

Universidade Federal de São João Del Rei
Pós-Graduação Stricto Sensu em Física

Maria Alice Neves

**O efeito do zinco como uma impureza não magnética sobre cupratos
supercondutores de alta temperatura**

São João Del Rei

2022

Maria Alice Neves

**O efeito do zinco como uma impureza não magnética sobre cupratos
supercondutores de alta temperatura**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Física, da Universidade Federal de São João del Rei, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física. Área de Concentração: Matéria Condensada

Orientador: Lizardo Henrique Cerqueira Moreira Nunes

Coorientador: Rodrigo Arouca de Albuquerque

São João Del Rei

2022



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

HOMOLOGAÇÃO DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO Nº 5 / 2022 - PPGF (13.29)

Nº do Protocolo: 23122.028164/2022-34

São João del-Rei-MG, 19 de julho de 2022.

São João del-Rei, 15 de julho de 2022.

A dissertação de mestrado "**O efeito do zinco como uma impureza não magnética sobre cupratos supercondutores em alta temperatura.**" elaborada por **Maria Alice Neves** e aprovada por todos os membros da banca examinadora, foi aceita pelo Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei como requisito parcial à obtenção do título de

MESTRE EM FÍSICA

(Assinado digitalmente em 09/08/2022 18:58)

EDSON WANDER DIAS
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
COFIS (12.61)
Matrícula: 1552299

(Assinado digitalmente em 21/07/2022 08:11)

LIZARDO HENRIQUE CERQUEIRA MOREIRA NUNES
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DCNAT (12.12)
Matrícula: 1672479

(Assinado digitalmente em 19/07/2022 13:03)

SERGIO MARTINS DE SOUZA
ASSINANTE EXTERNO
CPF: 894.558.437-49

Para verificar a autenticidade deste documento entre em <https://sipac.ufsj.edu.br/public/documentos/index.jsp> informando seu número: **5**, ano: **2022**, tipo: **HOMOLOGAÇÃO DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**, data de emissão: **19/07/2022** e o código de verificação: **01f298fc17**

Ficha catalográfica elaborada pela Divisão de Biblioteca (DIBIB)
e Núcleo de Tecnologia da Informação (NTINF) da UFSJ,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

N518e Neves, Maria Alice .
O efeito do zinco como uma impureza não magnética sobre os cupratos supercondutores em alta temperatura / Maria Alice Neves ; orientador Lizardo Henrique Moreira Nunes; coorientador Rodrigo Arouca de Albuquerque. -- São João del-Rei, 2022.
49 p.

Dissertação (Mestrado - Física) -- Universidade Federal de São João del-Rei, 2022.

1. Efeito de uma impureza não magnética sobre os cupratos. 2. Efeito do zinco uma impureza não magnética . 3. Efeito sobre os cupratos supercondutores em alta temperatura. 4. O efeito do zinco como uma impureza não magnética sobre os cupratos supercondutores em alta temperatura. 5. Supercondutores em alta temperatura. I. Moreira Nunes, Lizardo Henrique, orient. II. Arouca de Albuquerque, Rodrigo , co-orient. III. Título.

AGRADECIMENTOS

Quero agradecer primeiramente a Deus, que me deu sabedoria e persistência para nunca desistir dos caminhos mais difíceis da vida.

À minha mãe, Eliana Maria Neves, por tudo que fez por mim até os dias atuais, sempre esteve ao meu lado, e me ensinou que é a partir da educação que podemos subir na vida sem minimizar nossos princípios.

À Nubia Andrade Bergamini, que sempre me incentivou a crescer como pessoa e como ser humano, sempre esteve ao meu lado nos momentos de choro e de alegrias.

Tatiana Limas, que me ajudou com palavras positivas e sempre me deu suporte, acreditando no meu caráter.

Ao meu orientador Lizardo Nunes e ao meu coorientador Rodrigo Arouca, por toda paciência e calma, sem a base teórica e o conhecimento de vocês não conseguiria essa titulação.

Aos meus colegas de turma, que me incentivaram nessa longa jornada; em especial, Gabrielly Machado e Natália Nascimento.

À Capes, minha agência financiadora, que com seu suporte e auxílio financeiro, me manteve ativa no programa de pós-graduação.

In Memoriam

Maria de Lourdes Freitas Neves, Geraldo Neves

A persistência é o menor caminho do êxito. (Charles Chaplin)

RESUMO

O principal objetivo deste trabalho é investigar o efeito da dopagem com zinco nos supercondutores de alta temperatura crítica (os cupratos). Apresentamos a fenomenologia básica dos cupratos supercondutores, cuja supercondutividade foi descoberta em meados dos anos 80. A temperatura crítica supercondutora, T_c , neste compostos decresce linearmente a medida que a concentração de zinco aumenta, até ser completamente suprimida para um valor de dopagem crítica, z_c . Neste trabalho modelamos o efeito do zinco como impurezas que modificam, tanto a intensidade da interação supercondutora, quanto reduzem a velocidade dos portadores de carga, tomando como ponto de partida um modelo recente para esses materiais.

Palavras-chave: Supercondutividade. Cupratos. Impurezas.

ABSTRACT

The main goal of this work is to investigate the effect of doping with zinc the high-temperature superconductors (the cuprates). We present the basic phenomenology of the cuprates superconductors, which had its superconducting state discovered in the middle of the 1980's. The superconducting critical temperature in those compounds decreases linearly as the zinc doping concentration increases, until it is completely suppressed for a critical doping value z_c . In the present work, we model the zinc effect as impurities that modify the superconducting interaction strength, and also reduce the charge carriers velocity, taking as a starting point a recent model proposed to describe those materials.

Key-words: Superconductivity. Cuprates. Impurities.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Efeito Meissner nos supercondutores. À esquerda: uma amostra resfriada a uma temperatura abaixo de T_c sem campo, com posterior aplicação de um campo magnético. À direita: uma amostra com campo aplicado que é posteriormente resfriada abaixo de T_c . Em ambos os casos, se vê uma expulsão das linhas de campo. /Fonte: [2].	12
Figura 2 – Geração de linhas de corrente e aprisionamento do fluxo em um anel supercondutor./Fonte:[2].	13
Figura 3 – Diagrama de fase no plano $H - T$, mostrando regiões supercondutoras e normais./Fonte: [3].	13
Figura 4 – Diagrama esquemático do calor específico de um supercondutor.[2]. . .	14
Figura 5 – Atenuação do campo magnético no interior de um material supercondutor, conhecido como efeito Meissner-Ochsenfeld.[5]	16
Figura 6 – Diagrama de fases supercondutoras [6]	23
Figura 7 – a)Diferentes famílias de cupratos. b) Estrutura bidimensional dos cupratos [6]	23
Figura 8 – Rede do plano CuO_2 [6]	24
Figura 9 – A temperatura crítica em função da concentração de dopante para vários elementos. [9]	24
Figura 10 – A rede de CuO_2 . Grandes círculos são íons de Cu. Pequenos círculos escuros e brancos são íons de O. Observe que eles formam uma rede bipartida com os vetores primitivos \mathbf{X} e \mathbf{Y} . Estes apontam ao longo das direções \hat{x} , \hat{y} , que estão alinhadas com a direção dos íons de Cu, de acordo com a convenção. [1].	26
Figura 11 – A rede CuO_2 : Pequenos círculos escuros e brancos são íons de O e o círculo grande preto íons de Cu; uma visão da rotação em 45 graus, o íon do O p_y se hibridiza com o Cu conforme o desenho destacado em vermelho. [8]	27
Figura 12 – A dependência da temperatura crítica em função da concentração de dopagem de Sr . Os círculos vermelhos são os dados experimentais. A linha sólida representa a curva teórica [1].	34
Figura 13 – Diagrama de fase do LSCO obtido a partir do comportamento resistivo e utilizando a Eq. (2.39). A fase amarela é a supercondutora, onde $\rho = 0$, a vermelha é a fase do <i>pseudogap</i> , em que ρ tem um comportamento exponencial, a azul escuro é a fase <i>strange metal</i> , em que $\rho \tilde{T}$, a azul claro é a fase de <i>crossover</i> , em que $\rho \tilde{T}^{1.6}$ e a verde é a fase de líquido de Fermi, em que ρT^2 . As linhas são as expressões teóricas descritas na Seção 2.1. Figura retirada da Ref. [6]	35

Figura 14 – Evolução do coeficiente linear da resistividade A_1 dividido por BT^* , mostrando que ele se aproxima de uma constante C_0 para dopagens altas. Os pontos são os valores do ajuste com os dados experimentais, como citado nas referências na Ref. [6]. A linha tracejada é para um valor constante de C_0 . [6]	36
Figura 15 – Valor de τ_c em função de z . Os círculos vermelhos representam os dados experimentais coletados na Ref. [9] e a curva tracejada é a Eq. (3.7). . .	39
Figura 16 – Dependência da temperatura com a resistividade a partir da substituição por Zn. [25].	40
Figura 17 – Comparação de τ_c com os dados experimentais para $x = 0.15$ e $x = 0.2$ coletados pela Ref.[9], o <i>fit</i> linear da Eq. (3.7) e a Eq. (3.6) com $v(z) = 1 - \alpha z$ utilizando a Eq. (3.10).	41
Figura 18 – Comparação de τ_c com os dados experimentais para $x = 0.15$ e $x = 0.20$ coletados pela Ref. [9], o <i>fit</i> linear da Eq. (3.7) e a Eq. (3.6) com ξ obtido através da Eq. (3.16).	43
Figura 19 – Comparação de τ_c com os dados experimentais para $x = 0.15$ coletados pela Ref. [9], o <i>fit</i> linear da Eq. (3.7) e a Eq. (3.6) com diferentes comportamentos de Λ presentes na legenda.	43

SUMÁRIO

1	Introdução	11
1.1	Supercondutores convencionais	12
1.1.1	Panorama Histórico	12
1.1.2	Teorias de London e Ginzburg-Landau	15
1.1.3	Teoria BCS	18
1.2	Supercondutores de alta temperatura crítica	22
1.2.1	Fenomenologia	23
1.2.2	Efeito das impurezas de zinco nos cupratos	24
2	Teoria sem zinco	26
2.1	Modelo para os cupratos	26
2.2	Temperatura crítica supercondutora	31
2.3	Teoria para a resistividade	33
3	Efeito da impureza de zinco	37
3.1	Efeito do Zinco nos acoplamentos J_K e J_{AF}	37
3.2	Teoria auto-consistente para T_c	38
3.3	Nossa Conjectura	39
3.3.1	Velocidade dos portadores de carga	39
3.3.2	Comprimento de coerência	41
3.3.3	Cutoff	42
4	Conclusões e Perpectivas	45
	Bibliografia	46
	ANEXO A – TERMO DE AUTENTICIDADE	48

1 Introdução

O objetivo do nosso trabalho é verificar se um modelo proposto recentemente para descrever os cupratos [1] consegue explicar o decaimento da temperatura crítica ao dopar o material com uma impureza não-magnética. Focaremos na dopagem com zinco.

Para modelar o efeito dessa impureza, primeiramente investigamos como a dopagem com zinco altera os acoplamentos magnéticos do material e, em vista disso, a interação supercondutora. Em seguida, discutimos os possíveis impactos da diminuição da velocidade de portadores de carga e alteração do comprimento de coerência supercondutor devido às impurezas.

A tese será dividida em três capítulos.

O primeiro capítulo revisa alguns pontos importantes sobre a supercondutividade. A primeira seção detalha alguns conceitos relevantes para supercondutores convencionais, que mais tarde são comparados com as propriedades dos cupratos. Começamos com um panorama histórico, revisando a teoria termodinâmica de supercondutores, a teoria de London e a descrição macroscópica de Ginzburg-Landau. Finalmente, forneceremos uma abordagem microscópica usando a teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer. A segunda seção descreve os cupratos supercondutores de alta temperatura, focando na sua estrutura e característica comum desses materiais.

No segundo capítulo discutimos um modelo para os cupratos. Na primeira seção, descrevemos o Hamiltoniano para os planos de CuO_2 no limite sem e com dopagem. Em especial, mostramos como a dopagem com buracos leva à formação dos pares de Cooper nesses materiais. Na segunda seção, descrevemos a termodinâmica desse modelo e detalhamos como a temperatura crítica pode ser obtida e os parâmetros relevantes. Finalmente, na terceira seção discutimos a expressão para resistividade do modelo proposto, principalmente na fase *strange metal*. Essa expressão será importante para entender como a dopagem com zinco muda a velocidade dos portadores de carga.

No terceiro capítulo, discutiremos o efeito da impureza de zinco nos cupratos. Inicialmente analisando a influência da dopagem de zinco no modelo estudado no capítulo anterior, mostrando que ela leva a uma modificação do acoplamento supercondutor, o que contudo não leva à diminuição da temperatura crítica. Nós então estudamos como a velocidade de portadores é modificada pela dopagem com zinco e propomos como o comprimento de coerência ou o *cutoff* de energia deve se comportar para reproduzir os dados experimentais.

1.1 Supercondutores convencionais

Neste capítulo, algumas definições e informações importantes sobre os supercondutores convencionais devem ser lembradas e apresentadas como introdução para esta Tese. O objetivo é entender a supercondutividade e as propriedades que a envolvem, introduzir alguns conceitos sobre os supercondutores de alta temperatura a partir de uma descrição fenomenológica e algumas teorias sobre esses compostos.

