

Universidade Estadual de Campinas.
Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Fernando Assis Garcia

Simetria do Parâmetro de Ordem em Supercondutores
Ferromagnéticos

Dissertação de Mestrado

Orientador: Guillermo G. Cabrera

Campinas - São Paulo - 2006.

Agradecimentos

Aqueles com os quais já conversei sobre muitas coisas da vida já devem ter me ouvido comparar as páginas de agradecimentos de teses e dissertações à finais de festas onde o anfitrião, enebriado pelo álcool e companhia de tantos amigos, diz amar a todos no momento de despedida. Este “amor”, distribuído assim de maneira gratuita e generalizada, acaba por perder seu significado ou, pelo o menos, não diferencia as pessoas cujas presenças realmente importaram naquela festa.

Aqui, faço a opção de ser um anfitrião comedido e vou restringir meus agradecimentos à pessoas que realmente fizeram a diferença para a realização deste trabalho ao longo destes dois anos. Os muitos amigos que não vou citar certamente me perdoarão uma vez que, sendo meus amigos, compreendem a importância que existe para mim em escrever estas linhas da maneira que estou fazendo. Então vamos lá:

Começo agradecendo ao André e ao Éric. Quando comecei a desbravar as terras da Teoria de Grupos, ainda na graduação, foi com o André que dividia e, geralmente resolvia, as minhas dúvidas. Minha ignorância em conceitos gerais da Física de Matéria Condensada era, e ainda é, diminuída com minhas conversas com o Éric. Foram com estes dois também que sempre pude ter eternas conversas sobre questões da Física e também do Mundo. Não posso deixar de escrever que é um verdadeiro privilégio estar ao lado destes dois.

Agradeço ao Orlando. O Orlando talvez não saiba, mas tem uma grande responsabilidade na minha formação como Físico. Vou ser bom com ele e dizer que dele depende apenas a parte bem sucedida da minha formação. Esta influência veio através de muitas e muitas conversas, principalmente depois de um curso, praticamente encomendado, de Teoria Clássica de Campos, que fiz na graduação. Nem preciso dizer que Éric e André também estavam neste curso.

Agora é a vez do Pedro. A vontade que o Pedro tem de compartilhar suas coisas, seu conhecimento e seus sentimentos com os amigos é impressionante. Ao longo destes dois anos acredito que ficamos mais próximos e hoje digo que este cara é meu amigo. O Pedro tem apenas o defeito de querer pagar a conta do bar quando todos se distraem. Tento compensar surpreendendo-o com uma ou outra garrafa de vinho e tentando ser um bom interlocutor para nossas conversas, tanto para os momentos mais “intelectualizados” até para aqueles que beiram (ou entram profundamente) na canalhice.

Sobre o Cabrera, meu orientador tive alguma dificuldade sobre o que escrever. Lembrei-me então de algo que li em algum momento e senti que seria apropriado: agradeço ao

Guillermo por ter desempenhado com maestria seu papel de Edmund Wilson enquanto tentei, sem grande sucesso, desempenhar meu papel de F. Scott Fitzgerald.

É claro que agradeço ao Zé Pereira, sem ele as férias em Niterói, ao lado dos amigos de sempre não seriam as mesmas. A estes amigos, DEDICO este trabalho.

Resumo

Esta dissertação tem como objetivo apresentar um estudo da simetria do parâmetro de ordem em supercondutores ferromagnéticos. Nossa abordagem é inspirada na teoria de Landau para Transições de Fase de Segunda Ordem ou, de maneira mais precisa, na idéia que uma transição de fase de segunda ordem está acompanhada por uma redução na simetria do sistema. A nova fase passa a ser descrita por um subgrupo da fase de alta simetria, implicando consequências para o parâmetro de ordem, que em nosso caso determina a estrutura do gap supercondutor. A recente descoberta da coexistência de supercondutividade e ferromagnetismo revelou o problema da classificação das possíveis simetrias do parâmetro de ordem supercondutor quando o estado normal não possui simetria de reversão temporal. Veremos que o problema é resolvido quando a simetria do estado normal é descrita por grupos magnéticos (ou co-grupos) e que a classificação dos estados supercondutores deve agora ser feita em termos das co-representações destes grupos.

Abstract

In this dissertation, we present a study of the order-parameter symmetry in ferromagnetic superconductors. Our approach is inspired on the Landau Theory of Phase Transition or, more precisely, on the idea that a second order phase transition is a symmetry breaking process where the ordered phase of the system is described by a subgroup of the highly symmetric one, leading to important consequences for the order parameter. In our case, it imposes constraints to the superconducting gap structure. The recent discovery of the coexistence of superconductivity and ferromagnetism brought the problem of the classification of such structures in the situation where time reversal symmetry is broken on the normal state. We argue that this problem is solved when one consider the description of such normal state by magnetic groups (or cgroups) and that the classification of the superconducting states must be done in terms of the corepresentations of such cgroups.

Sumário

1	Introdução.	1
2	Generalização da teoria BCS.	3
2.1	A Hamiltoniana BCS.	3
2.2	Propriedades de Baixa temperatura.	10
2.3	Classificação dos Estados Supercondutores.	14
2.4	Classes Supercondutoras	18
2.5	Exemplos	19
3	Supercondutores Ferromagnéticos	25
3.1	$ZrZn_2$	27
3.1.1	Supercondutividade em $ZrZn_2$	27
3.1.2	Ferromagnetismo em $ZrZn_2$	28
3.2	UGe_2	29
3.2.1	Supercondutividade e Magnetismo em UGe_2	30
4	Estados Supercondutores em Metais Ferromagnéticos.	33
4.1	Um esboço para a Teoria Microscópica.	33
4.2	Grupos Magnéticos.	35
4.3	Grupos Magnéticos Pontuais	37
4.3.1	Tipos de Classes Magnéticas.	37
4.3.2	Co-representações.	39
4.4	Classes supercondutoras.	42
4.4.1	Estímulo da Supercondutividade pelo Ferromagnetismo.	45
4.5	A Estrutura do Gap.	47
4.6	Teoria de Ginzburg-Landau.	56

5 Supercondutividade e Paredes de Domínios.	60
5.1 O Modelo	61
5.2 Diagrama de Fases	71
5.3 Parede Transparente	71
5.4 Caso Geral	74
5.5 Considerações Finais	74
6 Conclusões	76

Lista de Figuras

2.1	Densidade de estados: fase polar	12
2.2	Densidade de estados: fase ABM.	13
2.3	Elementos de Simetria do Grupo Cúbico.	19
2.4	Diagrama de fases para as representações 2-d.	23
2.5	Estrutura dos gaps das fases A, B e C para o caso tripleto.	23
3.1	Antigo cenário da coexistência.	26
3.2	Novo cenário de coexistência	26
3.3	Medida do Calor Específico para o UGe_2 [11].	30
3.4	Assinatura da transição: medida de resistividade [10].	31
3.5	Diagrama de fases [11].	32
4.1	Estrutura cristalina do UGe_2	55
5.1	Diagrama de fases: limite de parede transparente.	73
5.2	Parâmetro de ordem.	73
5.3	Diagrama de fases: transparência finita.	74

Capítulo 1

Introdução.

A teoria BCS [1] tem demonstrado sucesso ao explicar o fenômeno da supercondutividade para grande parte dos compostos até hoje conhecidos. De fato, foi apenas a partir da década de 80 que foram descobertos sistemas supercondutores cujo comportamento apresentava desvios daquele previsto pela teoria BCS.

Concomitantemente, muitos desenvolvimentos foram feitos no campo fenomenológico, onde a teoria de Ginzburg-Landau têm grande sucesso em descrever propriedades macroscópicas dos sistemas supercondutores, como propriedades magnéticas. Neste sentido, desde cedo, foi percebido por Ginzburg [2] que a coexistência de ferromagnetismo e supercondutividade demanda por sistemas com propriedades bastante especiais e que, mesmo que possível, poderia não vir a ser observada, dada a dificuldades experimentais que a época pareciam insuperáveis.

O ponto principal residia no fato já conhecido que campos magnéticos costumam suprimir a supercondutividade uma vez que a energia de troca poderia tornar-se maior que a de pareamento, de maneira que os pares não resistiriam e a supercondutividade estaria destruída.

O argumento de Ginzburg é correto quando considerados os ingredientes originais da teoria BCS: pareamento no estado singleto, com momento nulo, em um potencial com simetria s , não nulo em apenas uma vizinhança da superfície de Fermi e um mecanismo elétron-phonon para a realização deste pareamento.

A nova classe dos chamados supercondutores não convencionais [3] põe em evidência a necessidade de expansão deste cenário. De fato, principalmente como motivação de propostas de possíveis cenários para o ocorrência de uma fase superfluída no ${}^3\text{He}$, outras hipóteses já haviam sido considerados [4].

Especificamente, a possibilidade de pareamento tripleto muda a relação do condensado

supercondutor com o campo magnético, existindo mesmo a possibilidade de estímulo da supercondutividade por interação com o campo, como veremos no texto.

A análise da simetria do sistema revela-se de grande importância pela possibilidade de guiar a construção de uma teoria microscópica, que certamente deve contê-la. No entanto, o conhecimento de rudimentos da teoria microscópica, ao menos no nível dos trabalhos pioneiros de Anderson e Balian [4], serve como ponto de partida para a construção de uma fenomenologia, mesmo que estas teorias não sejam rigorosamente válidas para os sistemas não convencionais.

Organizamos nosso texto da seguinte maneira: no capítulo 2 apresentamos a generalização da teoria BCS e a classificação de estados que desta decorre. Aqui, nos atemos às primeiras manifestações do comportamento “anômalo” que geralmente associamos aos chamados supercondutores não convencionais. A classificação da simetria destes estados não convencionais é apresentada e exemplos são discutidos. No capítulo 3, apresentamos uma discussão sobre as propriedades físicas de dois sistemas para os quais a coexistência de supercondutividade e ferromagnetismo foi demonstrada em vários experimentos, focalizando àquelas propriedades que serão importantes para os demais capítulos da dissertação. São consideradas propriedades do estado normal e supercondutor, ressaltando semelhanças e diferenças destes sistemas.

No capítulo 4 apresentamos a teoria para a classificação de simetrias dos supercondutores ferromagnéticos e a desenvolvemos para o caso do UGe_2 em particular, numa abordagem rigorosa, abrangendo vários aspectos até aqui não considerados na literatura. Em seguida, no capítulo 5, nos ocupamos de um problema específico, já clássico, onde consideramos as consequências da existência de domínios magnéticos para o parâmetro de ordem supercondutor. Em nossas conclusões discutimos as consequências deste estudo, contextualizando-o no cenário atual do problema.

Capítulo 2

Generalização da teoria BCS.

2.1 A Hamiltoniana BCS.

Consideramos aqui apenas os aspectos relevantes à obtenção da classificação dos possíveis estados supercondutores contidos na teoria BCS [1, 3]. Dentro deste contexto, não é necessário fazermos hipóteses acerca de um mecanismo específico para a formação dos pares de Cooper. A partir destas idéias bastante gerais, podemos extrair informação sobre a estrutura do gap supercondutor e conseqüentemente sobre algumas de suas propriedades termodinâmicas e de transporte.

Começamos nossa discussão com a Hamiltoniana efetiva, escrita no espaço de momentos:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \sum_{k>0s} \epsilon(k) c_{ks}^\dagger c_{ks} + \epsilon(k) c_{-ks}^\dagger c_{-ks} \\ \mathcal{H}_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{kk's_1s_2s_3s_4} V_{s_1s_2s_3s_4}(k, k') c_{-ks_1}^\dagger c_{ks_2}^\dagger c_{k's_3} c_{-k's_4} \\ \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int}\end{aligned}\tag{2.1}$$

O termo de interação de duas partículas é tratado em uma aproximação de campo médio.

$$c_{ks}^\dagger c_{-kr}^\dagger = \langle c_{kr}^\dagger c_{-ks}^\dagger \rangle + (c_{ks}^\dagger c_{-kr}^\dagger - \langle c_{kr}^\dagger c_{-ks}^\dagger \rangle)\tag{2.2}$$

Em 2.2 o par de operadores é substituído pelo seu valor médio somado a um segundo

termo que descreve os desvios do valor do operador de sua média. Para os supercondutores convencionais esta costuma ser uma boa aproximação uma vez que o comprimento de correlação do estado supercondutor é grande quando comparado a distâncias onde efeitos de forte correlação eletrônica poderiam retirar a validade da teoria.

Para os supercondutores não convencionais, como os que estudamos, em geral obtêm-se dos experimentos que os efeitos de correlação eletrônica são importantes e a validade desta aproximação é questionável. No entanto, neste trabalho estamos interessados nos aspectos de simetria que independem dos detalhes ao nível microscópico. Com esta aproximação reescrevemos o termo de interação de 2.1.

$$\begin{aligned}
 c_{-ks_1}^\dagger c_{ks_2}^\dagger c_{k's_3} c_{-k's_4} &= -c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger c_{k's_3} c_{-k's_4} \\
 &\approx -[\langle c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger \rangle + (c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger - \langle c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger \rangle)] [c_{k's_3} c_{-k's_4} + (c_{k's_3} c_{-k's_4} - \langle c_{k's_3} c_{-k's_4} \rangle)] \\
 &= -c_{k's_3} c_{-k's_4} \langle c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger \rangle - c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger \langle c_{k's_3} c_{-k's_4} \rangle + \langle c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger \rangle \langle c_{k's_3} c_{-k's_4} \rangle + \delta(\mathcal{O}^2) \quad (2.3)
 \end{aligned}$$

Em 2.3 o termo de segunda ordem se refere aos produtos das flutuações que vamos descartar. Descartamos também o termo constante (que contribui apenas para o estado fundamental) ficando apenas com os dois primeiros termos. Assim a parte de interação se escreve

$$\begin{aligned}
 &\sum_{kk's_1s_2s_3s_4} V_{s_1s_2s_3s_4}(k, k') c_{-ks_1}^\dagger c_{ks_2}^\dagger c_{k's_3} c_{-k's_4} \approx \\
 &\approx \sum_{kk's_1s_2s_3s_4} V_{s_1s_2s_3s_4}(k, k') (-c_{k's_3} c_{-k's_4} \langle c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger \rangle - c_{ks_2}^\dagger c_{-ks_1}^\dagger \langle c_{k's_3} c_{-k's_4} \rangle) =
 \end{aligned}$$

Agora definimos $\Delta_{s_1s_2}(k) \equiv V_{s_1s_2s_3s_4}(k, k') \langle c_{k's_3} c_{-k's_4} \rangle$ que é a matriz do gap. Cada um dos termos desta matriz pode ser interpretado como uma amplitude de pareamento. Para a supercondutividade convencional apenas os termos $\Delta_{\uparrow\downarrow}$ são diferentes de zero. Valores finitos para as médias $\langle c_{k's_3} c_{-k's_4} \rangle$, evidenciam o aparecimento de correlações anômalas ligadas a formação do estado supercondutor. A expressão aproximada fica:

$$\equiv \sum_{ks_1s_2} \Delta_{s_1s_2}(k) c_{ks_1}^\dagger c_{-ks_2}^\dagger - \sum_{ks_1s_2} \Delta_{s_1s_2}^*(-k) c_{ks_2} c_{-ks_1} \quad (2.4)$$

A partir de 2.4 reescrevemos a Hamiltoniana efetiva 2.1, transformando o problema original de muitos corpos em uma Hamiltoniana de um único elétron.

$$\tilde{\mathcal{H}} = \sum_{ks} \epsilon(k) c_{ks}^\dagger c_{ks} + \frac{1}{2} \sum_{ks_1s_2} (\Delta_{s_1s_2}(k) c_{ks_1}^\dagger c_{-ks_2}^\dagger - \Delta_{s_1s_2}^*(-k) c_{-ks_1} c_{ks_2}) \quad (2.5)$$

A diagonalização de 2.5 é feita usando uma transformação de Bogoliubov generalizada.

$$c_{ks} = \sum_r (u_{ksr} \alpha_{kr} + v_{ksr} \alpha_{-kr}^\dagger) \quad (2.6)$$

Neste contexto os coeficientes u_{ksr} e v_{ksr} em 2.6 são matrizes no espaço de spins que devem satisfazer uma condição de unitaridade de maneira que os operadores α_{ks} , α_{ks}^\dagger mantenham o carácter fermiônico dos operadores c_{ks} e c_{ks}^\dagger . Escrevendo explicitamente a transformação temos:

$$\begin{aligned} c_{ks} &= u_{ks\uparrow} \alpha_{k\uparrow} + v_{ks\uparrow} \alpha_{-k\uparrow}^\dagger + u_{ks\downarrow} \alpha_{k\downarrow} + v_{ks\downarrow} \alpha_{-k\downarrow}^\dagger \\ c_{-ks}^\dagger &= u_{-ks\uparrow}^* \alpha_{-k\uparrow}^\dagger + v_{-ks\uparrow}^* \alpha_{k\uparrow} + u_{-ks\downarrow}^* \alpha_{-k\downarrow}^\dagger + v_{-ks\downarrow}^* \alpha_{k\downarrow} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Uma inspeção no conjunto de equações 2.7 nos indica que podemos simplificar as equações definindo um formalismo vetorial de 4 componentes:

$$\begin{aligned} \vec{\alpha}_k &= \left(\alpha_{k\uparrow} \quad \alpha_{k\downarrow} \quad \alpha_{-k\uparrow}^\dagger \quad \alpha_{-k\downarrow}^\dagger \right)^T \\ \vec{c}_k &= \left(c_{k\uparrow} \quad c_{k\downarrow} \quad c_{-k\uparrow}^\dagger \quad c_{-k\downarrow}^\dagger \right)^T \end{aligned} \quad (2.8)$$

Onde T denota a operação de transposição. E também definir matrizes 2×2 apropriadas a partir dos coeficientes da transformação:

$$\begin{aligned} \hat{u}_k &= \begin{pmatrix} u_{k\uparrow\uparrow} & u_{k\uparrow\downarrow} \\ u_{k\downarrow\uparrow} & u_{k\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \\ \hat{u}_{-k}^* &= \begin{pmatrix} u_{-k\uparrow\uparrow}^* & u_{-k\uparrow\downarrow}^* \\ u_{-k\downarrow\uparrow}^* & u_{-k\downarrow\downarrow}^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.9)$$

As matrizes \hat{v}_k são definidas de modo análogo ao que se vê em 2.9. Se escrevermos a matriz:

$$U_k = \begin{pmatrix} \hat{u}_k & \hat{v}_k \\ \hat{v}_{-k}^* & \hat{u}_{-k}^* \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Perceba que 2.10 é uma matriz 4×4 . Suas entradas são as matrizes 2×2 (2.9) que definimos. A transformação 2.6 é escrita simplesmente como:

$$\vec{c}_k = U_k \vec{\alpha}_k \quad (2.11)$$

E a condição de unitariedade fica

$$U_k U_k^\dagger = 1 \quad (2.12)$$

A diagonalização de 2.5 é escrita neste formalismo como:

$$\hat{E}_k = U_k^\dagger \hat{\epsilon}_k U_k \quad (2.13)$$

com as definições:

$$\hat{E}_k = \begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_{-k\uparrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

$$\hat{\varepsilon}_k = \begin{pmatrix} \epsilon(k)\hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(k) \\ -\hat{\Delta}^*(-k) & -\epsilon(k)\hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Aproveitamos para definir que deste ponto em diante usamos σ_i ($i = x, y, z, 0$) para denotar as matrizes de Pauli. A matriz 2.15 é a representação matricial de 2.5. Os elementos diagonais de 2.14 são o espectro de energia das excitações do sistema. As energias $\epsilon(k)$ de 2.15 são as energia de Hartree Fock medida a partir do nível de Fermi. A solução para matriz da transformação U_k é obtida da equação 2.13:

$$\begin{aligned} \hat{u}_k \begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} &= \epsilon(k)\hat{\sigma}_0\hat{u}_k + \hat{\Delta}(k)v_{-k}^* \\ \hat{v}_k \begin{pmatrix} -E_{-k\uparrow} & 0 \\ 0 & -E_{-k\downarrow} \end{pmatrix} &= \epsilon(k)\hat{\sigma}_0\hat{v}_k + \hat{\Delta}(k)u_{-k}^* \\ v_{-k}^* \begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} &= -\hat{\Delta}^*(-k)\hat{u}_k - \epsilon(k)\hat{\sigma}_0v_{-k}^* \\ u_{-k}^* \begin{pmatrix} -E_{-k\uparrow} & 0 \\ 0 & -E_{-k\downarrow} \end{pmatrix} &= -\hat{\Delta}^*(-k)\hat{v}_k - \epsilon(k)\hat{\sigma}_0u_{-k}^* \end{aligned} \quad (2.16)$$

As equações para E_{ks} e E_{-ks} estão claramente desacopladas, de maneira que nosso problema se reduz a matrizes 2×2 :

$$\begin{aligned} \hat{u}_k \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} - \epsilon(k)\hat{\sigma}_0 \right] &= \hat{\Delta}(k)v_{-k}^* \\ v_{-k}^* \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} + \epsilon(k)\hat{\sigma}_0 \right] &= -\hat{\Delta}^*(-k)\hat{u}_k \end{aligned} \quad (2.17)$$

Aqui temos que estudar algumas das propriedades da matriz $\Delta(k)$. A simetria desta matriz é dada pelas simetrias do potencial de interação e dos operadores fermiônicos, como se vê diretamente de 2.4. Podemos também reescrever $\hat{\Delta}(k)$ de modo a evidenciar algumas de suas propriedades. Em nossa generalização permitimos acoplamentos de pares em ambos os canais singleto e tripleto. Com esta separação, temos também duas possibilidades para a dependência de $\Delta(k)$ com k . Para o primeiro caso $\Delta(k)$ deve ser uma função par da variável k enquanto que para o último uma função ímpar. Esta é uma

simples consequência do princípio de exclusão de Pauli. Para o caso singlete escrevemos

$$\begin{aligned}\hat{\Delta}(k) &= \begin{pmatrix} \Delta(k)_{\uparrow\uparrow} & \Delta(k)_{\uparrow\downarrow} \\ \Delta(k)_{\downarrow\uparrow} & \Delta(k)_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \Delta(k)_{\uparrow\downarrow} \\ -\Delta(k)_{\uparrow\downarrow} & 0 \end{pmatrix} = \psi(k) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.18)$$

Onde $\psi(k)$ é uma função par da variável k . As componentes $\uparrow\uparrow$ e $\downarrow\downarrow$ são zero uma vez que estamos, neste momento, interessados no estado singlete. De maneira a usarmos a álgebra das matrizes de Pauli, fazemos mais um passo em 2.18.

