

Supercondutividade não-convencional

Mateus Marques

7 de julho de 2023

Supercondutores que vemos por aí

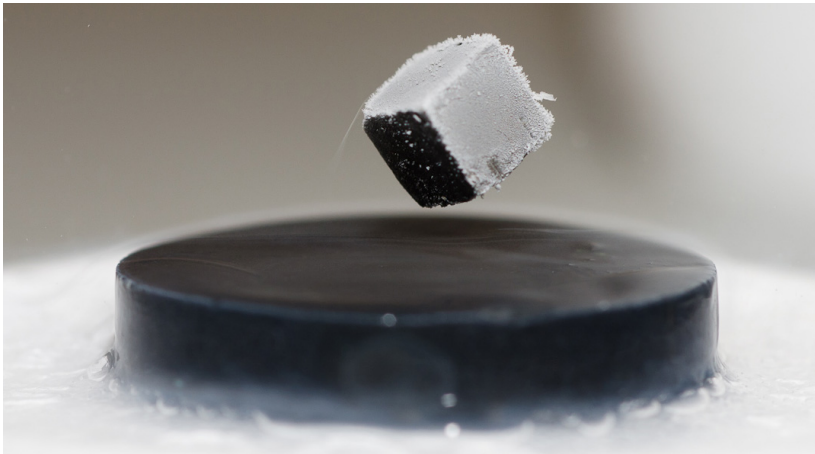


Figura 1: Supercondutor de cuprato levitando sobre um ímã pelo efeito Meissner.

Diferentes supercondutores

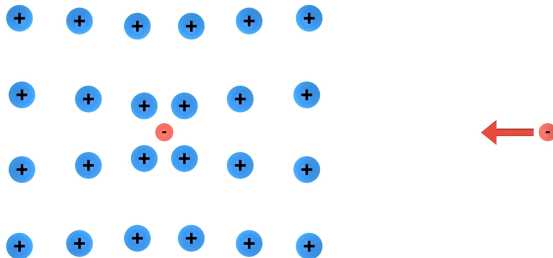
Exemplos de supercondutores/superfluidos			
Supercondutor	Simetria	$T_c \approx$	Categoria
Hg	s-wave	4.2 K	BCS
MgB ₂	s-wave	39 K	BCS
³ He	p-wave	2.5 mK	Superfluido
Sr ₂ RuO ₄	p-wave	0.93 K	—
YBCO	d-wave	93 K	Cuprato
BSCCO-2223	d-wave	108 K	Cuprato
UPt ₃	f-wave	0.51 K	Heavy-Fermion
K ₃ C ₆₀	—	18 K	Orgânico
LaO _{1-x} F _x FeAs	—	26 K	Ferro
MATBG	—	1.7 K	Grafeno

Objetivos

- Passar uma ideia introdutória de como generalizar a teoria BCS para estudar a **fenomenologia** da supercondutividade não-convencional.
- A inclusão de interações repulsivas e magnéticas causam anisotropia na função de gap.
- Entender a distinção básica das diferentes simetrias (jargão) s, p, d, f-wave.
- Existem mecanismos além dos fônons que geram interações atrativas?
- Foco específico nos cupratos e na simetria d-wave.

Hipóteses da teoria BCS

- O estado normal é um líquido de Fermi (metal).
- Elétrons formam pares de Cooper pela interação atrativa mediada por fônons.



- Os pares de Cooper são bósons e condensam num estado coerente, formando um superfluido carregado.
- Dispersão $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}$, onde o gap Δ não depende de \mathbf{k} (esfericamente simétrico, ou s-wave).