1.1.1 Panorama Histórico

Em 2021, um dos fenômenos mais interessantes da Física completou 110 anos de seu descobrimento. Estudado inicialmente em metais ou ligas metálicas, hoje em dia há grande interesse em entender os cupratos, supercondutores de alta temperatura crítica, cujo mecanismo microscópico responsável pela supercondutividade é até hoje desconhecido.

Contudo, muito do que se conhece dos supercondutores elementares, também chamados de convencionais, se repete nas propriedades observadas nos cupratos. Algumas dessas propriedades fundamentais são apresentadas abaixo para a compreensão da supercondutividade:

- **Condutividade infinita:** Ao se resfriar um metal abaixo de uma temperatura crítica T_c , há uma transição de fase para o estado supercondutor. Uma das assinaturas disso é que sua resistividade cai abruptamente para zero, ou, de forma equivalente, ele apresenta condutividade infinita.
- **Efeito Meissner:** Embora a condutividade infinita seja uma das características fundamentais, a verdadeira natureza do estado supercondutor aparece mais claramente nos efeitos magnéticos. Considerando um metal normal com seu campo magnético uniforme, quando a amostra é resfriada e se torna supercondutora, experimentos realizados pela primeira vez por Meissner e Ochsenfeld demonstra que todo o fluxo magnético é expelido do interior, conforme observado na Fig.(1).

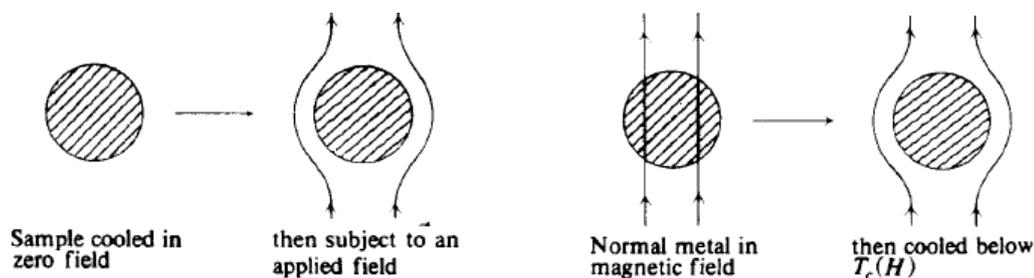


Figura 1 – Efeito Meissner nos supercondutores. À esquerda: uma amostra resfriada a uma temperatura abaixo de T_c sem campo, com posterior aplicação de um campo magnético. À direita: uma amostra com campo aplicado que é posteriormente resfriada abaixo de T_c . Em ambos os casos, se vê uma expulsão das linhas de campo. /Fonte: [2].

- **Correntes persistentes:** Quando um campo magnético é aplicado em um metal, pela Lei de Ampère, correntes são geradas em seu interior. Por conta da dissipação, para que a corrente seja mantida, o campo externo deve continuar sendo aplicado. Em um supercondutor, essas correntes persistem por um tempo extremamente longo. De outra forma, podemos pensar que essas correntes são as que geram uma magnetização forte o suficiente para repelir o campo magnético. Esse princípio é ilustrado para um anel na Fig. (2).

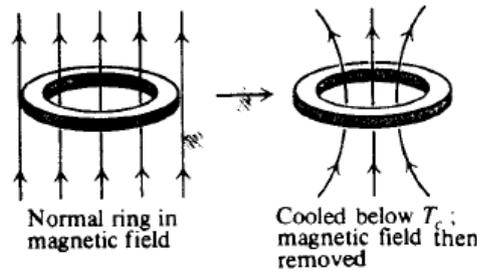


Figura 2 – Geração de linhas de corrente e aprisionamento do fluxo em um anel supercondutor./Fonte:[2].

- **Campo Crítico:** O efeito Meissner ocorre apenas para campos magnéticos H suficientemente baixos. Existe um campo crítico H_c acima do qual o material vai para seu estado normal. O valor desse campo crítico depende da temperatura T e o diagrama de fase para os supercondutores convencionais é representado por uma parábola, como visto na Fig. (3).

A equação que descreve o campo crítico é:

$$H_c(T) = H_c(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right]. \quad (1.1)$$

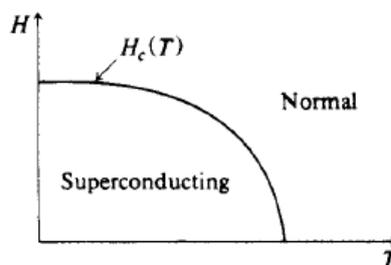


Figura 3 – Diagrama de fase no plano $H-T$, mostrando regiões supercondutoras e normais./Fonte: [3].

- **Termodinâmica:** Um supercondutor, além do seu comportamento eletromagnético, também possui propriedades térmicas distintas. Para materiais magnéticos, o

potencial termodinâmico adequado é a energia livre de Gibbs G [2, 4]. Para uma certa magnetização \mathbf{M} e campo externo \mathbf{H} , a energia livre de Gibbs é dada por

$$G(T, \mathbf{H}) = U - TS - \mu_0 V \mathbf{H} \cdot \mathbf{M}, \quad (1.2)$$

onde U é a energia interna, S a entropia, V o volume e μ_0 a permeabilidade magnética do vácuo. Como no efeito Meissner, o campo magnético no material \mathbf{B} é zero, temos que $\mathbf{M} = -\mathbf{H}$, de forma que podemos estabelecer relações diretas entre G na fase normal, chamado de G_n , e G na fase supercondutor, G_s . A partir dele, podemos obter as outras variáveis termodinâmicas. Em especial, para os supercondutores convencionais a diferença de entropia na transição de fase é dada por:

$$S_s(T, H_c) - S_n(T, H_c) = -\mu_0 V H_c \frac{dH_c}{dT}, \quad (1.3)$$

mostrando que essa é uma transição de primeira ordem com um campo aplicado e de segunda ordem sem campo.

- **Calor específico:** Na transição de fase, o calor específico tem uma descontinuidade. A Fig. 1.1.1 ilustra o comportamento do calor específico C : no estado normal C_n varia linearmente com a temperatura, enquanto no estado supercondutor, C_s dos supercondutores convencionais mostra um decaimento exponencial descrito por

$$C_s \propto \exp \frac{-\Delta_0}{k_B T}, \quad (1.4)$$

sendo k_B a constante de Boltzmann. Essa dependência indica a existência de um *gap* de energia Δ_0 , separando os estados excitados do estado fundamental.

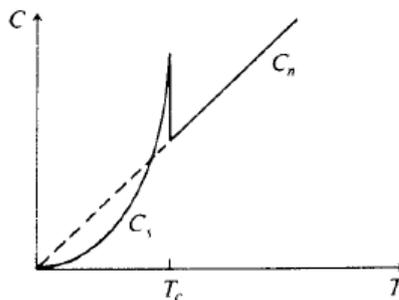


Figura 4 – Diagrama esquemático do calor específico de um supercondutor.[2].

- **Efeito Isotópico:** Ao considerar a supercondutividade em dois isótopos, elementos com o mesmo número atômico, mas diferente número de massa, nota-se que a temperatura crítica é maior para o composto mais leve, enquanto as propriedades do estado normal são basicamente iguais. A variação de T_c com a massa atômica é dada por:

$$T_c \propto M^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.5)$$

onde M é a massa do íon. Esse é o chamado efeito isotópico. Essa relação é válida apenas para supercondutores convencionais e é um indicativo para a importância dos fônons nesses materiais, visto que sua frequência é afetada pela massa do íon.

1.1.2 Teorias de London e Ginzburg-Landau

Nesta subseção forneceremos uma breve descrição das teorias de London e Ginzburg-Landau.

Após a descoberta da supercondutividade, alguns estudos propuseram abordagens fenomenológicas para descrever essa fase. A primeira delas é a teoria de London, que propôs explicar um supercondutor como sendo um fluido sem resistência, de forma que ele é acelerado sem dissipação. Imaginando esse fluido formado por partículas, podemos utilizar a segunda Lei de Newton, de forma que a velocidade do fluido supercondutor v_s na presença de um campo elétrico \mathbf{E} é dada simplesmente por

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = -e^* \mathbf{E}, \quad (1.6)$$

onde e^* é a carga efetiva desse fluido e m^* sua massa. Podemos então associar uma densidade de corrente supercondutora j_s ,

$$j_s = e^* n_s v_s, \quad (1.7)$$

dependendo da densidade numérica das partículas supercondutoras n_s . Isso nos permite escrever a primeira equação descrita pelos irmãos London,

$$\frac{d\mathbf{j}_s}{dt} = \frac{e^{*2} n_s}{m^*} \mathbf{E}. \quad (1.8)$$

Utilizando a Lei de Faraday,

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t, \quad (1.9)$$

e aplicando o rotacional em ambos os lados da Eq. (1.8), temos a segunda equação de London:

$$\frac{d}{dt} \left(\nabla \times \mathbf{j}_s + \frac{e^{*2} n_s}{m^*} \mathbf{B} \right) = 0. \quad (1.10)$$

Portanto, temos que o termo entre parêntesis deve ser uma constante no tempo, que deve ser nula para minimizar a energia. Aplicando a Lei de Ampère para um campo elétrico estático, a segunda equação pode ser reescrita como,

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B} = 0, \quad (1.11)$$

onde o comprimento de penetração de London λ_L é dado por

$$\lambda_L^2 = \frac{m^*}{\mu_0 n_s e^{*2}}, \quad (1.12)$$

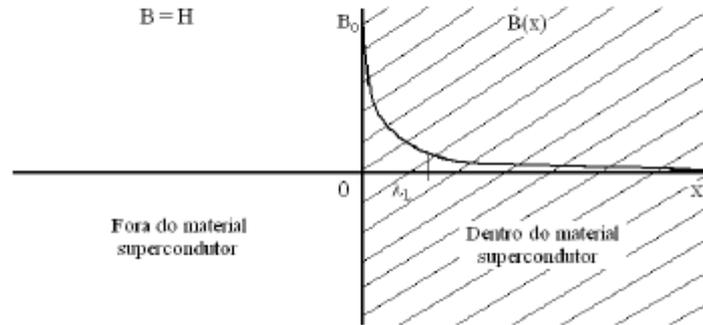


Figura 5 – Atenuação do campo magnético no interior de um material supercondutor, conhecido como efeito Meissner-Ochsenfeld.[5]

Para entender a interpretação física de λ_L , analisamos uma situação de uma fronteira unidimensional entre um supercondutor e o vácuo com um campo externo aplicado, conforme ilustrado na Fig. 1.1.2.

Nesse caso, a segunda equação de London toma a forma

$$\frac{d^2 B}{dx^2} = \frac{1}{\lambda_L^2} B, \quad (1.13)$$

que apresenta solução

$$B(x) = B_0 e^{-x/\lambda_L}, \quad (1.14)$$

onde B_0 é o campo na fronteira. Essa solução mostra que o campo magnético é atenuado no interior do material supercondutor e o comprimento característico dessa atenuação é representado pelo parâmetro λ_L . Isso nos permite entender que o campo não é completamente expulso da amostra, mas atenuado exponencialmente.

Apesar dessa teoria descrever a resposta eletromagnética de supercondutores, ela não consegue explicar a origem da fase supercondutora e nem como ela é destruída pela temperatura ou campo magnético.

Algumas décadas depois, uma teoria fenomenológica foi proposta, baseada em observações experimentais e algumas suposições que não podiam ser demonstradas na época, mas que descreve de forma brilhante todas as propriedades apresentadas até aqui dos supercondutores. Essa é a teoria de Ginzburg-Landau, que explica os fenômenos eletromagnéticos presentes na teoria de London, e também as propriedades termodinâmicas dos supercondutores. Ela se baseia na descrição de uma energia livre F em termos de um parâmetro de ordem complexo ψ que desaparece na fase normal, tornando-se diferente de zero na fase supercondutora. A generalização da energia livre de Landau é feita incluindo um potencial eletromagnético \mathbf{A} , levando a:

$$F_s = F_n + \int \left(\alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} |(-i\hbar\nabla - e^* \mathbf{A}\psi)|^2 + \frac{|\nabla \times \mathbf{A}|^2}{2\mu_0} \right) d^3 \mathbf{r}, \quad (1.15)$$

onde o primeiro termo F_n é a energia livre no estado normal, os coeficientes α e β são parâmetros fenomenológicos, além da constante de Planck reduzida \hbar e a unidade imaginária $i = \sqrt{-1}$.

A função descrita na Eq. (1.15) deve satisfazer algumas condições, sendo essas:

1. Existe um campo magnético externo H agindo sobre o material (que é necessário para observarmos o efeito Meissner-Ochsenfeld). A reação do material a esse campo magnético externo dá-se através do potencial vetor eletromagnético \mathbf{A} , presente no quarto termo da Eq. (1.15).
2. Os coeficientes α e β são parâmetros fenomenológicos que dependem da temperatura e só podem ser completamente determinados quando fornecidos por uma teoria microscópica (Teoria BCS).

