação 4.86 , portanto ficamos com a eq. 5, onde é importante lembrar que os termos com barra em cima estão normalizados por E_F :

$$N = \frac{k_F^3}{4\pi} \int_{-\bar{\mu}}^{\infty} \sqrt{x + \bar{\mu}} dx - \frac{k_F^3}{4\pi} \int_{-\mu}^{\infty} \frac{x}{\bar{\omega}_1^2 - \bar{\omega}_2^2} \left\{ \frac{(1 + \alpha)(\bar{\omega}_1^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2 + \bar{V}_k^2 - \alpha x^2)}{\bar{\omega}_1} + \frac{(1 + \alpha)(\bar{\omega}_2^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2 + \bar{V}_k^2 - \alpha x^2)}{\bar{\omega}_2} \right\} \sqrt{x + \bar{\mu}} dx \quad (4.132)$$

A partir desse momento serão resolvidas, simultaneamente, as equações do gap e a do número, ambas já calculadas. Com isso seremos capazes de estudar o comportamento do sistema em todas as suas regiões de interesse levando em consideração a interação atrativa, passando pelo regime de acoplamentos fracos e até o regime de acoplamentos fortes. Dessa forma aspiramos encontrar mudanças no comportamento através da amplitude do gap e do potencial químico em uma dada área de interações, onde permitirá ser visto o crossover entre os dois limites.

Resultados e considerações finais

Neste capítulo será feito uso das equações de gap interbanda e do número obtidas no capítulo anterior, e por meio delas serão construídos os gráficos do parâmetro de ordem em função do acoplamento e do potencial químico em função do acoplamento ambos os analisados com a influência da hibridização. Vale lembrar que a equação para o gap supercondutor e a equação para o número, ambas calculadas, valem, respectivamente:

$$-\frac{1}{k_F a_s} = \int_{-\bar{\mu}}^{\infty} \left\{ \left[\frac{\sqrt{(x + \bar{\mu})}}{2(\bar{\omega}_1^2 - \bar{\omega}_2^2)} \right] \left[\frac{(\bar{\omega}_1^2 - \alpha x^2 + \bar{V}_k^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2)}{\bar{\omega}_1} - \frac{(\bar{\omega}_2^2 - \alpha x^2 + \bar{V}_k^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2)}{\bar{\omega}_2} \right] + \right. \\ \left. - \frac{1}{(1 + \alpha)} \frac{1}{\sqrt{(x + \bar{\mu})}} \right\} dx$$

e

$$N = \frac{k_F^3}{4\pi} \int_{-\bar{\mu}}^{\infty} \sqrt{x + \bar{\mu}} dx - \frac{k_F^3}{4\pi} \int_{-\bar{\mu}}^{\infty} \frac{x}{\bar{\omega}_1^2 - \bar{\omega}_2^2} \left\{ \frac{(1 + \alpha)(\bar{\omega}_1^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2 + \bar{V}_k^2 - \alpha x^2)}{\bar{\omega}_1} + \right. \\ \left. - \frac{(1 + \alpha)(\bar{\omega}_2^2 - \bar{\Delta}_{ab}^2 + \bar{V}_k^2 - \alpha x^2)}{\bar{\omega}_2} \right\} \sqrt{x + \bar{\mu}} dx$$

onde:

$$\bar{\omega}_1 = +\sqrt{\bar{y} + \sqrt{\bar{z}}};$$

$$\bar{\omega}_2 = +\sqrt{\bar{y} - \sqrt{\bar{z}}}$$

e, por sua vez:

$$\bar{y} = \frac{(\alpha x^2 + x^2)}{2} + (\bar{\Delta}_{ab}^2 + \bar{V}_k^2)$$

e

$$\bar{z} = \left[\frac{(\alpha x^2 + x^2)}{2} + (\bar{\Delta}_{ab}^2 + \bar{V}_k^2) \right]^2 - [\alpha x^2 + (\bar{\Delta}_{ab}^2 - \bar{V}_k^2)]^2$$

Nota-se que a integral deve ser feita até o infinito e para isso observaremos o gráfico do integrando da eq. 5 do gap e da eq.5 do número para saber até onde irá esse infinito fisicamente.