$$\hat{\Delta}(k) = i\hat{\sigma}_y\psi(k) \quad (2.19)$$

Já para o canal tripleto, todas as componentes são não nulas. Foi percebido por Balian e Werthamer [4] que o estado tripleto pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}\hat{\Delta}(k) &= i(\vec{d}(k)\cdot\hat{\sigma})\hat{\sigma}_y \\ &= \begin{pmatrix} -d_x(k) + id_y(k) & d_z(k) \\ d_z(k) & d_x(k) + id_y(k) \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.20)$$

A dificuldade para encontrar soluções para a transformação 2.6 está no estado tripleto. Estas matrizes podem descrever estados não unitários para os quais a estrutura das correlações dos pares para spins *up* e spins *down* é diferente, para diferentes direções no espaço k . Definimos que uma matriz $\Delta(k)$ descreve um estado unitário quando o produto $\Delta\Delta^\dagger$ é proporcional a matriz identidade, caso contrário o estado associado é não unitário. Da forma como estão escritos 2.19 e 2.20 é claro que apenas o estado tripleto pode ser não unitário. O produto $\Delta\Delta^\dagger$ se escreve, no caso tripleto:

$$\hat{\Delta}(k)\hat{\Delta}^\dagger(k) = (\vec{d}(k)\cdot\hat{\sigma})(\vec{d}(k)\cdot\hat{\sigma})^\dagger = |\vec{d}(k)|^2\hat{\sigma}_0 + i\vec{d}(k) \times \vec{d}(k)^*\cdot\hat{\sigma}$$

Tendo em vista estas considerações, retomamos as equações 2.17, resolvendo-a para o

caso unitário, ou seja, estado singlete ou estado tripleto com $\vec{d}(k) \times \vec{d}(k)^* = 0$.

$$\therefore v_{-k}^* = -\hat{\Delta}^*(-k) \hat{u}_k \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} + \epsilon(k) \hat{\sigma}_0 \right]^{-1}$$

$$\hat{u}_k \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} - \epsilon(k) \hat{\sigma}_0 \right] = \hat{\Delta}(k) - \hat{\Delta}^*(-k) \hat{u}_k \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} + \epsilon(k) \hat{\sigma}_0 \right]^{-1}$$

$$\hat{u}_k \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} - \epsilon(k) \hat{\sigma}_0 \right] \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} + \epsilon(k) \hat{\sigma}_0 \right] = \hat{\Delta}(k) \hat{\Delta}^\dagger(k) \hat{u}_k$$

As soluções para \hat{u}_k , $E_{k\uparrow}$ e $E_{k\downarrow}$ podem ser encontradas por inspeção baseada em alguns argumentos. Uma vez que o estado é unitário o produto $\Delta \Delta^\dagger$ é proporcional a matriz identidade e por isto comuta com a matriz \hat{u}_k . Desta maneira se escreve:

$$\left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} - \epsilon(k) \hat{\sigma}_0 \right] \left[\begin{pmatrix} E_{k\uparrow} & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow} \end{pmatrix} + \epsilon(k) \hat{\sigma}_0 \right] = \hat{\Delta}(k) \hat{\Delta}^\dagger(k) \quad (2.21)$$

A partir de 2.21, argumento similar pode ser utilizado para notar que $E_{k\uparrow} = E_{k\downarrow} = E_k$ e, portanto, temos a solução para o espectro de energias:

$$E_k^2 = [\epsilon(k)^2 + \frac{1}{2} \text{tr}[(\hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger)(k)]] \quad (2.22)$$

A solução para a transformação é obtida percebendo que \hat{u}_k pode ser proporcional a qualquer matriz 2×2 não singular. Escolhemos a matriz identidade e escrevemos

$$\hat{u}_k = \frac{[E_k - \epsilon(k)] \hat{\sigma}_0}{\{[E_k + \epsilon(k)]^2 + \frac{1}{2} \text{tr}[(\hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger)(k)]\}^{\frac{1}{2}}} \quad (2.23)$$

Para \hat{v}_k eliminamos \hat{u}_{-k}^* do conjunto de equações 2.16 e se escreve:

$$\hat{v}_k = \frac{-\hat{\Delta}(k)}{\{[E_k + \epsilon(k)]^2 + \frac{1}{2} \text{tr}[(\hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger)(k)]\}^{\frac{1}{2}}} \quad (2.24)$$

Para o caso de estados não unitários os resultados são bem mais complicados [3]. Um resultado importante diz respeito ao espectro de energias das quasi partículas:

$$E_{k\uparrow ou\downarrow}^2 = \epsilon(k)^2 + |d(\vec{k})|^2 \pm |id(\vec{k}) \times d(\vec{k})^*| \quad (2.25)$$

Neste caso a degenerescência para os estados *up* e *down* é quebrada. Esta separação pode ser compreendida como uma redução de simetria devido a perda de simetria de reversão temporal. Nesta formulação generalizada, em qualquer um dos casos, permitimos que o gap tenha alguma dependência em k . Em situações especiais, esta dependência pode levar a zeros no gap de energia que resultam em novas propriedades de baixa temperatura quando comparadas aos supercondutores convencionais, que possuem um gap sem nós.

2.2 Propriedades de Baixa temperatura.

A chave para o entendimento destas modificações está na dependência da densidade de estados $N(E)$ do sistema com o gap de energia. Investigamos aqui o calor específico destes sistemas. O calor específico para baixas energias $T \ll T_c$ se escreve (a dependência do gap com a temperatura é ignorada).

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{2}{\Omega} \sum_k E_k \frac{df(E_k)}{dT} = \int dE N(E) E \frac{df(E)}{dT} \\ &= \int dE N(E) \frac{E^2}{k_B T^2} \frac{1}{4 \cosh^2\left(\frac{E}{2k_B T}\right)} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Investigamos agora a densidade de estados e como que esta depende da simetria do gap. Por definição temos:

$$N(E) = 2 \sum_k \delta(E - E_k) \quad (2.27)$$

Onde restringimos nossa análise a estados unitários. Relembrando a equação 2.22, reescrevemos 2.27 utilizando $N(0)$, que é densidade de estados na superfície de Fermi para a fase normal.

$$N(E) = N(0) \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \int d\epsilon \delta\left(\sqrt{\epsilon(k)^2 + \frac{1}{2} \text{tr}[(\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger)(k)]} - E\right) \quad (2.28)$$

Vamos aqui definir:

$$|\Delta(k)|^2 \equiv \frac{1}{2} \text{tr}[(\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger)(k)] \quad (2.29)$$

E assim 2.28 é escrita como:

$$N(E) = N(0) \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \frac{E}{\sqrt{E^2 - |\Delta(k)|^2}} \quad (2.30)$$

Embora estejamos aqui analisando apenas o calor específico, o que vemos é que, de fato, qualquer propriedade que dependa da estrutura da densidade de estados será amplamente afetada por diferentes tipos de gap. Para supercondutores convencionais o gap não possui nós, o que é topologicamente equivalente a um gap isotrópico. Este, em particular, se escreve $|\Delta(k)|^2 = \Delta_0^2$, onde Δ_0 é uma constante que descreve sua amplitude. A partir de 2.30 temos a densidade de estados:

$$\begin{aligned} N(E) &= N(0) \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2}} \\ &= N(0) \begin{cases} 0 & E < \Delta_0 \\ \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2}} & E > \Delta_0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.31)$$

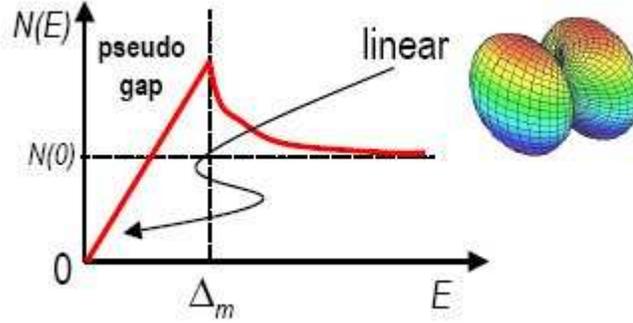
Usando 2.26 e 2.31 podemos calcular o calor específico de baixas temperaturas.

$$C_V \approx N(0)k_B \left(\frac{\Delta_0}{k_B T}\right)^2 \sqrt{2\pi k_B T \Delta_0} \exp(-\Delta_0/k_B T) \quad (2.32)$$

Podemos calcular o calor específico para pareamento tripleto e fase polar, por seu valor didático. Para tal usamos 2.20 com $d_x(k) = d_z(k) = 0$ e $d_y(k) = -ik_z$.

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}(k) &= \Delta_0 \begin{pmatrix} k_z & 0 \\ 0 & k_z \end{pmatrix} \\ \Rightarrow |\Delta(k)|^2 &= \Delta_0^2 \cos^2 \theta \end{aligned} \quad (2.33)$$

Figura 2.1: Densidade de estados: fase polar



A densidade de estados agora fica:

$$\begin{aligned}
 N(E) &= N(0) \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2 \cos^2 \theta}} \\
 &= N(0) \frac{E}{\Delta_0} \begin{cases} \frac{\pi}{2} & E < \Delta_0 \\ \arcsin\left(\frac{\Delta_0}{E}\right) & E > \Delta_0 \end{cases} \quad (2.34)
 \end{aligned}$$

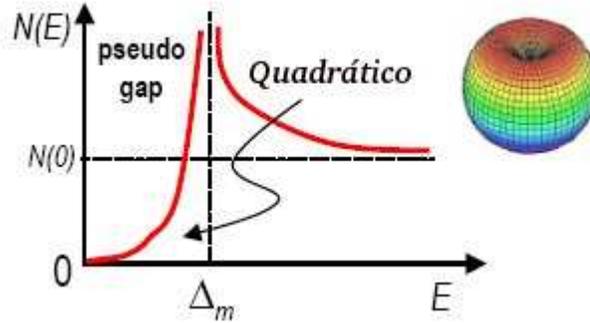
O calor específico calculado para esta fase apresenta um comportamento de baixas temperaturas bem distinto da dependência exponencial observado em supercondutores convencionais. Antes de calculá-lo, podemos analisar a estrutura do gap e da densidade de estados. O gap 2.33 tem uma linha de zeros no equador e a densidade de estados associada possui dependência linear com a energia para baixas temperaturas (ver figura 2.1).

Outra forma possível é dada por

$$\begin{aligned}
 \hat{\Delta}(k) &= \Delta_0 \begin{pmatrix} k_x + ik_y & 0 \\ 0 & k_x - ik_y \end{pmatrix} \\
 \Rightarrow |\Delta(k)|^2 &= \Delta_0^2 \sin^2 \theta \quad (2.35)
 \end{aligned}$$

Onde com referência a 2.20 temos $d_x(k) = k_x$, $d_y(k) = k_z$ e $d_z(k) = 0$. Esta estrutura é o estado ABM [4] realizado no 3He . Perceba que com esta parametrização, apenas as

Figura 2.2: Densidade de estados: fase ABM.



amplitudes que $\Delta_{\uparrow\uparrow}$ e $\Delta_{\downarrow\downarrow}$ são diferentes de 0. Este é o chamado estado *ESP* (equal spin paring). A densidade de estados é dada por:

$$N(E) = N(0) \frac{E}{\Delta_0} \ln \left| \frac{1 + \frac{E}{\Delta_0}}{1 - \frac{E}{\Delta_0}} \right| \quad (2.36)$$

Interessante notar que o fato do pareamento ocorrer no estado tripleto, não implica a existência de nós na estrutura de gap. De fato, desde o início das discussões sobre a possibilidade de gaps anisotrópicos [4], notou-se a existência daquele que é hoje chamado estado BW.

$$\hat{\Delta}(k) = \Delta_0 \begin{pmatrix} k_x + ik_y & k_z \\ k_z & k_x - ik_y \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow |\Delta(k)|^2 = \Delta_0^2 \quad (2.37)$$

Notando 2.37, vemos que as propriedades de equilíbrio deste estado serão iguais às propriedades dos supercondutores convencionais. De fato, de uma teoria de acoplamento fraco, como a que consideramos aqui, resulta que o estado BW tem energia menor que o estado ABM que, portanto, nunca seria realizado. O estado ABM se estabiliza apenas quando efeitos de correlação de spin dos átomos de ${}^3\text{He}$ são considerados.

Analisando o gap ABM (2.35) vemos que este possui zeros nos polos e que sua densidade de estados tem associada uma dependência quadrática com a energia, quando consideramos o espectro de baixas energias (ver figura 2.2).

Vemos, portanto, que a dependência de baixas energias da densidade de estados depende apenas da topologia dos zeros do gap. Da mesma maneira, podemos classificar o comportamento anômalo do calor específico observado em sistemas não convencionais.

$$C_v \propto \begin{cases} T & \text{sem gap} \\ T^2 & \text{linhas} \\ T^3 & \text{pontos} \end{cases} \quad (2.38)$$

Todas as propriedades termodinâmicas de equilíbrio sofrem modificações que dependem apenas da topologia dos zeros do gap. Como veremos agora, a teoria de grupos constitui uma ferramenta poderosa para a classificação destes gaps .

2.3 Classificação dos Estados Supercondutores.

Como notamos desde o início não esperamos que os resultados de uma teoria de acoplamento fraco sejam válidos para os sistemas que estudamos neste trabalho, ou mesmo que podemos confiar em uma aproximação de campo médio. A forma específica do hamiltoniano que os descreve nos é desconhecida, mas assumimos que considerações baseadas em aspectos bastante gerais sobre a estrutura do gap podem ser utilizadas para entender resultados experimentais ou mesmo prevê-los.

Em supercondutores não convencionais temos que considerar a existência de acoplamento spin órbita, campo cristalino e acoplamento forte. Esses efeitos estão presentes em supercondutores formados por “férmions pesados” como é o caso do UGe_2 , que estudamos no próximo capítulo. O Primeiro ponto que ressaltamos é que na presença de acoplamento spin órbita, os estados de 1 partícula não podem ser autoestados do operador de spin. No entanto, podemos fazer uma correspondência um a um com estados de pseudospin e spin, de maneira que formalmente podemos nos referir a spin e pseudospin como os mesmos objetos. Lembramos que chamamos de pseudospin os dois valores que podem ser assumidos pelo estado de momento angular total que resulta da soma do momento angular orbital e do spin eletrônico.

Também em presença de acoplamento spin órbita, as transformações de coordenadas afetam igualmente estados orbitais e estados de spin. Isso traz consequências para o estado tripleto. Partindo da definição 2.4 para a função do gap, podemos deduzir as regras de transformação desta função sob a ação dos elementos do grupo de simetrias da Hamiltoniana do sistema. Este grupo de simetrias definimos como:

$$\mathcal{G} = G \otimes \mathcal{K} \otimes U(1) \quad (2.39)$$

Onde G é grupo de simetrias do cristal, \mathcal{K} é a reversão temporal ¹ e $U(1)$ o grupo de gauge. A diferença fundamental entre supercondutores convencionais e não convencionais é que no primeiro tipo ocorre apenas quebra de simetria de gauge durante a transição. A maneira como escrevemos a função do gap 2.19 e 2.20 nos permite escrever a ação sobre a função do gap como uma ação sob as funções $\psi(k)$ (estado singleto) e $\vec{d}(k)$ (estado tripleto). Referimos a literatura [3] para as regras completas, mas detalhamos aqui um ponto referente ao estado tripleto na presença de acoplamento spin órbita forte. Começamos na ausência deste efeito. Para uma rotação g no espaço k temos:

$$g\vec{d}(k) = \vec{d}(D_{(G)}^{(-)}(g)k) \quad (2.40)$$

Onde $D(g)$ denota a matriz da representação de g no grupo G . Para uma rotação no espaço de spin:

$$g\vec{d}(k) = D_{(G)}^{(+)}(g)\vec{d}(k) \quad (2.41)$$

A diferença para as duas representações em 2.40 e 2.41 está no sinal das mesmas sob a operação de inversão. No último caso, como $\vec{d}(k)$ é um vetor no espaço de spin, a representação não muda de sinal sob inversão. Já no primeiro caso, uma vez que k é um vetor, o sinal – explicita que esta matriz deve ser negativa para a operação de inversão. Ainda neste caso, a ação de g foi apenas nas coordenadas k e para o anterior, apenas para o vetor $\vec{d}(k)$. Quando o acoplamento spin-órbita é ligado, não existem mais estas operações separadamente. Os spins estão congelados na rede e também sofrem ação dos elementos de G , de maneira que devemos escrever:

$$g\vec{d}(k) = D_{(G)}^{(+)}(g)\vec{d}(D_{(G)}^{(-)}(g)k) \quad (2.42)$$

Iniciamos a classificação dos estados para sistemas invariantes por rotação que, con-

¹Na verdade é correto afirmar que $\mathcal{K} = \{E, K\}$, onde K é a operação de reversão temporal. A operação K somente, não constitui um grupo de simetrias.

tém também a simetria de inversão, de maneira que $G = SO_3 \otimes \mathcal{I}$. Uma base para as representações deste grupo são os esféricos harmônicos, que usamos para escrever $\hat{\Delta}(k)$.

$$\hat{\Delta}(k) = \begin{cases} \sum_m c_m Y_{lm}(k) i \hat{\sigma}_y & \text{singleto } l \text{ par} \\ \sum_{m,\alpha=1,2,3} c_{m\alpha} Y_{lm}(k) i(\hat{\sigma} \cdot \hat{\alpha}) \sigma_y & \text{tripletto } l \text{ mpar} \end{cases} \quad (2.43)$$

Na expansão 2.43, α se refere a direções no espaço onde m é fixo. A ocorrência de acoplamento spin órbita diminui a simetria do sistema e as representações deve ser obtidas pela decomposição destas representações em novos sub espaços invariantes. As novas bases são obtidas utilizando-se coeficientes de Clebsch-Gordan. A decomposição dos espaços não é, de fato, tarefa complicada:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_{S=0} &= \mathcal{D}_l \quad \text{singleto } l = \text{par} \\ \mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_{S=1} &= \mathcal{D}_{l-1} \bigoplus \mathcal{D}_l \bigoplus \mathcal{D}_{l+1} \quad \text{tripletto } l = \text{mpar} \end{aligned} \quad (2.44)$$

No entanto, a forma exata das funções não pode ser especificada sem o conhecimento do potencial \hat{V} de interação. Isto acontece pois nestes subespaços as bases devem ser classificadas de acordo com as de momento angular total, que em geral contém vários conjuntos de funções base, cuja combinação é obtida pelo procedimento de Clebsch-Gordan. No entanto, mais uma vez, a simetria destes sub espaços pode ser estudada.

O próximo passo é considerar efeitos de campo cristalino. Aqui a simetria diminui de um conjunto de representações contínuas para algumas poucas representações irreduzíveis, finitas e discretas dos grupos cristalinos. O gap pode agora ser classificado de acordo a estas poucas representações. As bases que tomamos são as projeções dos harmônicos esféricos no espaço de representações do campo cristalino.

Cada representação do grupo descreve a simetria de uma solução para a equação do gap e por consequência está associada a uma temperatura crítica T_c diferente. Chamando de Γ a representação correspondente a maior destas T_c 's, escrevemos a função do gap como:

$$\hat{\Delta}(k) = \sum_m \eta(\Gamma, m) \hat{\Delta}(\Gamma, m; k) \quad (2.45)$$

Uma vez que a simetria do gap está classificada, podemos proceder dentro do arca-

bouço teórico da teoria de Landau para transições de fase. A teoria de Landau permite a descrição de efeitos de acoplamento forte, ao menos ao nível qualitativo, visto que a liberdade introduzida pelos parâmetros fenomenológicos permite a obtenção de várias possíveis fases estáveis.

De maneira geral a teoria de Landau se baseia na idéia que em uma transição de 2ª ordem, a simetria do estado de baixas temperaturas ($T < T_c$) é menor que a daquela do estado de alta temperatura $T > T_c$. A transição é totalmente caracterizada pela introdução de um parâmetro de ordem, que assume valores não nulos apenas para $T < T_c$. Uma vez que o conjunto de funções $\{\eta(\Gamma, m)\}$ tem a mesma simetria que $\Delta(k)$, este conjunto é escolhido como parâmetro de ordem da teoria. Assume-se ainda que estas transições são contínuas de forma que nas proximidades de T_c o parâmetro de ordem ($\{\eta(\Gamma, m)\}$) toma valores arbitrariamente pequenos.

Notando que a energia livre F tem a mesma simetria que o Hamiltoniano do sistema, considera-se a expansão de F em termos deste parâmetro de ordem. A energia livre deve ser invariante sob as operações do grupo \mathcal{G} , o que significa que podem aparecer na expansão apenas termos pares, reais e polinômios invariantes sob as operações do grupo cristalino. Isto é equivalente a dizer que F é um invariante associado a uma dada representação. O número e forma dos invariantes que compõe F , são determinados pela decomposição de produtos da representação de interesse [13, 5]. Baseados nestas idéias escrevemos a energia livre como:

$$F_{\Gamma} = F_0(T) + [A_{\Gamma}(T) \sum_m |\eta(\Gamma, m)|^2 + f_{\Gamma}(\eta^4)] \quad (2.46)$$

Em 2.46 o termo $f_{\Gamma}(\eta^4)$ contém as constantes fenomenológicas que descrevem o material. As diferentes formas destes invariantes para as diferentes representações estão tabeladas [3], assim como as diferentes fases, degeneradas ou não, que são previstas pela teoria. Dado a presença do campo cristalino, a degenerescência destas fases deve ser discreta. Os termos de quarta ordem em geral são suficientes para gerar estas degenerescências discretas, mas em alguns casos termos de sexta ordem são necessários para eliminar degenerescências espúrias. As possíveis quebras de simetria associadas a cada uma destas energia livres são encontradas também através da teoria de grupos. Este estudo é feito através da determinação das classes supercondutoras

2.4 Classes Supercondutoras

A obtenção das classes supercondutoras [3] também não faz suposição alguma sobre os mecanismos microscópicos que dão origem a supercondutividade. É baseada somente na hipótese bastante geral da existência de um parâmetro de ordem que caracteriza a transição de fase.

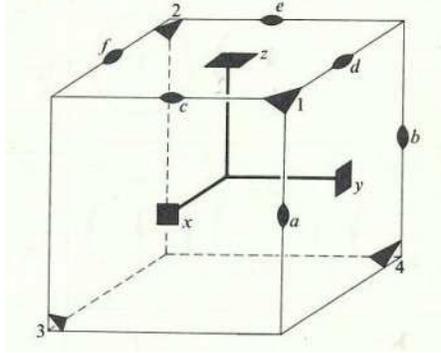
Em supercondutores convencionais apenas a simetria de gauge é quebrada na transição e, portanto, o parâmetro de ordem permanece invariante sob todas as operações do grupo cristalino. A simetria da fase supercondutora é dada simplesmente por $\mathcal{G} = G \otimes \mathcal{K}$. Para o caso de supercondutores não convencionais o parâmetro de ordem não será invariante sob a ação de todos elementos do grupo G , sendo multiplicado por algum fator de fase ou transformado em seu complexo conjugado.