Equação do Gap

Aproveitaremos parte do formalismo da teoria BCS. O raciocínio ainda se baseia na formação de pares de Cooper. Consideremos uma interação do tipo BCS

$$H_I = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}).$$

Se definirmos o gap $\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle$ e aplicarmos o procedimento de campo médio $AB \simeq A \langle B \rangle + B \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$, generalizamos a equação do gap

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right). \quad (1)$$

Devido ao sinal negativo acima, se $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ não for sempre negativo, a função de gap $\Delta_{\mathbf{k}}$ poderá ser negativa em alguns pontos, de maneira a surgirem nós. Esse fenômeno acontece em várias classes de supercondutores: orgânicos, heavy-fermion, cupratos e baseados em ferro.

Anisotropia

Tendo em mente que queremos capturar os nós da função de gap, faremos considerações gerais sobre potenciais para estudar como a anisotropia pode surgir. Consideremos dois potenciais, um potencial repulsivo genérico

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \sigma'} c_{\mathbf{k}_1, \sigma},$$

e um magnético

$$V_{\text{mag}} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{q}}.$$

Analisaremos primeiro o potencial repulsivo V .

Potencial repulsivo (1)

Como estamos interessados na projeção nos pares de Cooper (momento total zero), consideramos que $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'$, $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} = -(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) = \mathbf{k}$ e $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$. A interação resultante geral pode ser separada em termos de acordo com os spins

$$V_{BCS} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \sigma, \sigma'}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}\sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}'\sigma} = V_{BCS}^{\uparrow\downarrow} + V_{BCS}^{\uparrow\uparrow} + V_{BCS}^{\downarrow\downarrow}.$$

Foquemos primeiramente no termo mais familiar

$$V_{BCS}^{\uparrow\downarrow} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}}.$$

Paridade e troca de spin

Consideremos as propriedades de paridade P e spin exchange X da função de onda $F(\mathbf{k})_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{k}\alpha, -\mathbf{k}\beta | \mathbf{k}_P \rangle$ do par de Cooper, definidas por

$$PF(\mathbf{k})_{\alpha\beta} = F(-\mathbf{k})_{\alpha\beta},$$

$$XF(\mathbf{k})_{\alpha\beta} = F(\mathbf{k})_{\beta\alpha}.$$

O operador de troca de spin distingue singletos $X = -1$ de tripletos $X = +1$.

Obs: Lembremos que um par de spins $|\uparrow\downarrow\rangle$ não é singleto nem tripleto. De fato, o singleto é $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ e o tripleto é composto por $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$, $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$.

Se aplicarmos X e P em $\langle \mathbf{k}\alpha, -\mathbf{k}\beta | \mathbf{k}_P \rangle$ estaremos trocando os dois férmions que compõem o par, adquirindo uma fase -1 . Portanto, $XP = -1$ no subespaço dos pares de Cooper.

Temos então que pares com paridade par são singletos $(P, X) = (+, -)$ e com paridade ímpar são tripletos $(P, X) = (-, +)$.

Singlete e tripleto

Com autovalores dos operadores P e X em mente, podemos decompor a interação em partes simétrica (par, singlete) e antissimétrica (ímpar, tripleto):

$$V_{BCS}^{\uparrow\downarrow} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\overbrace{\left(\frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^S + V_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^S}{2} \right)}^{V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^S} + \overbrace{\left(\frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^T - V_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^T}{2} \right)}^{V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^T} \right] \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{k}}.$$

O primeiro termo acima espalha singletos e o segundo tripletos, representados por

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{S\dagger} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + c_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}), \quad \Psi_{\mathbf{k}}^{S\dagger} = +\Psi_{-\mathbf{k}}^{S\dagger},$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{T\dagger} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - c_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}), \quad \Psi_{\mathbf{k}}^{T\dagger} = -\Psi_{-\mathbf{k}}^{T\dagger}.$$

E escrevemos

$$V_{BCS}^{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^S \Psi_{\mathbf{k}}^{S\dagger} \Psi_{\mathbf{k}'}^S + V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^T \Psi_{\mathbf{k}}^{T\dagger} \Psi_{\mathbf{k}'}^T \right].$$

Potencial repulsivo (2)