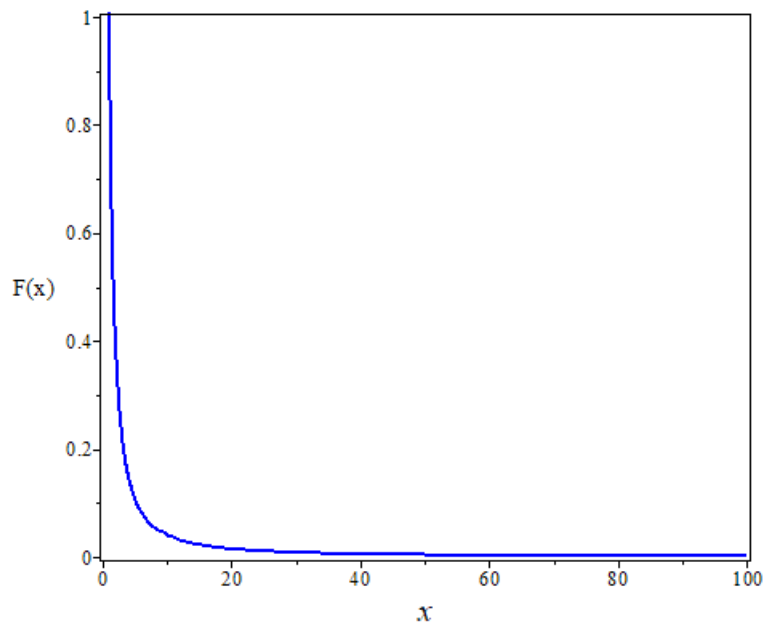


Figura 5.1 - Como a função do integrando da equação do gap se comporta

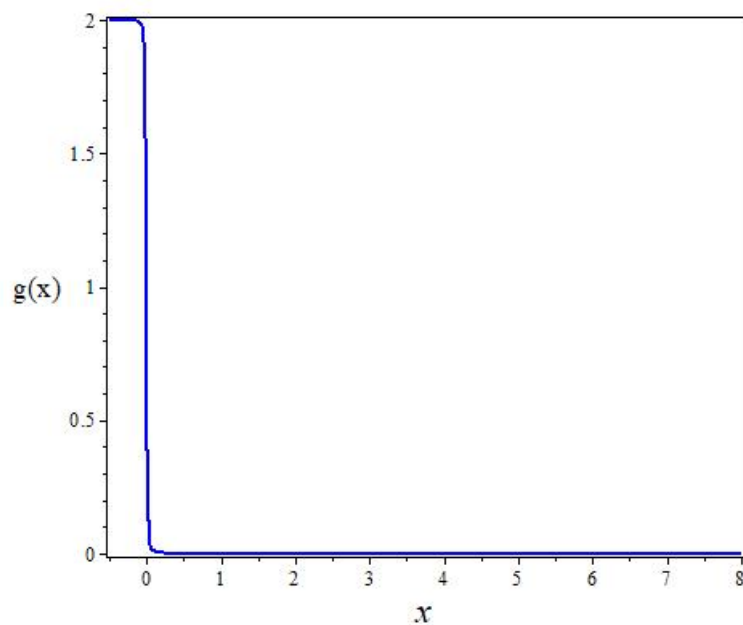


Figura 5.2 - Como a função do integrando da equação do número se comporta

Nas fig. 5.1 e fig. 5.2 são observados os comportamentos das funções que representam o integrando da equação do gap supercondutor e do número e é visto que a curva vai a praticamente zero próximo a 100, portanto a integral poderá ser feita até 1000 pois é

um valor razoável para infinito uma vez que após esse valor a curva não contribuirá mais para a integral.

Primeiro veremos como as soluções para a amplitude do gap supercondutor interbanda se comportam variando os valores de α , a razão entre as massas das duas bandas.