A classe supercondutora é um novo conjunto de elementos de simetria, um sub-grupo de $G \otimes \mathcal{K}$, que preservam a invariância deste parâmetro de ordem não convencional. Perceba que isto significa que a classe supercondutora é construída a partir dos elementos de G multiplicando-os por fases ou pela operação \mathcal{K} . Neste sentido as possíveis classes podem ser construídas por inspeção a partir do conhecimento das representações e bases de G . Estas idéias gerais, no entanto, guiam a construção de um procedimento sistemático para construções destas classes.

Primeiro enumeramos os subgrupos H invariantes do grupo G . Estes descreverão transições em que a simetria cristalina não é diminuída. Com este conhecimento determinamos o Grupo Quociente \mathcal{F} de G com respeito a este subgrupo H . O grupo \mathcal{F} evidencia as classes (no sentido da teoria grupos) sob a qual o parâmetro de ordem permanece invariante e aquelas que devem ser multiplicadas por algum fator de fase. Em seguida, determinamos um grupo I com o qual \mathcal{F} possui um isomorfismo. Os elementos de I são multiplicados pelos elementos de \mathcal{F} de maneira que, sob a ação deste novo grupo, o parâmetro de ordem não convencional é invariante. Este novo grupo é a chamada classe supercondutora. Este procedimento é, em seguida, repetido para estes subgrupos invariantes considerados. A partir deste momento, toda transição supercondutora será precedida de uma quebra da simetria cristalina do sistema.

A identificação da classe com a respectiva representação é obtida diretamente de uma tabela de caracteres. Fica claro que a supercondutividade convencional está associada à representação A_{1g} , representação totalmente simétrica, de um dado grupo cristalino. Todas as outras representações estão associadas a estados supercondutores não convencionais. Representações multidimensional dão origem a degenerescência que se refletem na

Figura 2.3: Elementos de Simetria do Grupo Cúbico.



formação de domínios supercondutores, onde o parâmetro de ordem tem comportamento diferente em cada uma das regiões.

2.5 Exemplos

Com alguns exemplos pretendemos ao mesmo tempo clarear idéias e também demonstrar o alcance da teoria até aqui desenvolvida. Para facilitar seguimos as notações e convenções de uma referência comum da área de teoria de grupos em Física [5].

Começamos com o grupo cúbico O^2 . Este grupo possui dois subgrupos invariantes: T e D_2 . Listamos abaixo os elementos destes 3 grupos.

$$\begin{aligned}
 O &= \{E, C_{2m}, C_{3j}^+, C_{3j}^-, C_{2p}, C_{4m}^+, C_{4m}^-\} \\
 T &= \{E, C_{2m}, C_{3j}^+, C_{3j}^-\} \\
 D_2 &= \{E, C_{2m}\}
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

Apenas para explicar a notação, digredimos brevemente sobre a estrutura do grupo O . Os índices das operações ($C_{2m}, C_{3j}^+, C_{3j}^- \dots$) dizem respeito a diferentes eixos de rotação do grupo. Observe a figura 2.3 e tome como exemplo C_{2m} . Aqui o índice m associa-se a três distintas direções x, y e z . O mesmo é válido para o índice m em C_{4m}^+ e C_{4m}^- . Já o

²O grupo completo é $O_h = O \otimes \mathcal{I}$, mas por hora negamos a possibilidade de quebra de simetria de inversão, com isto consideramos apenas as rotações próprias tendo em mente que as representações de O serão sempre dobradas, possuindo um representação ímpar e outra par.

índice j em $C_{3j}^{+/-}$, associa-se aos eixos que denominamos 1, 2, 3 e 4. O índice p está ligado às seis posições a, b, c, d, e e f . Observe que nenhuma operação do grupo O mapeia as operações C_{2m} em C_{2p} , o que significa que estas operações pertencem a classes distintas. Para os subgrupos T e D_2 mantemos os mesmos índices. Ou seja, D_2 nada mais é do que o conjunto de elementos composto por 3 rotações de $\frac{P_i}{2}$, perpendiculares entre si, mais a identidade.

Procurando o grupo \mathcal{F} , fazemos a decomposição O/T em classes laterais (cosets):

$$O/T = T + TC_{2a} \quad (2.48)$$

Em 2.48 C_{2a} é qualquer um dos elementos C_{2p} . Os elementos de \mathcal{F} são $\mathcal{F} = \{TE, TC_{2a}\}$. Este grupo tem ordem 2 e portanto admite apenas representações unidimensionais. Uma tabela de multiplicação de \mathcal{F} revela que este grupo é isomorfo a $I = \{1, \exp(i\pi)\}$. Uma vez que o parâmetro de ordem permanece invariante sob a ação de T , podemos escrever imediatamente a classe supercondutora $O(T)$.

$$O(T) \otimes \mathcal{K} = \{E, C_{2m}, C_{3j}^+, C_{3j}^-, C_{2p}e^{i\pi}, C_{4m}^+e^{i\pi}, C_{4m}^-e^{i\pi}\} \otimes \mathcal{K} \quad (2.49)$$

Observando a tabela de caracteres das representações do grupo O vemos que esta classe corresponde a um parâmetro de ordem que se transforma de acordo a representação A_2 . A representação par estará associada ao pareamento singleto e a representação ímpar ao tripleto. Como A_2 é uma representação $1-d$, a energia livre 2.46 é do tipo convencional.

$$F_{\Gamma} = F_0(T) + A(T)|\eta|^2 + \beta_1|\eta|^4 \quad (2.50)$$

As funções base, no entanto, revelam algum comportamento não usual.

$$\begin{aligned} \psi(k) &\propto (k_x^2 - k_y^2)(k_y^2 - k_z^2)(k_z^2 - k_x^2) \\ \vec{d}(k) &\propto \hat{x}k_x(k_z^2 - k_y^2) + \hat{y}k_y(k_x^2 - k_z^2) + \hat{z}(k_y^2 - k_x^2) \end{aligned} \quad (2.51)$$

No caso singleto, o gap possui uma linha de zeros na intersecção da superfície de fermi com as diagonais do plano do cubo. Isto indica um comportamento de baixas temperaturas

para o calor específico proporcional a T^2 (2.38). Para o caso tripleto, existem zeros pontuais na intersecção da superfície de fermi com eixos de rotação de ordem 3 e 4 (14 zeros). Estes zeros podem ser estudados das bases 2.51, no entanto são consequência dos elementos não triviais presentes na classe supercondutora 2.49.

Procuramos agora o grupo \mathcal{F} associado à O/D_2 . A decomposição em classes laterais fica:

$$O/D_2 = D_2 + D_2C_{31}^+ + D_2C_{31}^- + D_2C_{2a} + D_2C_{2c} + D_2C_{2f} \quad (2.52)$$

De 2.52 obtemos que $\mathcal{F} = \{D_2, D_2C_{31}^+, D_2C_{31}^-, D_2C_{2a}, D_2C_{2c}, D_2C_{2f}\}$ que é isomorfo ao grupo $I = \{1, \epsilon, \epsilon^2\} \otimes \{1, \mathcal{K}\}$, com $\epsilon = e^{2\pi i/3}$. Este isomorfismo é determinado apenas pela construção da tabela de multiplicação de ambos os grupos. A forma proposta para I , pode ser sugerida pelo isomorfismo entre \mathcal{F} e o grupo D_3 . Apenas também desta tabela de multiplicação é que podemos saber exatamente que elementos de O/D_2 que serão multiplicados por fatores de fase e também pela operação \mathcal{K} . A classe supercondutora se escreve:

$$O(D_2) = \{D_2 + D_2C_{31}^+\epsilon + D_2C_{31}^-\epsilon^2 + D_2C_{2a}\mathcal{K} + D_2C_{2c}\epsilon\mathcal{K} + D_2C_{2f}\epsilon^2\mathcal{K}\} \quad (2.53)$$

A classe 2.53 descreve um estado que não possui simetria de reversão temporal. A quebra da simetria de gauge é também acompanhada pelo aparecimento de algum tipo de magnetismo. Esta ordem não é necessariamente de longo alcance, mas implica o aparecimento de um estado supercondutor não unitário. Esta classe está associada à representação E_g , pareamento singleto, ou E_u , pareamento tripleto, do grupo cúbico (estas representações são $2 - d$). Esta não é a única classe associada a esta representação. De fato, a energia livre a esta associada permite a descrição de vários estados supercondutores.

$$\begin{aligned} F_{\Gamma} &= F_0(T) + A(T)(|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2) + \beta_1|\eta|^4 \\ &+ \beta_2(|\eta_1^*\eta_2 - \eta_1\eta_2^*|^2) + \beta_3|\eta_1|^2|\eta_2|^2 \end{aligned} \quad (2.54)$$

A classe 2.53 corresponde solução $\eta_1^2 = A(T)/2\beta_1$ e $\eta_2 = 0$ com funções base:

$$\begin{aligned}\psi(k) &\propto k_x^2 + \epsilon k_y^2 + \epsilon^2 k_z^2 \\ \vec{d}(k) &\propto \hat{x}k_x + \epsilon\hat{y}k_y + \epsilon^2\hat{z}k_z\end{aligned}\tag{2.55}$$

De 2.55 verifica-se que existem zeros (pontuais) na intersecção dos eixos de rotação de ordem 3 e a superfície de Fermi. Isso implica em um calor específico a baixas temperaturas com uma dependência do tipo $\propto T^3$.

A determinação das classes supercondutoras evidenciam as simetrias quebradas na transição mas isto também pode ser diretamente obtido de uma expressão para a base do parâmetro de ordem. Estas bases estão associadas diretamente à representação associada à transição e não às classes supercondutoras. Por exemplo, como as bases em 2.55 são complexas, certamente este parâmetro de ordem quebra a simetria de reversão temporal. No entanto, como já discutimos, a escolha de base para uma dada representação não é única. Isto pode implicar especialmente que zeros não exclusivamente ditados por simetria estejam presentes, caracterizando um zero acidental. A determinação das classes supercondutoras elimina esta possibilidade ao listar os elementos não triviais do grupo de simetrias do estado supercondutor.

Como último exemplo estudemos uma simetria tetragonal. O grupo D_{4h} possui 8 representações irredutíveis $1 - d$ e duas representações $2 - d$. Para o primeiro grupo, o funcional associado as representações tem a forma convencional 2.50. O parâmetro de ordem destas representações é real, não descrevendo quebra de simetria de reversão temporal. Para o caso singleto, existem linhas de zeros no gap supercondutor e para o caso tripleto pontos. Simetria de rotação não é quebrada pelo parâmetro de ordem.

Nos concentramos no caso $2 - d$. O funcional associado a ambas as representações é dado por 2.54. Para a representação par E_g (singleto) uma base é $\varphi = \{k_x k_z, k_y k_z\}$ e para a representação impar E_u (tripleto) temos $\delta = \{\hat{z}k_x, \hat{z}k_y\}$ ou $\delta = \{\hat{x}k_z, \hat{y}k_z\}$. Desta maneira escrevemos os parâmetros de ordem como:

$$\begin{aligned}\psi(k) &= \eta_x \varphi_x + \eta_y \varphi_y \text{ singleto} \\ \vec{d}(k) &= \eta_x \vec{\delta}_x + \eta_y \vec{\delta}_y \text{ tripleto}\end{aligned}\tag{2.56}$$

As soluções que minimizam o funcional do problema são $\vec{\eta} = (1, i)$, $\vec{\eta} = (1, 1)$ e $\vec{\eta} = (1, 0)$. Com referência ao diagrama de fases (ver figura 2.4) chamamos estas fases A , B e C , respectivamente. Os parâmetros de ordem associados a cada fase são encontrado

Figura 2.4: Diagrama de fases para as representações 2-d.

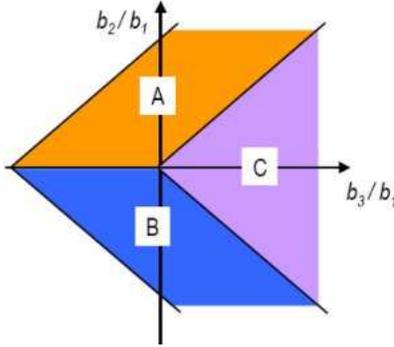
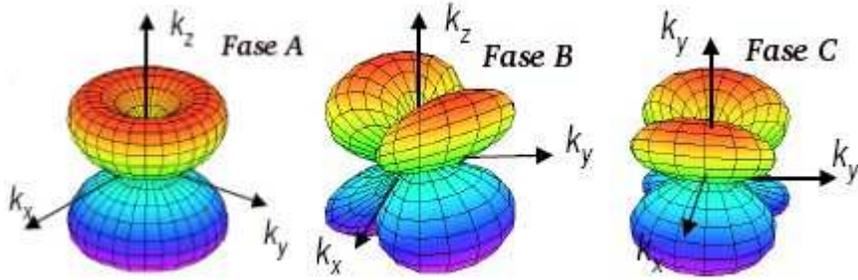


Figura 2.5: Estrutura dos gaps das fases A, B e C para o caso tripleto.



a partir de 2.56.

A fase *A* preserva a simetria de rotação mas quebra a simetria de reversão temporal em ambos os caso (singleto e tripleto). As fases *B* e *C* quebram a simetria de rotação $D_{4h} \rightarrow D_{2h}$ mas preservam reversão temporal. Nos estados singleto aparecem linhas de zeros enquanto no estado tripleto apenas pontos isolados na superfície de Fermi. Ilustramos estes parâmetros de ordem, para o caso tripleto, (ver figura 2.5) no espaço k de maneira a evidenciar estes apontamentos.

Combinando esta análise de simetrias com a teoria de acoplamento fraco do início do capítulo, podemos obter alguma previsão sobre a estabilidade relativa das fases supercondutoras. Nesta teoria a energia de condensação para o estado supercondutor é dada por:

$$E_{cond} = -\frac{1}{2} \langle N_0(k) |\Delta_k|^2 \rangle_{k,SF} \quad (2.57)$$

De 2.57 temos que gaps (na verdade $|\Delta_k|^2$) com o menor número de nós na superfície de Fermi é aquele mais estável, uma vez que o sistema ganha mais energia ao condensar. Com isto, a fase A do exemplo anterior é a mais estável. De fato, podemos entender porque muitos sistemas preferem formar pares no estado singleto e simetria s (simetria A_{1g} na nossa linguagem). No entanto, efeitos de acoplamento forte mudam este cenário. Mais uma vez, lembrarmos que este ponto foi bastante debatido logo no início das considerações teóricas acerca da possibilidade de pareamento não convencional [4].

Capítulo 3

Supercondutores Ferromagnéticos

Uma simples análise termodinâmica [1] de um supercondutor do tipo I revela a existência de uma energia de condensação dada pela expressão $\frac{H_c^2}{8\pi}$. Esta conclusão é obtida tão somente da observação do comportamento do sistema, sob a ação de um campo externo aplicado, a uma temperatura $T < T_c$. Para campos maiores que este H_c a supercondutividade é destruída.

A observação deste fato levou Ginzburg [2] a considerar as dificuldades decorrentes de uma possível coexistência de supercondutividade e ferromagnetismo. A conclusão básica foi que mesmo na ausência de um campo externo a magnetização M_0 da fase ferromagnética induz um campo de indução $B_0 = 4\pi M_0$ que deve ser menor que o campo crítico μH_c , para um meio ferromagnético linear.

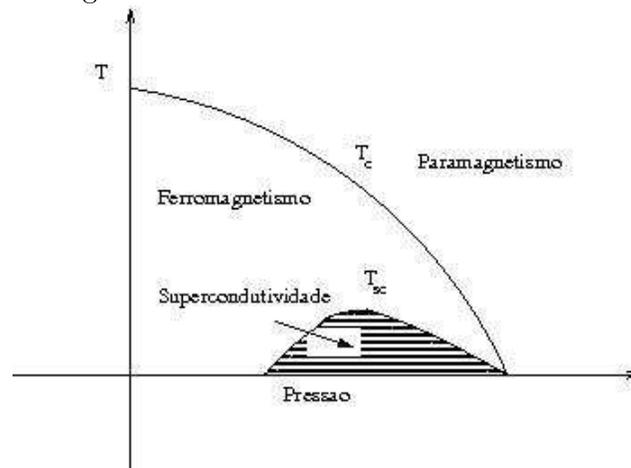
Requer-se, portanto, um sistema com um campo crítico elevado e que ao mesmo tempo com uma pequena magnetização espontânea. Ginzburg apontou ainda que ferromagnetismo é em geral associado com elétrons das camadas mais internas da estrutura eletrônica de um sólido, enquanto que a supercondutividade com os de camadas mais externas. Neste cenário, discussões [6] anteriores sobre a “coexistência” de supercondutividade e magnetismo já comentavam resultados experimentais e argumentou-se ainda que a supercondutividade ali observada deveria estar restrita apenas à uma faixa das paredes de domínio.

A novidade que consta nos resultados que vamos discutir é que nestes sistemas é aparente que *os mesmos elétrons* são responsáveis por ambos os fenômenos e que a supercondutividade é um fenômeno presente em *todo o volume* da amostra, assim como o ferromagnetismo. Isto é extremamente importante ao considerar a formulação de modelos microscópicos ou fenomenológicos. Mathias e Suhl evidenciam ainda o fato que a região do diagrama de fases para o qual há coexistência, corresponde àquela onde T_{SC} (temperatura

Figura 3.1: Antigo cenário da coexistência.



Figura 3.2: Novo cenário de coexistência



crítica supercondutora) é menor. O ferromagnetismo surge como uma fase que compete com a supercondutividade.

Como veremos, para os sistemas a serem descritos, a supercondutividade surge apenas quando o estado normal é ferromagnético. Para temperatura finita, *não há transição de uma fase paramagnética para a fase supercondutora*, isto nos leva a crer que aqui a supercondutividade é estimulada pela presença do ferromagnetismo.

Temos então um idéia de qual deve ser um esquema dos diagramas de fases (ver figuras 3.1 e 3.2) nestes que podemos chamar de antigo cenário de coexistência e novo cenário de coexistência.

3.1 $ZrZn_2$

Logo em seguida a descoberta da teoria BCS [1], mecanismos alternativos para o pareamento dos elétrons (quasipartículas) supercondutores foram propostos. Em especial, motivado inicialmente por uma extensão da teoria BCS [4] para o 3He , foi considerado um mecanismo de interação magnética.

Se as interações magnéticas são maiores quando comparadas a outras interações entre as quasipartículas, quasipartículas de spin paralelo tendem a se atrair, enquanto que àquelas com spin anti paralelo se repelem, levando a formação de um condensado no estado tripleto e, certamente, com momento orbital finito (ímpar). Isto nos leva a três critérios a serem preenchidos por possíveis candidatos a apresentarem este tipo de supercondutividade.

Os sistemas devem ser levados às bordas do ferromagnetismo, podendo significar que o sistema é fortemente paramagnético ou fracamente ferromagnético. O sistema deve ter alto grau de pureza, uma vez que supercondutores com momento angular não nulo são altamente suscetíveis a impurezas e este deve, ainda, ser resfriado à escala de milikelvin, para que as flutuações magnéticas possam sobrepujar as flutuações térmicas, culminando na formação de pares. De fato o $ZrZn_2$ foi prontamente reconhecido [8] como um possível candidato, no mesmo trabalho em que Matthias e Borzorth reportam a descoberta de seu fraco ferromagnetismo. Nas referências [7, 9] estão os resultados que apresentamos nesta seção.

3.1.1 Supercondutividade em $ZrZn_2$

A supercondutividade em $ZrZn_2$ [7] é encontrada apenas em amostras limpas, indicada por uma resistividade residual de apenas $0.62\mu\Omega$ o que é consistente com um livre caminho médio para os portadores da ordem de alguns milhares de Ângstrons. A baixas temperaturas ($25mk$), um campo crítico $\mu_0H_{c2} = 0.4T$ é medido. Pelas relações usuais, temos um comprimento de coerência $\xi_0 = 290\text{Å}$. Esta sensibilidade do estado supercondutor à impurezas é um indício que a supercondutividade deve ser não convencional.

A temperatura de transição é estimada em $T_{SC} = 0.29K$, indicada principalmente pela súbita queda da resistividade da amostra a partir desta temperatura. A susceptibilidade magnética do material também mostra sinais claros da transição. Para baixas temperaturas $Re(\chi) \rightarrow -0.65$, que é da ordem do valor ideal -1 . Observa-se também um aumento de $Im(\chi)$ como para outros supercondutores do tipo II.

A supercondutividade é observada apenas dentro da fase ferromagnética. Não há

anomalia do calor específico, indicando a existência de um gap altamente anisotrópico, ou mesmo a inexistência de um gap. Supercondutividade e ferromagnetismo coexistem em um longo intervalo de pressão e são ambos suprimidos a uma mesma pressão crítica $P_c = 21\text{kbar}$, sendo este mais um indicativo da importância do ferromagnetismo para o estímulo da supercondutividade. As bandas da superfície de Fermi do $ZrZn_2$ são predominantemente devido aos elétrons $4d$ do Zr e supercondutividade e ferromagnetismo derivam destes mesmos elétrons.

3.1.2 Ferromagnetismo em $ZrZn_2$

Resultados obtidos [9] do estudo de amostras com alto grau de pureza demonstram que o ferromagnetismo em $ZrZn_2$ é bem descrito por uma teoria de campo médio. Isto será importante no capítulo 4, pois justifica a nossa abordagem ao estudo da interação dos parâmetros de ordem ferromagnético e supercondutor.