Os outros termos $V_{BCS}^{\uparrow\uparrow}$ e $V_{BCS}^{\downarrow\downarrow}$ somente envolvem tripletos, que interagem via $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^T$. Se definirmos o vetor tripleto

$$\vec{\Psi}_{\mathbf{k}}^T = \sum_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} i\sigma_2)_{\alpha\beta} c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger = \begin{cases} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, & (x) \\ i(c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger), & (y) \\ c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, & (z), \end{cases}$$

podemos representar as interações de spins paralelos de maneira compacta. No final obtemos

$$V_{BCS} = V_{BCS}^{\uparrow\downarrow} + V_{BCS}^{\uparrow\uparrow} + V_{BCS}^{\downarrow\downarrow} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left(V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^S \Psi_{\mathbf{k}}^{S\dagger} \Psi_{\mathbf{k}'}^S + V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^T \vec{\Psi}_{\mathbf{k}}^{T\dagger} \vec{\Psi}_{\mathbf{k}'}^T \right).$$

Observações sobre o potencial repulsivo

- Ao estudarmos os harmônicos esféricos $Y_{\ell m}$ no contexto do átomo de Hidrogênio, vemos que a paridade está associada ao número quântico de momento angular orbital ℓ , de maneira que $Y_{\ell m}(-\mathbf{r}) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\mathbf{r})$.
- Pares de Cooper com função de onda de singlete envolvem $\ell = 0, 2, \dots$ (s, d, ... wave) e de tripleto envolvem valores ímpares $\ell = 1, 3, \dots$ (p, f, ... wave).

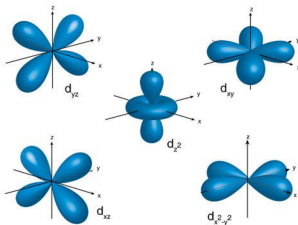


Figura 2: Harmônicos esféricos Y_{2m} dos orbitais d .

- Já que o potencial repulsivo V_{BCS} se dissocia em interações de singlete e tripleto, podemos estudá-las separadamente. Em especial, só precisamos considerar o termo de tripleto $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^T$ se estivermos interessados em descrever supercondutividade p-wave ou f-wave, por exemplo.
- Para um acoplamento somente de singlete, ficamos com a familiar

$$V_{BCS} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^S (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)(c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}).$$

Interação magnética (1)

Analisemos agora a interação magnética (do tipo Heisenberg)

$$V_{\text{mag}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} \vec{S}_{-\mathbf{q}} \cdot \vec{S}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \\ \alpha \beta \gamma \delta}} J_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \gamma}^\dagger \left(\frac{\vec{\sigma}}{2} \right)_{\alpha \beta} \left(\frac{\vec{\sigma}}{2} \right)_{\gamma \delta} c_{\mathbf{k}_2 \delta} c_{\mathbf{k}_1 \beta},$$

onde $J_{\mathbf{q}}$ é a interação efetiva dos spins. Por exemplo, para spins em uma rede quadrada interagindo só com primeiros vizinhos temos $J_{\mathbf{q}} = 2J[\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]$ (tight-binding).

Considerando o produto escalar $\left(\frac{\vec{\sigma}}{2} \right)_{\alpha \beta} \cdot \left(\frac{\vec{\sigma}}{2} \right)_{\gamma \delta} \equiv \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, lembremos que seus autovalores são $+\frac{1}{4}$ para o tripleto e $-\frac{3}{4}$ para o singleto (lembre da estrutura hiperfina do hidrogênio):

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \begin{cases} +\frac{1}{4} & (\text{tripleto}), \\ -\frac{3}{4} & (\text{singleto}). \end{cases}$$

Interação magnética (2)

Já que as partes simétricas e antissimétricas da interação filtram os pares singleto e tripleto, temos que esses autovalores entram como prefatores no potencial, de maneira que

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^S = -\frac{3}{4} \left(\frac{J_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + J_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}}{2} \right), \quad V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^T = +\frac{1}{4} \left(\frac{J_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} - J_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}}{2} \right).$$