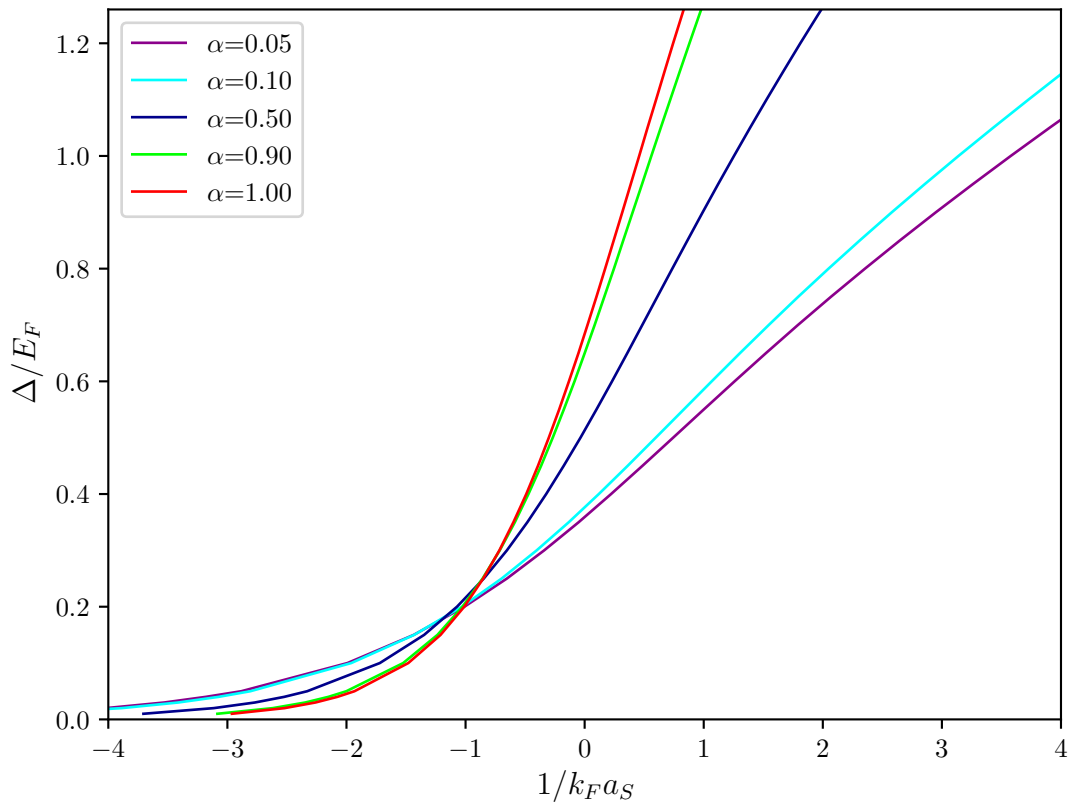


Figura 5.3 - Como a função do gap interbanda varia com α

Na fig. 5.3 vemos como a razão entre as massas das quasi-partículas nas suas respectivas bandas afeta a variação do gap, partindo de um valor de α bem pequeno, ou seja, a massa das quasi-partículas na banda estreita é muito maior, até um valor de α próximo de 1. Observa-se que a mudança de α tem como consequência a mudança na variação da magnitude da amplitude do gap supercondutor. No entanto, tanto para razão entre as massas das quasi-partículas muito pequena, quanto para a razão entre as massas das quasi-partículas próximo de 1 a amplitude do gap se altera de uma forma bem parecida. Portanto, será usado o valor de α igual a 0,5, pois será possível observar a evolução que ocorre entre os limites $-1 \leq 1/k_F a_s \leq +1$.

É importante destacar que o limite entre acoplamentos fracos BCS e acoplamentos fortes BEC é mediado pelo parâmetro $1/k_F a_s$. O limite de acoplamentos fracos BCS está compreendida na região $0 \leq 1/k_F a_s$, por sua vez o limite de acoplamentos fortes BEC está compreendida na região $1/k_F a_s \geq 0$. Agora veremos como o gap varia em função do parâmetro $1/k_F a_s$.