Escrevemos a energia livre de Landau para descrever esta transição magnética, na ausência de anisotropias.

$$\Phi(P, T, \eta) = \Phi_0(P, T) + A(P, T)\eta^2 + B(P, T)\eta^4 \quad (3.1)$$

O parâmetro de ordem η em 3.1 deve ser identificado com a magnetização M , por unidade de volume do sistema. Para estudar a dependência de M com um campo externo, incluímos o termo usual $-MhV$, onde V é o volume da amostra. Determinamos rapidamente os expoentes críticos.

$$\frac{\partial\Phi}{\partial M} = 0 \quad \rightarrow \quad M^2 = -\frac{A(P, T)}{2B(P, T)} \quad (3.2)$$

No modelo de Landau, escrevemos $A(T) = a(P)(T - T_c)$ e $B(P, T) = B(P)$, de maneira que $\beta = 0.5$. Para a escala de M com o campo, nas proximidades de T_c , de maneira que $T - T_c = 0$, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Phi}{\partial M} &= 2a(P)(T - T_c)M + 4B(P)M^3 - hV \\ \frac{\partial\Phi}{\partial M} = 0 &\quad \rightarrow \quad M^3 = \frac{hV}{4B(P)} \end{aligned} \quad (3.3)$$

De maneira que $\delta = 3$. Podemos ainda comparar os resultados experimentais com o

salto do calor específico previsto pela teoria. Para as proximidades de T_c , M é pequeno, e escrevemos.

$$S = -\frac{\partial\Phi}{\partial T} = S_0 - \left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)\eta^2 \quad (3.4)$$

O calor específico da fase ordenada é $C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p$, de maneira que

$$C_p - C_{p0} = \frac{a(P)^2 T_C}{2B} \quad (3.5)$$

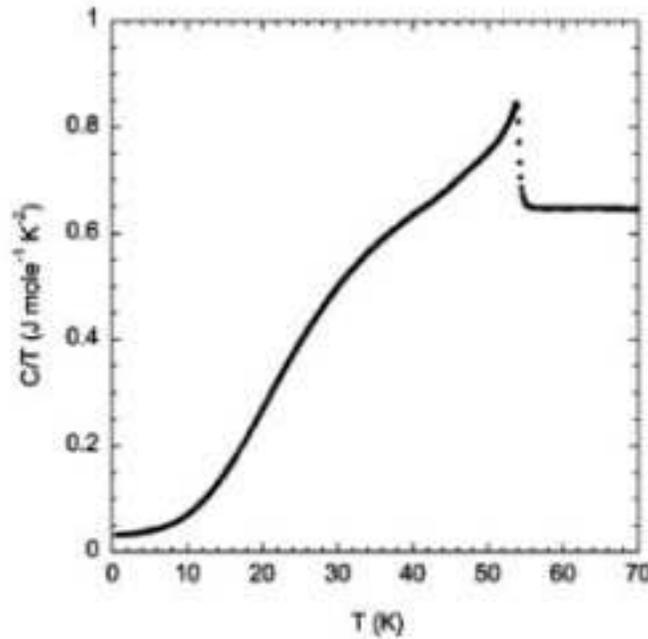
No experimento encontra-se $\beta = 0.52 \pm 0.05$ e $\delta = 3.20 \pm 0.08$. Outro resultado da teoria de campo médio é um salto do calor específico de $150 \text{ mJK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ enquanto que o experimental é de $155 \pm 30 \text{ mJK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$. O valor dos expoentes críticos e salto do calor específico de outras teorias estão bem mais distantes do que os previstos pela teoria de Landau.

3.2 UGe_2

Em um primeiro momento UGe_2 é um sistema totalmente diferente do $ZrZn_2$ visto que, de fato, pertence a uma classe distinta de materiais, sendo exemplo de um “férmion pesado”. O ferromagnetismo metálico do $ZrZn_2$ advém da separação das bandas de condução pela interação de troca que favorece uma maior população de elétron com uma dada direção de spin.

Para férmions pesados, o magnetismo tem origem na polarização de elétrons f , altamente localizados, pelos elétrons da banda de condução. No entanto, para este composto em particular, e pelo o menos a pressão ambiente, os elétrons f possuem um caráter itinerante, sugerido por medidas de calor específico a baixas temperaturas $C/T = 32 \text{ mJmol}^{-1} \text{ K}^{-2}$ e também pela razão deste valor pelo salto do calor específico observado na temperatura de Curie $\approx 200 \text{ mJmol}^{-1} \text{ K}^{-2}$ (fig 3.3). Existe também uma diminuição do valor ($\approx 50\%$) do momento ordenado do U no composto em relação ao íon, mas que pode ser explicado por efeitos de campo cristalino.

Vale lembrar que este sistema distingue-se dos metais itinerantes devido a forte interação spin-órbita, que leva a propriedades magnéticas altamente anisotrópicas. Os re-

Figura 3.3: Medida do Calor Específico para o UGe_2 [11].

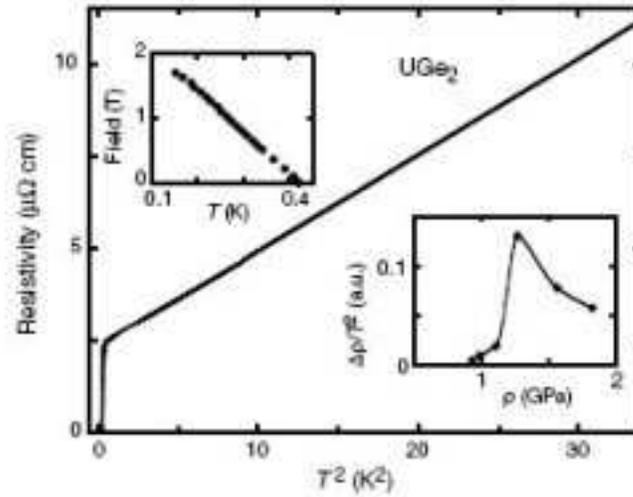
sultados aqui apresentado estão nas referências [10, 11].

3.2.1 Supercondutividade e Magnetismo em UGe_2

Supercondutividade em UGe_2 também só pode ser encontrada em amostras com alto grau de pureza com resistividade residual de $0.2\mu\Omega$, correspondendo a um livre caminho médio de alguns milhares de Ângstroms, sendo esta uma primeira indicação de que o sistema é não convencional (momento angular finito). Para um pequeno intervalo de pressão, a resistividade da amostra cai subitamente, assinalando uma transição supercondutora (fig 3.4).

Aqui também a supercondutividade aparece apenas a partir de uma transição onde o estado normal é ferromagnético. Ambos os fenômenos são suprimidos a uma pressão crítica $P_c \approx 16\text{GPa}$. A aplicação de pressão diminui a distância entre os sítios de Urânio (à pressão ambiente 3.85Å), o que aumenta o grau de deslocalização dos elétrons f , que pode explicar o desaparecimento do ferromagnetismo para uma dada pressão. Se a presença do ferromagnetismo é essencial para a ocorrência de supercondutividade, é natural que

Figura 3.4: Assinatura da transição: medida de resistividade [10].

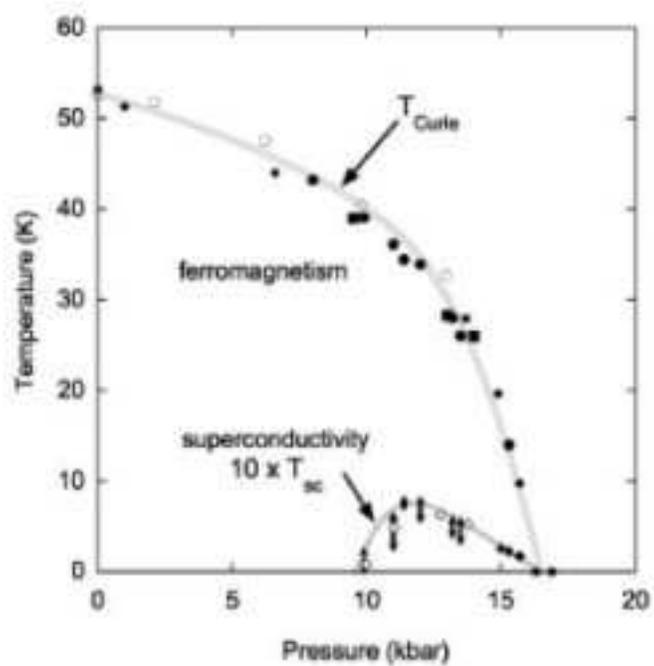


ambos os fenômenos sejam suprimidos nesta mesma pressão crítica P_c . O diagrama de fases (fig 3.5) para este composto tem um aspecto bastante similar ao do esquema que discutimos no início do capítulo.

A supercondutividade é um fenômeno de todo o volume da amostra, como mostram medidas de fluxo de corrente. A coexistência com a fase ferromagnética é determinada diretamente por espalhamento de nêutrons, quando o sistema está no estado superconductor. Medidas de susceptibilidade revelam que esta também tende ao valor ideal -1 . Mede-se um campo crítico de $B_{c2} = 3T$, resultado bastante elevado, sendo mais um indicativo de comportamento não convencional (pareamento tripleto). A temperatura crítica supercondutora medida é $T_{SC} = 0.8K$, enquanto que a temperatura de Curie é $T_C = 35K$ (a revisão destas propriedades está extensamente discutida em [11]).

Uma energia de troca da ordem de $70meV$ separa as folhas da superfície de Fermi para os diferentes spins. Observa-se que ambas as folhas estão populadas e, portanto, a superfície de Fermi consiste de ambas as folhas. Esta separação é importante para explicar algumas de nossas escolhas ao analisar a simetria do parâmetro de ordem superconductor. O UGe_2 se forma em uma estrutura ortorrômbica (grupo espacial $Cmmm$). Esta estrutura cristalina favorece o aparecimento de propriedades magnéticas ainda mais anisotrópicas. Voltaremos a discutir esta estrutura no próximo capítulo, onde será mais oportuno.

Figura 3.5: Diagrama de fases [11].



Capítulo 4

Estados Supercondutores em Metais Ferromagnéticos.

Neste capítulo desenvolvemos o corpo central do nosso trabalho. Pretendemos expor a teoria desenvolvida para a classificação dos estados supercondutores em metais ferromagnéticos [16] especialmente no limite de acoplamento spin-órbita forte. Vamos partir de considerações bastante gerais acerca da construção de uma teoria microscópica, apenas para nos situarmos no problema fenomenológico. Em seguida, discutimos a teoria de grupos magnéticos e suas co-representações [5, 13]. Estudamos, então, a simetria dos estados supercondutores para os dois sistemas que descrevemos no capítulo anterior [19]. Finalizamos o capítulo desenvolvendo a teoria de Ginzburg-Landau para supercondutores ferromagnéticos [15, 18].

4.1 Um esboço para a Teoria Microscópica.

Espera-se que devido ao forte campo de troca gerado, as bandas de energia eletrônica de metais ferromagnéticos devam estar separadas em bandas de *spin up* e *spin down*. Isto implica que elétrons de spins opostos possuem energias bastante diferentes, o que torna o pareamento no estado singleto bastante improvável. Isto nos leva naturalmente a propor que nestes sistemas, a supercondutividade se dá pelo canal tripleto e ainda que a componente de zero projeção de momento de spin deve ser zero. Aprendemos no capítulo 1 que o parâmetro de ordem tripleto pode ser escrito como 2.20.

$$\begin{aligned}\hat{\Delta}(k) &= \begin{pmatrix} \Delta(k)_{\uparrow\uparrow} & \Delta(k)_{\uparrow\downarrow} \\ \Delta(k)_{\downarrow\uparrow} & \Delta(k)_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -d_x(k) + id_y(k) & d_z(k) \\ d_z(k) & d_x(k) + id_y(k) \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (4.1)$$

Para as próximas seções lembramos também a forma

$$\hat{\Delta}(k) = i(\vec{d}^\Gamma(k) \cdot \hat{\sigma})\hat{\sigma}_y \quad (4.2)$$

Onde em 4.2, explicitamos que o vetor \vec{d} está associado a uma das simetrias Γ do grupo de simetrias do estado normal. Veremos que Γ é uma dada co-representação deste grupo. Uma vez que consideramos $\Delta(k)_{\uparrow\downarrow} = \Delta(k)_{\downarrow\uparrow} = 0$, o vetor \vec{d} pode ser escrito como:

$$d^\Gamma(R, k) = \frac{1}{2}[-(\hat{x} + i\hat{y})\Delta(R, k)_{\uparrow\uparrow} + (\hat{x} - i\hat{y})\Delta(R, k)_{\downarrow\downarrow}] \quad (4.3)$$

Em 4.3 \hat{x} e \hat{y} são versores do espaço de pseudospin. A forma das componentes $\Delta(k)_{\uparrow\uparrow}$ e $\Delta(k)_{\downarrow\downarrow}$ depende da co-representação Γ associada a transição. Neste caso, ainda vale o princípio geral que diferentes (co-)representações estão associadas a distintas temperaturas de transição. No nível deste trabalho, permanece o argumento anterior, que será mais estável a representação que leva a um gap com menos nós. Vamos aqui relembrar que na verdade os índices α e β não denotam exatamente o spin das partículas. Como estamos no limite de forte acoplamento spin órbita, estes índices denotam pseudospin ou ainda, a degenerescência de Kramer das bandas eletrônicas que acabam por ser separadas devido a presença do ferromagnetismo. De agora em diante usamos a palavra spin, mas tendo em mente esta observação.

A Hamiltoniana para este problema é similar à forma generalizada que estudamos no capítulo 1 (2.1), no entanto devemos ter em mente que os diferentes índices de spin α e β dizem respeito a elétrons em bandas distintas e, como apontado desde cedo por Ginzburg, sempre existe a presença de um termo de energia magnética, devido ao campo de troca.

$$\mathcal{H} = \sum_{kk'\alpha} \langle k | \hat{h}_\alpha | k' \rangle c_{k\alpha}^\dagger c_{k'\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{kk'\alpha\beta} V_{\alpha\beta}(k, k') c_{-k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}^\dagger c_{k'\beta} c_{-k'\beta} \quad (4.4)$$

O operador \hat{h} de 4.4 se escreve:

$$\hat{h}_\alpha = \hat{\epsilon}_\alpha + \mu_B \hat{g}_\alpha \vec{H}_{ext}/2 + U(r) - \epsilon_F \quad (4.5)$$

Perceba que a separação das bandas pela energia de troca está inclusa em $\hat{\epsilon}_\alpha$. Como usual, $U(r)$ é um potencial de impurezas. O campo magnético total que atua sobre o sistema é

$$\nabla \times \vec{A} = \vec{B} = \vec{H}_{ext} + 4\pi \vec{M} \quad (4.6)$$

Onde \vec{M} é o momento magnético do estado ferromagnético. O potencial de interação contém, no caso geral, quatro termos de interação. Excluímos os termos de interação entre bandas ($V_{\uparrow\downarrow} = V_{\downarrow\uparrow} = 0$) e associamos os demais termos a uma dada (co-)representação Γ . Este procedimento é garantido pelo mesmo argumento de ortogonalidade de diferentes representações que usamos no primeiro capítulo. Por exemplo:

$$V_{\uparrow\uparrow}(k, k') = -v_{\uparrow\uparrow} \varphi_{\uparrow}(k) \varphi_{\uparrow}(k')^* \quad (4.7)$$

Onde $v_{\uparrow\uparrow}$ é amplitude do potencial e as funções $\varphi(k)$ “carregam” a informação sobre a simetria do potencial. Com estas considerações bastante gerais podemos tirar conclusões sobre zeros no espectro de energia das quasi partículas e, conseqüentemente, propriedades termodinâmicas não convencionais. Para prosseguir, precisamos estudar a teoria dos grupos magnéticos e suas co-representações.

4.2 Grupos Magnéticos.

Sabemos que muitas propriedades macroscópicas e microscópicas de um sistema físico guardam relação com suas simetrias e em especial, em física da matéria condensada, com sua simetria cristalina. No entanto, é comum incorrer no erro de tirar conclusões acerca da estrutura magnética de um sistema com base nesta simetria. Um exemplo flagrante seria a da fase ferromagnética do ferro. Devido a forças de magnetoestrição, sua rede cúbica apresenta uma fraca distorção tetragonal (grupo D_{4h}). Uma análise dos elementos desta simetria cristalina mostra que aqui, o ferromagnetismo não seria possível pois uma rotação C_{2x} mudaria o sinal do pseudovetor M que descreve a magnetização (ver abaixo).

O problema de determinar a simetria do ordenamento magnético começa a ser resolvido ao considerarmos duas grandezas fundamentais, sendo estas $\rho(x, y, z)$ e $j(x, y, z)$, respectivamente a densidade microscópica de carga e corrente de um sistema. De fato, a densidade de carga $\rho(x, y, z)$ está diretamente relacionada com a simetria cristalina e, portanto, conclusões acerca do ordenamento elétrico de um corpo podem ser extraídas diretamente desta simetria. Como exemplo, qualquer cristal com centro de inversão não pode ser ferroelétrico (apresentar uma transição de segunda ordem para uma fase piroelétrica).

Quando olhamos para o problema do ferromagnetismo, temos que considerar que correntes possuem um comportamento distinto das cargas sob a ação da simetria de reversão temporal (que denotamos K). Sabemos que $K\rho(x, y, z) = \rho(x, y, z)$ mas que $Kj(x, y, z) = -j(x, y, z)$, portanto, se o estado do sistema como um todo permanece invariante sob a ação de K , temos que ter $j(x, y, z) = 0$. É importante notar [14] que não falamos aqui de uma média temporal de j que deve ser nula e sim que j é identicamente nula para qualquer intervalo de tempo.

Do mesmo modo, caso o estado do corpo se modifique devido a ação de K , $j(x, y, z)$ não precisa ser identicamente nula. No entanto, como tratamos estados de equilíbrio termodinâmico, não podem existir correntes resultantes, ou seja, requeremos $\int j dV = 0$, onde tomamos o volume de uma cela unitária (magnética). Entretanto, a integral $\int r \times j dV$ não precisa ser zero, significando que estas correntes podem dar origens a um vetor de magnetização espontânea. Quando isto ocorre para um dado sistema, este é chamado ferromagnético.

É muito importante notar que ambas as integrais precisam ser tomadas sob uma cela magnética (conceito que esclarecemos adiante). Para um sistema antiferromagnético, a segunda integral é zero somente quando compreendemos que a cela magnética compreende as duas sub redes magnéticas com magnetizações de sentidos opostos e iguais intensidades.

A função $j(x, y, z)$ pode conter a simetria K de modo que temos $j = -j = 0$, mas pode também ser antissimétrica com respeito a um elemento da simetria cristalina, como uma dada translação T , de maneira que $KTj = j$ e o sistema terá estrutura magnética. Isso implica que o problema de determinar os possíveis tipos de simetria da distribuição de corrente resulta em determinar todas as combinações de K com outros elementos de simetria, como rotações, translações e reflexões.

Uma vez que nos interessamos por propriedades termodinâmicas (que são macroscópicas), vale o argumento geral da Teoria de Landau que não precisamos considerar o grupo espacial do cristal, apenas seu grupo de ponto. Desenvolvemos abaixo, a partir das 32

classes cristalinas (grupos pontuais), as classes magnéticas (grupos magnéticos pontuais), primeiro a partir de idéias intuitivas (conhecimento necessário para os objetivos deste capítulo) e depois apresentamos a teoria formal para incluir suas co-representações.

4.3 Grupos Magnéticos Pontuais

Um dado conjunto de átomos que possuem um mesmo valor do momento magnético μ é chamado de uma sub-rede. Ao determinarmos as sub-redes que, quando repetidas, formam a estrutura do cristal, determinamos a cela magnética unitária. A cela magnética unitária de um antiferromagneto é formada por pelo menos duas sub-redes, enquanto que um ferromagneto pode possuir uma única sub-rede.

Diferente da simetria da função $j(x, y, z)$, podemos usar a simetria da distribuição de densidade de momento magnético $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{j}$. Lembrando que \vec{M} é um vetor axial com $K\vec{M} = -\vec{M}$, construímos a teoria.

4.3.1 Tipos de Classes Magnéticas.

As classes magnéticas são divididas em três tipos [5, 14, 13]. Chamamos de tipo I àquelas que se constituem das classes cristalinas ordinárias. Estes são 32 grupos de simetria e não incluem a operação K de nenhuma forma. A extensão natural do tipo I é considerarmos o conjunto dos elementos formados pela soma dos elementos do tipo I com a multiplicação destes pela simetria K . Aqui a simetria K aparece explicitamente como elemento de simetria. Sendo G um grupo pontual qualquer, esta classe magnética M , se escreve como:

$$M = G + KG \tag{4.8}$$

Sistemas que sejam descritos por esta classe certamente não possuem estrutura magnética, sendo diamagnéticos. Fica claro que existem também 32 destes grupos. Estes 2 tipos de classes são comumente chamadas classes triviais. O terceiro tipo, inclui K apenas em combinação com outros elementos (rotações e reflexões). Para escrevermos esta classe M de maneira geral, considere um grupo H de elementos de G , que *não* são multiplicados por K na formação de M . Considere agora g_1 , um elemento de G , que *não pertence* a H (significando que g_1 é multiplicado por K). Como K só aparece em M em combinação com outros elementos, é certo que $g_1 \neq E$, ou que $E \in H$.

Agora considere $h_1 \in H$ e $h_2 \in H$ e defina $m = h_1 h_2$. É certo que $m \in G$. Como nem h_1 ou h_2 são multiplicados por K , m que é elemento de M , não pode ser decomposto em

K multiplicado por outro elemento. Isto significa que $m \in H$. Deste resultado, e que $E \in H$, resulta que H é subgrupo de G . Tome agora g_2 que, como g_1 , é multiplicado por K (de maneira equivalente $g_2 \notin H$). Considere a multiplicação $Kg_1Kg_2 = K^2g_1g_2 = g_1g_2$. Isto significa que g_1g_2 é um elemento de G que não é multiplicado por K , ou seja, que $g_1g_2 \in H$. Isto significa que H é subgrupo de G de índice 2. Uma classe magnética M deste terceiro tipo fica escrita como:

$$M = H + Kg_1H \quad (4.9)$$

De 4.9 resulta que para determinar as classes magnéticas do tipo 3, ou classes não triviais, devemos determinar para cada um dos 32 grupos G , seus subgrupos de índice 2 e construir a classe magnética associada. Estes subgrupos podem ser achados diretamente da tabela de caracteres de um grupo G quando consideramos a analogia correta de uma dada estrutura cristalina e sua simetria cristalina, com o caso magnético. Isso quer dizer que uma dada estrutura magnética deve pertencer a representação identidade de uma dada classe magnética M . Como exemplo considere as possíveis classes do tipo *III* que podem ser contruídas a partir dos grupos O e O_h . Uma consulta a tabela de caracteres mostra, que o grupo O além da representação identidade, possui uma representação A_2 unidimensional (para referência ver [5] página 59). Suponha um estrutura cristalina C invariante sob este grupo. O grupo possui 24 elementos. Todas as 6 rotações C_{2p} e 6 rotações C_{4m}^\pm (sentidos horários e antihorários) são representadas por -1 nesta representação. Uma dada estrutura magnética construída sob C , seria invariante sobre a ação dos demais 12 elementos, mas não a ação destes elementos acima explicitados. Agora, ao multiplicarmos estes elementos pela operação K , a estrutura magnética passa a ser invariante sob todas os elementos. Os 12 elementos de O não listados, constituem o grupo T , que obviamente tem índice 2. Podemos então formar a classe magnética

$$M = T + KC_{4x}T \quad (4.10)$$

Em geral esta classe seria escrita como $O(T)$, onde o grupo em parênteses denota os elementos não multiplicados por K (não confundir com as classes supercondutoras do capítulo 1). A escolha de C_{4x} em 4.10 é arbitrária. Olhando a mesma tabela de caracteres podemos construir as possíveis classes para o grupo O_h , uma vez que $O_h = O \otimes C_i$. As classes são $O_h(O, T_h, T_d)$. Com referência ao problema do ferro, podemos ver que o grupo D_{4h} tem como subgrupo de índice 2, o grupo C_{4h} . A classe magnética $D_{4h}(C_{4h})$ descreve uma fase ferromagnética, com a magnetização ao longo do eixo de simetria de ordem 4,

resolvendo assim o problema da existência do ferromagnetismo.