Minimizando a energia livre em função de ψ , obtemos a equação de Ginzburg-Landau em sua forma diferencial

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e^* \mathbf{A} \right)^2 \psi = 0, \quad (1.16)$$

que descreve o comportamento espacial de ψ . Colocando $\mathbf{A} = 0$, e considerando uma interface com o estado supercondutor, similar à considerada na Fig. 1.1.2, temos que ψ tem a forma [4]

$$\psi(x) = \psi_0 \tanh \left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right), \quad (1.17)$$

onde ψ_0 é o parâmetro de ordem no interior do supercondutor e o comprimento de coerência ξ é dado por

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^* |\alpha|}}. \quad (1.18)$$

Vemos então que ξ mostra o decaimento espacial de ψ em uma interface com o estado normal.

Se agora minimizarmos a energia livre da Eq. (1.15) em relação a \mathbf{A} , obtemos a densidade de corrente supercondutora \mathbf{j}_s

$$\mathbf{j}_s = -\frac{e^* \hbar i}{2m^*} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*} |\psi|^2 \mathbf{A}. \quad (1.19)$$

Assumindo que ψ seja constante, dado por $\sqrt{n_s}$, obtemos

$$\mathbf{j}_s = -\frac{n_s e^{*2}}{m_e} \mathbf{A}, \quad (1.20)$$

que resulta na Eq. (1.8) ao aplicarmos a derivada no tempo. Vemos então que n_s é determinada pela forma de ψ e conseguimos obter λ_L em função de α e β . Portanto,

podemos usar esses dois comprimentos, ξ e λ_L , para escrever a energia livre da Eq. (1.15). A razão entre esses dois comprimentos é dada por κ

$$\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi} = \frac{m^*}{\hbar e^*} \sqrt{\frac{2\beta}{\mu_0}}, \quad (1.21)$$

que define o comportamento do supercondutor. Para $\kappa \ll 1$ ($\lambda_L \ll \xi$), o material é supercondutor do tipo I, em que temos apenas a fase supercondutora e normal, e para o intervalo $\kappa \gg 1$ ($\lambda_L \gg \xi$), é do tipo II, aonde temos vórtices também para campos suficientemente fortes.

Em resumo, as principais características dos supercondutores são a queda da resistividade e a exclusão dos campos magnéticos, até um campo crítico, o que leva a dois tipos de supercondutores. No entanto, essas são teorias macroscópicas e não fornecem uma explicação do mecanismo microscópico responsável pela supercondutividade. Isso foi dado pela teoria BCS.

1.1.3 Teoria BCS

Nessa seção mostraremos como, utilizando técnicas de teoria quântica de campos, podemos, a partir de um Hamiltoniano com férmions e uma interação atrativa, obter uma energia livre dada por um parâmetro complexo que justifica a teoria fenomenológica de Landau-Ginzburg.

A teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) é baseada no chamado problema de Cooper. Cooper mostrou que uma pequena interação atrativa na superfície de Fermi gera estados ligados, os pares de Cooper, de elétrons com *spins* opostos. Isso explica o gap de energia e também o parâmetro de ordem de Ginzburg-Landau. Em trabalho posterior, Bardeen e Pines mostraram que o acoplamento elétron-fônon pode gerar uma interação atrativa efetiva entre elétrons que explica a supercondutividade convencional.

Usaremos uma abordagem de teoria de campos, descrevendo os operadores de criação e aniquilação de elétrons definidos em um contínuo. O Hamiltoniano BCS é da forma

$$H_{BCS} = \int d^3r \left[\sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) - \frac{\lambda}{2} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \right], \quad (1.22)$$

onde m é a massa dos elétrons, λ é a constante de acoplamento entre os elétrons e $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ cria um elétron com spin σ na posição \mathbf{r} . O primeiro termo é um termo de energia cinética, enquanto o segundo é um termo de interação entre elétrons com spins opostos. Deste Hamiltoniano, obtermos a densidade Lagrangeana:

$$\mathcal{L}_{BCS} = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \lambda \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \psi_{\downarrow}. \quad (1.23)$$

Para descrever a função de partição do modelo, usaremos o método de integral de caminhos. Para isso, passamos do tempo real para um tempo imaginário τ , de forma que:

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\mathcal{Z}_{0,\psi}} \int \mathcal{D}\psi_\sigma^\dagger \mathcal{D}\psi_\sigma \exp \left\{ - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3r \sum_\sigma \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_\sigma(\mathbf{r}) + \lambda \psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow^\dagger \psi_\uparrow \psi_\downarrow \right\}, \quad (1.24)$$

onde $\mathcal{Z}_{0,\psi}$ é \mathcal{Z} desconsiderando o termo de interação e normalização da função de partição, e $\beta = 1/(k_B T)$.

É conveniente transformar a interação quártica em uma forma trilinear na integral funcional acima. Isso é alcançado por meio da transformação de Hubbard-Stratonovitch. Assim, introduzindo um campo de Hubbard-Stratonovich η , temos

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\mathcal{Z}_\eta \mathcal{Z}_{0,\psi}} \int \mathcal{D}\psi_\sigma^\dagger \mathcal{D}\psi_\sigma \mathcal{D}\eta^* \mathcal{D}\eta \exp \left\{ - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3r \mathcal{L}_0[\psi_\sigma, \eta] \right\}, \quad (1.25)$$

onde

$$\mathcal{L}_0[\psi_\sigma, \eta] = \mathcal{L}_{BCS}[\psi_\sigma] - \frac{1}{\lambda} \eta^* \eta \quad (1.26)$$

e \mathcal{Z}_η é a normalização do termo quadrático envolvendo η .

Para eliminar o termo quártico, fazemos a transformação

$$\begin{aligned} \eta &\longrightarrow \eta - \lambda \psi_\uparrow \psi_\downarrow \\ \eta^* &\longrightarrow \eta^* - \lambda \psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow^\dagger, \end{aligned} \quad (1.27)$$

de forma que obtemos a Lagrangeana

$$\mathcal{L}[\psi_\sigma, \eta] = \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_\sigma(\mathbf{r}) - \frac{1}{\lambda} \eta^* \eta + \eta^* \psi_\uparrow \psi_\downarrow + \eta \psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow^\dagger. \quad (1.28)$$

Considerando a variação em termos dos campos fermiônicos, temos a relação de autoconsistência

$$\begin{aligned} \eta &= \lambda \psi_\uparrow \psi_\downarrow \\ \eta^* &= \lambda \psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow^\dagger, \end{aligned} \quad (1.29)$$

mostrando que o valor esperado de η é proporcional a $\langle \psi_\uparrow \psi_\downarrow \rangle$, que expressa a densidade de pares de Cooper no estado fundamental.

Agora, integraremos a Lagrangeana sobre os campos fermiônicos, obtendo assim uma ação efetiva no campo de Hubbard η . Para isso, utiliza-se o férmion de Nambu:

$$\Phi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_\downarrow^\dagger & \psi_\uparrow \end{pmatrix}, \quad (1.30)$$

de forma que o termo fermiônico pode ser expresso como um produto matricial

$$\mathcal{L}[\psi, \eta] = -\frac{1}{\lambda} \eta^* \eta^\dagger + \Phi \mathcal{A} \Phi^\dagger, \quad (1.31)$$

onde matriz \mathcal{A} é:

$$\mathcal{A}(\eta) = \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) + \hbar\omega & \eta \\ \eta^* & -\epsilon(\mathbf{k}) + \hbar\omega \end{pmatrix}, \quad (1.32)$$

sendo

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu, \quad (1.33)$$

a energia cinética em relação ao potencial químico μ , visto que os elétrons com energia cinética mais próxima ao nível de Fermi são mais relevantes. Após a integração, obtemos:

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\mathcal{Z}_\eta} \int \mathcal{D}\psi_\eta^\dagger \mathcal{D}\psi_\eta e^{-S_{eff}[\eta]}, \quad (1.34)$$

onde

$$S_{eff}[\eta] = \int d^4x \left(-\frac{1}{\lambda} |\eta|^2 \right) - \ln \text{Det} \left[\frac{\mathcal{A}(\eta)}{\mathcal{A}(0)} \right], \quad (1.35)$$

e Det denota tanto integração sobre o tempo imaginário e a posição, além do determinante nas componentes de Nambu que denotamos por det,

$$\det \mathcal{A}[\eta] = \epsilon^2 - (\hbar\omega)^2 - |\eta|^2. \quad (1.36)$$

Usando agora que $\ln \text{Det} = \text{Tr} \ln$, a expressão acima se torna

$$S_{eff}[\eta] = \int d^4x \left(-\frac{1}{\lambda} |\eta|^2 \right) - \text{Tr} \ln \left[1 + \frac{|\eta|^2}{\partial_t^2 + \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu \right)^2} \right]. \quad (1.37)$$

Da Eq. (1.37) pode-se extrair o potencial efetivo. Aplicando a transformada de Fourier no espaço e no tempo imaginário, como as condições de contorno são anti-periódicas, as frequências de Matsubara ω_n serão quantizadas como $(2n + 1) k_B T / \hbar$, deste modo, o parâmetro de ordem da fase supercondutora é expresso por: $\Delta = \langle 0 | \eta | 0 \rangle$ e temos o potencial efetivo em campo médio:

$$V_{eff}(|\Delta|, T) = \frac{|\Delta|^2}{\lambda} - k_B T \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \ln \left[1 + \frac{|\Delta|^2}{\hbar^2 \omega_n^2 + \epsilon(\mathbf{k})^2} \right] \right\}, \quad (1.38)$$

que representa o grande potencial termodinâmico para esse sistema.

Para determinar as fases supercondutoras e as fases normais do sistema, é essencial determinar os pontos de equilíbrio do potencial efetivo dados por:

$$\frac{\partial}{\partial |\Delta|} V_{eff}(|\Delta|, T) = 0, \quad (1.39)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial |\Delta|^2} V_{eff}(|\Delta|, T) > 0. \quad (1.40)$$

A primeira derivada implica

$$\frac{\partial V_{eff}}{\partial \Delta} = -2\Delta \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\beta} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\hbar^2 \omega_n^2 + \epsilon^2 + \Delta^2} \right) = 0. \quad (1.41)$$

A solução trivial dessa equação é $\Delta = 0$. Assumindo a solução não-trivial $\Delta \neq 0$, temos a equação de *gap*:

$$1 = \frac{\lambda}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\hbar\omega_n)^2 + E_k^2}, \quad (1.42)$$

onde $E(\mathbf{k})^2 = \epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2$.

A soma sobre as frequências de Matsubara pode ser feita exatamente usando a identidade

$$\sum \frac{1}{a^2 + (n + \frac{1}{2})^2} = \frac{\pi}{a} \tanh(\pi a). \quad (1.43)$$

Agora, consideramos que a interação elétron-elétron não seja atrativa para todos os momentos, mas apenas em uma casca esférica de largura dada pela frequência de Debye ω_D , que representa a frequência máxima para um fônon que gera essa interação atrativa, e é zero para outros momentos. Assumindo que $\hbar\omega_D$ é muito menor que a energia de Fermi E_F ,

$$\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \approx \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\epsilon N(\epsilon) \simeq N(E_F) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\epsilon, \quad (1.44)$$

onde N é a distribuição de Fermi-Dirac,

$$N(\epsilon) = \frac{1}{\exp(\beta\epsilon) + 1}, \quad (1.45)$$

a equação de *gap* se torna

$$1 = \lambda N(E_F) \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\tanh\left(\frac{\beta\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}}{2}\right)}{\sqrt{\epsilon^2 + |\Delta|^2}}. \quad (1.46)$$

A partir dessa equação, podemos tanto determinar Δ em função da temperatura, quanto obter a temperatura crítica T_c para qual $\Delta = 0$.

Impondo $\Delta = 0$, obtemos

$$1 = \lambda N(E_F) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh \frac{\epsilon}{2k_B T_c}. \quad (1.47)$$

Podemos resolver a equação implicitamente para T_c , integrando por partes e fazendo a substituição de variáveis:

$$\frac{1}{\lambda N(E_F)} = \int_0^x \tanh z, \quad (1.48)$$

sendo,

$$z = \frac{\epsilon}{2k_B T_c}, \quad (1.49)$$

e

$$x = \frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}. \quad (1.50)$$

Portanto,

$$\frac{1}{N(E_F)} = [\ln z \tanh z] \Big|_0^x - \int_0^x dz \ln z \operatorname{sech}^2 z. \quad (1.51)$$

Assumindo que $\hbar\omega_D \gg k_B T_c$, ou $x \rightarrow \infty$, teremos

$$\frac{1}{N(E_F)} = \ln \frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c} - \int_0^\infty dz \ln z \operatorname{sech}^2 z = \ln \frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c} - \ln \frac{4\gamma}{\pi}, \quad (1.52)$$

onde γ é a constante de Euler-Mascheroni.