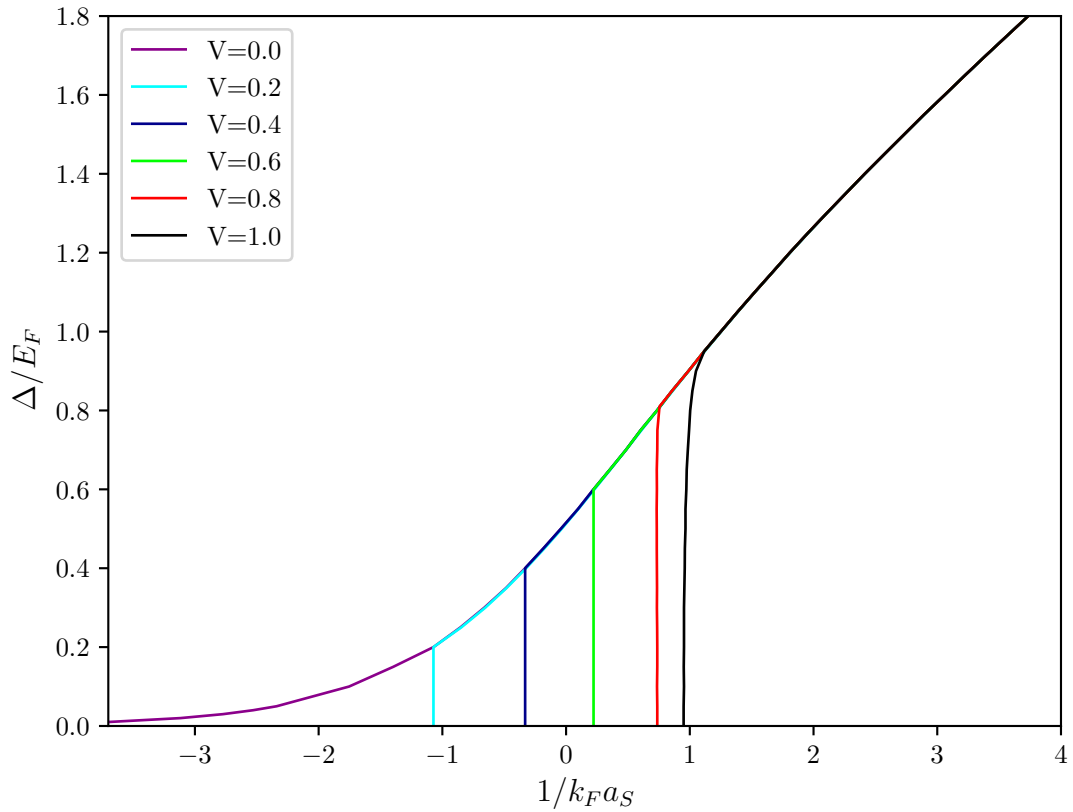


Figura 5.4 - Como a função de gap interbanda se comporta para diferentes valores de hibridização para $\alpha = 0.5$

Na fig. 5.4 podemos observar que para hibridização nula $V = 0$, no limite de acoplamentos fracos BCS, a magnitude da energia de Fermi é bem maior que o gap supercondutor e tem um comportamento parecido com o BCS típico onde o gap obedece uma lei exponencial. E com o aumento da hibridização no sistema, ou seja, para $V > 0$ ainda no limite BCS, a amplitude do gap supercondutor continua obedecendo uma lei exponencial, no entanto, com amplitudes cada vez menores em comparação com o caso não hibridizado, logo podemos afirmar que a hibridização atua também como um agente que não corrobora com o estado supercondutor no limite de acoplamentos fracos BCS. Outro ponto importante reside no fato de que há uma convergência nas soluções dos

diferentes valores de V positivo, portanto o gap supercondutor independe da hibridização quando $1/k_F a_s \rightarrow +\infty$. Outro fato interessante se refere ao comportamento da amplitude do gap supercondutor que deixa de ser exponencial e passa a ser do tipo lei de potência para todo valor de V . Além disso para hibridização nula $V = 0$ o gap supercondutor tem uma evolução suave e contínua, contudo para a hibridização maior que zero $V > 0$ as soluções apresentam descontinuidades indicando transições de 1º ordem em toda região de interação. E para $V > 0.4$ a transição começa a ser vista já na região de acoplamentos fortes, embora ainda seja observada uma descontinuidade na amplitude do gap supercondutor. Por fim podemos dizer que o aumento da hibridização destrói a supercondutividade. Agora avaliaremos como o potencial químico se relaciona com o parâmetro $1/k_F a_s$.

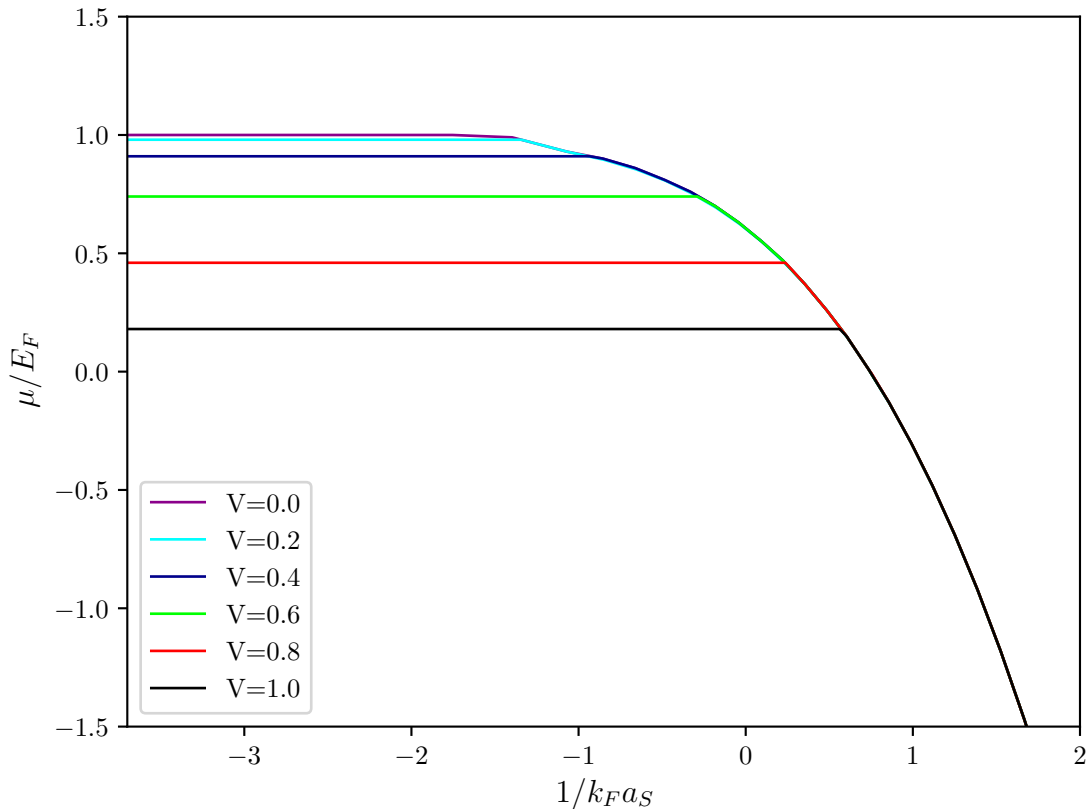


Figura 5.5 - Como o potencial químico se comporta para diferentes valores de hibridização para $\alpha = 0.5$