Antes de passarmos a questão das co-

representações, exploramos a questão das classes equivalentes. Utilizando o método acima, esperamos encontrar, por exemplo, para o grupo C_{4v} , 3 diferentes classes magnéticas pois este grupo possui 3 outras representações unidimensionais que a representação identidade A_1 . No entanto, observamos que as representações B_1 e B_2 deste grupo dão origem a classes que diferem entre si apenas por uma rotação dos eixos de reflexão. Estas classes são ditas equivalentes. Quando tomamos cuidado com estas questões e analisamos todas as 32 classes cristalinas, encontramos 58 classes magnéticas do tipo *III*.

4.3.2 Co-representações.

A inclusão da operação K traz modificações à teoria de representações [13, 5] uma vez que K é um operador anti-unitário. Para estudar estas modificações considere a decomposição (4.8,4.9) de uma dada classe magnética M (tipos *II* ou *III*)

$$M = H + AH \quad (4.11)$$

Na decomposição 4.11, A é um elemento de simetria não unitário e H é o sub-grupo unitário de índice 2, em relação a classe M . Para uma classe do tipo 2, H são as classes cristalinas e A é a operação K . Em 4.10, temos que $H = T$ e que $A = KC_{4x}$. Seja ψ um certo conjunto de funções, que formam uma base d dimensional de uma certa representação Γ do grupo H ($\psi = \{\psi_1, \psi_2 \dots \psi_d\}$). Para uma dada operação $h \in H$, representada em Γ por uma matriz $\Delta(h)$, escrevemos:

$$h\psi_i = \sum_{j=1}^d \psi_j \Delta(h)_{ji} \quad (4.12)$$

Ou, em notação mais familiar:

$$h \langle \psi | = \langle \psi | \Delta(h) \quad (4.13)$$

Introduzimos um outro conjunto de d funções ϕ_i , de maneira que temos:

$$A \langle \psi | = \langle \phi | \quad (4.14)$$

Mostremos, com base em 4.13, 4.14 e que A é anti linear, que o espaço gerado pelas funções ψ e ϕ é invariante sob ação de M .

$$\begin{aligned}
 h \langle \phi | &= hA \langle \psi | = A(A^{-1}hA) \langle \psi | = A \langle \psi | \Delta(A^{-1}hA) \\
 &= \langle \phi | \Delta^*(A^{-1}hA)
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Desta maneira temos:

$$h \langle \psi, \phi | = \begin{pmatrix} \Delta(h) & 0 \\ 0 & \Delta^*(A^{-1}hA) \end{pmatrix} \tag{4.16}$$

Considere agora uma operação $g \in AH$. Esta operação pode ser escrita como $g = Ah$. Calculando $g \langle \psi |$ e $g \langle \phi |$, chega-se que:

$$g \langle \psi, \phi | = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(gA) \\ \Delta(A^{-1}g)^* & 0 \end{pmatrix} \tag{4.17}$$

A invariância está demonstrada. Como fomos capazes de construir um espaço invariante sob a ação dos elementos do grupo M , temos que as matrizes 4.16 e 4.17, constituem as corepresentações de M (que denotamos D). Meramente multiplicando estas matrizes pode-se verificar que a propriedade:

$$\Delta(h_1)\Delta(h_2) = \Delta(h_1h_2)$$

Válida para representações de elementos de grupos unitários, não é válida para qualquer elemento de M , ocorrendo mudanças na presença de elementos da classe lateral AH . Para tratar da equivalência e reducibilidade destas co-representações, precisamos estudar o efeito de uma transformação unitária na base $\langle \psi, \phi |$.

$$\langle \psi, \phi | \equiv \langle \chi |$$

$$\langle \chi' | = \langle \chi | U \Rightarrow h \langle \chi' | = \langle \chi' | D'(h) = \langle \chi | UD'(h)$$

Ou, simplesmente:

$$h \langle \chi' | = h \langle \chi | U = \langle \chi | D(h)U$$

De maneira que:

$$D'(h) = U^{-1}D(h)U \quad (4.18)$$

Para uma operação $g \in AH$, ficamos com:

$$D'(g) = U^{-1}D(g)U^* \quad (4.19)$$

Se as equações 4.18 e 4.19, são satisfeitas para todos os elementos h e g de M , dizemos que as co-representações D e D' são equivalentes. Da mesma maneira definimos que D será redutível se uma transformação U poder levar D a uma forma bloco diagonal, mais elementar que àquela na qual D se encontra. Outro ponto importante é que caso escolhamos um elemento diferente A para a representação por cosets 4.11, sempre é possível construir uma matriz U que relaciona diferentes escolhas de A . Deste modo a escolha de A é arbitrária, como discutimos no exemplo 4.10.

Tome agora duas representações Γ_1 e Γ_2 não equivalentes em H (ou seja, representações complexas), com matrizes $\Delta_1(h)$ e $\Delta_1^*(A^{-1}hA) \equiv \Delta_2(h)$ (definindo assim a representação de h em Γ_2), para $h \in H$. Temos que $\Delta_2^*(A^{-1}hA) = \Delta_1(A^{-2}hA) = \Delta_1(A^{-2})\Delta_1(h)\Delta_1(A^2)$ que é equivalente a $\Delta(h)$. Logo, representações conjugadas, não equivalentes em H , dão origem a co-representações equivalentes. Estas são obtidas direto de 4.16 e 4.17. Estas representações são irredutíveis.

Agora resta o caso em que Γ_1 e Γ_2 são equivalentes. Aqui assumimos que podemos escrever

$$\Delta(h) = N\Delta(A^{-1}hA)N^{-1}$$

Onde N é a matriz unitária da transformação. Usando o lema de Shur, podemos concluir que:

$$NN^* = \pm\Delta(A^2) \quad (4.20)$$

Para o sinal positivo, a co-representação será dada por:

$$\begin{cases} D(h) \\ D(g) \end{cases} = \begin{cases} \Delta(h) \\ \Delta(h)N \end{cases} \quad (4.21)$$

E para o sinal negativo, temos

$$\begin{cases} D(h) \\ D(g) \end{cases} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \Delta(h) & 0 \\ 0 & \Delta(h) \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -\Delta(h)N \\ \Delta(h)N & 0 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (4.22)$$

Na referência [5], extensivas tabelas de (co-)representações e várias outras informações são dadas. A teoria, embora com caráter mais formal e menos didática, está exposta com bastante precisão em [13].

4.4 Classes supercondutoras.

Com os conhecimentos das últimas duas seções, construímos agora as possíveis classes supercondutoras [16] que são realizadas a partir do estado normal ferromagnético. Para tanto, iniciamos a descrição do estado normal, já assumindo a simplificação geral da teoria de Landau que apenas a simetria pontual é de interesse, não sendo importante considerar a simetria de translação da rede.

Os dois sistemas considerados UGe_2 e $ZrZn_2$ possuem, respectivamente, estrutura ortorrômbica e cúbica em sua fase paramagnética [10, 7]. Em ambos os sistemas, a transição para a fase ferromagnética implica o aparecimento de uma magnetização com direção bem definida, embora a anisotropia para o caso do $ZrZn_2$ seja pouco acentuada. Para o $ZrZn_2$, a magnetização aparece paralela ao eixo z ($M||[001]$) ou na diagonal do cubo ($M||[111]$). A simetria O_h da fase paramagnética é perdida e assim temos:

$$M = \begin{cases} D_{4h}(C_{4h}) \\ D_{3d}(C_3) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} M||[001] \\ M||[111] \end{cases} \quad (4.23)$$

Já para o UGe_2 que a magnetização surge no eixo z (eixo cristalográfico a).

$$M = D_{2h}(C_{2h}) \Rightarrow M|[001] \quad (4.24)$$

Para cada um destes casos, escrevemos a simetria da fase normal como:

$$\mathcal{G} = M \otimes U(1) \quad (4.25)$$

Seguimos o procedimento geral discutido no capítulo 1, começando por 4.24. Sabemos de 2.47 (ver nota de roda-pé) que podemos estudar a classe $D_2(C_2)$ no lugar da classe $D_{2h}(C_{2h})$ e tomar as representações ímpares. As 2 representações do grupo C_2 dão origem à duas corepresentações não equivalentes para $D_2(C_2)$ e ambas pertencem ao caso descrito por 4.21. Vamos denota-las co-representações A e B . Os elementos de $D_2(C_2)$ são:

$$D_2(C_2) = \{E, C_{2z}, RC_{2x}, RC_{2y}\}$$

Que escrevemos na forma 4.11 como:

$$D_2(C_2) = C_2 + KC_{2x}C_2$$

Estes elementos são representados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} A &= \{1, 1, 1, 1\} \\ B &= \{1, -1, 1, -1\} \end{aligned} \quad (4.26)$$

Vamos aqui fazer uma convenção de notação: $S_\Gamma[J]$ denota uma classe supercondutora, obtida a partir de um subgrupo J da fase normal 4.25, associada a representação Γ . As duas classes supercondutoras, não equivalentes, que podem ser obtidas são:

$$\begin{aligned} S_A[D_2(C_2)] &= \{E, C_{2z}, RC_{2x}, RC_{2y}\} \\ S_B[\{E, RC_{2x}\}] &= \{E, C_{2z}e^{i\pi}, RC_{2x}RC_{2y}e^{i\pi}\} \end{aligned} \quad (4.27)$$

A classe S_A descreve o caso “convencional”, onde o parâmetro de ordem mantém a

simetria cristalina. Neste caso a simetria de gauge foi quebrada de maneira trivial. No caso de S_B , contruímos a classe a partir do sub co-grupo invariante $\{E, RC_{2x}\}$. O grupo de gauge isomorfo à $\mathcal{F} = D_2(C_2)/\{E, RC_{2x}\}$ é $\{1, e^{i\pi}\}$ e é claro que elementos devem ser multiplicados pelas fases. Os elementos de $S_B(E)$, não implicam na existência de zeros no espectro de energia das quasipartículas, quando consideramos a situação mais geral para o pareamento. Uma vez que são todas corepresentações $1 - d$, o parâmetro de ordem associado é escrito como

$$d(R, k) = \eta(R)\Psi(k) \quad (4.28)$$

Onde em 4.28, temos que:

$$\Psi(k) = \hat{x}f_x(k) + \hat{y}f_y(k) + \hat{z}f_z(k) \quad (4.29)$$

E aqui (4.29) \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} são versores do espaço de spin e $f_{x,y,z}(k)$ são funções (ímpar) no espaço de momentos do pareamento das partículas na superfície de Fermi. Formas para estas funções podem ser encontradas na literatura [16]. Aqui vale um comentário sobre os resultados desta referência e os nossos.

No texto partimos direto do formalismo de co-representações e consideramos apenas a formação de co-representações não equivalentes. Por isto, encontramos apenas duas classes supercondutores, e não 4 como no trabalho citado. Posteriormente, a condição $\langle \Psi^{\Gamma^*}(k)\Psi^{\Gamma'}(k) \rangle = 0$, mostra que de fato existem apenas 2 classes não equivalentes, sendo que o par de classes equivalentes denotam domínios onde a magnetização tem sentido contrário, mas o estado supercondutor em si possui a mesma simetria.

Discutimos agora 4.23, começando pelo caso $D_4(C_4)$. Listamos os elementos deste grupo e o escrevemos na forma 4.11.

$$D_4(C_4) = \{E, C_{2z}, C_{4z}, C_{4z}^{-1}, KC_{2x}, KC_{2y}, KC_{2a}, KC_{2b}\}$$

$$D_4(C_4) = C_4 + KC_{2x}C_4$$

Este grupo possui 4 co-representações não equivalentes, obtidas também a partir de 4.21.

$$\begin{aligned}
 \Gamma_1 &= \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\} \\
 \Gamma_2 &= \{1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1\} \\
 \Gamma_3 &= \{1, -1, -i, i, 1, -1, -i, i\} \\
 \Gamma_4 &= \{1, -1, i, -i, 1, -1, i, -i\}
 \end{aligned}$$

Com as definições $J_1 = \{E, C_{2z}, KC_{2x}, KC_{2y}\}$ e $J_2 = \{E, C_{2x}\}$, são obtidas quatro classes supercondutoras:

$$\begin{aligned}
 S_{\Gamma_1}[D_4(C_4)] &= \{E, C_{2z}, C_{4z}, C_{4z}^{-1}, KC_{2x}, KC_{2y}, KC_{2a}, KC_{2b}\} \\
 S_{\Gamma_2}[J_1] &= \{E, C_{2z}, C_{4z}e^{i\pi}, C_{4z}^{-1}e^{i\pi}, KC_{2x}, KC_{2y}, KC_{2a}e^{i\pi}, KC_{2b}e^{i\pi}\} \\
 S_{\Gamma_3}[J_2] &= \{E, C_{2z}e^{i\pi}, C_{4z}e^{i\pi/2}, C_{4z}^{-1}e^{3i\pi/2}, KC_{2x}, KC_{2y}e^{i\pi}, KC_{2a}e^{i\pi/2}, KC_{2b}e^{3i\pi/2}\} \\
 S_{\Gamma_4}[J_2] &= \{E, C_{2z}e^{i\pi}, C_{4z}e^{3i\pi/2}, C_{4z}^{-1}e^{i\pi/2}, KC_{2x}, KC_{2y}e^{i\pi}, KC_{2a}e^{3i\pi/2}, KC_{2b}e^{i\pi/2}\}
 \end{aligned}$$

Na classe S_{Γ_2} , zeros são esperados no espectro de energia para $k_x = k_y = 0$. Para verificar esta afirmação basta perceber que para $k_0 = (0, 0, k_z)$, temos $d(k_0) \parallel k_0$, devido a invariância de $d(k)$ sob a transformação C_{2z} . Usando o elemento não trivial $C_{4z}e^{i\pi}$, o resultado é obtido. Não esperamos zeros nas demais classes. O mesmo procedimento pode ser usado para analisar as classes supercondutoras para o caso $D_{3d}(C_3)$.

Na próxima seção, a estrutura do gap será novamente analisada levando-se em conta um cenário possível de pareamento, com as restrições discutidas no início do capítulo.

4.4.1 Estímulo da Supercondutividade pelo Ferromagnetismo.

Uma vez que sabemos classificar os estados supercondutores que podem ser realizados em uma transição a partir de uma fase ferromagnética metálica, nos parece oportuno entender, ao menos em um nível fenomenológico, como o ferromagnetismo pode estimular a supercondutividade. As idéias desta seção são válidas nas proximidades do ponto crítico para a transição supercondutora, na região em que apenas termos lineares do parâmetro de ordem são considerados.

Os estados listados acima são não unitários e possuem um momento de spin associado ao par de Cooper dado por:

$$S = i \langle d^* \times d \rangle = \frac{\hat{z}}{2} \langle |\Delta_{\uparrow\uparrow}|^2 - |\Delta_{\downarrow\downarrow}|^2 \rangle \quad (4.31)$$

E também um momento angular associado ao par de Cooper:

$$L = \frac{i}{2} \langle \Delta_{\uparrow\uparrow}^* (k \times \frac{\partial}{\partial k}) \Delta_{\uparrow\uparrow} + \Delta_{\downarrow\downarrow}^* (k \times \frac{\partial}{\partial k}) \Delta_{\downarrow\downarrow} \rangle \quad (4.32)$$

Em 4.31 consideramos apenas a formação de pares de elétrons com spins na mesma direção. Em ambas as equações, os colchetes denotam um média sob as direções no espaço k . De maneira geral, a interação do momento de spin do par de Cooper com o campo magnético age para estabilizar a fase supercondutora (como no caso do ${}^3\text{He}$), enquanto que esta interação com o momento angular suprime a fase supercondutora (como ocorre em supercondutores convencionais). Parece um caminho natural explorar o estímulo da supercondutividade pelo ferromagnetismo, pela comparação destas duas interações.

Sendo H_{ex} o campo de exchange, devido ao ferromagnetismo, e H_{ext} o campo externo aplicado, o campo magnético que age no par de Cooper é dado por $H = H_{ex} + H_{ext}$. Podemos considerar que a ação do campo H_{ex} aumenta a temperatura crítica supercondutora, proporcionalmente ao deslocamento da superfície de Fermi para as bandas de spin up e spin down das quasipartículas.

$$\frac{T_c(H_{ex}) - T_c}{T_c} \approx \frac{\mu_B H_{ex}}{\epsilon_F} \quad (4.33)$$

A ação do campo magnético sobre a carga do elétron, suprime o estado supercondutor, numa medida proporcional a penetração do fluxo magnético na amostra. No regime linear temos:

$$\frac{T_c(H_{em}) - T_c}{T_c} \approx -\frac{\xi_0^2 H_{em}}{\Phi_0} \approx -\frac{\epsilon_F \mu_B H_{em} m}{T_c^2 m^*} \quad (4.34)$$

Onde m e m^* são a massa e a massa efetiva do elétron, respectivamente. O campo H_{em} que age nas cargas é soma do campo externo e do campo de dipolo de seu próprio momento magnético ferromagnético. Em UGe_2 os valores dos campos H_{ex} e H_{em} podem ser estimadas [11], e mostram que temos $H_{ex} \gg H_{em}$. Neste composto $H_{ex} \approx 20T$, enquanto que H_{em} é menor que $1kG$. Usando as equações 4.31 e 4.32, obtemos um critério para que ocorra estímulo da supercondutividade:

$$\frac{H_{ex}}{H_{em}} > \frac{\epsilon_F^2 m}{T_c^2 m^*} \quad (4.35)$$

É importante notar que ambos os efeitos do ferromagnetismo dos compostos (supressão e estímulo) estão presentes e competem. Um campo externo, em sentido contrário, poderia compensar o efeito de supressão orbital sem atrapalhar de maneira sensível o estímulo gerado pelo campo de troca por sua interação com os pares de Cooper. Um exemplo disto é tratado no problema que apresentaremos no capítulo 5. Estas idéias foram usadas com relativo sucesso em uma teoria fenomenológica para o $ZrZn_2$ [20].

4.5 A Estrutura do Gap.

Vamos nos especializar nas consequências para a estrutura do gap supercondutor, implicadas pela simetria ortorrômbica presente no UGe_2 . Esta abordagem já foi utilizada para o caso do $ZrZn_2$ para ambos os cenários de acoplamento spin órbita fraco [15] e forte [19], visto que ambos os casos podem ser relevantes para este sistema. Aqui tratamos apenas o caso de forte acoplamento spin órbita, uma vez que parece claro que este é o caso para UGe_2 . Começamos por invocar os argumentos do início do capítulo que nos leva a escrever um parâmetro de ordem do tipo 4.3:

$$d^\Gamma(R, k) = \frac{1}{2}[-(\hat{x} + i\hat{y})\Delta(R, k)_{\uparrow\uparrow} + (\hat{x} - i\hat{y})\Delta(R, k)_{\downarrow\downarrow}] \quad (4.36)$$

As co-representações para o grupo de simetrias da fase do estado normal ferromagnético do UGe_2 (e também do $ZrZn_2$), são todas $1 - d$. No entanto, um dos efeitos multibanda mais evidentes é que o parâmetro de ordem terá duas componentes mesmo nesta situação e escrevemos para os potenciais de pareamento:

$$\begin{aligned} \Delta(R, k)_{\uparrow\uparrow} &= -\psi_1(R)f_-(k) \\ \Delta(R, k)_{\downarrow\downarrow} &= \psi_2(R)f_+(k) \end{aligned} \quad (4.37)$$

Onde definimos as funções $f(k)$, que descrevem o pareamento de partículas na superfície de Fermi e são ímpares na variável k . As funções $\psi(R)$, dependem das coordenadas e descrevem a amplitude do parâmetro de ordem. São estas as funções que usaremos na formulação da teoria de Ginzburg-Landau, na próxima seção, e no capítulo 5, onde

resolvemos um modelo específico para a interação deste parâmetro de ordem com paredes de domínios magnéticos.

A definição de f_{\pm} vem diretamente de 4.36, sendo $f_{\pm}(k) = f_x(k) \pm i f_y(k)$. Explicitando a dependência destas funções com a co-representação associada, o parâmetro de ordem se escreve agora:

$$d^{\Gamma}(R, k) = \frac{1}{2}[\psi_1(R)(\hat{x} + i\hat{y})f_{-}^{\Gamma}(k) + \psi_2(R)(\hat{x} - i\hat{y})f_{+}^{\Gamma}(k)] \quad (4.38)$$

As co-representações Γ são as co-representações A e B obtidas acima 4.26. Se analisarmos a simetria deste parâmetro de ordem, levando em conta os elementos das classes 4.27, teremos um resultado bem diferente. Começamos pela classe S_A . A tabela de caracteres nos mostra que:

$$C_{2z}d^A(R, k) = d^A(R, k)$$

Por outro lado, lembrando que as rotações agem no espaço de momentos ¹ e do limite de forte acoplamento spin-órbita, temos:

$$C_{2z}d^A(R, k) = -\frac{1}{2}[\psi_1(R)(\hat{x} + i\hat{y})f_{-}^A(C_{2z}^{-1}k) + \psi_2(R)(\hat{x} - i\hat{y})f_{+}^A(C_{2z}^{-1}k)]$$

Temos ainda que $f_{\pm}^A(C_{2z}^{-1}k) = f_{\pm}^A(-k_x, -k_y, k_z)$, para $k_0 = (00, k)$, ficamos com $f_{\pm}^A(C_{2z}^{-1}k_0) = f_{\pm}^A(k_0)$ e chegamos que:

$$d^A(R, k_0) = C_{2z}d^A(R, k_0) = -d^A(R, k_0) \quad (4.39)$$

Portanto o estado supercondutor da classe S_A possui nós em ambos os polos da superfície de Fermi ($k_x = k_y = 0$). Considerando agora classe S_B , usamos a invariância do parâmetro de ordem sob o elemento não trivial $C_{2z}e^{i\pi}$:

$$C_{2z}e^{i\pi}d^B(R, k) = d^B(R, k)$$

$$C_{2z}e^{i\pi}d^B(R, k) = -C_{2z}d^B(R, k)$$

$$C_{2z}e^{i\pi}d^B(R, k) = d^B(R, C_{2z}^{-1}k)$$

¹Poderiam agir nas coordenadas de maneira equivalente e, de fato, esta equivalência é usada para construir a Teoria de Ginzburg Landau. O fato é que as rotações não agem de maneira simultânea no espaço de momentos e no espaço de coordenadas.