Interações antiferromagnéticas ($J > 0 \Rightarrow V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^S < 0$) causam uma interação atrativa nos pares de singleto e interações ferromagnéticas ($J < 0 \Rightarrow V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^T < 0$) causam interação atrativa nos pares de tripleto.

$$\begin{cases} \text{interação antiferromagnética} \leftrightarrow \text{pares singleto anisotrópicos (d-wave),} \\ \text{interação ferromagnética} \leftrightarrow \text{pares tripleto anisotrópicos (p-wave).} \end{cases}$$

A saber, o estado normal dos cupratos é em geral um isolante de Mott com ordem antiferromagnética. No resto de nossa discussão daremos foco especial a eles.

Fatos sobre os cupratos

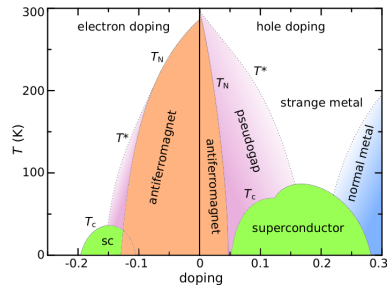
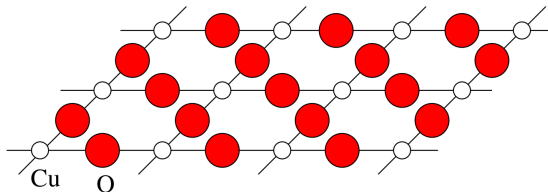
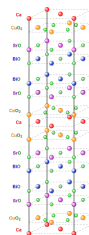


Figura 3: Propriedades gerais dos cupratos

- Os cupratos consistem de várias camadas de CuO_2 , que possui uma rede quadrada.
- Seu estado normal é um isolante de Mott com ordem antiferromagnética.
- A interação atrativa elétron-elétron não é causada por fônons, mas sim por interação antiferromagnética, capaz de gerar supercondutividade d-wave.
- Do lado direito do diagrama (superdopado) eles se comportam como líquido de Fermi. Essa é a nossa justificativa para aplicarmos fenomenologia BCS.



Modelando os cupratos

Consideramos um modelo simplificado de um supercondutor d-wave para os cupratos, onde os elétrons se movem em uma rede quadrada com dispersão $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$. Incluímos a repulsão de Coulomb por meio de um termo de Hubbard e também consideramos interações antiferromagnéticas para primeiros vizinhos:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_j U n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j.$$

Supondo que $U, J \ll t$, tratamos o material como um líquido de Fermi com uma interação BCS de singleto

$$V^{\text{singleto}}(\mathbf{q}) = U - \frac{3J}{2} (\cos q_x a + \cos q_y a),$$

onde o fator $-\frac{3}{2}$ surgiu daquele $-\frac{3}{4}$ da discussão anterior.

A interação $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ é obtida a partir da simetrização

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \frac{1}{2} \left[V^{\text{singleto}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + V^{\text{singleto}}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \right] = U - \frac{3}{2} (c_x c_{x'} + c_y c_{y'}),$$

onde denotamos $c_x = \cos(k_x a)$ e $c_y = \cos(k_y a)$. A hamiltoniana BCS é então

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[U - \frac{3}{2} (c_x c_{x'} + c_y c_{y'}) \right] c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}.$$

Termos s-wave e d-wave

Podemos separar a interação $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s + V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^d$ em um termo s-wave e d-wave:

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s = \overbrace{U}^{\text{s-wave}} - \overbrace{\frac{3}{4}J(c_x + c_y)(c_{x'} + c_{y'})}^{\text{s-wave estendida}} \quad (\text{s-wave}),$$
$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^d = -\frac{3}{4}J(c_x - c_y)(c_{x'} - c_{y'}) \quad (\text{d-wave}),$$

onde o termo s-wave é invariante por rotações de 90° e o termo d-wave troca de sinal, $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s = +V_{\mathbf{k},R\mathbf{k}'}^s$ e $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^d = -V_{\mathbf{k},R\mathbf{k}'}^d$ com $R\mathbf{k} = (-k_y, k_x)$.