Reagrupando os termos e igualando, temos a equação para T_c na teoria BCS

$$k_B T_c = \frac{2\gamma}{\pi} \hbar\omega_D e^{\frac{1}{N(E_F)\lambda}} \approx 1.13 \hbar\omega_D e^{\frac{1}{N(E_F)\lambda}}. \quad (1.53)$$

Uma característica interessante da supercondutividade BCS é que qualquer sistema descrito pelo Hamiltoniano BCS estará em fase supercondutora para $T < T_c$, independentemente do valor do parâmetro de acoplamento λ , o que deixa de ser verdade quando adicionamos as correções trazidas pela interação Coulombiana. Usando então a Eq. (1.46), fazendo $T = 0$, obtemos o gap a temperatura zero:

$$|\Delta(T = 0)| = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\lambda N(E_F)}}, \quad (1.54)$$

de forma que a razão entre $\Delta(T = 0)$ e T_c na teoria BCS é a razão universal

$$\frac{T_c}{|\Delta(T = 0)|} = \frac{\gamma}{\pi}, \quad (1.55)$$

O fator exponencial na expressão para T_c é responsável pelo fato de que a supercondutividade BCS convencional ocorre a temperaturas consideravelmente baixas.

A Eq. (1.53) para a temperatura crítica pode explicar o chamado efeito isotópico, ou seja, a modificação de T_c após substituição dos constituintes do material por isótopos de massas diferentes, já que a frequência de Debye se escala como $M^{-1/2}$, de forma que a Eq. (1.55) é satisfeita.

1.2 Supercondutores de alta temperatura crítica

Após uma breve revisão dos conceitos que abrangem a supercondutividade convencional, nesta seção descrevemos os cupratos, sua estrutura cristalina e algumas teorias usadas para modelá-los. A partir delas, nos propomos a descrever a dopagem de impurezas não-magnéticas, como o zinco, nas amostras supercondutoras.

1.2.1 Fenomenologia

Não há ainda um entendimento completo sobre o mecanismo microscópico responsável pela supercondutividade nos cupratos. Até meados da década de 80, acreditava-se que a supercondutividade só existisse em metais ou em ligas metálicas. Contudo, esse conceito foi revolucionado pela descoberta dos cupratos, que são materiais cerâmicos. Além do fato deles não serem metais puros ou ligas metálicas, muito da fenomenologia desses materiais desafia o paradigma da teoria BCS, discutida na seção anterior. Porém, dois alemães, Muller e Berdnorz, iniciaram os estudos em supercondutores de alta temperatura crítica. Na ausência de dopagem, esses materiais são isolantes. Mas quando dopados, tornam-se metálicos. Em baixas temperaturas, tornam-se supercondutores. O diagrama de fase desses materiais é bastante complexo e apresentam muitas fases distintas, como mostrado na Fig. 6).

Figura 6 – Diagrama de fases supercondutoras [6]

Uma característica comum a todos os cupratos é a presença de planos de CuO_2 , como mostrado na Fig. 7.a, que representa as diferentes famílias dos cupratos. A estrutura da rede cristalina bidimensional dos planos de CuO_2 é vista na Fig. 7.b. Note que os planos são separados por camadas, que, quando dopadas, comportam-se basicamente como reservatórios de cargas, armazenando elétrons. Acredita-se que a supercondutividade dos cupratos tem origem a partir dos planos de CuO_2 e o número de planos adjacentes na estrutura cristalina pode afetar a temperatura crítica dos compostos. [7]. Conseqüentemente, a temperatura crítica aumenta conforme o número de planos N também aumenta. [8].

Figura 7 – a) Diferentes famílias de cupratos. b) Estrutura bidimensional dos cupratos [6]

Nesta seção, tentaremos compreender a fenomenologia essencial dos cupratos concentrando a nossa análise no composto $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO). Em um sistema não dopado, o lantânio La_{3+} e o oxigênio O_{2-} são ionizados. Para conseguir neutralizar a carga, cada átomo de Cu transfere dois elétrons do orbital $4s$ para o $3d$, conforme a sua configuração eletrônica, o que adiciona buracos em sua camada de valência. Como mostra a Fig. 6, os cupratos se tornam supercondutores pela dopagem, que adiciona buracos aos planos de CuO_2 .

A Fig. 8 mostra a rede quadrada dos planos de CuO_2 . Note que há duas subredes para os íons de oxigênio (círculos brancos e pretos menores) e íons de cobre (círculos pretos maiores). Os elétrons nos O são itinerantes, enquanto os graus de liberdade eletrônicos do Cu, devido à forte repulsão Coulombiana, correspondem a spins $1/2$ localizados.

Figura 8 – Rede do plano CuO_2 [6]

Nesta tese, assumimos que a supercondutividade surja através do acoplamento magnético dos spins itinerantes do oxigênio com os spins localizados do cobre. Além disso, a rede dos íons de oxigênio, que se divide em duas subredes, irá se sobrepor aos orbitais $3d$ do Cu, essa sobreposição leva a uma interação Kondo entre os buracos dopados e os spins localizados. Nossa descrição teórica irá concentrar-se nos planos de CuO_2 , que, acreditamos, contem a física essencial para a supercondutividade dos cupratos, e iremos descrever as interações dos buracos portadores de carga do sistema.

1.2.2 Efeito das impurezas de zinco nos cupratos

Em oposição aos supercondutores convencionais, cupratos são muito sensíveis a dopagem de impurezas não-magnéticas. Além da dopagem nos reservatórios de carga, o próprio plano de CuO_2 pode ser dopado. Ni, Mg, Fe e Zn são exemplos de átomos que substituem o Cu nos planos de CuO_2 . O efeito em geral é destruir a ordem magnética e a supercondutividade nesses materiais. De fato, conforme ilustrado na Fig. 9, o efeito de todas essas impurezas é diminuir T_c .

Figura 9 – A temperatura crítica em função da concentração de dopante para vários elementos. [9]

Nessa tese, focaremos em estudar o efeito do Zn como impureza. A escolha do elemento zinco é devida a facilidade da troca de íons com o elemento cobre e por seu raio iônico similar, o que preserva a estrutura dos planos de CuO_2 no material. Experimentalmente, observa-se que a introdução de uma dopagem z de Zn produz um decaimento linear de T_c na forma

$$\frac{T_c(x, z)}{T_c(x, 0)} = 1 - \frac{z}{z_c}, \quad (1.56)$$

onde z_c é a dopagem crítica de Zn para a qual $T_c = 0$.

Diferentes modelos tentaram explicar o efeito das impurezas não-magnéticas nos cupratos. Alguns deles são:

Potencial de impureza: Nesses modelos, as impurezas são descritas por um potencial de impureza. Esse potencial espalha os elétrons e impede a formação de pares de Cooper. Esse efeito também é chamado de quebra de pares (*pair breaking*). Esse modelo descreve bem o decaimento para baixas dopagens, mas falha perto de z_c [9].

Quebra de coerência: Modelos que associam uma perda de coerência local dos pares de Cooper, levando a um material que, apesar de supercondutor, apresenta uma resistividade finita para baixas temperaturas.

"Queijo suíço": Nesse modelo, a introdução de impurezas destrói localmente a supercondutividade. Teremos então ilhas supercondutoras em uma matriz isolante, de forma similar a buracos em um queijo suíço. A inhomogeneidade no sistema leva a diminuição da T_c global.

Modelos de "listras" (*stripes*): Nesse modelo, a destruição da supercondutividade se dá através das listras (*stripes*, no original em inglês), defeitos que aparecem em alguns cupratos que apresentam tanto ordenamento magnético quanto de carga [10]. Isso leva a uma perda de energia cinética, efetivamente diminuindo T_c .

Nessa tese, tentaremos entender como a dopagem por zinco pode suprimir a supercondutividade. Iremos mostrar que o acoplamento da interação supercondutora é afetado diretamente pela concentração de zinco na amostra, afetando o emparelhamento de Cooper. Isso deve alterar o comprimento de coerência (essencialmente, o raio do par de Cooper). O comprimento de coerência tende a diminuir a medida que a concentração de dopantes aumenta. Como veremos adiante, isso também afeta o valor de corte (*cutoff*) de energia do modelo microscópico, que é inversamente proporcional ao comprimento de coerência. Além disso, espera-se que a velocidade dos portadores de carga decaia, visto que ilhas isolantes se formam quando os dopantes são introduzidos no material [9]. A partir de nossas conjecturas, iremos propor um modelo microscópico e mostrar como nossos resultados se comparam com os dados experimentais.

2 Teoria sem zinco

Neste capítulo iremos apresentar nossa teoria que descreve os cupratos supercondutores sem a adição de impurezas magnéticas, como o zinco. A teoria aqui apresentada servirá de base para o próximo capítulo, quando tentaremos descrever os efeitos das impurezas de zinco nos cupratos.

Na próxima seção, propomos um modelo que contem a física básica nos planos de CuO_2 . Em seguida, iremos deduzir a expressão para a temperatura crítica supercondutora e comparar o diagrama de fase supercondutor com os dados experimentais. Finalmente, deduziremos uma expressão para a resistividade e também iremos comparar nossos resultados com os dados experimentais.

2.1 Modelo para os cupratos

Como discutido na Seção 1.2, o elemento comum a todos os cupratos é o plano de CuO_2 na chamada rede de Lieb, mostrada na Fig. 2.1. É natural então esperar que eles sejam o elemento principal na descrição física desses materiais. Os íons de cobre nesse plano apresentam o orbital $3d_{x^2-y^2}$, enquanto os de oxigênio apresentam orbitais $2p_x$ e $2p_y$. O modelo mais completo para descrever esse sistema é o modelo de Hubbard de 3 bandas [11], que consideram o modelo de Hubbard com esses três orbitais. Como o termo de interação Coulombiana do cobre é grande, os elétrons nesses orbitais tendem a ficar localizados, enquanto os elétrons no O são itinerantes. De fato, o termo de repulsão Coulombiana é tão grande, que o composto sem dopagem é um isolante de carga antiferromagnético, descrito aproximadamente pelo modelo de Heisenberg [11–13].

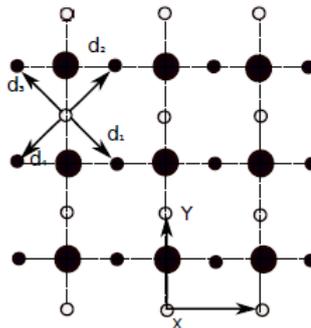


Figura 10 – A rede de CuO_2 . Grandes círculos são íons de Cu. Pequenos círculos escuros e brancos são íons de O. Observe que eles formam uma rede bipartida com os vetores primitivos \mathbf{X} e \mathbf{Y} . Estes apontam ao longo das direções \hat{x} , \hat{y} , que estão alinhadas com a direção dos íons de Cu, de acordo com a convenção. [1].

Além dos planos de CuO_2 , os cupratos apresentam camadas que podem ser interpretados como reservatórios de carga nesses sistemas. Por exemplo, no LSCO, uma porcentagem x do La é substituída por Sr. Como a configuração eletrônica do Sr tem

mais elétrons que a do La, há uma absorção de elétrons dos orbitais de O, implicando em uma dopagem do sistema com buracos. A introdução da dopagem no sistema muda suas propriedades físicas.

O modelo de Hubbard de 3 bandas dopado leva ao modelo de Spin-Fermion-Hubbard [1, 11], que descreve a dinâmica dos buracos itinerantes do O e os spins localizados no Cu. Esse Hamiltoniano é da forma

$$H_{SFH} = H_0 + H_U + H_{AF} + H_K, \quad (2.1)$$

onde H_0 é o termo do *hopping* responsável pela energia cinética entre os buracos, H_U é a repulsão Coloumbiana dos buracos, H_{AF} é a interação antiferromagnética entre spins localizados e H_K é a interação Kondo dos spins com os buracos itinerantes.

O termo de Kondo é a representação magnética da hibridização entre os orbitais d do Cu e os buracos no O. Devido a distribuição de carga dos orbitais d e p , haverá uma dimerização da rede do O e ela se dividirá na subrede A , em que os buracos tem orbital p_x , e B , em que os buracos tem orbital p_y , conforme representado na Fig. 2.1.