A rotação no espaço de momento é realizada através das funções f_{\pm} , explicitamente temos $f_{\pm}^B(C_{2z}^{-1}k) = f_{\pm}^B(-k_x, -k_y, k_z)$ (como anteriormente), agora escolhemos $k_0 = (k_x, k_y, 0)$ de maneira que $f_{\pm}^B(C_{2z}^{-1}k_0) = f_{\pm}^B(-k_x, -k_y, 0) = -f_{\pm}(k_0)$, onde usamos que f_{\pm} é uma função ímpar no espaço de momentos. Com este resultado escrevemos:

$$\begin{aligned} d^B(R, k_0) &= C_{2z} e^{i\pi} d^B(R, k_0) = -d^B(R, k_0) \\ \Rightarrow d(R, k_0) &= 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

Desta maneira, temos que este gap tem uma linha de zeros na região do equador $k_z = 0$. Vale mais uma vez afirmar uma questão muito importante.: esta estrutura de gap INDEPENDENTE da escolha particular de bases. Ela foi determinada unicamente pelos elementos presentes nas classes supercondutoras. Vale também observar que este resultado parece contrariar a regra de Blount [3].

Na seção anterior colocamos que as classes supercondutoras apropriadas para o UGe_2 não apresentavam nós no espectro de energia e aqui determinamos a existência de alguns nós! Deve-se perceber, no entanto, que agora consideramos apenas pareamento de elétrons de mesmo spin ($\Delta(R, k)_{\uparrow\uparrow}$ e $\Delta(R, k)_{\downarrow\downarrow}$). Para analisarmos diretamente as consequências desta escolha, estudamos a Hamiltoniana 4.4, começando por uma aproximação tipo BCS.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_k [\epsilon_{\uparrow}(k) c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} + \epsilon_{\downarrow}(k) c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}] \\ \mathcal{H}_{int} &= \sum_k \sum_{\alpha, \beta = \pm} [\Delta_{\alpha\beta}(k) c_{k\alpha}^{\dagger} c_{-k\beta}^{\dagger} + cc] \\ \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int} \end{aligned} \quad (4.41)$$

Aqui está definido $\Delta_{\alpha\beta} = \sum_{k'\gamma\delta} V_{\beta\alpha\gamma\delta} \langle c_{k'\gamma} c_{-k'\delta} \rangle$ que é o potencial de pareamento, da teoria BCS generalizada.

Vamos diagonalizar 4.41 a fim de encontrarmos a condição para a existência de zeros no espectro de energia das quasipartículas supercondutoras. O trabalho se resume em encontrar o determinante da matriz deste Hamiltoniano e igualá-lo a zero. A forma matricial de 4.41 se escreve diretamente:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\uparrow}(k) & 0 & \Delta_{\uparrow\uparrow}(k) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(k) \\ 0 & \epsilon_{\downarrow}(k) & \Delta_{\downarrow\uparrow}(k) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(k) \\ \Delta_{\uparrow\uparrow}(k)^* & \Delta_{\downarrow\uparrow}(k)^* & -\epsilon_{\uparrow}(k) & 0 \\ \Delta_{\uparrow\downarrow}(k)^* & \Delta_{\downarrow\downarrow}(k)^* & 0 & -\epsilon_{\downarrow}(k) \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

E a nossa condição é

$$\epsilon_+^2 \epsilon_-^2 + \epsilon_-^2 |\Delta_{\uparrow\uparrow}|^2 + \epsilon_+^2 |\Delta_{\downarrow\downarrow}|^2 + \epsilon_+ \epsilon_- (|\Delta_{\uparrow\downarrow}|^2 + |\Delta_{\downarrow\uparrow}|^2) + |Det(\Delta)|^2 = 0 \quad (4.43)$$

Um estudo de 4.43 revela que qualquer valor finito para as componentes intrabanda, impossibilita a existência de zeros no espectro de energia. Explicitamente, a condição para zeros na banda \uparrow ($\epsilon_{\uparrow} = 0$) é

$$\epsilon_-^2 |\Delta_{\uparrow\uparrow}|^2 + |\Delta_{\uparrow\uparrow}\Delta_{\downarrow\downarrow} - \Delta_{\downarrow\uparrow}\Delta_{\uparrow\downarrow}|^2 = 0$$

A condição que satisfaz a igualdade é $\Delta_{\uparrow\uparrow} = \Delta_{\uparrow\downarrow} = 0$ de modo similar, temos que para existir zeros na banda \downarrow , $\Delta_{\downarrow\downarrow} = \Delta_{\downarrow\uparrow} = 0$. Desta maneira, chegamos que um valor finito para $\Delta_{\uparrow\downarrow}$ elimina os zeros no espectro das quasipartículas.

Podemos analisar outros aspectos da Hamiltonia 4.41 levando em consideração as propriedades de transformação dos potenciais de pareamento $\Delta_{\alpha\beta}(k)$. A estrutura cristalina do UGe_2 é descrita por uma estrutura ortorrômbica de base centrada [11], grupo espacial C_{mmm} (ou $\Gamma_0^b D_{2h}^{19}$ ou ainda o grupo 65 na tabela de Bradley [5]), que é um grupo simorfo. Seus elementos geradores são $\{E, (C_{2x}|\vec{0}), (C_{2y}|\vec{0}), (I|\vec{0})\}$. Mas uma vez, podemos fixar a paridade (ímpar) e estudar apenas $\{E, (C_{2x}|\vec{0}), (C_{2y}|\vec{0})\}$.

Para a fase magnética devemos considerar a inclusão da operação K , de maneira que $\{E, (C_{2z}|\vec{0}), (KC_{2x}|\vec{0})\}$ é uma escolha possível para os geradores do grupo magnético (observe que $C_{2z}KC_{2x} = KC_{2y}$). Os operadores $c_{k\pm}^\dagger$ (\pm para \uparrow ou \downarrow) se transformam como:

$$\begin{aligned} (C_{2z}|\vec{0}) : \lambda c_{k,\pm}^\dagger &\rightarrow \mp i \lambda c_{C_{2z}k,\pm}^\dagger \\ (KC_{2x}|\vec{0}) : \lambda c_{k,\pm}^\dagger &\rightarrow \pm i \lambda^* c_{-C_{2x}k,\pm}^\dagger \end{aligned} \quad (4.44)$$

Onde λ é um número complexo qualquer. As regras de transformação 4.44 são deduzi-

das a partir da escolha $K = (i\sigma_y)\theta$ (onde θ é a operação de tomar o complexo conjugado) e que os estados de pseudospin se transformam de maneira similar aos autoestados de spin. A Hamiltoniana 4.41 deve ser invariante sob estas operações. A análise da parte não interagente, que contém o espectro das bandas, é direta, fazemos aqui para $(C_{2z}|\vec{0})$, como exemplo:

$$\begin{aligned}
 (C_{2z}|\vec{0}) : \sum_k \epsilon_{\uparrow}(k) c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} &\rightarrow \sum_k [C_{2z} \epsilon_{\uparrow}(k) c_{k\uparrow}^{\dagger}] [C_{2z} c_{k\uparrow}] \\
 &= \sum_k [C_{2z} \epsilon_{\uparrow}(k)] c_{k\uparrow}^{\dagger} [C_{2z} c_{k\uparrow}] = -i \epsilon_{\uparrow}(k) c_{C_{2z}k, \uparrow}^{\dagger} (+i) c_{C_{2z}k, \uparrow} \\
 \sum_k \epsilon_{\uparrow}(k) c_{C_{2z}k, \uparrow}^{\dagger} c_{C_{2z}k, \uparrow} &= \sum_{C_{2z}k'} \epsilon_{\uparrow}(C_{2z}^{-1}k') c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow} \\
 &= \sum_{C_{2z}^{-1}k'} \epsilon_{\uparrow}(C_{2z}^{-1}k') c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow} \tag{4.45}
 \end{aligned}$$

Uma vez que a soma em 4.45 é sobre todos os k' s, podemos escrever

$$= \sum_{k'} \epsilon_{\uparrow}(C_{2z}^{-1}k) c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}$$

O que demonstra $\epsilon_{\uparrow}(k) = \epsilon_{\uparrow}(C_{2z}^{-1}k)$, ou seja, a banda é invariante sob as operação C_{2z} , o mesmo resultado vale para KC_{2x} . O caso de maior interesse, que descreve a transformação do potencial de pareamento, reside na análise da parte interagente:

$$\mathcal{H}_{int} = \sum_k \sum_{\alpha, \beta = \pm} [\Delta_{\alpha\beta}(k) c_{k\alpha}^{\dagger} c_{-k\beta}^{\dagger} + cc] \tag{4.46}$$

Vamos a transformação para $(C_{2z}|\vec{0})$. Vimos anteriormente que os nós no gap de energia foram determinados apenas pela análise da ação deste operador no parâmetro de ordem.

$$\begin{aligned}
 &\sum_k [(C_{2z}|\vec{0}) \Delta_{\uparrow\uparrow}(k) c_{k\uparrow}^{\dagger}] [(C_{2z}|\vec{0}) c_{-k\uparrow}^{\dagger}] = \\
 &= \sum_k \Delta_{\uparrow\uparrow}(k) [(-i) c_{C_{2z}k\uparrow}^{\dagger}] [(-i) c_{-C_{2z}k\uparrow}^{\dagger}] = \sum_{C_{2z}^{-1}k'} -\Delta_{\uparrow\uparrow}(C_{2z}^{-1}k') [c_{k'\uparrow}^{\dagger}] [c_{-k'\uparrow}^{\dagger}]
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (C_{2z}|\vec{0})\Delta_{\uparrow\uparrow}(k) = -\Delta_{\uparrow\uparrow}(C_{2z}^{-1}k) \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} & \sum_k [(C_{2z}|\vec{0})\Delta_{\uparrow\downarrow}(k)c_{k\uparrow}^\dagger][(C_{2z}|\vec{0})c_{-k\downarrow}^\dagger] = \\ & = \sum_k \Delta_{\uparrow\downarrow}(k)[(-i)c_{C_{2z}k\uparrow}^\dagger][(+i)c_{-C_{2z}k\downarrow}^\dagger] = \sum_{C_{2z}^{-1}k'} \Delta_{\uparrow\downarrow}(C_{2z}^{-1}k')[c_{k'\uparrow}^\dagger][c_{-k'\downarrow}^\dagger] \\ & \Rightarrow (C_{2z}|\vec{0})\Delta_{\uparrow\downarrow}(k) = \Delta_{\uparrow\downarrow}(C_{2z}^{-1}k) \end{aligned} \quad (4.48)$$

$$\begin{aligned} & \sum_k [(C_{2z}|\vec{0})\Delta_{\downarrow\downarrow}(k)c_{k\downarrow}^\dagger][(C_{2z}|\vec{0})c_{-k\downarrow}^\dagger] = \\ & = \sum_k \Delta_{\downarrow\downarrow}(k)[(+i)c_{C_{2z}k\downarrow}^\dagger][(+i)c_{-C_{2z}k\downarrow}^\dagger] = \sum_{C_{2z}^{-1}k'} -\Delta_{\downarrow\downarrow}(C_{2z}^{-1}k')[c_{k'\downarrow}^\dagger][c_{-k'\downarrow}^\dagger] \\ & \Rightarrow (C_{2z}|\vec{0})\Delta_{\downarrow\downarrow}(k) = -\Delta_{\downarrow\downarrow}(C_{2z}^{-1}k) \end{aligned} \quad (4.49)$$

Invocamos agora que podemos expandir a função do gap em termos de funções base associadas a uma dada representação Γ , isto é, $\Delta_\Gamma(k) = \sum_i \psi_{\Gamma,i} f_i(k)$. Como o grupo de simetrias do UGe_2 é simorfo, as co-representações que obtemos anteriormente 4.26 valem para o grupo espacial no ponto de alta simetria $k = (000)$. Para os elementos $\{E, (C_{2z}|\vec{0}), (RC_{2x}|\vec{0}), (RC_{2y}|\vec{0})\}$, estas co-representações são:

$$\begin{aligned} A &= \{1, 1, 1, 1\} \\ B &= \{1, -1, 1, -1\} \end{aligned}$$

Vemos agora que mais conclusões podem ser tiradas desta expansão, sem que, mais uma vez, precisemos utilizar formas específicas para as funções base. No entanto, precisamos fixar a fase das funções base e a escolhemos de maneira que tenhamos $KC_{2x}f_\Gamma(k) = f_\Gamma(k)$. Com esta escolha nos preocupamos apenas com os elementos unitários do grupo $(\{E, (C_{2z}|\vec{0})\})$. Olhando os resultados 4.47 -4.50 podemos escrever:

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\uparrow\uparrow,A}(k) &= \psi_A f_B(k) \\
 \Delta_{\uparrow\uparrow,B}(k) &= \psi_B f_A(k)
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\uparrow\downarrow,A}(k) &= \psi_A f_A(k) \\
 \Delta_{\uparrow\downarrow,B}(k) &= \psi_B f_B(k)
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\downarrow\downarrow,A}(k) &= \psi_A f_B(k) \\
 \Delta_{\downarrow\downarrow,B}(k) &= \psi_B f_A(k)
 \end{aligned} \tag{4.52}$$

Das relações 4.50-4.52 temos que zeros nos potenciais de pareamento $\Delta_{\uparrow\uparrow,\Gamma}(k)$ e $\Delta_{\downarrow\downarrow,\Gamma}(k)$ são determinadas por co-representações diferentes daquelas que determinam zeros nos potenciais $\Delta_{\uparrow\downarrow,\Gamma}(k)$ e $\Delta_{\downarrow\uparrow,\Gamma}(k)$. Ou seja, mais uma vez vemos que mesmo que os potenciais intrabanda sejam nula, a existência de um valor finito para a componente interbanda impede a existência de zeros.

Discutimos agora a questão das temperaturas de transição associadas às diferentes co-representações. No início desta seção, destacamos que um dos efeitos multibanda mais evidentes é o aparecimento de um parâmetro de ordem supercondutor de duas componentes, que descreve a densidade de pares em cada uma das bandas \uparrow e \downarrow , mesmo na situação de co-representações unidimensionais². Estes parâmetros de ordem podem assumir simetrias diferentes ou iguais. No primeiro caso, uma das bandas se tornaria supercondutora enquanto que a outra ainda estaria no estado normal. De fato, uma das representações pode estar associada a uma temperatura de transição muito menor que a outra.

Em relação ao Hamiltoniano 4.41, os termos de pareamento intrabanda $c_{k,\uparrow}^\dagger c_{-k,\uparrow}^\dagger c_{k',\downarrow} c_{k',\downarrow}$ são os responsáveis pelo aparecimento de parâmetros de ordem com mesma simetria nas diferentes bandas. Em caso de acoplamento spin órbita fraco, esperamos que estes termos tenham amplitude muito pequena uma vez que, devido a conservação de spin, este termo é nulo para acoplamento spin órbita nulo. Por consequência, podemos supor que, num

²De fato, a inclusão do pareamento interbanda pode levar a um parâmetro de ordem de três componentes, mas vamos descartar esta possibilidade dada a enorme separação das bandas de energia devido ao campo de troca.

sistema como o $ZrZn_2$, uma das bandas torna-se supercondutora antes da outra. De fato os experimentos [7] mostram que não há um salto aparente do calor específico nas proximidades de T_{SC} . Uma possibilidade para explicar é que estas medidas podem estar sendo influenciadas pela banda normal, embora exista a possibilidade de supercondutividade sem gap [1].

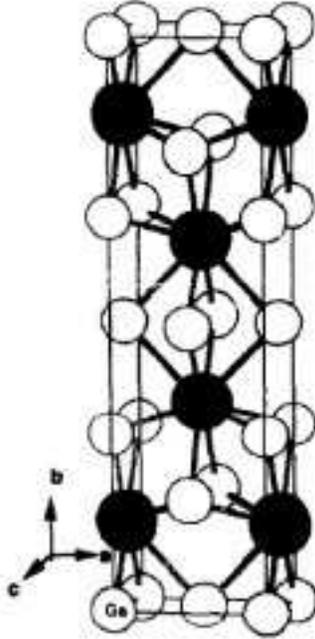
Para o caso do UGe_2 esperamos que este termo seja grande o suficiente para induzir parâmetros de ordem de mesma simetria. O salto do calor específico para este composto é menor que o previsto pela teoria BCS e nós na estrutura do gap podem explicar este comportamento. Medidas de baixa temperatura mostram um comportamento do tipo $\propto T^2$ [11], compatível com uma linha de zeros para a estrutura do gap. Por esta observação o parâmetro de ordem do UGe_2 pertenceria ao estado S_B . É importante afirmar que este ponto não é conclusivo, uma vez que estas medidas ainda não foram repetidas para um número suficiente de amostras. e também porque apenas medidas de calor específico não selecionam de maneira inequívoca a simetria do parâmetro de ordem.

Por último vamos analisar as consequências que a periodicidade da rede ortorrômbica pode implicar para a supercondutividade em UGe_2 . Isto implica em achar uma forma específica para as funções $f_{\Gamma}(k)$ compatível com esta periodicidade. Isto pode ser feito considerando a expansão em série de Fourier, tomando apenas sua parte ímpar.

$$f(k) = \sum_n c_n \sin(k \cdot R_n) \quad (4.53)$$

Onde R_n são sítios da rede ortorrômbica de base centrada, que não podem ser transformados um nos outros por uma operação de inversão. Formamos um conjunto para os R_n considerando uma aproximação de primeiros vizinhos. Com referência à figura 4.1 os valores aproximados de a , b e c (as constantes de rede) são, respectivamente $4\overset{0}{\text{Å}}$, $15\overset{0}{\text{Å}}$ e $4,1\overset{0}{\text{Å}}$.

Com estes valores, fica claro que os primeiros vizinhos da rede constituem os sítios distantes pelas diagonais dos planos. O conjunto R_n apropriado é $R_n = \{\frac{1}{2}(110), \frac{1}{2}(\bar{1}\bar{1}0)\}$. Aqui não podemos mais nos furtar a discutir a questão da orientação da magnetização do sistema. Quando determinamos o grupo pontual magnético do UGe_2 (e depois suas classes supercondutoras) fizemos a hipótese que esta magnetização surge ao longo do eixo

Figura 4.1: Estrutura cristalina do UGe_2


z . Em termos cristalográfico, verifica-se, experimentalmente, que esta direção é a direção a , de maneira que R_n é melhor escrito como $R_n = \{\frac{1}{2}(011), \frac{1}{2}(0\bar{1}1)\}$, de maneira que:

$$f(k) = c_1 \sin\left(\frac{1}{2}(ak_z + ck_y)\right) + c_2 \sin\left(\frac{1}{2}(ak_z - ck_y)\right)$$

Esta função pode ser escrita como:

$$f(k) = \alpha \sin\left(\frac{ak_z}{2}\right) \cos\left(\frac{ck_y}{2}\right) + \beta \sin\left(\frac{ck_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) \quad (4.54)$$

Para $\beta = 0$, esta função é uma base para a corepresentação A e para $\alpha = 0$, esta é uma base para a corepresentação B (lembre que $KRf(k) = f^*(-R^{-1}k)$).

$$\begin{aligned} f(k)_A &= \alpha \sin\left(\frac{ak_z}{2}\right) \cos\left(\frac{ck_y}{2}\right) \\ f(k)_B &= \beta \sin\left(\frac{ck_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) \end{aligned}$$

Estas funções base implicam em zeros não requeridos por simetria. Estes zeros são

devido a esta escolha particular de base, onde consideramos apenas interações de primeiros vizinhos. Estes zeros desaparecem quando termos de ordem superior são incluídos. No entanto, estes zeros indicam que se as interações de primeiros vizinhos são dominantes, experimentos poderiam encontra-los.

4.6 Teoria de Ginzburg-Landau.

A teoria de Ginzburg Landau (GL) deve ser modificada a fim de se obter um funcional consistente com as simetrias do sistema, modificadas devido a presença da Magnetização. O funcional deve, portanto, conter termos invariantes com respeito aos elementos da classe magnética M e ainda invariantes pelo grupo de Gauge. Temos ainda que a transição supercondutora se dá apenas na presença de ferromagnetismo. Isso nos obriga a considerar termos que descrevam a energia do estado magnético e ainda a interação da magnetização com o parâmetro de ordem supercondutor.

O funcional a que nos referimos é escrito na forma geral como:

$$f(\psi, M) = f_S(\psi) + f'_F(M) + f_I(\psi, M) + \frac{B^2}{8\pi} - B.M \quad (4.55)$$

Sendo que a energia livre total é obtida pela integração de 4.55 sob toda a amostra

$$F[\psi M] = \int d^3x f(\psi, M)$$

Em relação a 4.55, temos que ψ é o parâmetro de ordem supercondutor, um vetor complexo de 3 componentes e $B = H + 4\pi M = \nabla \times A$ é a indução magnética; H é o campo externo. Os dois últimos termos em 4.55 são comumente utilizados para descrever efeitos paramagnéticos e diamagnéticos no supercondutor [14]. O primeiro termo ($f_S(\psi)$), descreve a supercondutividade na ausência de magnetização e campos externos. É o termo usual (generalizado), do funcional de GL.

$$f_S(\psi) = f_{grad}(\psi) + a_s|\psi|^2 + \frac{b_s}{2}|\psi|^4 + \frac{u_s}{2}|\psi^2|^2 + \frac{v_s}{2} \sum_{j=1}^3 |\psi_j|^4 \quad (4.56)$$

O termo $f_{grad}(\psi)$ de 4.56 se escreve:

$$f_{grad}(\psi) = K_1(D_i\psi_j)^*(D_i\psi_j) + K_2[(D_i\psi_i)^*(D_j\psi_j) + (D_i\psi_j)^*(D_j\psi_i)] + K_3(D_i\psi_i)^*(D_i\psi_i) \quad (4.57)$$

Onde a repetição dos índices denota uma soma e introduzimos a derivada covariante:

$$D_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{2|e|\hbar}{c}A_j$$

A seguinte interpretação pode ser feita das constantes fenomenológicas introduzidas em 4.56 e 4.57: $a_s = \alpha_s(P)(T - T_S)$ é a constante usual da teoria de Landau [14] com T_s denotando a transição supercondutora na ausência de campo externo e magnetização; também como usual $b_s > 0$, que estabiliza a fase de baixa temperatura; já u_s descreve a anisotropia do pareamento tripleto e v_s a anisotropia cristalina; finalmente em 4.57, K_i está ligado ao tensor de massa efetiva devido ao pareamento anisotrópico dos pares de Cooper.