Na fig. 5.5 somos capazes de perceber que, na região de acoplamentos fracos BCS para a hibridização nula $V = 0$, o potencial químico quase não é alterado, e não é diferente da energia de Fermi, sendo igual a unidade. Conforme a hibridização aumenta

o potencial químico tende a diminuir para manter o número de partículas total fixo. Já para $V > 0$ ainda no limite BCS, o potencial químico permanece constante, contudo agora com soluções de $\mu < 1$. E quando estamos na região de acoplamentos fortes, o potencial químico, o qual já estava diminuindo suavemente para manter o número total de elétrons fixo, se torna 0 e vira negativo. Além de tudo isso, conseguimos notar que há uma convergência para o potencial químico independente do valor da hibridização V .

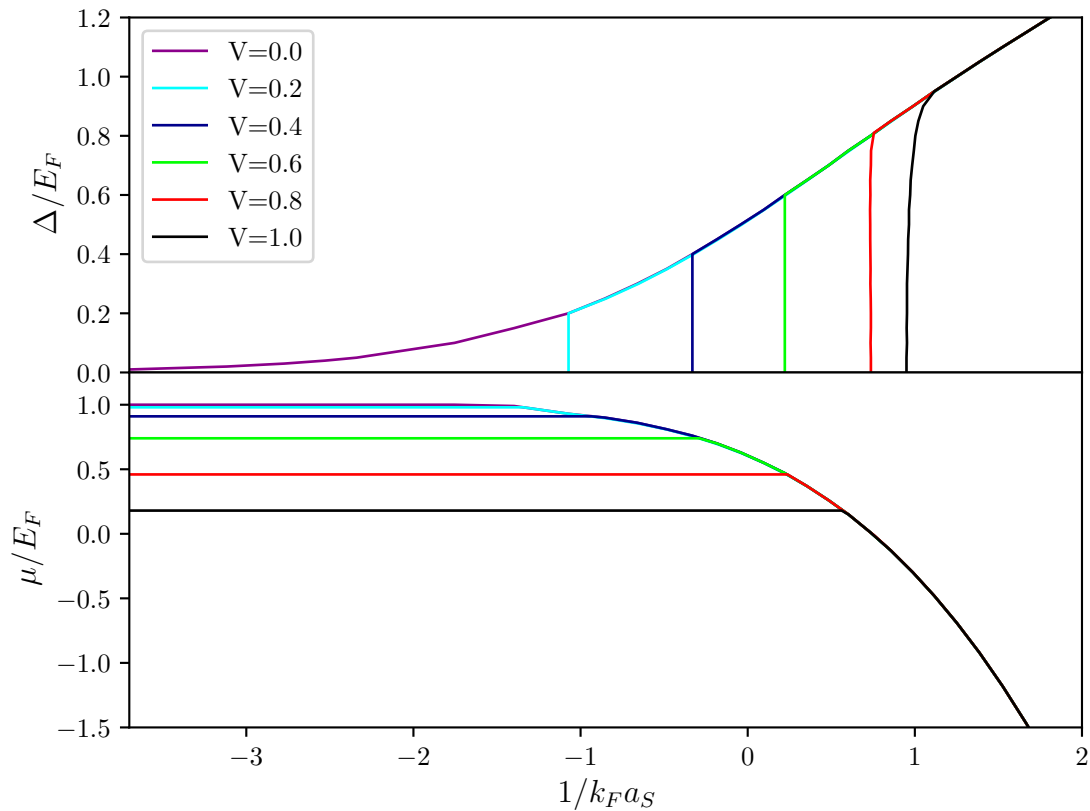


Figura 5.6 - Comparação entre os comportamentos do Gap e do potencial químico em função do parâmetro supercondutor

Na fig. 5.6 Percebemos a relação entre o crossover BCS-BEC e a mudança de comportamento do potencial químico. Podemos notar que quando passamos do limite de acoplamentos fracos BCS para o limite de acoplamentos fortes BEC o potencial químico deixa de ser constante e passa a decair, zero e passa a ser inclusive negativo para compensar o número de partículas.