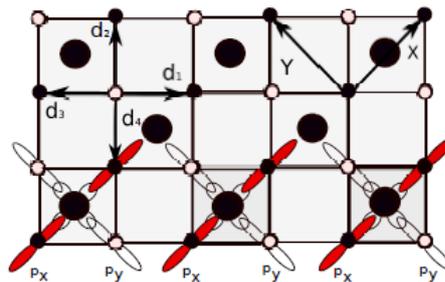


Figura 11 – A rede CuO_2 : Pequenos círculos escuros e brancos são íons de O e o círculo grande preto íons de Cu; uma visão da rotação em 45 graus, o íon do O p_y se hibridiza com o Cu conforme o desenho destacado em vermelho. [8]

Cada íon de cobre é cercado por 4 buracos, dois deles ficam localizados na subrede A e dois na subrede B , de forma que os termos na Eq. (2.1) são descritos por

$$\begin{aligned} H_0 &= -t_p \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \sum_{\sigma} \psi_{A,\sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}) \psi_{B,\sigma}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + hc \\ H_U &= U_p \sum_{\mathbf{R}} n_{\uparrow}^A n_{\downarrow}^A + U_p \sum_{\mathbf{R}+\mathbf{d}} n_{\uparrow}^B n_{\downarrow}^B \\ H_{AF} &= J_{AF} \sum_{\langle IJ \rangle} \mathbf{S}_I \cdot \mathbf{S}_J \\ H_K &= J_K \sum_I \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}+\mathbf{d} \in I} \mathbf{S}_I \cdot [\mathcal{S}_A(\mathbf{R}) + \mathcal{S}_B(\mathbf{R} + \mathbf{d})]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Na expressão acima,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_A(\mathbf{R}) &= \frac{1}{2} \psi_{A\alpha}^{\dagger}(\mathbf{R}) \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{A\beta}(\mathbf{R}) \\ \mathcal{S}_B(\mathbf{R} + \mathbf{d}) &= \frac{1}{2} \psi_{B\alpha}^{\dagger}(\mathbf{R} + \mathbf{d}) \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{B\beta}(\mathbf{R} + \mathbf{d}), \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde $\sigma_{\alpha\beta}$ são matrizes de Pauli e representam os spins dos buracos, i, j indicam as posições do átomo de cobre, \mathbf{R} é a posição na subrede A do oxigênio, $\mathbf{d}_i, i = 1..4$ são os vetores conectando cada sítio da subrede A com os quatro vizinhos de \mathbf{R} , que pertencem a subrede B , denotados por \mathbf{d}_i , mostrados nas Figs. 2.1 e 2.1. Explicitamente:

$$\mathbf{d}_1 = \frac{\mathbf{X} - \mathbf{Y}}{2}, \quad \mathbf{d}_2 = \frac{\mathbf{X} + \mathbf{Y}}{2}, \quad \mathbf{d}_3 = \frac{-\mathbf{X} + \mathbf{Y}}{2}, \quad \mathbf{d}_4 = \frac{-\mathbf{X} - \mathbf{Y}}{2}, \quad (2.4)$$

$\mathbf{X} = a\hat{x}$ e $\mathbf{Y} = a\hat{y}$ são os vetores primitivos da rede de cobre com parâmetro de rede a . $\psi_{C\sigma}^\dagger(\mathbf{R})$ são operadores de criação de buracos na subrede $C = A, B$, com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e na posição \mathbf{R} . $n_{C\sigma}(\mathbf{R}) = \psi_{C\sigma}^\dagger \psi_{C\sigma}$ representa a densidade de buracos na subrede C no sítio \mathbf{R} com spin σ . t_p é o parâmetro de *hopping* entre a rede de oxigênio nas subredes, U_p é a repulsão columbiana entre os buracos de O , J_{AF} o acoplamento antiferromagnético entre os íons de Cu vizinhos, e J_K é o parâmetro de acoplamento Kondo, entre buracos itinerantes do oxigênio e os íons do cobre.

Deve-se fazer algumas aproximações para conseguir obter as soluções desse Hamiltoniano. Primeiro, devemos realizar um traço sobre os graus de liberdade localizados, representados pelo spins do cobre, o que é feito a partir do modelo sigma não-linear [3]. Posteriormente, o termo de hopping no oxigênio é tratado de forma perturbativa em relação ao termo de Hubbard. Esses cálculos são longos e descritos em detalhe nas Refs. [1, 14].

Após essas operações, um Hamiltoniano efetivo total entre os buracos itinerantes é obtido. Ele pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} H_{eff}[\psi] = & -t \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \psi_{A\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \psi_{B\sigma}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + hc \\ & -g_S \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \left[\psi_{A\uparrow}^\dagger(\mathbf{R}) \psi_{B\downarrow}^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + \psi_{B\uparrow}^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \psi_{A\downarrow}^\dagger(\mathbf{R}) \right] \\ & \times \left[\psi_{B\downarrow}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \psi_{A\uparrow}(\mathbf{R}) + \psi_{A\downarrow}(\mathbf{R}) \psi_{B\uparrow}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \right] \\ & -g_P \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \left[\psi_{A\uparrow}^\dagger(\mathbf{R}) \psi_{B\uparrow}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + \psi_{A\downarrow}^\dagger(\mathbf{R}) \psi_{B\downarrow}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \right] \\ & \times \left[\psi_{B\uparrow}^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \psi_{A\uparrow}(\mathbf{R}) + \psi_{B\downarrow}^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \psi_{A\downarrow}(\mathbf{R}) \right]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Esse modelo é dividido em três partes. A primeira, é o termo de hopping que é igual ao termo presente no modelo spin-fermion-Hubbard. A segunda, é um termo de interação atrativo entre buracos proporcional a g_S , que vai gerar a formação de pares de Cooper e é responsável pelo estado supercondutor. A terceira, é uma interação repulsiva entre buracos proporcional a g_P , que vai gerar a formação de éxcitons e está associada com a fase pseudogap.

Os acoplamentos g_S e g_P são obtidos através do modelo spin-fermion-Hubbard e

tem a forma:

$$g_S = \frac{J_K^2}{J_{AF}}, \quad g_P = \frac{2t_p^2}{U_p}. \quad (2.6)$$

Conforme descrito em detalhe na Ref. [1], esses acoplamentos obtidos através de ajustes com os dados experimentais apresentam um excelente acordo com estudos anteriores do modelo spin-fermion-Hubbard, o que sinaliza que a Eq. (2.5) é a teoria efetiva correta para esse modelo.

Usando a transformação de Hubbard-Stratonovich [3], reescrevemos o Hamiltoniano efetivo para efetivamente cancelar os termos quárticos dos campos fermiônicos:

$$\begin{aligned} H_{eff}[\Phi, \chi, \Psi] = & -t_p \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \sum_{\sigma} \psi_{A,\sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}) \psi_{B,\sigma}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + hc \\ & + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \Phi(\mathbf{d}_i) \left[\psi_{A\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R}) \psi_{B\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + \psi_{B\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \psi_{A\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{R}) \right] + hc \\ & + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \chi(\mathbf{d}_i) \left[\psi_{A\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R}) \psi_{B\uparrow}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + \psi_{A\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{R}) \psi_{B\downarrow}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \right] + hc \\ & + \frac{1}{g_S} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i} \Phi^{\dagger}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \Phi(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) + \frac{1}{g_P} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}_i \in \mathbf{R}} \chi^{\dagger}(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i) \chi(\mathbf{R} + \mathbf{d}_i). \end{aligned} \quad (2.7)$$

O preço por eliminar os termos quárticos é introduzir dois novos operadores. Eles são:

$$\Phi^{\dagger}(\mathbf{R}, \mathbf{d}_i) = g_S \left[\psi_{A\uparrow}^{\dagger} \psi_{B\downarrow}^{\dagger} + \psi_{B\uparrow}^{\dagger} \psi_{A\downarrow}^{\dagger} \right], \quad (2.8)$$

que representa a criação de pares de Cooper, e

$$\chi^{\dagger}(\mathbf{R}, \mathbf{d}_i) = g_P \left[\psi_{A\uparrow}^{\dagger} \psi_{B\uparrow} + \psi_{A\downarrow}^{\dagger} \psi_{B\downarrow} \right], \quad (2.9)$$

que cria éxcitons.

Os valores esperados desses operadores são identificados como os parâmetros de ordem. $\Delta = \langle \Phi \rangle$ é o parâmetro de ordem do estado supercondutor e $M = \langle \chi \rangle$ é o parâmetro de ordem da fase pseudogap.

No espaço de momentos, o Hamiltoniano é expresso por:

$$\begin{aligned} H_{eff}[\phi, \chi, \psi] = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \left[\psi_{A\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi_{B\sigma}(\mathbf{k}) + hc \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \left[\psi_{A\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \psi_{B\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) + \psi_{B\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi_{A\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \right] + hc \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) \left[\psi_{A\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi_{B\sigma}(\mathbf{k}) \right] + hc \\ & + \frac{1}{g_S} \sum_{\mathbf{k}} \Phi^{\dagger}(\mathbf{k}) \Phi(\mathbf{k}) + \frac{1}{g_P} \sum_{\mathbf{k}} \chi^{\dagger}(\mathbf{k}) \chi(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde $\epsilon(\mathbf{k})$ é a energia cinética, dada por:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -t \sum_{i=1,\dots,4} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_i}. \quad (2.11)$$

Introduzindo o férmion de Nambu:

$$\Psi_a = \begin{pmatrix} \psi_{A,\uparrow,a} \\ \psi_{B,\uparrow,a} \\ \psi_{A,\downarrow,a}^\dagger \\ \psi_{B,\downarrow,a}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

podemos escrever o Hamiltoniano em campo médio como:

$$H_{eff}[\Delta, M, \Psi] = \frac{1}{g_S} \sum_{\mathbf{k}} |\Delta(\mathbf{k})|^2 + \frac{1}{g_P} \sum_{\mathbf{k}} |M(\mathbf{k})|^2 + \sum_{\mathbf{k}} \Psi_a^\dagger(k) \mathcal{H}(k) \Psi_a(k). \quad (2.13)$$

onde \mathcal{H} é chamado de Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes, [4]

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon - M & 0 & -\Delta \\ \epsilon - M^* & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta^* & 0 & -\epsilon + M^* \\ -\Delta^* & 0 & -\epsilon + M & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Em campo médio, as energias das excitações fermiônicas do sistema podem ser expressas pelo autovalores de \mathcal{H} , que são

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + |M(\mathbf{k})|^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}. \quad (2.15)$$

Antes de prosseguirmos para as propriedades termodinâmicas desse modelo, é interessante notar que a criação das subredes A e B , devido a hibridização do Cu com o O, leva a formação de um parâmetro de ordem com simetria d nesse modelo. De fato, a transformada de Fourier de Δ é

$$\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{i=1,\dots,4} \Delta(\mathbf{d}_i) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_i}, \quad (2.16)$$

em que :

$$\Delta(\mathbf{d}_{1,3}) = -\Delta(\mathbf{d}_{2,4}) = \frac{-\Delta_0}{2}, \quad (2.17)$$

onde \mathbf{k} é o vetor de onda com suas componentes ao longo das direções \mathbf{X} e \mathbf{Y} da rede original. Portanto, usando a Eq. ((2.4)), temos:

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 \left[\cos \frac{(k_x + k_y)a}{2} - \cos \frac{(k_x - k_y)a}{2} \right], \quad (2.18)$$

o que caracteriza uma onda d . Da mesma forma, M também apresenta uma onda d . O fato desses parâmetros de ordem apresentarem simetria d está de acordo com as estruturas nodais observadas nos cupratos [1, 15].

2.2 Temperatura crítica supercondutora

Um dos grandes problemas para a descrição física dos cupratos é que a densidade de portadores de carga por plano de CuO_2 , que chamaremos de $d(x)$, não é conhecida. Contudo, no nosso modelo, a densidade de portadores de carga total nos N planos de CuO_2 deve ser dada pela soma sobre o operador número de buracos, que é dado por

$$\sum_{p=1}^N \sum_{C=A,B} \sum_{\sigma} \Psi_{C,\sigma,p}^{\dagger} \Psi_{C,\sigma,p}, \quad (2.19)$$

onde introduzimos um novo grau de liberdade p , ligado aos diferentes planos de CuO_2 , que introduz um vínculo em nossa teoria,

$$Nd(x) - \sum_{p=1}^N \sum_{C=A,B} \sum_{\sigma} \Psi_{C,\sigma,p}^{\dagger} \Psi_{C,\sigma,p} = 0. \quad (2.20)$$

Para descrever a termodinâmica desse sistema, utilizaremos o formalismo de integral de trajetórias para escrever a função de partição desse sistema quântico [3]. Nesse formalismo, podemos colocar o vínculo da Eq. (2.19) através de um multiplicador de Lagrange λ [16], cujo valor no estado termodinâmico é o potencial químico μ [3]. Dessa forma, a função de partição do sistema se torna

$$Z = \frac{1}{Z_0} \int D\Psi \int D\Psi^{\dagger} D\Delta DMD\lambda e^{-\int \int [-\frac{|\Delta|^2}{g_S} - \frac{|M|^2}{g_P} - \lambda Nd(x) + \Psi^{\dagger}(i\partial_{\tau}I - \mathcal{H} - \lambda I_z)\Psi] d^2\mathbf{r}d\tau}, \quad (2.21)$$

onde Z_0 é uma constante de normalização, I corresponde à matriz identidade e I_z é uma matriz diagonal com elementos $(1, 1, -1, -1)$.

Integrando sobre os campos de Nambu, podemos expressar o potencial grande-canônico em termos de um potencial efetivo. Ademais, usando a aproximação de campo médio, esse potencial é dado pelos valores de campo médio de Φ , χ e λ ,

$$Z = \int D\Phi D\chi D\lambda e^{-\int \int V_{eff}(\Phi, \chi, \lambda) d^2\mathbf{r}d\tau} \approx e^{-\int \int V_{eff}(\Phi, \chi, \lambda) d^2\mathbf{r}d\tau} = e^{-\beta\Omega[\Delta, M, \mu]}, \quad (2.22)$$

onde

$$V_{eff}[\Delta, M, \mu]A = \frac{|\Delta|^2}{g_S} + \frac{|M|^2}{g_P} + N\mu d(x) - \frac{N}{\beta} Tr \ln[i\partial_{\tau} + \mathcal{H} - \mu\mathcal{N}]. \quad (2.23)$$

Podemos fazer agora as transformadas de Fourier, tanto no espaço, quanto no tempo imaginário, para obtermos

$$\begin{aligned} V_{eff}[\Delta, M, \mu] &= \frac{|\Delta|^2}{g_S} + \frac{|M|^2}{g_P} + N\mu d(x) \\ &- \frac{N}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=\pm 1} \int \frac{a^2 d^2k}{4\pi^2} \ln \left[\omega_n^2 + (\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + |M(\mathbf{k})|^2} + l\mu)^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2 \right], \end{aligned} \quad (2.24)$$

onde $\hbar\omega_n = (2n + 1)\pi k_B T$ são as frequências de Matsubara [3, 17].