Retornando a 4.55, explicitamos o termo $f'_F(M)$ que descreve a energia de um ferromagneto. Sobre este termo, vale notar que ao colocarmos $H = 0$ em 4.55, já temos um termo $-2\pi M^2$ que vem de $\frac{B^2}{8\pi}$. Com isto, a parte quadrática de $f'_F(M)$ deve ser modificada, de maneira que apenas para $H = 0$, a temperatura T'_f seja de fato a temperatura de transição ferromagnética. Usualmente temos:

$$f_{quad} = \alpha_f(P)(T - T_f)M^2$$

Precisamos apenas considerar que escrevemos $f'_F(M)$

$$f'_F(M) = c_f \sum_{j=1}^3 |\nabla_j M_j|^2 + \alpha_j(P)(T - T'_f)M^2 + \frac{b_f}{2}M^4 \quad (4.58)$$

Onde temos a relação $T_f = T'_f + \frac{2\pi}{\alpha_f}$, para resolver o problema discutido. É claro que se trocarmos em 4.55, o termo $\frac{B^2}{8\pi}$ por $\frac{H^2}{8\pi}$, podemos escrever o funcional 4.58 em função direto da temperatura de transição T_f . Nos resta apenas $f_I(\psi, M)$, que descreve a interação entre os parâmetros de ordem supercondutor e ferromagnético.

$$f_I(\psi, M) = i\gamma_0 M \cdot (\psi \times \psi^*) + \delta M^2 |\psi|^2 \quad (4.59)$$

A parte quadrática em 4.59 é relevante apenas para a descrição do sistema no caso de acoplamento forte, em geral o termo γ_0 é dominante. Usualmente se escreve a constante $\gamma_0 = 4\pi J$, onde $J > 0$ é o parâmetro de exchange ferromagnético. Perceba que este termo tem um forma do tipo exchange. As constantes fenomenológicas $T_S, T_f, \alpha_s, \alpha_f, b_s, u_s, v_s K_j, \gamma_0$ e δ tem seus valores definidos pela escolha do material específico que se pretende estudar. Certamente não é fácil investigar de maneira direta a termodinâmica descrita a partir de 4.55, e simplificações devem ser feitas a fim de diminuir o número de termos (e parâmetros) a serem analisados.

Partindo do fato que a supercondutividade em $ZrZn_2$ aparece apenas da fase ferromagnética, pode-se formular um modelo [20] onde o par de Cooper interage com a magnetização apenas através do termo $i\gamma_0 M \cdot (\psi \times \psi^*)$ de 4.59 e que a densidade de magnetização do par de Cooper ($\psi \times \psi^*$) escolhe uma direção tal que sua energia de exchange é negativa, estabilizando a supercondutividade.

Neste modelo a magnetização é considerada uniforme (temos $\nabla_j M_j = 0$ em 4.58) e uma dependência linear da temperatura crítica com a pressão é considerada. A equação para a magnetização é simplesmente

$$M = \left(\frac{\alpha_f}{b_f}\right)(T_f(P) - T)^{\frac{1}{2}}$$

Em geral a presença da magnetização altera a simetria do cristalina do $ZrZn_2$. No modelo, a fim de estudar a dependência explícita do parâmetro de ordem ψ com M , esta alteração é ignorada e considera-se ψ com um vetor $3 - d$, associado a representação F_1 do grupo O_h . Anisotropias da fase supercondutora devido a presença do tripleto e campo cristalino e mesmo o termo de quarta ordem com simetria de rotação, são também ignoradas ($b_s = u_s = v_s = 0$ em 4.56), mas a anisotropia do tensor de massa 4.57 é mantida e todos os três termos são considerados. O funcional considerado é

$$F = \alpha\psi^* \cdot \psi - i4\pi JM \cdot \psi^* \times \psi + f_{grad}(\psi)$$

A minimização deste funcional seleciona um parâmetro de ordem que se transforma de acordo a co-representação 1E , ou 2E , da classe magnética $D_{4h}(C_{4h})$ para a magnetização $M||[100]$ ou de acordo as co-representações complexas da classe magnética $D_{3d}(C_3)$ para a magnetização $M||[111]$.

Este modelo inspira um outro trabalho que considera este mesmo mecanismo para estabilizar a supercondutividade. Este trabalho [18] considera a possibilidade da exis-

tência de fases de Meissner (supercondutividade uniforme), mas estuda os efeitos dos termos de anisotropia (ou seja, ignora os termos de gradiente). Extensiva discussão sobre a estabilidade das fases é feita nestes trabalho, de grande valor didático.

No próximo capítulo, apresentamos o problema da supercondutividade na proximidade de paredes de domínios magnéticos, a partir das idéias fenomenológicas desta seção e das seções anteriores.

Capítulo 5

Supercondutividade e Paredes de Domínios.

Em compostos supercondutores cujo estado de referência é paramagnético, simetria de reversão temporal pode ou não ser quebrada na transição supercondutora. Para os recentemente descobertos ferromagnetos supercondutores $T_f > T_s$, o estado de referência já não possui simetria de reversão temporal, ocasionando uma mudança no tratamento fenomenológico.

Aqui vamos nos ater ao problema clássico da supercondutividade nas bordas de uma parede de domínio [21]. Precedentes teóricos apontam na direção de que a supercondutividade, diferente de ser suprimida é, de fato, estimulada pela proximidade com a parede, sendo a temperatura crítica da transição maior nas proximidades da parede do que no “bulk”.

Como já foi discutido, este problema foi primeiro abordado por Ginzburg [2], que percebeu imediatamente que a formação de domínios magnéticos levaria a uma maior estabilidade da fase supercondutora. Aqui, apresentamos uma expansão desta discussão clássica de Ginzburg, analisando o parâmetro de ordem nas proximidades da parede de domínio magnético, conforme foi estudado na referência [21].

A teoria fenomenológica deve incluir necessariamente uma indução magnética B , gerada pela magnetização macroscópica do estado ferromagnético. Quando este campo B é inhomogêneo, isto é, na presença de domínios ferromagnéticos, a supressão da supercondutividade pelo ferromagnetismo é menor e com isto podemos esperar a coexistência dos dois fenômenos.

As idéias a serem apresentadas implementam algumas observações experimentais sobre o sistema. Qualquer que seja o mecanismo de acoplamento do par de Cooper, as condições

para este acoplamento são diferentes nas proximidades da parede e no “bulk”. A parede cria ainda uma barreira de potencial que pode impedir o tunelamento de elétrons entre os dois domínios.

Assume-se que a largura da parede é pequena em comparação com as escalas de grandeza da supercondutividade. Além dos termos de domínio único do potencial de Ginzburg Landau, são incluídos termos localizados próximos a parede, descrevendo a variação da força do pareamento além da transparência finita para a parede, com respeito ao tunelamento de pares.

Apresentaremos um estudo do diagrama de fases destas paredes localizadas em um estudo fenomenológico geral.

5.1 O Modelo

Começamos por considerar que $T_{fm} > T_{sc}$, desta maneira assume-se que a supercondutividade emerge a partir de um “background” ferromagnético. O parâmetro de ordem deve transformar-se de acordo com uma das co-representações do grupo magnético do estado normal. Vamos supor um parâmetro de ordem de uma componente $\psi(r)$ assumindo que apenas uma das bandas separadas pela interação de troca é supercondutora.

A quantização do spin é escolhida paralela a direção da magnetização, e consideramos que o canal up do estado tripleto é o canal supercondutor, em ambos os domínios. O parâmetro de ordem se escreve

$$\begin{aligned}\Delta_{\pm}(\vec{k}, \vec{r}) &= \Delta_{\uparrow\uparrow}^{\pm}(\vec{k}, \vec{r}) \\ \Delta_{\uparrow\uparrow}^{\pm}(\vec{k}, \vec{r}) &= \psi_{\pm}(\vec{r})\phi(\vec{k})\end{aligned}\tag{5.1}$$

Onde $\phi(\vec{k})$ é a base da co-representação escolhida. Supomos que a temperatura crítica é a mesma em ambos os lados (mesma co-representação associada à simetria do parâmetro de ordem). A energia livre se escreve como uma soma das energias livres de ambos os domínios $+/-$ e a energia da parede.

$$F = F_+ + F_- + F_{DW}\tag{5.2}$$

Escolhemos a parede no plano $x = 0$. As energias F_+ e F_- possuem a mesma dependência funcional, e se escreve, por exemplo para F_+ (bastando apenas trocar o índice para F_-).

$$F_+ = a(T - T_c)|\psi_+|^2 + K|D\psi_+|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi_+|^4 \quad (5.3)$$

O termo dos gradientes, contém, certamente os termos magnéticos, seguindo a prescrição da teoria fenomenológica de Ginzburg Landau. Desta maneira temos $D_i = -i\nabla_i + (2\pi/\Phi_0)A_i(\vec{r})$, como usual $\nabla \times A = B$. Prosseguimos com algumas considerações para acharmos uma forma para \vec{A} . A indução magnética é dada por $B = 4\pi M + H$ (onde H é o campo externo). Estamos num regime onde a largura l da parede é muito menor que as escalas supercondutoras, em especial $l \ll \xi_0$, o que significa que o parâmetro de ordem supercondutor, não “sente” a variação da magnetização na parede. De fato o parâmetro de ordem “enxerga” a magnetização como uma função sinal $M = (0, 0, M_0 \text{sgn}(x))$. Se considerarmos ainda um campo externo H ao longo do eixo z , temos para \vec{A} :

$$A(\vec{r}) = (0, B_0|x| + Hx, 0) \quad (5.4)$$

A contribuição da parede é escrita como.

$$F_{DW} = [\gamma_1(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \gamma_2(\psi_+^*\psi_- + \psi_-^*\psi_+) + i\gamma_3(\psi_+^*\psi_- - \psi_-^*\psi_+)]\delta(x) \quad (5.5)$$

Os termos da parede são quadráticos a fim de conseguirmos condições de contorno linearizadas. Certamente no limite $M \rightarrow 0$ os γ_i devem ser nulos (não há parede). Perceba que F_{DW} é invariante sob reversão temporal, uma vez que é uma grandeza termodinâmica.

Vamos analisar a expressão para F_{DW} considerando uma rotação do parâmetro de ordem.

$$\psi_{\pm} = \exp(\mp i\theta/2)\psi_{+-} \quad (5.6)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{\gamma_3}{\gamma_2}\right) \quad (5.7)$$

Analisamos 5.5 termo a termo.

$$\begin{aligned}
\psi_+^* \psi_- \pm \psi_-^* \psi_+ &\rightarrow \exp(i\theta/2) \psi_+^* \exp(i\theta/2) \psi_- \pm \exp(-i\theta/2) \psi_-^* \exp(-i\theta/2) \psi_+ \\
&= \exp(i\theta) \psi_+^* \psi_- \pm \exp(-i\theta) \psi_-^* \psi_+
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Usando 5.8 escrevemos os dois últimos termos de F_{DW} .

$$\begin{aligned}
&\gamma_2(\psi_+^* \psi_- + \psi_-^* \psi_+) + i\gamma_3(\psi_+^* \psi_- - \psi_-^* \psi_+) \rightarrow \\
&-\gamma_2(\exp(i\theta) \psi_+^* \psi_- + \exp(-i\theta) \psi_-^* \psi_+) + i\gamma_3(\exp(i\theta) \psi_+^* \psi_- - \exp(-i\theta) \psi_-^* \psi_+) \\
&= (-\gamma_2 + i\gamma_3) \exp(i\theta) \psi_+^* \psi_- - (\gamma_2 + i\gamma_3) \exp(-i\theta) \psi_-^* \psi_+
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Em 5.9 passamos os coeficientes das exponenciais para a forma polar. As exponenciais obtidas com esta passagem cancelam as já existentes e os dois termos podem ser unificados sob a mesma constante fenomenológica. A nova expressão para F_{DW} fica:

$$F_{DW} = [\gamma_1(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \gamma_2(\psi_+^* \psi_- + \psi_-^* \psi_+)]\delta(x) \tag{5.10}$$

A variação do funcional 5.2 nos dá as equações de movimento e condições de contorno (que discutiremos ao analisarmos o diagrama de fases).

$$\delta F = 0$$

$$\Rightarrow \delta \int a(T - T_c) |\psi_\pm|^2 + K |D\psi_\pm|^2 + \frac{1}{2} \beta |\psi_\pm|^4 + [\gamma_1(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \gamma_2(\psi_+^* \psi_- + \psi_-^* \psi_+)] \delta(x) = 0$$

Tratamos ψ_\pm e ψ_\pm^* como variáveis independentes. Vamos estudar os termos um a um.

$$\delta[a(T - T_c)|\psi_{\pm}|^2 + K|D\psi_{\pm}|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi_{\pm}|^4] = [2a(T - T_c)\psi_{\pm} + \beta|\psi_{\pm}|^2\psi_{\pm}]\delta\psi_{\pm}^* + K\delta|D\psi_{\pm}|^2$$

$$\because \delta|D\psi_{\pm}|^2 = \delta(D\psi_{\pm})(D\psi_{\pm})^*$$

$$= -KD^2(\psi_{\pm})\delta\psi_{\pm}^* + D(K[D\psi_{\pm}])\delta\psi_{\pm}^*$$

$$\therefore \delta\{\} = \{[2a(T - T_c)\psi_{\pm} + \beta|\psi_{\pm}|^2\psi_{\pm}] - KD^2(\psi_{\pm}) + D(K[D\psi_{\pm}])\}\delta\psi_{\pm}^* \quad (5.11)$$

O termo associado a energia da parede pode ser transformado em um termo de superfície (devido a função δ), contribuindo com novas condições de contorno.

$$\delta F_{DW} = [\gamma_1\psi_{\pm} - \gamma_2\psi_{\mp}]\psi_{\pm}^*\delta(x) \quad (5.12)$$

Usando 5.11 e 5.12 temos para variação total da energia:

$$\begin{aligned} \delta F &= \int d^3x \{-KD^2(\psi_{\pm}) + a(T - T_c)\psi_{\pm} + \beta|\psi_{\pm}|^2\psi_{\pm}\}\delta\psi_{\pm}^* + \\ &+ \int d^2x \{K[D\psi_{\pm}] + (\gamma_1\psi_{\pm} - \gamma_2\psi_{\mp})\}\delta\psi_{\pm}^* \end{aligned} \quad (5.13)$$

Prosseguimos propondo uma forma para o parâmetro de ordem $\psi_{\pm}(r) = \exp(iqy)f_{\pm}(x)$. Fazemos alguns cálculos preliminares.

$$-KD^2(\psi_{\pm}) = -K[-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0}\vec{A}]^2\psi_{\pm} =$$

$$= -K[-\nabla^2 + (\frac{2\pi}{\Phi_0})^2\vec{A}\cdot\vec{A} - i\frac{2\pi}{\Phi_0}\vec{A}\cdot\nabla]\psi_{\pm} = -K[-\exp(iqy)f_{\pm}'' + q^2\exp(iqy)f_{\pm}(x) +$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0}\right)^2 \vec{A} \cdot \vec{A} \exp(iqy) f_{\pm}(x) + \frac{2\pi}{\Phi_0} A_y \exp(iqy) f_{\pm}(x) \\
& = -\exp(iqy) K \left[-\frac{d^2 f_{\pm}}{dx^2} + \left[\frac{2\pi}{\Phi_0} (H \pm B_0)x + q \right]^2 f_{\pm} \right] \quad (5.14)
\end{aligned}$$

Mantemos apenas os termos lineares em ψ e escrevemos as equações para calcularmos T_c nas proximidades da barreira.

$$-K \frac{d^2 f_{\pm}}{dx^2} + K \left[\frac{2\pi}{\Phi_0} (H \pm B_0)x + q \right]^2 f_{\pm} + a(T - T_c) f_{\pm} = 0 \quad (5.15)$$

Condições de contorno em $x = 0$ (observe que $\vec{A}(0) = 0$).

$$K \frac{df_+}{dx} = \gamma_1 f_+ - \gamma_2 f_- \quad (5.16)$$

$$K \frac{df_-}{dx} = \gamma_2 f_+ - \gamma_1 f_- \quad (5.17)$$

Re-escalando as quantidades podemos escrever as equações em termos de parâmetros adimensionais.

$$\tilde{x} = x/l_B$$

$$\tilde{q} = ql_B$$

$$\tilde{\gamma}_i = \gamma_i l_B / K$$

$$l_B = \sqrt{\frac{\phi_0}{2\pi B}}$$

A equação diferencial re-escalada tem a seguinte solução:

$$f_{\pm}(x) = C_{\pm} \exp(-X_{\pm}^2/2) H_{\nu_{\pm}}(\pm X_{\pm}) \quad (5.18)$$

Para 5.18 temos que C_{\pm} é uma constante, a ser determinada pela condições de contorno (5.16 e 5.17) e $H_{\nu}(x)$ é a função de hermite. A constante que multiplica a função hipergeométrica é zero devido a condições de contorno no infinito $f(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty$.

Os demais parâmetros se escrevem:

$$v_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\frac{1 - \tau}{|1 \pm h|} - 1 \right) \quad (5.19)$$

$$X_{\pm} = \sqrt{|1 \pm h|} \left(x \pm \frac{q}{1 \pm h} \right) \quad (5.20)$$

$$h = H/B_0 \quad (5.21)$$

$$\tau = 1 + a(T - T_c)\phi_0/2\pi B_0 K \quad (5.22)$$

Onde x, q, \dots se referem as quantidades re-escaladas anteriormente definidas. Importante notar o significado físico em especial de τ , como dado por 5.22.

$$\tau = 1 + a(T - T_c)\phi_0/2\pi B_0 K$$

$$\Rightarrow T = (\tau - 1) \frac{2\pi B_0 K}{\phi_0 a} + T_c = \tau \frac{2\pi B_0 K}{\phi_0 a} + \left(T_c - \frac{2\pi B_0 K}{\phi_0 a} \right) \quad (5.23)$$

Na última igualdade em 5.23, o termo entre parêntesis nada mais é do que a expressão para a temperatura crítica no volume (“bulk”), levando em consideração que o sistema estará em geral em um estado mixto. Perceba então, que para o parâmetro adimensional $\tau = 0$, a temperatura crítica da parede se iguala a temperatura crítica no volume. Este é um ponto importante para analisar os resultados que apresentaremos no diagrama de fases.

Vamos agora determinar a constante C_{\pm} . Lembramos que as funções de Hermite obedecem a seguinte relação de recorrência:

$$H'_{\nu}(z) = 2\nu H_{\nu-1}(z) \quad (5.24)$$

Procedemos utilizando este resultado na versão re-escalada de 5.16 e 5.17.

$$\frac{df_+}{dx} = \gamma_1 f_+ - \gamma_2 f_- \quad (5.25)$$

$$\frac{df_-}{dx} = \gamma_2 f_+ - \gamma_1 f_- \quad (5.26)$$

Calculamos $\frac{df_{\pm}}{dx}$ separadamente, usando 5.24.

$$\begin{aligned} \frac{df_{\pm}}{dx} &= C_{\pm} [\exp(-X_{\pm}^2/2) \frac{d}{dx} H_{\nu_{\pm}}(\pm X_{\pm}) + H_{\nu_{\pm}}(\pm X_{\pm}) \frac{d}{dx} \exp(-X_{\pm}^2/2)] \\ &\quad \because \frac{d}{dx} H_{\nu_{\pm}}(\pm X_{\pm}) = 2\nu H_{\nu-1}(\pm X_{\pm}) \frac{d}{dx} \pm X_{\pm} \\ &\quad \because \frac{d}{dx} \exp(-X_{\pm}^2/2) = \exp(-X_{\pm}^2/2) (-X_{\pm}) \frac{d}{dx} \pm X_{\pm} \\ &\therefore = C_{\pm} \exp(-X_{\pm}^2/2) [2\nu_{\pm} H_{\nu_{\pm}-1}(\pm X_{\pm}) - H_{\nu_{\pm}}(\pm X_{\pm}) X_{\pm}] \frac{d}{dx} \pm X_{\pm} \quad (5.27) \end{aligned}$$

Observamos que quando substituirmos 5.27 em 5.25 e 5.26, devemos considerar que as condições são válidas para as proximidades da parede $x = 0$. Lembremos que nesta situação

$$X_{\pm}|_{x=0} = \frac{q\sqrt{|1 \pm h|}}{1 \pm h} \quad (5.28)$$

Assim escrevemos 5.25 e 5.26 em toda sua glória.

$$\begin{aligned} &C_+ \exp\left(-\frac{q^2}{2(1+h)}\right) [2\nu_+ H_{\nu_+-1}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) - H_{\nu_+}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) \frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}] \sqrt{|1+h|} = \\ &= \gamma_1 C_+ \exp\left(-\frac{q^2}{2(1+h)}\right) H_{\nu_+}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) - \gamma_2 C_- \exp\left(-\frac{q^2}{2(1-h)}\right) H_{\nu_-}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) \end{aligned} \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned}
C_- \exp\left(-\frac{q^2}{2(1-h)}\right) [2\nu_- H_{\nu_- - 1}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) - H_{\nu_-}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) \frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}] (-\sqrt{|1-h|}) &= \\
= \gamma_2 C_+ \exp\left(-\frac{q^2}{2(1+h)}\right) H_{\nu_+}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) - \gamma_1 C_- \exp\left(-\frac{q^2}{2(1-h)}\right) H_{\nu_-}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) & (5.30)
\end{aligned}$$

Escolhemos as constantes de modo a simplificar a expressão.

$$C_{\pm} = \exp\left(\pm \frac{q^2}{2(1 \pm h)}\right) \quad (5.31)$$

Assim ficamos com:

$$\begin{aligned}
[2\nu_+ H_{\nu_+ - 1}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) - H_{\nu_+}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) \frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}] \sqrt{|1+h|} &= \\
= \gamma_1 H_{\nu_+}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) - \gamma_2 H_{\nu_-}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) & (5.32)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[2\nu_- H_{\nu_- - 1}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) - H_{\nu_-}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) \frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}] (-\sqrt{|1-h|}) &= \\
= \gamma_2 H_{\nu_+}\left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h}\right) - \gamma_1 H_{\nu_-}\left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h}\right) & (5.33)
\end{aligned}$$