Se analisarmos a equação 1 do gap

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \int \frac{d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} (V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s + V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^d) \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right),$$

é possível escrever também $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}^s + \Delta_{\mathbf{k}}^d$, com

$$\Delta_{\mathbf{k}}^s = \Delta_1 + \Delta_2(c_x + c_y) = +\Delta_{R\mathbf{k}}^s,$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^d = \Delta_d(c_x - c_y) = -\Delta_{R\mathbf{k}}^d.$$

Os dois termos $\Delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s$ e $\Delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^d$ se acoplam somente com as respectivas interações s-wave e d-wave na equação do gap, pois

$\int \frac{d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s \Delta_{\mathbf{k}'}^d(\dots) = 0$ e $\int \frac{d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^d \Delta_{\mathbf{k}'}^s(\dots) = 0$, devido às integrais mudarem de sinal sob uma rotação de 90° e, portanto, serem nulas. Concluimos que as duas simetrias s-wave e d-wave são desacopladas e, em particular, a simetria d-wave é ortogonal ao potencial de Coulomb local U .

Simetria d-wave

Analisando o gap d-wave $\Delta_{\mathbf{k}}^d = \Delta_d(c_x - c_y)$, vemos que ele possui nós nas diagonais $k_x = \pm k_y$, de maneira que essa simetria d-wave tem a forma do orbital $d_{x^2-y^2}$ da Figura 2. A energia das quasipartículas $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_d^2(c_x - c_y)^2}$ se anula na interseção dessas diagonais (onde $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$) com a superfície de Fermi (onde $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$), de maneira a formar cones de Dirac nesses pontos (nodais), ilustrados na Figura 4:

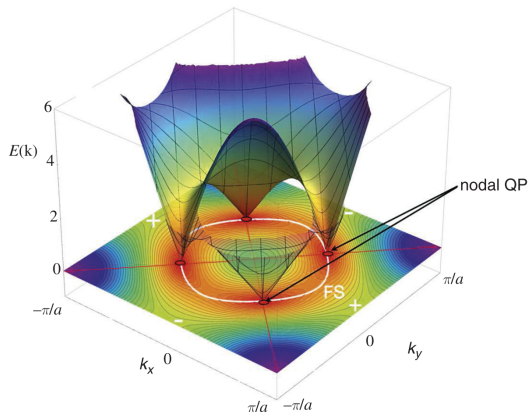


Figura 4: Cones de Dirac nos pontos nodais, que se localizam na interseção da superfície de Fermi (FS) com as retas $k_x = \pm k_y$.

Gap d-wave

Utilizando a equação do gap, podemos fazer algumas aproximações para ter uma ideia da física envolvida. Supondo que o preenchimento ao redor de $\Gamma(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ seja pequeno, temos $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(c_x + c_y) \simeq -4t + tk^2$ e o gap

$$\Delta_{\mathbf{k}}^d = \Delta_d(c_x - c_y) \simeq -\frac{\Delta_d}{2k_F^2} \left[\left(\frac{k_x}{k_F} \right)^2 - \left(\frac{k_y}{k_F} \right)^2 \right] = -\Delta_0 \cos(2\theta), \quad \Delta_0 = \frac{\Delta_d}{2k_F^2}, \quad \mathbf{k} = (k_x, k_y) = |\mathbf{k}|e^{i\theta}.$$

Perceba que $\Delta^d(\theta) \propto \cos(2\theta)$ remete ao harmônico esférico do orbital $d_{x^2-y^2}$.