No limite termodinâmico, Δ , M e μ minimizam Ω . Portanto, devem satisfazer:

$$2|\Delta| \left(\frac{1}{g_s} - NT \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l\pm 1} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\omega_n^2 + (\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + |M(\mathbf{k})|^2 + l\mu)^2 + |\Delta|^2} \right) = 0, \quad (2.25)$$

$$2|M| \left(\frac{1}{g_p} - NT \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l\pm 1} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1 + l\mu/\sqrt{\epsilon^2 + |M(\mathbf{k})|^2}}{\omega_n^2 + (\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + M^2 + l\mu)^2 + |\Delta|^2} \right) = 0, \quad (2.26)$$

$$Nd(x) - NT \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l\pm 1} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \frac{2l\sqrt{\epsilon^2 + |M(\mathbf{k})|^2} + l\mu}{\omega_n^2 + \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + |M(\mathbf{k})|^2} + (l\mu)^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2} = 0, \quad (2.27)$$

que são equações autoconsistentes de Δ , M e μ e envolvem a temperatura T e a dopagem x . Com o uso das equações acima, podemos determinar como os parâmetros de ordem dependem de T e x .

O processo para tratar essas equações é descrito em detalhes nas Refs. [1, 7, 18] e mostram que não há coexistência entre Δ e M , ou seja, se $\Delta \neq 0$, necessariamente $M = 0$, e vice-versa. Além disso, podemos obter as temperaturas críticas em que Δ e M vão a zero, chamadas respectivamente de T_c e T^* , e como elas mudam com a dopagem. A expressão obtida para $T_c(x)$ é

$$T_c(x) = \frac{\frac{\alpha\eta(g_s N)}{2g_c}}{\ln 2 + \ln \cosh\left[\frac{\mu_S(x)}{2T_c(x)}\right]}. \quad (2.28)$$

Na expressão acima, temos vários elementos; o primeiro é a função adimensional

$$\eta(Ng) = \frac{Ng - g_c}{Ng}, \quad (2.29)$$

que controla o comportamento de T_c com o acoplamento. Como T_c é positivo, η também precisa ser positiva, o que só acontece quando Ng é maior que o acoplamento crítico g_c . Além disso, note que η é uma função crescente de g , mas que satura em 1 para $g \gg g_c$. Os planos entram como um fator multiplicativo no acoplamento.

g_c é definido como

$$g_c = \frac{\alpha}{\Lambda}, \quad (2.30)$$

onde $\alpha = 2\pi v^2$, em que $v \approx 2ta$ é a velocidade dos portadores de carga, e Λ é um *cutoff* em energia, relacionado com o comprimento de coerência ξ desses materiais, que está ligado ao tamanho do par de Cooper. Nos cupratos, esse comprimento de coerência é muito menor, da ordem de 10 Å, enquanto em supercondutores convencionais é da ordem de 500 Å.

Esse *cutoff* de energia essencialmente indica a escala de energia abaixo da qual podemos considerar os portadores de carga formando os pares de Cooper como quasipartículas e está relacionado com T_c . Reescrevendo o cutoff em termos de v e ξ , temos:

$$\Lambda \approx \frac{2\pi v}{\xi} \approx \frac{\sqrt{2\pi\alpha}}{\xi}, \quad (2.31)$$

e vemos que os menores ξ nos cupratos estão relacionados a Λ e, conseqüentemente, com T_c 's mais altos.

Usando a expressão acima, podemos reescrever g_c como:

$$g_c = \frac{\alpha}{\Lambda} = \frac{\Lambda}{2\pi} \xi^2. \quad (2.32)$$

Além disso, como visto na Eq. (2.28), a temperatura crítica, T_c , depende do potencial químico, μ_S , (que, por sua vez, depende da função desconhecida $d(x)$). Propomos, então, o seguinte *ansatz*,

$$\mu_0 = 2\gamma(g_S)(x_0 - x), \quad (2.33)$$

onde x_0 é o valor da dopagem ótima quando T_c é máximo e γ é um parâmetro que devemos ajustar, uma vez que $d(x)$ não é conhecido a priori. Utilizando essa expressão, vemos que, em $x = x_0$, $\mu = 0$ e o cosh na Eq. (2.28) se torna 1. Logo,

$$T_c(x = x_0) \equiv T_{max} = \frac{\Lambda}{2 \ln 2} \eta(Ng_S). \quad (2.34)$$

Assim, obtivemos uma equação para a temperatura crítica no ponto de dopagem ótima, $x = x_0$, que pode ser comparada com os resultados para T_c na Teoria BCS, como visto na Seção 1.1.3. Note que, em ambos os casos, T_c depende da escala de energia e são funções crescentes da constante de acoplamento da interação supercondutora.

Conforme a ref. [1], podemos obter os parâmetros desse modelo usando os valores experimentais de x_0 e T_{max} e ajustando γ . As curvas obtidas são *domos* centrados em x_0 , que descrevem muito bem os dados experimentais, como mostrado na Fig. 12 para o LSCO.

2.3 Teoria para a resistividade

Os cupratos apresentam propriedades curiosas não apenas no seu estado supercondutor, mas também no seu estado normal. Uma das formas de investigar o estado normal de um material é olhando para a sua resistividade. Em especial, a forma como a resistividade depende da temperatura indica se um material é um isolante, quando a resistividade diminui com a temperatura, ou um metal, quando ela aumenta com a temperatura. Metais convencionais são bem descritos pela teoria de líquido de Fermi de Landau [19], que mostra que a resistividade deve ser proporcional a T^2 para temperaturas

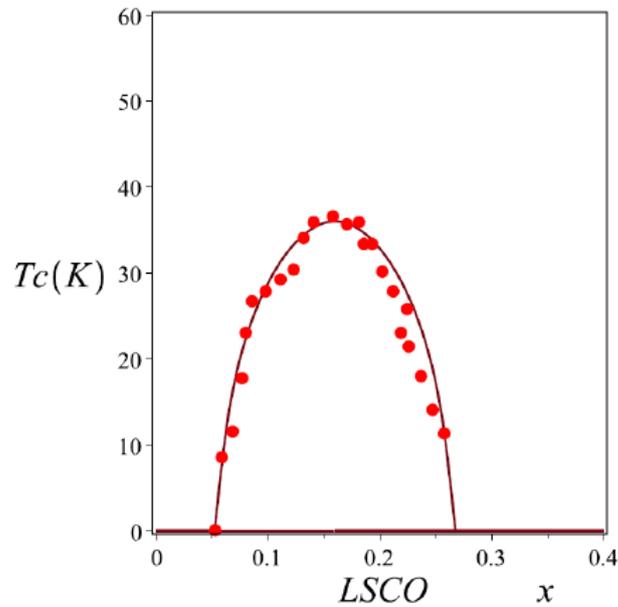


Figura 12 – A dependência da temperatura crítica em função da concentração de dopagem de *Sr*. Os círculos vermelhos são os dados experimentais. A linha sólida representa a curva teórica [1].

altas. Em comparação, os cupratos apresentam um comportamento linear em T até temperaturas altíssimas [20] na fase chamada *strange metal*. Além desse comportamento, a resistividade apresenta uma grande riqueza de comportamentos em função da temperatura e dopagem.

Na prática, a resistividade é calculada a partir da sua inversa, a condutividade. A condutividade expressa quanta corrente é gerada em um material pela aplicação de um campo externo. Um campo eletromagnético externo, expresso aqui por um potencial vetor \mathbf{A} , muda o momento $\hbar\mathbf{k}$ dos portadores de carga no termo de energia cinética por $\hbar\mathbf{k} \rightarrow \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}$, onde e é o módulo da carga do elétron. \mathcal{E} , dado pela Eq. (2.15), se tornará então

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}) + |M(\mathbf{k})|^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}, \quad (2.35)$$

o que fará Ω depender de \mathbf{A} .

Dessa forma, podemos obter a corrente a partir de uma derivada funcional de $\Omega[\mathbf{A}]$,

$$\langle j^i \rangle = \frac{\delta \Omega[\mathbf{A}]}{\delta A^i}, \quad (2.36)$$

e a condutividade deve ser proporcional a

$$\sigma^{ij} \propto \frac{\delta \langle j^i \rangle}{\delta A^j} = \frac{\delta^2 \Omega[\mathbf{A}]}{\delta A^i \delta A^j}. \quad (2.37)$$

A expressão exata da corrente é dada pela fórmula de Kubo [2]. No limite de condutividade de corrente contínua (DC),

$$\sigma_{DC}^{ij} = \lim_{\omega \rightarrow 0, \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{1}{\omega NV} [1 - \exp(-\beta \hbar \omega)] \frac{\delta^2 \Omega[\mathbf{A}]}{\delta A^i \delta A^j}, \quad (2.38)$$

onde consideramos que \mathbf{A} tenha um certo momento \mathbf{k} e frequência ω e $V = da^2$ é o volume da célula unitária por plano de CuO_2 , com d sendo a distância entre planos.

Conforme discutido em detalhe nas Refs.[6, 7, 15], essa equação leva à expressão para a resistividade no estado normal ($\Delta = 0$) na ausência de campos magnéticos,

$$\rho(x, T) = BT^2 G \left(\frac{M(x, T)}{k_B T}, \frac{\mu(x, T)}{k_B T} \right), \quad (2.39)$$

onde

$$B = \frac{h}{e^2} \frac{d}{2\pi} \left(\frac{a}{\hbar v} \right)^2 k_B^2 \approx 3.62 d \times 10^{-4} \mu\Omega\text{cm}/K^2, \quad (2.40)$$

é uma constante que depende apenas da distância entre os planos de CuO_2 e

$$G \left(\frac{M(x, T)}{k_B T}, \frac{\mu(x, T)}{k_B T} \right) = \frac{M/(k_B T)}{2 \sinh \left(\frac{M}{k_B T} \right)} \left[\cosh \left(\frac{M}{k_B T} \right) + \cosh \left(\frac{\mu}{k_B T} \right) \right] \quad (2.41)$$

é uma função de escala, que depende das razões $K_1 = M/(k_B T)$ e $K_2 = \mu/(k_B T)$. M e μ tem valores dependendo das fases dos materiais, de forma que o comportamento da resistividade, e, em especial, dessa função, determina o diagrama de fase dos cupratos, conforme ilustrado na Fig. 13.

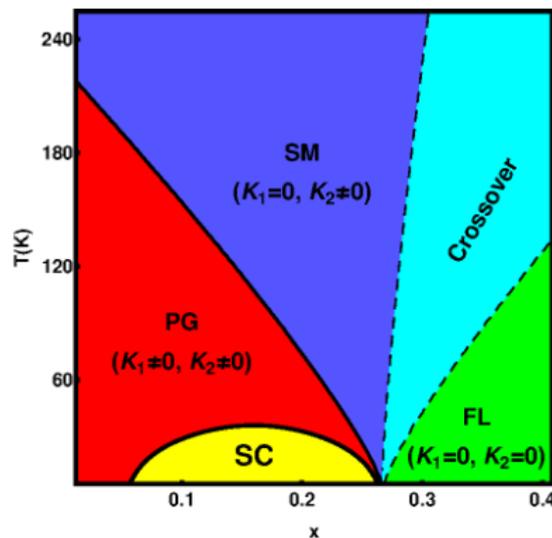


Figura 13 – Diagrama de fase do LSCO obtido a partir do comportamento resistivo e utilizando a Eq. (2.39). A fase amarela é a supercondutora, onde $\rho = 0$, a vermelha é a fase do *pseudogap*, em que ρ tem um comportamento exponencial, a azul escuro é a fase *strange metal*, em que $\rho \tilde{T}$, a azul claro é a fase de *crossover*, em que $\rho \tilde{T}^{1.6}$ e a verde é a fase de líquido de Fermi, em que ρT^2 . As linhas são as expressões teóricas descritas na Seção 2.1. Figura retirada da Ref. [6]

Nessa dissertação estaremos especialmente interessados na expressão da resistividade na fase *strange metal*. Nessa fase $M \rightarrow 0$ e $\mu \rightarrow Dk_B T$, devido ao comportamento crítico

[6]. Impondo a continuidade da resistividade na transição entre a fase *pseudogap* e *strange metal*, chegamos à expressão [6]

$$\rho_{SM} = BCT^*(x)T, \quad (2.42)$$

onde $C = \cosh^2(D/2)$. Note que se C for constante, a dependência de ρ_{SM} com a dopagem vem apenas de $T^*(x)$, indicando que há uma relação entre a resistividade linear e a temperatura crítica. Isso pode ser entendido usando o Hamiltoniano da Eq. (2.10), já que os éxcitons vão espalhar os elétrons, sendo, em última instância, responsáveis pela resistividade nesse modelo. Na transição, o parâmetro de ordem dos éxcitons vai a zero e a única escala de energia se torna a temperatura em que isso acontece, que é justamente T^* . Na Ref. [6], essa relação foi verificada analisando o comportamento do coeficiente linear com a dopagem que acompanha a curva de T^* para valores de x acima da dopagem ótima.