Escrevemos $z_{\pm} = \frac{q\sqrt{|1 \pm h|}}{1 \pm h}$ e simplificamos ainda mais 5.32 e 5.33.

$$[2\nu_+ H_{\nu_+ - 1}(z_+) - H_{\nu_+}(z_+) z_+] \sqrt{|1+h|} =$$

$$= \gamma_1 H_{\nu_+}(z_+) - \gamma_2 H_{\nu_-}(z_-) \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} [2\nu_- H_{\nu_-1}(z_-) - H_{\nu_-}(z_-)z_-](-\sqrt{|1-h|}) &= \\ &= \gamma_2 H_{\nu_+}(z_+) - \gamma_1 H_{\nu_-}(z_-) \end{aligned} \quad (5.35)$$

Definimos a função $L_v(z) = 2H_{v-1}(z)/H_v(z) - z$ (para \pm) e substituímos em ambas as equações 5.34 e 5.35.

$$\begin{aligned} H_{\nu_+}(z_+)[L_{v_+}(z_+)]\sqrt{|1+h|} &= \gamma_1 H_{\nu_+}(z_+) - \gamma_2 H_{\nu_-}(z_-) \\ H_{\nu_-}(z_-)[L_{v_-}(z_-)](-\sqrt{|1-h|}) &= \gamma_2 H_{\nu_+}(z_+) - \gamma_1 H_{\nu_-}(z_-) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_{v_+}(z_+)]\sqrt{|1+h|} &= \gamma_1 - \gamma_2 \frac{H_{\nu_-}(z_-)}{H_{\nu_+}(z_+)} \\ [L_{v_-}(z_-)](-\sqrt{|1-h|}) &= \gamma_2 \frac{H_{\nu_+}(z_+)}{H_{\nu_-}(z_-)} - \gamma_1 \end{aligned}$$

$$[L_{v_+}(z_+)] - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1+h|}} = -\gamma_2 \frac{H_{\nu_-}(z_-)}{H_{\nu_+}(z_+)\sqrt{|1+h|}} \quad (5.36)$$

$$[L_{v_-}(z_-)] - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1-h|}} = -\gamma_2 \frac{H_{\nu_+}(z_+)}{H_{\nu_-}(z_-)\sqrt{|1-h|}} \quad (5.37)$$

Multiplicando 5.36 e 5.37 chegamos em:

$$\left\{ [L_{v_+}(z_+)] - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1+h|}} \right\} \left\{ [L_{v_-}(z_-)] - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1-h|}} \right\} = \frac{\gamma_2^2}{\sqrt{|1-h^2|}} \quad (5.38)$$

Antes de prosseguirmos podemos analisar a forma da solução quando estamos distantes

da parede $x \rightarrow \pm\infty$. De fato as funções de Hermite não são adequadas para o limite em si, mas devemos nos ater a uma situação em que o termo exponencial de 5.18 permanece finito. Assim temos que $H_0(\pm X_{\pm})$ é uma solução adequada, uma vez que é uma constante. Recordando a expressão 5.19, temos para a temperatura crítica:

$$\min\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1-\tau}{|1\pm h|} - 1\right)\right] = 0$$

$$\Rightarrow \tau = 1 - \min(|1\pm h|) \quad (5.39)$$

Nos concentramos também em outro caso especial $h = 1$. Este caso corresponde a total compensação da indução interna pelo campo externo $h = H/B_0$. Voltamos a equação diferencial 5.15, e fazemos este caso para a equação já reescalada. O domínio $+$ tem apenas uma mudança de parâmetro, as soluções continuam sendo uma função de hermite, enquanto que a equação para o domínio $-$ se modifica:

$$-f_-'' + q^2 f_- + (\tau - 1)f_- = 0 \quad (5.40)$$

Com solução, sem “estourar” para $x \rightarrow -\infty$.

$$f_- = C_- \exp(\sqrt{\tau - 1 + q^2}x) \quad (5.41)$$

Temos uma outra equação para τ (as constantes C_{\pm} podem ser escolhidas de maneira conveniente a simplificar os cálculos). Lembramos ainda que $z_+(h = 1) = q/\sqrt{2}$ e fazemos $\nu_+(h = 1) = \nu = -(1 + \tau/4)$

$$\begin{aligned} H_{\nu}(q/\sqrt{2})[L_{\nu}(q/\sqrt{2})]\sqrt{2} &= \gamma_1 H_{\nu}(q/\sqrt{2}) - \gamma_2 \\ \sqrt{\tau - 1 + q^2} &= \gamma_2 H_{\nu}(q/\sqrt{2}) - \gamma_1 \end{aligned}$$

$$\sqrt{2}[L_{\nu_+}(z_+)] - \gamma_1 = -\gamma_2/H_{\nu}(q/\sqrt{2}) \quad (5.42)$$

$$\sqrt{\tau - 1 + q^2} + \gamma_1 = \gamma_2 H_{\nu_+}(z_+) \quad (5.43)$$

Multiplicando 5.42 e 5.43 temos uma nova equação para τ .

$$[\sqrt{2}[L_{v_+}(z_+)] - \gamma_1][\sqrt{\tau - 1 + q^2 + \gamma_1}] + \gamma_2^2 = 0 \quad (5.44)$$

5.2 Diagrama de Fases

Vamos estudar a equação 5.38 em diferentes limites. Num primeiro momento estudamos o chamado limite de “Parede Transparente”. Neste limite escrevemos nesta equação $\gamma_1 = \gamma_2 + \delta\gamma$, com $\gamma_1 \rightarrow \infty, \gamma_2 \rightarrow \infty$ e impomos continuidade do parâmetro de ordem na parede. Esta condição de contorno é melhor visualizada quando estudamos diretamente a expressão para a energia livre da parede 5.45.

$$F_{DW} = [\gamma_1(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \gamma_2(\psi_+^*\psi_- + \psi_-^*\psi_+)]\delta(x)$$

$$F_{DW} = [(\gamma_2 + \delta\gamma)(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \gamma_2(\psi_+^*\psi_- + \psi_-^*\psi_+)]\delta(x)$$

$$F_{DW} = \{\gamma_2[|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2] - (\psi_+^*\psi_- + \psi_-^*\psi_+)\} + \delta\gamma(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2)\delta(x) \quad (5.45)$$

Fica claro pela expressão 5.45 que a não continuidade do parâmetro de ordem leva a uma energia infinita para a parede. Fica também demonstrado que valores negativos de $\delta\gamma$ diminuem a energia F_{DW} , o que se associa a temperaturas críticas maiores.

O estudo do caso que chamaremos “Caso Geral”, também é feito a partir de 5.38, mas desta vez associamos valores finitos para as constantes γ_i , o que permite o aparecimento de parâmetros de ordem com descontinuidades na região da parede.

5.3 Parede Transparente

Vamos estudar detalhadamente 5.38 nesta aproximação:

$$\left\{ \left[L_{v_+} \left(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h} \right) \right] - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1+h|}} \right\} \left\{ \left[L_{v_-} \left(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h} \right) \right] - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1-h|}} \right\} = \frac{\gamma_2^2}{\sqrt{|1-h^2|}}$$

$$\begin{aligned}
& [L_{v_+}(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h})][L_{v_-}(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h})] - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1-h|}}[L_{v_+}(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h})] - \\
& - \frac{\gamma_1}{\sqrt{|1+h|}}[L_{v_-}(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h})] + \frac{\gamma_1^2}{\sqrt{|1-h^2|}} = \frac{(\gamma_1 - \delta\gamma)^2}{\sqrt{|1-h^2|}} \\
& \quad \therefore \frac{(\gamma_1 - \delta\gamma)^2}{\sqrt{|1-h^2|}} \approx \frac{\gamma_1^2}{\sqrt{|1-h^2|}} - \frac{2\gamma_1\delta\gamma}{\sqrt{|1-h^2|}} \\
& \therefore \frac{\sqrt{|1-h^2|}}{\gamma_1} [L_{v_+}(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h})][L_{v_-}(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h})] - \sqrt{|1+h|}[L_{v_+}(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h})] - \\
& \quad - \sqrt{|1-h|}[L_{v_-}(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h})] = -2\delta\gamma \tag{5.46}
\end{aligned}$$

No limite $\gamma_1 \rightarrow \infty$, temos para 5.46.

$$\sqrt{|1+h|}[L_{v_+}(\frac{q\sqrt{|1+h|}}{1+h})] + \sqrt{|1-h|}[L_{v_-}(\frac{q\sqrt{|1-h|}}{1-h})] = 2\delta\gamma \tag{5.47}$$

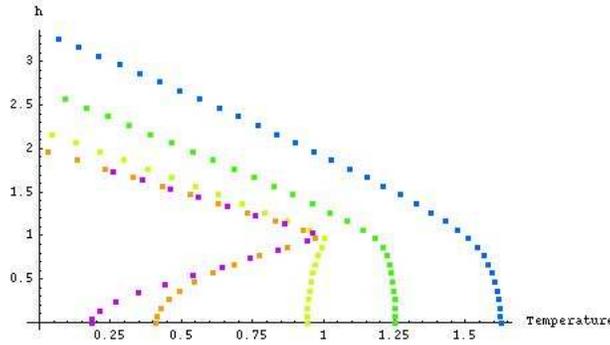
Cuidado especial deve ser tomado para o caso $h = 1$, conforme descrito por 5.44. Vamos estudar esta expressão no limite de parede transparente, como em 5.47.

$$\sqrt{2}[L_{-(\tau+1)/4}(\frac{q}{\sqrt{2}})] - \sqrt{\tau-1+q^2} \approx 2\delta\gamma \tag{5.48}$$

Resultados numéricos da equação 5.47 podem ser obtidos para um dado valor de campo h e do parâmetro $\delta\gamma$ (cada uma das curvas corresponde a um valor distinto de $\delta\gamma$). Este parâmetro controla a situação onde a parede é responsável pela supressão ($\delta\gamma > 0$) ou estímulo da supercondutividade ($\delta\gamma < 0$). Os resultados numéricos (ver figura 5.1) possuem alguns problemas devido a alta degenerescência de zeros das funções em 5.47. Lembre-se da discussão sobre o significado da temperatura τ que fizemos quando a definimos 5.23. É esta temperatura que aparece nestes gráficos.

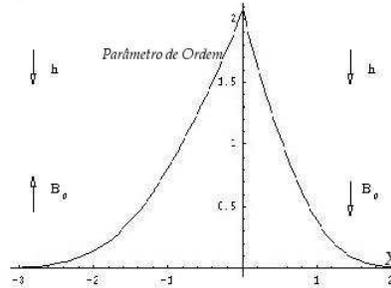
Aproveitamos também para verificar o parâmetro de ordem superconductor nesta situação (ver figura 5.2). Um ponto importante é que este gráfico não é simétrico. Esta quebra de simetria é justamente o efeito do campo magnético externo sobre o parâmetro de ordem. Para um dos domínios, este campo tem direção oposta ao do campo B_0 de

Figura 5.1: Diagrama de fases: limite de parede transparente.



Os valores usados para $\delta\gamma$ são: 0.4, 0, -0.5 , -0.7 e -0.9 .

Figura 5.2: Parâmetro de ordem.

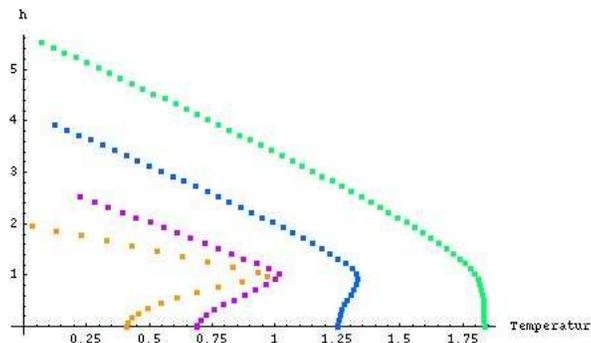


Parâmetro de ordem calculado para $\delta\gamma = -0.5$ e $h = 1.2$.

indução gerado pela magnetização do próprio sistema, acabando por compensar o efeito de supressão deste campo sobre o estado superconductor. Com isto, observa-se uma maior densidade de pares condensados neste domínio.

Ainda sobre a figura 5.2, lembramos que a escala de distâncias é dada pelas quantidades re-escaladas que discutimos na seção anterior. Fisicamente $\tilde{x} = x/l_B \equiv X$, define uma escala de penetração do fluxo magnético na amostra em relação a distância com a parede. Lembremos também que para $\tau > 0$, a temperatura de transição na parede é maior que a temperatura de transição no volume. O que este gráfico evidencia, portanto, é o aparecimento da supercondutividade, nas proximidades da parede de domínio, enquanto que o parâmetro de ordem é zero no volume.

Figura 5.3: Diagrama de fases: transparência finita.



Neste gráfico, apresentamos o resultado para $\delta\gamma = 0$, como no anterior junto com cálculos para $\gamma_2 = 0.2$ (fixo) e $\delta\gamma = -0.3, -0.7$ e -1.0 .

5.4 Caso Geral

Neste caso, valores finitos são associados aos parâmetros γ_1 e γ_2 na equação 5.38. Mais uma vez o problema é tratado numericamente (ver figura 5.3), como soluções obtidas para vários valores de h , nas situações de estímulo ou supressão da supercondutividade. Cada curva corresponde a valores distintos associados aos γ_i . Qualitativamente a situação é bastante parecida, o parâmetro de ordem neste caso é, no entanto, descontínuo.

5.5 Considerações Finais

Em termos gerais, construímos uma teoria fenomenológica para uma parede de domínio supercondutora em um ferromagneto, onde adicionamos termos relacionados a interface na expressão para a energia livre. Estes termos descrevem uma mudança na constante de acoplamento supercondutor e ainda podem controlar o grau de transparência das paredes, com respeito ao tunelamento de elétrons.

A temperatura crítica nas proximidades da parede é sempre mais alta do aquela no volume (bulk), mesmo quando a energia da parede adiciona um termo positivo a energia livre. O comportamento desta temperatura com o campo nem sempre é monotômico.

Podemos contextualizar estas idéias pensando no modelo para $ZrZn_2$ já proposto, que discutimos no final do capítulo 4. Neste modelo, ferromagnetismo estimula a supercondutividade via um acoplamento do tipo de troca, entre a magnetização intrínseca do par de Cooper com a magnetização M . Podemos expressar estas idéias como:

$$E_{Exc} = -4\pi JM.S \quad (5.49)$$

Em 5.49 M é magnetização do volume (bulk), J controla a direção da magnetização do par de Cooper com a magnetização de Bulk e definimos $S \equiv i\psi \times \psi$. Como esta quantidade se transforma como um vetor de magnetização, podemos identifica-la com a magnetização intrínseca do par de Cooper.

Nas proximidades de uma parede este estímulo é menor, pois a magnetização está precessando. No entanto a supressão orbital será menor, por este mesmo efeito e o resultado líquido é positivo (como observamos no modelo). Sempre haverá um núcleo supercondutor nas proximidades de uma parede, antes da transição de fase se estabelecer em todo o volume.

Capítulo 6

Conclusões

No capítulo 1 estudamos as classes supercondutoras considerando a existência de uma simetria cúbica e depois de uma simetria tetragonal, esta discutida em maiores detalhes. A simetria tetragonal está presente no composto supercondutor Sr_2RuO_4 que possui estrutura de rede idêntica ao composto La_2CuO_4 , um supercondutor de alta temperatura. Suas propriedades eletrônicas do estado normal, no entanto, se assemelham àquelas do 3He .

Experimentos revelam que embora a supercondutividade em Sr_2RuO_4 pareça estar restrita aos planos de RuO_2 (caso análogo aos planos de CuO_2 do La_2CuO_4), o pareamento se dá em um estado de onda p , com $S = 1$ e $L = 1$. De fato, a simetria específica do pareamento foi determinada para este composto em experimentos que demonstram, sem ambiguidades, a existência de pares de Cooper e sua simetria (para uma discussão recente ver [22]).

Destacamos estas idéias neste momento para afirmar que até a presente data não há assinaturas experimentais claras que identifiquem com exatidão a simetria de pareamento do estado supercondutor dos compostos apresentados no capítulo 2, ou mesmo sinais evidentes para a formação destes pares. No entanto, como discutido nas referências [10, 11, 7, 9] e ao longo do nosso texto, existe uma coleção razoável de medidas de propriedades termodinâmicas e de transporte que apontam para a formação destes pares.

Nos capítulos 3 e 4 desenvolvemos uma teoria onde tomamos por hipótese a formação de pares. No capítulo 3, após tratarmos aspectos formais, discutimos por alto o problema do $ZrZn_2$ (que consta na literatura) e depois nos especializamos em uma análise cuidadosa para o caso do UGe_2 e acreditamos ser os primeiros a fazê-lo com este nível de detalhes. Mostramos que no caso geral, não se esperam nós no gap supercondutor para nenhuma das duas classes supercondutoras, de fato distintas, que podem ser realizadas.

Considerando a ocorrência de ferromagnetismo metálico neste composto, propomos que apenas elétrons da mesma banda (e mesmo spin, ou pseudospin) formam pares, já que o forte campo de troca parece implicar que elétrons de bandas distintas formariam pares com momento não nulo. Embora isto não seja uma impossibilidade (trata-se de um estado *FFLO*), a excluímos de nossa teoria. Vimos que com estas hipóteses, nós no gap superconductor são encontrados.

Em seguida consideramos um modelo de campo médio tipo *BCS* para o problema. Vimos neste modelo de que maneira os potenciais de pareamento interbanda levantam os zeros no gap de energia. Vimos também que os zeros determinados com esta análise (de campo médio), são compatíveis com o caso anterior. A periodicidade da rede ortorrômbica foi então considerada e chegamos que esta determina outros nós, quando apenas interações de primeiros vizinhos são consideradas. É importante notar também que, antes de estudar a periodicidade tiramos nossas conclusões apenas a partir das propriedades gerais de simetrias das funções base e não de uma forma particular para estas funções. Não fizemos, também, qualquer suposição acerca do mecanismo de pareamento.

No capítulo 4 estudamos o problema de paredes de domínio. Aqui observamos explicitamente os efeitos de inclusão de um campo externo e como este pode, nas proximidades de paredes do domínio, somar-se ao campo devido ao ferromagnetismo do superconductor e diminuir a supressão orbital deste campo. Ou seja, o campo externo pode compensar a supressão orbital da atuação dos campos dos dipolo nas cargas eletrônicas, mas não é significativo ao ponto de influenciar a estimulação da supercondutividade pelo campo de troca. Vimos que a supercondutividade sempre está presente nas paredes antes de se espalhar para todo o volume da amostra, corroborando análises bem anteriores [6].

Para que estas idéias fenomenológicas possam guiar a construção de teorias microscópicas, são necessários mais experimentos. Nos parece razoável supor que o pareamento se dá apenas entre elétrons de mesmo spin (ou pseudospin), mas talvez em apenas uma das bandas. Para o caso *UGe₂* nos parece que efeitos de forte acoplamento spin órbita devem ser considerados. Dado o papel fundamental do ferromagnetismo, consideramos que flutuações magnéticas são as mais prováveis a levarem à formação de pares. Isso também favorece o pareamento tripleto, uma vez que o estado singleto é repulsivo para este tipo de mecanismo.

Referências Bibliográficas

- [1] J. B. Ketterson & S.N. Song. *Superconductivity*. Cambridge University Press (1999).
- [2] V. L. Ginzburg. Soviet Physics JETP 4, 2 (1957).
- [3] M. Sigrist & K. Ueda. Reviews on Modern Physics 63, 2 (1991). G. E. Volovik and L. P. Gorkov. Sov Phys JETP 61, 4 (1985). E. I. Blount. Phys Rev B 32, 5, 1 Sep (1985). J.F. Annett. Advances in Physics 39 (2): 83-126 (MAR-APR 1990).
- [4] P. W. Anderson, P. Morel. Phys Rev 123, 6 (1961); R. Balian, N.R. Werthamer. Phys Rev 131, 4 (1963).
- [5] C. J. Bradley; A. P. Cracknell. *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids*. Clarendon Press - Oxford (1972).
- [6] B. T. Matthias, and H. Suhl. Phys Rev Letters 4, 15 (1960).
- [7] C. Pfeleiderer, M. Uhlarz, S.M. Hayden, R. Vollmer, H.v. Löhneysen, N.R. Bernhoeft, and G.G. Lonzarich. Nature 412 (6842): 58-61 (JUL 5 2001).
- [8] B. T. Matthias, and R. M. Bozorth. Phys Rev. 109, 604 (1957).
- [9] E. A. Yelland, S. J. C. Yates, O. Taylor, A. Griffiths, S. M. Hayden, and A. Carrington. Phys Rev B 72, 184436 (2005).
- [10] S. S. Saxena, P. Agarwal, K. Ahilan, F. M. Grosche, R. K. W. Haselwimmer, M. J. Steiner, E. Pugh, L. R. Walker, S. R. Julian, P. Monthoux, G. G. Lonzarich, A. Huxley, L. Sheildn, D. Braithwaite, & J. Flouquet. Nature 406 (6796): 587-592 (AUG 10 2000).
- [11] A. Huxley, I. Sheikin, E. Ressouche, N. Kernavanois, D. Braithwaite, R. Calemezuk, & J. Flouquet. Phys Rev B 63, 144519 (2001).

- [12] D. Aoki, A. Huxley, E. Ressouche, D. Brathwaite, J. Flouquet, J.P. Brison, E. Lhotel, & C. Paulsen. *Nature*, 413 (6856): 613-616 (OCT 11 2001).
- [13] T. Inui, Y. Tanabe, Y. Onodera. *Group Theory and Its Applications in Physics*. Springer (1995).
- [14] L. D. Landau & E. M. Lifshitz. *Electrodynamics of Continuous Media*. Pergamon Press (1980).
- [15] K. V. Samokhin and M. B. Walker. *Phys Rev B* 66, 174501 (2002).
- [16] V. P. Mineev. *Phys Rev B* 66, 134504 (2002).
- [17] V. P. Mineev and T. Champel. *Phys Rev B* 66, 134504 (2002).
- [18] D. V. Shopova, D. I. Uzunov. *Phys Rev B* 72, 024531 (2005).
- [19] K. V. Samokhin and M. B. Walker. *Phys Rev B* 66, 024512 (2002).
- [20] M. B. Walker and K. V. Samokhin. *Phys Rev Letters* 88, 20 (2002).
- [21] K. V. Samokhin and D. Shirokoff. *Phys Rev B* 71, 104527 (2005).
- [22] C. Day. *Physics Today*, December 2006, 23-27.