Portanto, concluímos neste trabalho que a hibridização traz discontinuidades para o parâmetro de ordem supercondutor interbanda, o gap, para valores diferentes de zero da hibridização normalizada pela energia de fermi, como também é perceptível que para

quaisquer valores da hibridização o gap não é influenciado por esses na região $1/k_f a_s \rightarrow +\infty$ e o mesmo pode ser afirmado para o potencial químico que tendem para um comportamento único. Ainda podemos afirmar que a hibridização é responsável por fazer o gap começar em regiões de acoplamentos diferentes e quanto maior a hibridização mais o gap inicia na região de acoplamentos fortes. Por fim, o crossover entre essas regiões é consideravelmente afetado pela hibridização que quanto maior mais é deslocado para a região de acoplamentos fortes.

Pretendemos, mais adiante, como perspectiva, estudar os efeitos que a hibridização tem no sistema como um todo para valores de temperaturas diferentes de zero, com o efeitos de estar mais próximo de situações reais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Charles Kittel. *Introdução à Física do estado sólido*, volume único. Traduzido: Guanabara Dois S. A., Rio de Janeiro, 5st edition, 1978.
- [2] N. David Ashcroft, Neil W.; Mermin. *Solid state physics*, volume único. College University, EUA, 1976.
- [3] M. Silaev J.M. Speight E. Babaev, J. Carlström. Type-1.5 superconductivity in multicomponent systems. *Physica C*, 533(20):20 – 35, 2017.
- [4] S. D. Fernanda. Contribuições para as propriedades de transporte em sistemas de muitos corpos. Master's thesis, Universite Joseph Fourier, 2015.
- [5] T. KoonHoo L. Chungwei, W. Bingnan. The role of local repulsion in superconductivity in the hubbard–holstein model. *Physica C*, 532(27):27 – 32, 2017.
- [6] I. Bonalde A .A . Schmidt D.A. Peraza-Salcedo, J.J. Rodríguez-Núñez. Superconductivity in an attractive two-band hubbard model with second nearest neighbors. *Physica C*, 535(9):9 – 12, 2017.
- [7] M A Continentino, Igor T Padilha, and Heron Caldas. Mechanism for enhancement of superconductivity in multi-band systems with odd parity hybridization. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2014(7):15, 2014.
- [8] P. D. Sacramento e M. A. Continentino T. O. Puel. Effect of hybridization symmetry on topological phases of odd-parity multiband superconductors. *Journal of Statistical Mechanics*, 7(9):9 – 12, 2017.
- [9] Ranga P. Dias and Isaac F. Silvera. Observation of the wigner-huntington transition to metallic hydrogen. *Science*, 2017.

- [10] N. W. Ashcroft. Metallic hydrogen: A high-temperature superconductor. *Phys. Rev. Lett*, 26(1748):1748–1749, 1968.
- [11] I. A. Troyan V. Ksenofontov A. P. Drozdov, M. I. Erements and S. I. Shylin. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. *Nature*, 525(7567):73–76, 2015.
- [12] portal.cbpf. *portal.cbpf*. 2014.
- [13] H. K. Onnes. *Phys. Lab. Univ. Leiden*, 12(119,120, 122), 1911.
- [14] L. M.; Cavalcanti C. J. H. Ostermann, F. ; Ferreira. *Supercondutividade: uma proposta de inserção no ensino médio*, volume único. Instituto de Física-UFRGS, Porto Alegre, 8st edition, 1998.
- [15] W. Meissner; R. Ochsenfeld. *Naturwissenschaften*, 21(787):787–789, 1933.
- [16] B. B. Goodman. Type ii supercondutors. *Rep. Prog. Phys.*, 29(445):445–487, 1966.
- [17] F. London ; H. London. *Physica*, 2(341):341–342, 1935.
- [18] V. L. Ginzburg; L. Landau. *Zhurnal Eksperimental'noi I Teoreticheskoi Fiziki*, 20(1064), 1950.
- [19] J. Bardeen; L. N. Cooper; J. R. Schrieffer. *Phys. Rev.*, 108(1175), 1957.
- [20] I. S. Oliveira. *Introdução a Física do estado Sólido*, volume único. Livraria da Física, São PAulo, 1a edition, 2005.
- [21] Rajiv R. P. Singh and George A. Baker. Constructive method for calculating the conformal charge. *Phys. Rev. Lett.*, 66:1–4, Jan 1991.
- [22] E. Maxwell. *Phys. Rev.*, 78(477), 1950.
- [23] A. Bill; V. Z. Kresin; S. A. Wolf. The isotope effect in superconductors. *arXiv:cond-mat/9801222*, (477):1 – 31, 1998.
- [24] James William Rohlf. *Modern Physics from a to Z0*, volume único. Wiley, New York, 1994.