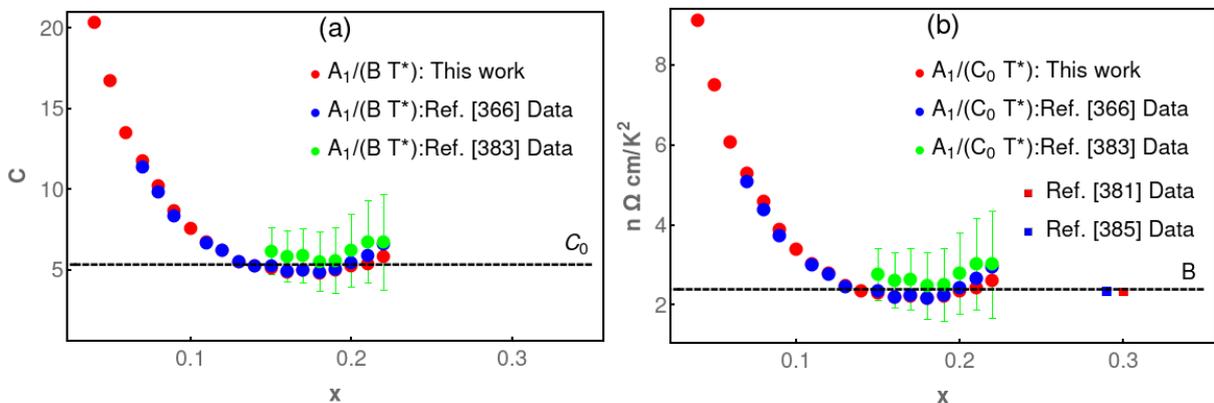


Figura 14 – Evolução do coeficiente linear da resistividade A_1 dividido por BT^* , mostrando que ele se aproxima de uma constante C_0 para dopagens altas. Os pontos são os valores do ajuste com os dados experimentais, como citado nas referências na Ref. [6]. A linha tracejada é para um valor constante de C_0 . [6]

No próximo capítulo, faremos uma análise de como a inserção do zinco altera o modelo apresentado nesse capítulo e, em especial, como altera o coeficiente B da resistividade.

3 Efeito da impureza de zinco

Como mencionado no Cap. 1, o principal efeito da dopagem de impurezas não-magnéticas nos cupratos é a destruição da supercondutividade. Nesse capítulo, discutiremos como esse efeito pode ser obtido a partir do modelo estudado no Cap. 2.

Iniciaremos a Seção 3.1 discutindo o efeito do zinco nos acoplamentos J_{AF} e J_K do modelo spin-fermion-Hubbard, vistos na Eq. (2.2). Posteriormente, na Seção 3.2 mostramos como isso muda a equação para T_c . Finalmente, na Seção 3.3 discutimos a nossa abordagem para o problema, assumindo que a dopagem com zinco não apenas mude os acoplamentos, mas as propriedades do estado normal e supercondutor do material. Ao longo da seção, iremos comparar os resultados obtidos com os dados experimentais apresentados nas Refs. [9, 21, 22].

3.1 Efeito do Zinco nos acoplamentos J_K e J_{AF}

O zinco substitui o cobre no plano de CuO_2 . Como ele não apresenta spin 1/2, podemos enxergar seu efeito como uma impureza não-magnética em uma subrede de momentos magnéticos localizados. Isso faz com que, tanto o acoplamento Heisenberg J_{AF} , entre átomos de cobre, quanto o acoplamento Kondo J_K , entre os átomos de cobre e os buracos de oxigênio, diminuam. Seguindo a Ref. [23], que estudou como a substituição de Cu por Zn leva à destruição da ordem antiferromagnética no LSCO para baixas dopagens, assumimos que o efeito da impureza seja descrito por um processo de percolação na rede e assumimos que os acoplamentos sejam alterados da seguinte forma,

$$J_{AF}(z) = J_{AF}(0)K(z) \text{ e } J_K(z) = J_K(0)P_\infty(z), \quad (3.1)$$

sendo, $P_\infty = 1 - z$ a fração dos sítios preservados da rede original, e $K(z) = 1 - 3z$ o fator de diluição da ligação iônica. Como o acoplamento supercondutor g_s é uma função de J_{AF} e J_K , conforme a Eq. (2.6), teremos que g_s depende de z como

$$g_s(z) = \frac{J_K^2(z)}{J_{AF}(z)} = g_s(0) \frac{(1-z)^2}{1-3z}. \quad (3.2)$$

Apesar dos dois fatores diminuírem com z , o numerador diminui de forma mais lenta que o denominador, de forma que $g(z)$ aumenta com z ! Escrevendo a Eq. (2.28) explicitamente em termos de $g(z)$, temos

$$T_c(x, z) = \frac{\Lambda/2 \left(1 - \frac{g_c}{g_s(z)} \right)}{\ln \left\{ 2 \cosh \left[\frac{\rho(x_0-x)}{T_c(x, z)} \left(\frac{g_c}{1 - \frac{g_c}{g_s(z)}} \right) \right] \right\}}, \quad (3.3)$$

onde $\rho g_c/\eta(0) = \rho g_c/(1 - g_c/g_s(0)) = \gamma$. Os valores das constantes dessa equação são fornecidos pela Ref. [1] e estão presentes na Tabela 1.

Λ (eV)	η	γ (eV)	$g_s(0)$ (eV)	g_c (eV)	x_0
0.018	0.23870	0.02	0.39406	0.3	0.16

Tabela 1 – Valores relevante aos parâmetros na fase supercondutora [1].

Conforme discutido na Ref. [9], isso não leva à diminuição de T_c com a dopagem por zinco, mas ao seu aumento! Isso indica que deve haver outros efeitos que podem ser considerados para descrever o decaimento de T_c observado experimentalmente.

3.2 Teoria auto-consistente para T_c

Como vimos na seção anterior, o termo de interação supercondutor é alterado pela presença de zinco [9]. Mas também iremos assumir que a introdução de zinco pode mudar a velocidade de portadores de carga e o comprimento de coerência ξ ou, de forma equivalente, o *cutoff* de energia Λ . Alguns outros efeitos, como a diminuição da densidade superfluida, ou o efeito da ancoragem por *stripes* não será considerada.

Nesta seção, derivamos a equação auto-consistente para temperatura crítica e na Seção 3.3.2, propomos uma expressão analítica para o comprimento de coerência em função da concentração de zinco da amostra.

Para investigar o efeito do zinco sobre a supercondutividade, primeiro escrevemos a equação para T_c em termos de variáveis adimensionais que expressam a razão dos parâmetros com e sem zinco. Assim, para v e ξ temos,

$$\tilde{v}(z) = v(0)v(z), \quad \tilde{\xi}(z) = \xi(0)\xi(z), \quad (3.4)$$

onde expressamos as grandezas em função de z com um til para posterior conveniência.

A partir dessas quantidades, encontramos que,

$$\Lambda(z) = \frac{v(z)}{\xi(z)}, \quad g_c(z) = v(z)\xi(z), \quad \eta(z) = 1 - \frac{1}{\frac{g_s(0)}{g_c(0)} - 1} \left[\frac{v(z)\xi(z)}{g_s(z)} - 1 \right], \quad (3.5)$$

em que utilizamos as Eqs. (2.29), (2.30) e (1.12) e novamente a notação em que as variáveis sem til são adimensionais.

Usando essas variáveis, escrevemos a equação para T_c como

$$\tau_c(x, z) = \frac{\Lambda(z)\eta(z)}{\ln \left\{ 2 \cosh \left[\frac{\zeta}{\tau_c(x, z)} \left(1 - \frac{x}{x_0} \right) \frac{g_c(z)}{\eta(z)} \right] \right\}}, \quad (3.6)$$

onde $\tau_c(x, z) = T_c(x, z) / T_{max}(z = 0)$, onde $T_{max}(z = 0)$ é a temperatura crítica na dopagem ótima e ausência de zinco $T_c(x = x_0, z = 0)$, e $\zeta = 1.032$ é o único parâmetro livre da teoria, proposto anteriormente para o modelo na ausência da dopagem por zinco [8].

A Fig. 15 mostra o valor de τ_c em função de z para a dopagem de $x = 0.15$ presentes em várias referências coletadas pela Ref. [9]. Vemos a supressão linear da forma

$$\tau_c(z) = 1 - \frac{z}{z_c}, \quad (3.7)$$

com $z_c \approx 0.029$. Nossa teoria deve reproduzir os dados experimentais, além de recair na teoria anterior quando fazemos o limite $z = 0$.

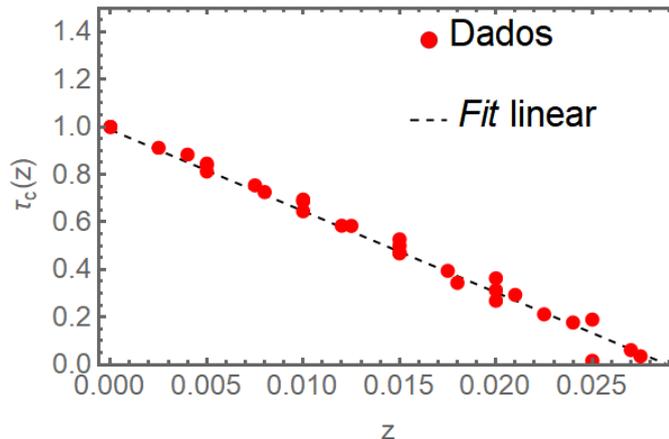


Figura 15 – Valor de τ_c em função de z . Os círculos vermelhos representam os dados experimentais coletados na Ref. [9] e a curva tracejada é a Eq. (3.7).

3.3 Nossa Conjectura

3.3.1 Velocidade dos portadores de carga

A velocidade de portadores pode ser estimada usando a Eq. (2.42) para a resistividade na fase *strange metal*. Nessa fase, a resistividade é da forma [6]

$$\rho(T) = c(x, z)T, \quad (3.8)$$

onde o coeficiente $c = B(z)C(x)T^*(x)$, com $B(z)$ dependendo de z através de

$$B(z) = \frac{1}{\hbar e^2 k_B^2} \frac{V(z)}{\tilde{v}(z)^2}, \quad (3.9)$$

e $V = a^2 d$ é o volume da célula unitária.

Vemos então que conhecendo o coeficiente α , podemos ter uma estimativa de como a velocidade muda com z . De fato,

$$\tilde{v}(z) = v(0) \sqrt{\frac{c(0)V(0)}{c(z)V(z)}}, \quad (3.10)$$

já que $V(z)$ pode ser retirado da Tabela 1 da Ref. [24].

z	$\tilde{v}(\text{m/s})$	v
0.00	8423	1
0.005	7590	0.81
0.01	7188	0.72
0.015	6894	0.66
0.02	6306	0.56
0.04	5638	0.44

Tabela 2 – Valores da velocidade de portadores obtidos a partir dos ajustes da Eq. (3.10), para dopagem $x = 0.15$.

z	$\tilde{v}(\text{m/s})$	v
0.00	8069	1
0.01	7092	0.73
0.02	6401	0.60
0.04	5476	0.45

Tabela 3 – Valores da velocidade de portadores obtidos a partir dos ajuste da Eq. 3.10, para dopagem $x = 0.2$.

Os dados da resistividade usados como base estão na Fig. 16 para as dopagens $x = 0.15$ e $x = 0.2$ e para vários valores de z . Note que um desses compostos é subdopado ($x = 0.15$) e o outro superdopado ($x = 0.2$). Vemos que o efeito da dopagem com zinco é aumentar o coeficiente linear da resistividade para altas temperaturas, o que implica que a velocidade dos portadores diminui.

Figura 16 – Dependência da temperatura com a resistividade a partir da substituição por Zn. [25].

Com os dados de ρ da Ref. [25], efetuamos um ajuste linear para concentrações de dopagens $x = 0.15$ e $x = 0.2$, e, a partir desses coeficientes, estimamos $\tilde{v}(z)$, conforme mostrado nas Tabelas 2 e 3.

Dos dados experimentais, vemos que $v(z)$ basicamente tem um decaimento linear da forma

$$v(z) = 1 - \alpha z, \quad (3.11)$$

com $\alpha \approx 12.761$ para $x = 0.15$ e $\alpha \approx 20$ para $x = 0.2$. Se só utilizarmos esse comportamento para a expressão de T_c , temos o comportamento mostrados na Fig. 17 e vemos que T_c ainda aumenta ao invés de diminuir.

A partir desse comportamento, podemos utilizar duas abordagens para tentar obter o decaimento linear. Na primeira, fazemos uma suposição sobre o comportamento de τ_c e tentamos obter os valores dos coeficientes para reproduzir o decaimento. Na segunda, dado o decaimento da velocidade, podemos supor um comportamento para o *cutoff* para reproduzir os dados experimentais.

figures/Tc_v.png

Figura 17 – Comparação de τ_c com os dados experimentais para $x = 0.15$ e $x = 0.2$ coletados pela Ref.[9], o *fit* linear da Eq. (3.7) e a Eq. (3.6) com $v(z) = 1 - \alpha z$ utilizando a Eq. (3.10).