Colocando um cutoff na energia $|\epsilon| \leq \omega_0$ e assumindo que a densidade de estados por spin seja constante $\rho(E_F) = \frac{1}{4\pi t}$, obtemos a equação do gap:

$$1 = \frac{3J}{4} \rho(E_F) \int_{-\omega_0}^{\omega_0} d\epsilon \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos^2(2\theta) \frac{\tanh\left(\frac{\beta E}{2}\right)}{2E}, \quad E = \sqrt{\epsilon^2 + [\Delta_0 \cos(2\theta)]^2}.$$

Aproximando grosseiramente $\cos^2(2\theta)$ pela sua média 1/2, chegamos numa equação aproximada (similar à BCS) para T_c :

$$1 = \frac{3J}{8} \rho(E_F) \int_0^{\omega_0} d\epsilon \frac{\tanh\left(\frac{\epsilon}{2T_c}\right)}{\epsilon},$$

onde é possível obter $T_c \sim 1.13 \omega_0 e^{-\frac{8}{3J\rho(E_F)}}$.

Densidade de estados d-wave

Também podemos calcular a densidade de estados aproximada tomando uma média sobre o ângulo θ :

$$\frac{N_d(E)}{N(0)} = \frac{d\epsilon}{dE} = \text{Re} \left\{ \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{|E|}{\sqrt{(E - i\delta)^2 + [\Delta_0 \cos(2\theta)]^2}} \right\},$$

em que obtemos a Figura 5:

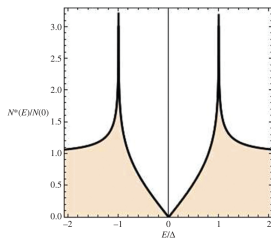


Figura 5: Densidade de estados $N_d(E)/N(0)$ aproximada para um supercondutor d-wave.

Note que não temos mais uma densidade de estados gapeada, pois de fato há cones de Dirac pelos nós nas diagonais $k_x = \pm k_y$. A Figura 5 na verdade parece muito com a DOS do grafeno.

Simetria s-wave estendida

Exploremos por final a componente s-wave do gap $\Delta_{\mathbf{k}}^s = \Delta_1 + \Delta_2(c_x + c_y)$. A equação do gap correspondente é

$$\Delta_{\mathbf{k}}^s = - \int \frac{d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \overbrace{\left[U - \frac{3}{4} J(c_x + c_y)(c_{x'} + c_{y'}) \right]}^{V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}^s}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right).$$

Ela é mais complicada pois existe acoplamento entre o termo local Δ_1 e o termo s-wave estendido $\Delta_2(c_x + c_y)$.





De forma simplificada, assumindo uma única superfície de Fermi, um cutoff $|\epsilon| \leq \omega_0$ e expandindo $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \ll t$ próximo do ponto Γ de maneira que $c_x \simeq c_y \simeq 1$, temos que a interação efetiva é da ordem de $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s \simeq U - 3J$.

Isso indica que, para uma única superfície de Fermi, a atração s-wave estendida é suprimida pela interação de Coulomb U . Isso faz com que a interação efetiva seja reduzida.

Pensando na fórmula da temperatura crítica BCS para a componente s-wave $T_c^s \sim 1.13 \omega_0 e^{-\frac{1}{g\rho(E_F)}}$, essa redução na constante efetiva de acoplamento $g \sim V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s \simeq U - 3J$ faz com que a temperatura crítica s-wave diminua.

Essas estimativas indicam que nos cupratos o T_c^d da componente d-wave é maior que T_c^s (que foi suprimido por U), fazendo com que o pareamento d-wave seja predominante.

Referências

-  **P. Coleman.**
Introduction to Many-Body Physics.
[Cambridge University Press, 2015.](#)
-  **Carsten Timm.**
Theory of Superconductivity.
Version: [March 24, 2023.](#)
-  **C. C. Tsuei and J. R. Kirtley**
Pairing symmetry in cuprate superconductors.
[Rev. Mod. Phys., 72, 969, October 2000.](#)
-  **Wikipédia contributors.**
Cuprate superconductor - Wikipédia
https://en.wikipedia.org/wiki/Cuprate_superconductor.