- [25] K. A. Müller J. G. Bednorz. Possible high- T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Phys. B*, 64(2):189–193, 1986.
- [26] Paulo Puro. *Supercondutividade*, volume único. Livraria da Física, São Paulo, 1st edition, 2005.
- [27] C. P. Poole. *Handbook of Superconductivity*, volume único. Academic Press, San Diego, 2000.
- [28] Chang-Yan Wang e Yan He. BCS-BEC crossover of spin polarized Fermi gases with Rashba spin-orbit coupling. *Phys. Lett. A*, 29(379):3089, 2015.
- [29] L. G. Sarason and M. A. Continentino. Superconductivity and excitonic state in a two-band model. *Phys. Rev. B*, 65(184503), 2002.
- [30] Nagamatsu J. et al. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride. *Nature*, 410(63-64), 2001.
- [31] C. J. Torng P. H. Hor R. L. Meng L. Gao Z. H. Huang Y. Q. Wang and C. W. Chu M. K. Wu, J. R. Ashburn. K superconductivity and high upper critical field - 165 T in YBCO. *Phys. Rev. Lett.*, 58(908), 1987.
- [32] A. J. Leggett. *Introduction to solid state physics*, volume único. (Springer-Verlag; J. Phys., Paris, 7th-19th edition, 1980).
- [33] D. M. Eagles. Possible pairing without superconductivity at low carrier concentrations in bulk and thin-film superconducting semiconductors. *Phys. Rev.*, 186:456–463, Oct 1969.
- [34] B. T. Matthias H. Suhl and L. R. Walker. Bardeen-Cooper-Schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands. *Phys. Rev. Lett.*, 3(552), 1959.
- [35] M. Iskin and C. A. R. Sá de Melo. Two-band superfluidity from the BCS to the BEC limit. *Phys. Rev. B*, 74:144517, Oct 2006.
- [36] W. Vincent Liu and Frank Wilczek. Interior gap superfluidity. *Phys. Rev. Lett.*, 90:047002, Jan 2003.

- [37] Paulo F. Bedaque, Heron Caldas, and Gautam Rupak. Phase separation in asymmetrical fermion superfluids. *Phys. Rev. Lett.*, 91:247002, Dec 2003.
- [38] D. J. Van Harlingen. Phase-sensitive tests of the symmetry of the pairing state in the high-temperature superconductors 22 evidence for dx²-y² symmetry. *Rev. Mod. Phys.*, 67:515–535, Apr 1995.
- [39] Márcio Gomes da. Silva. *Efeitos da hibridização e do campo magnético externo na Supercondutividade de Modelos Multibandas*. PhD thesis, Universidade Federal de São Carlos, 2015.
- [40] C. Lacroix C. Bastide and A. da Rosa Simoes. S-wave superconductivity with strong local repulsion.
- [41] A. Nicholson e E. Dagotto M. Adriana, M. Daghofer. Interband pairing in multiorbital systems.
- [42] A. Hackl and M. Vojta. Pressure-induced magnetic transition and volume collapse in fea superconductors: an orbital-selective mott scenario. *New Journal of Physics* 11, 11(055064), 2009.
- [43] Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, and H. Yamochi. Basic similarities among cuprate, bismuthate, organic, chevrele-phase, and heavy-fermion superconductors shown by penetration-depth measurements. *Phys. Rev. Lett.*, 66:2665–2668, May 1991.
- [44] V. J. Emery and S. A. Kivelson. Superconductivity in bad metals. *Phys. Rev. Lett.*, 74:3253–3256, Apr 1995.
- [45] Schmitt-Rink P. NozièresS. Bose condensation in an attractive fermion gas: From weak to strong coupling superconductivity. *Journal of Low Temperature Physics*, 59(3-4):195–211, 1985.
- [46] C. A. R. Sá de Melo, Mohit Randeria, and Jan R. Engelbrecht. Crossover from bcs to bose superconductivity: Transition temperature and time-dependent ginzburg-landau theory. *Phys. Rev. Lett.*, 71:3202–3205, Nov 1993.