3.3.2 Comprimento de coerência

Reescrevendo a Eq. (3.6) para τ_c em termos do comprimento de coerência ξ e v :

$$\tau_c(x, z) = \frac{v(z)\eta(z)/\xi(z)}{\ln \left\{ 2 \cosh \left[\frac{\zeta}{\tau_c(x, z)} \left(1 - \frac{x}{x_0} \right) \frac{\xi(z)v(z)}{\eta(z)} \right] \right\}}, \quad (3.12)$$

de forma que o comportamento de τ_c é determinado pelas razões

$$\frac{v(z)\eta(z)}{\xi(z)} \text{ e } \frac{v(z)\xi(z)}{\eta(z)}.$$

Considerando agora que ξ seja da forma

$$\xi(z) = 1 - f(z) \approx 1 - f'(0)z \quad (3.13)$$

com $f(0) = 0$, temos que

$$\frac{v\eta}{\xi} \approx 1 + \alpha_1(g_s(0), \alpha, f'(0))z \quad (3.14)$$

e

$$\frac{v\xi}{\eta} \approx 1 + \alpha'_1(\tilde{g}_s, \alpha, f'(0))z \quad (3.15)$$

também variam linearmente com z .

Assumindo que $v\eta/\xi \approx 1 - 1/z_c$, obtemos

$$f'(0) = \frac{1 - g_s(0) - z_c + 2\alpha z_c - \alpha g_s(0)z_c}{g_s(0)z_c}. \quad (3.16)$$

De forma que o comportamento de T_c é determinado por α .

O comportamento de $T_c(z)$ é mostrado na Fig. 18. Vemos que o α obtidos da resistividade descreve os dados próximos de $x = 0$, mas não explicam o comportamento perto de z_c , mas valores diferentes de α descreveriam o decaimento.

Os valores de ξ obtidos estão dispostos na Tabelas 4 e 5. Vemos que a tendência do ξ é aumentar para obtermos o decaimento linear

z	$\xi(z)$
0.00	1
0005	1.27
0.01	1.42
0.015	1.60
0.02	1.95
0.04	5.47

Tabela 4 – Tabela com os valores calculados a partir dos dados para dopagem $x = 0.15$.

z	$\xi(z)$
0.00	1
0.01	1.42
0.02	1.87
0.04	5.41

Tabela 5 – Tabela com os valores calculados a partir dos dados para dopagem $x = 0.2$.

Se, ao invés de utilizarmos essa hipótese, supusermos um decaimento de ξ , a temperatura crítica aumenta! Apesar de contra intuitivo, isso indica que ξ deve aumentar, ou, de forma equivalente, o *cutoff* tem que diminuir, pois eles são inversamente proporcionais.

3.3.3 Cutoff

Como $\Lambda = v/\xi$, a análise anterior indica que ambos v e Λ devem decair para obtermos o decaimento de τ_c .

figures/Tc_xi.png

Figura 18 – Comparação de τ_c com os dados experimentais para $x = 0.15$ e $x = 0.20$ coletados pela Ref. [9], o *fit* linear da Eq. (3.7) e a Eq. (3.6) com ξ obtido através da Eq. (3.16).

Propomos então que $\Lambda(z)$ tenha o comportamento

$$\Lambda(z) = \exp(-Az + Bz^2), \quad (3.17)$$

de forma que Λ decaia, mas se mantenha positivo. Λ está ligado com a escala típica de energia em que há formação de pares de Cooper, de forma que a diminuição da temperatura crítica pela diminuição dessa escala de energia seja razoável.

Figura 19 – Comparação de τ_c com os dados experimentais para $x = 0.15$ coletados pela Ref. [9], o *fit* linear da Eq. (3.7) e a Eq. (3.6) com diferentes comportamentos de Λ presentes na legenda.

Na Fig. 19, mostramos o comportamento de τ_c com z comparando os dados experimentais para $x = 0.15$ e $x = 0.2$, usando o ajuste linear da Eq. (3.7) e a Eq. (3.6) com diferentes $\Lambda(z)$ dados pela Eq. (3.17). Vemos que, para ambos os conjuntos de dados, é necessário assumir um comportamento quadrático para o expoente de Λ para que a curva não sature para valores altos de τ_c . O comportamento de $x = 0.15$ é bem descrito por esse Λ , enquanto para $x = 0.2$, ele descreve bem o comportamento até valores intermediários de z . No regime subdopado, a diminuição de T_c está associada a uma diminuição de Λ com comportamento exponencial enquanto para o superdopado, temos uma curva para T_c que satura para valores finitos o que não reproduz os dados experimentais.

4 Conclusões e Perspectivas

Nessa dissertação, foi discutida a supressão da supercondutividade em cupratos pela dopagem com impurezas não magnéticas.

Iniciamos discutindo a supercondutividade convencional, comentando sobre os principais aspectos fenomenológicos e expondo com detalhe a teoria BCS, que descreve a supercondutividade em supercondutores baseados na interação elétron-fônon.

Posteriormente, apresentamos os cupratos, conhecidos como supercondutores de alta temperatura crítica, bem como o papel das impurezas não-magnéticas em destruir a supercondutividade nesses materiais. O aspecto principal para descrevermos esses materiais são os planos de CuO_2 , descritos pelo modelo de Hubbard de três bandas. Levando em conta a hibridização dos orbitais de Cu e O , descrevemos, seguindo a Ref. [1], como isso leva primeiramente ao modelo spin-fermion-Hubbard e, finalmente a um modelo efetivo que inclui um termo de interação que leva à formação de pares de Cooper e outro que leva à formação de éxcitons. Utilizando uma abordagem de campo médio, a termodinâmica desse sistema é obtida, levando a uma expressão para a temperatura crítica supercondutora. Esse modelo não descreve apenas as curvas críticas, mas a resistividade no sistema [6]. Em especial, a resistividade linear em função da temperatura na fase *strange metal*.

Discutimos então se essa teoria consegue descrever a destruição da supercondutividade em cupratos pela dopagem com impurezas não magnéticas. Focamos na dopagem com zinco, visto que ele apresenta raio atômico similar ao cobre, o que não leva a uma distorção da rede. Como mostrado pela Ref. [9], a dopagem com zinco diminui os acoplamentos Heisenberg e Kondo do modelo spin-Fermion-Hubbard, o que, contudo, leva a um aumento do acoplamento supercondutor, o que não descreve a supressão da supercondutividade com a dopagem de zinco.

Utilizando a expressão para a resistividade na fase *strange metal*, estimamos a velocidade de portadores em função da dopagem de zinco e vimos que há uma supressão da velocidade, porém não suficiente para levar à diminuição da temperatura crítica.

Em seguida, estimamos como o comprimento de coerência ou, equivalentemente, o *cutoff* de energia da teoria deve ser modificado para que a diminuição de T_c possa ser explicada. Vemos que o comprimento de coerência deve aumentar de forma não-linear, ou que o *cutoff* deve diminuir exponencialmente. O *cutoff* está ligado com a escala de energia em que há uma interação atrativa nesse modelo. Portanto, a diminuição dessa escala explica a destruição da supercondutividade. Essa análise, contudo, não explica como essa diminuição exponencial acontece e uma descrição, ainda que fenomenológica, dessa supressão seria necessária para explicar a destruição da supercondutividade, o que precisa ser investigado em estudos futuros.

Bibliografia

- [1] E. C. Marino, R. O. Corrêa Jr, R. Arouca, L. H. C. M. Nunes e V. S. Alves. “Superconducting and Pseudogap Transition Temperatures in High- T_c Cuprates and the T_c Dependence on Pressure”. Em: *Superconductor Science and Technology* 33 (2020), p. 035009.
- [2] A. L. Fetter e J. D. Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Corporation, 2012.
- [3] E. C. Marino. *Quantum field theory approach to condensed matter physics*. Cambridge University Press, 2017.
- [4] J. F. Annett et al. *Superconductivity, superfluids and condensates*. Vol. 5. Oxford University Press, 2004.
- [5] S. Pereira e M. G. Félix. “100 anos de supercondutividade e a teoria de Ginzburg-Landau”. Em: *Revista Brasileira de Ensino de Física* 35 (2013), pp. 1–10.
- [6] R. Arouca e E. C. Marino. “The resistivity of high- T_c cuprates”. Em: *Superconductor Science and Technology* 34.3 (2021), p. 035004.
- [7] R. Arouca. “Quantum phase transitions in topological matter and high- T_c cuprates”. Tese de dout. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2021.
- [8] E. C. Marino, R. O. Corrêa, R. Arouca, L. H. Nunes e V. S. Alves. “Superconducting and pseudogap transition temperatures in high- T_c cuprates and the T_c dependence on pressure”. Em: *Superconductor Science and Technology* 33.3 (2020), p. 035009.
- [9] S. Schönecker. “The effect of zinc as a nonmagnetic impurity on high-temperature superconducting cuprates”. Diss. de mestr. 2020.
- [10] C. M. Smith, A. C. Neto e A. Balatsky. “ T_c Suppression in Co-Doped Striped Cuprates”. Em: *Physical review letters* 87.17 (2001), p. 177010.
- [11] V. J. Emery. “Theory of high- T_c superconductivity in oxides”. Em: *Physical Review Letters* 58.26 (1987), p. 2794.
- [12] S. R. Salinas. *Introdução a física estatística vol. 09*. Edusp, 1997.
- [13] P. Fazekas. *Lecture notes on electron correlation and magnetism*. 1st edition. World Scientific, 1999.
- [14] E. C. Marino e R. Arouca. “Magnetic field effects on the transport properties of high- T_c cuprates”. Em: *Superconductor Science and Technology* (2021).
- [15] E. Marino. “Orbital Order, Superconductivity, Pseudogap and Spectral Weight in High- T_c Cuprates”. Em: *arXiv preprint arXiv:2103.05709* (2021).
- [16] N. A. Lemos. *Mecânica analítica*. Editora Livraria da Física, 2007.

- [17] H. T. C. Stoof, K. B. Gubbels e D. Dickerscheid. *Ultracold quantum fields*. 1st edition. Springer, 2009.
- [18] R. O. Correa Jr. “Effects of doping in High- T_c superconducting cuprates”. Tese de dout. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2019.
- [19] P. Coleman. *Introduction to many-body physics*. 1st edition. Cambridge University Press, 2015.
- [20] R. A. Cooper et al. “Anomalous criticality in the electrical resistivity of $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ”. Em: *Science* 323.5914 (2009), pp. 603–607.
- [21] H Harashina et al. “Cu-site doping effects, transport and magnetic properties of high- T_c oxides and their hole concentration dependence”. Em: *Physica C: Superconductivity* 212.1-2 (1993), pp. 142–150.
- [22] G. Xiao, M. Z. Cieplak, J. Xiao e C. Chien. “Magnetic pair-breaking effects: moment formation and critical doping level in superconducting $La_{1.85}Sr_{0.15}Cu_{1-x}A_xO_4$ systems (A= Fe, Co, Ni, Zn, Ga, Al)”. Em: *Physical Review B* 42.13 (1990), p. 8752.
- [23] L. Adamska, M. B. Silva Neto e C. Morais Smith. “Competing impurities in an antiferromagnetic background”. Em: *Bulletin of the American Physical Society* 52 (2007).
- [24] K. Segawa e Y. Ando. “Charge localization from local destruction of antiferromagnetic correlation in Zn-doped $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ”. Em: *Physical Review B* 59.6 (1999), R3948.
- [25] Y Fukuzumi, K Mizuhashi, K Takenaka e S Uchida. “Universal superconductor-insulator transition and T_c depression in Zn-substituted high- T_c cuprates in the underdoped regime”. Em: *Physical review letters* 76.4 (1996), p. 684.

ANEXO A – TERMO DE AUTENTICIDADE**Termo de Declaração de Autenticidade de Autoria**

Declaro, sob as penas da lei e para os devidos fins, junto à Universidade Federal de São João Del Rei, para obtenção do título de Mestre é original, de minha única e exclusiva autoria. E não se trata de cópia integral ou parcial de textos e trabalhos de autoria de outrem, seja em formato de papel, eletrônico, digital, áudio-visual ou qualquer outro meio.

Declaro ainda ter total conhecimento e compreensão do que é considerado plágio, não apenas a cópia integral do trabalho, mas também de parte dele, inclusive de artigos e/ou parágrafos, sem citação do autor ou de sua fonte.

Declaro, por fim, ter total conhecimento e compreensão das punições decorrentes da prática de plágio, através das sanções civis previstas na lei do direito autoral¹ e criminais previstas no Código Penal², além das cominações administrativas e acadêmicas que poderão resultar em reprovação no Trabalho de Conclusão de Curso.

São João Del Rei, 30 de Junho de 2022.

Nome completo – Discente
Matrícula: – CPF:

¹ LEI N° 9.610, DE 19 DE FEVEREIRO DE 1998. Altera, atualiza e consolida a legislação sobre direitos autorais e dá outras providências.

² Art. 184. Violar direitos de autor e os que lhe são conexos: Pena – detenção, de 3 (três) meses a 1 (um) ano, ou multa.