- [47] Egor Babaev. Thermodynamics of the crossover from weak- to strong-coupling superconductivity. *Phys. Rev. B*, 63:184514, Apr 2001.
- [48] D. E. Sheehy and L. Radzihovsky. BEC BCS crossover, phase transitions and phase separation in polarized resonantly-paired superfluids. *Annals of Physics*, 322:1790–1924, August 2007.
- [49] C. A. R. Sá de Melo, Mohit Randeria, and Jan R. Engelbrecht. Crossover from bcs to bose superconductivity: Transition temperature and time-dependent ginzburg-landau theory. *Phys. Rev. Lett.*, 71:3202–3205, Nov 1993.
- [50] Qijin Chen, Jelena Stajic, Shina Tan, and Kathryn Levin. Bcs–bec crossover: From high temperature superconductors to ultracold superfluids. *Physics Reports*, 412(1):1–88, 2005.
- [51] W; Zwerlein M Randeria, Mohit; Zwerger. The bcs-bec crossover and the unitary fermi gas. In *The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas*, pages 1–32. Springer, 2012.
- [52] Ricardo Romano. Estrutura e modelos de ligaÇÃo química para semiiondutores iii-v e ii-vi, 2007.
- [53] S. R. ELLIOTT. *The physics and chemistry of solids*, volume único. John Wiley Sons, New York, 2000.
- [54] O. L. T. de Menezes. Hybridization effect in superconductors. *Solid State Communications*, 56(9):799–801, 1985.
- [55] Mucio A. Continentino Gloria M. Japiassú and Amós Troper. On the k-dependence of the hybridization in two-band superconductors. *Journal of Applied Physics*, 73(10):6648–6650, 1993.
- [56] P.V. Sreenivasa Reddy; V. Kanchana; T.E. Millichamp; G. Vaitheeswaran; S.B. Dugdale. Enhanced superconductivity in the high pressure phase of snas studied from first principles. *Physica B: Condensed Matter*, 505:33–40, 2017.
- [57] J.G. Lin; K. Matsuishi; Y.Q. Wang; Y.Y. Xue; P.H. Hor; C.W. Chu. *Physica C: Superconductivity*, 175(5-6):627–633, 1991.

- [58] esniak R. Szcz, esniak; T.P. Zemła; D. Szcz. Superconducting state in bromium halide at high pressure. *Physica B*, 495:106–116, 2016.
- [59] A. I. Larkin e Yu N. Ovchinnikov. *Sov. Phys. JETP*, 20(762), 1965.
- [60] L. Mathey; S.W. Tsai; A. H. Castro Neto. Superconductivity. *Phys. Rev. Lett*, 97(030601), 2006.
- [61] J. W. Clark e M. Alford A. Sedrakian. Pairing in fermionic systems. *Editado por World Scientific Singapore*, 2006.
- [62] JR. Casalbuoni e G. Nardulli. Pressure effect on the superconducting transition temperature of $\text{tl}_2\text{can-1ba}_2\text{cuno}_{2n+4}\text{-it}$. *Rev. Mod. Phys.*, 76(263), 2004.
- [63] X. Hao e P. Zhuang X. Huang. *Int. j. Mod. Phys. E*, 16(2307), 2007.
- [64] A. A. Abrikosov. Experimente in superconductivity. *Rev. Mod. Phys.*, 51(1174), 1957.
- [65] A. M. Luiz. Aplicações da supercondutividade. *Editada Edgard Blucher Ltda*, São Paulo(1174), 1992.
- [66] Alessandro A Mazzola. Ressonância magnética: princípios de formação da imagem e aplicações em imagem funcional. *Revista Brasileira de Física Médica*, 3(1):117–129, 2009.
- [67] P. S. Branício. Introdução à supercondutividade, suas aplicações e a mini-revolução provocada pela redescoberta do mgb_2 : Uma abordagem didática. *Rev. Bras. de Ens. de Fís.*, 23(73):381, 2001.
- [68] Marcos Vieira Teixeira. O método das funções de green. *Revista Brasileira de História da Matemática*, 7(13):527–536, 2007.
- [69] Márcio de Melo Freire. Funções de green em mecânica estatística. Master's thesis, Universidade Federal do Ceará, 2014.
- [70] S. V. Bonch-Bruевич, V. L.; Tyablikov. *The Green Function Method in Statistical Mechanics*. North Holland Pub. co., Amsterdam, 1962.

- [71] D. N. Zubarev. Double-time green function in statistical physics. *Soviet Physics:Uspekhi*, 3(3):320–345, 1960.
- [72] Hugo N. Nazareno. *Mecânica estatística e funções de Green*, volume único. Editora Universidade de Brasília, Brasília, 2st edition, 2010.
- [73] Eugene Butkov. *Mathematical Physics*. St. John’s University, New York, 1960.
- [74] James Ward Brown et al. Complex variables and applications. *Phys. Rev. Lett.*, 71, 2009.
- [75] F. D. Neto. *Supercondutividade em Modelos Multi-bandas: Crossover BCS-BEC, Potencial Repulsivo e Aplicações*. PhD thesis, Universidade Federal Fluminense, 2011.
- [76] K. Arii; Y. Kamihara; M. Hirano; H. Takahashi; K. Igawa and H. Hosono. Bcs-bec crossover and the unitary fermi gas. *Nature*, 453(376), 2008.
- [77] Geraldo Ávila. *Variáveis complexas e aplicações*, volume único. LTC, Rio de Janeiro, 3st edition, 2008.