

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

**“Flutuações Termodinâmicas em Supercondutores:
Confronto entre o Modelo X-Y 3D e a Descrição Baseada nos
Níveis de Landau”**

Sebastian Ujevic Tonino

**Orientador:
Edison Zacarias da Silva, Ph. D.**

**Banca Examinadora:
Prof. Edison Zacarias da Silva – IFGW/UNICAMP
Prof. Silvio Antonio Sacheto Vitiello – IFGW/UNICAMP
Prof. Osvaldo Frederico Schilling Neto – UFSC
Prof. Amir Ordacgi Caldeira (Suplente) – IFGW/UNICAMP
Prof. Raimundo Rocha dos Santos (Suplente) – UFRJ**

**Dissertação de mestrado apresentada ao
Instituto de Física “Gleb Wataghin” da
Universidade Estadual de Campinas
como parte dos requisitos para obtenção
do título de Mestre em Física.**

Financiado pela CAPES 98/99

Campinas-SP

Fevereiro de 2000.

***Dedico este trabajo
a mi querida familia.***

Agradecimentos

A Edison Zacarias da Silva pela infinita paciência que teve comigo ao elaborar esta Tese.

A S. Salem-Sugui, Jr. pelos dados experimentais.

A Raul, Maruja e Paulo por todo o apoio e boa comida (Peruana!).

A Andrés e José pelo “Carlos Viera”.

A Josi pelo apoio e massagens na hora de estresse.

A Tomás e Valeria pelas tardes de dados.

A toda a galera da quadra de futsal das sextas feiras que tiravam o estresse.

A Alexis, Jorge e Carlos pela amizade de toda uma vida.

A todos da comunidade do IFGW, professores, colegas e funcionários.

À CAPES pelo apoio financeiro.

A meu irmão querido Maxi, que sempre esta comigo.

A meu irmão querido Alex que de longe sempre senti seu apoio.

A meus pais adorados que são todo na minha vida.

Financiamento

CAPES

It's so hard to believe that we can see the world so differently
We don't realize cause we can't see the world through each other's eyes
We'll never understand I don't think that anybody can
I won't change anyway guess were both just stubborn stuck in our ways
I don't care if you never see the world like I do

“Pennywise”

Resumo

Nesta tese estudamos, usando a teoria fenomenológica de Ginzburg - Landau, os efeitos das flutuações termodinâmicas na transição de fase entre os estados normal e supercondutor. Se viu como as flutuações contribuem para a magnitude de quantidades termodinâmicas como a magnetização e calor específico. Primeiramente estas quantidades foram estudadas usando a aproximação Gaussiana e vimos como estas possuem um comportamento divergente na transição. Mediante uma aproximação melhor que a Gaussiana, a aproximação de Hartree, que considera o termo não linear na equação de Ginzburg - Landau, vimos que essa divergência é eliminada. Estes resultados foram aplicados para simular um supercondutor de alta temperatura, introduzindo a anisotropia de massa. Se estudou também nesta aproximação, a dependência angular da magnetização e calor específico com o campo magnético aplicado. Observamos que nesta aproximação, usando a descrição dos níveis de Landau mais baixos, as quantidades estudadas apresentam um comportamento universal de escala. Estes resultados são válidos no intervalo de campos magnéticos altos. Se desenvolveu também nesta tese as hipóteses que levam a uma formulação para as flutuações termodinâmicas dos supercondutores baseada no modelo X-Y. Estes resultados são válidos no intervalo de campos magnéticos baixos. Estas duas descrições foram confrontadas em seus respectivos intervalos de validade. Para campos magnéticos baixos as flutuações termodinâmicas foram melhor descritas usando o modelo X-Y. Para campos magnéticos altos as duas descrições são satisfatórias, sendo melhor a descrição baseada nos níveis de Landau mais baixos (LLL).

Abstract

In this work we studied, using the phenomenological theory of Ginzburg – Landau, the effects of thermodynamic fluctuations in phase transition between the normal and superconducting states. We saw how these fluctuations contribute to the magnitude of thermodynamic quantities like magnetization and specific heat. These quantities were first studied using the Gaussian approximation, and demonstrated that they have a divergent behavior in the transition. Through a better approximation, the Hartree approximation, we saw how this divergent behavior is eliminated. These results were applied to simulate a high T_c superconductor, introducing the mass anisotropy. We studied in this approximation the angular dependence with the applied magnetic field, of the magnetization and specific heat. We observed that in this approximation, using the description of the lowest Landau levels, the physical quantities present universal scaling behavior. These results are valid in the range of high applied magnetic fields. We developed in this work the hipotesis that leads to a formulation for the fluctuations in superconductors based in the X-Y model. These results are valid in the range of low applied magnetic fields. These two descriptions were confronted in their respective ranges of validity. For low magnetic fields the thermodynamic fluctuations were better described using the X-Y model. For high magnetic fields the two descriptions are satisfactory, being the description based in the lowest Landau levels (LLL) more accurate.

Conteúdo

• Resumo	i
• Abstract	iii
• Lista de Figuras	vii
□ 1 – Introdução	1
□ 2 – Teoria de Ginzburg – Landau e Flutuações Termodinâmicas	15
2.1 – Introdução.....	17
2.2 – Teoria de Ginzburg – Landau.....	18
2.3 – Estudo da Energia Livre de Ginzburg – Landau.....	19
2.4 – Aplicação das Equações de Ginzburg – Landau.....	22
2.5 – Flutuações Termodinâmicas.....	24
2.6 – Aproximação Gaussiana.....	26
2.7 – Calor Específico.....	28
2.8 – Magnetização.....	31
□ 3 – Aproximação de Hartree	35
3.1 – Introdução.....	37
3.2 – Aproximação de Hartree.....	37
3.3 – “Scaling” na aproximação de Hartree.....	47
□ 4 – Modelo X-Y	49
4.1 – Introdução.....	51
4.2 – Modelo X-Y.....	51
4.3 – Conexão do modelo X-Y com modelos planares.....	52
4.4 – Hipótese de Universalidade.....	55
4.5 – Exponentes Críticos do Modelo 3D X-Y.....	56
4.6 – Modelo X-Y para Supercondutores.....	58

□	5 – Discussão dos resultados em confronto com os experimentos.....	61
	5.1 – Introdução.....	63
	5.2 – Dados Experimentais.....	64
	5.3 – Análise da Magnetização para Campos Baixos.....	66
	5.4 – Análise da Magnetização para Campos Altos.....	70
	5.5 – Discussão do Calor Específico.....	73
□	6 – Conclusões.....	75
□	Referências.....	79
□	Apêndice A – Integral Gaussiana.....	83
□	Apêndice B – Expressão da Energia Livre de Helmholtz com Anisotropia.....	87
□	Apêndice C – Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.....	93

Índice de Figuras

Figura 1.1: Medida da resistividade do mercúrio. Evidenciando a supercondutividade.....	3
Figura 1.2: Diagrama de expulsão do fluxo magnético. Efeito Meissner.....	4
Figura 1.3: Diagrama de fase de supercondutores do Tipo I.....	6
Figura 1.4: Diagrama de fase de supercondutores do Tipo II.....	6
Figura 1.5: Diagrama de fases aonde se representa alinha de “Melting” para diferentes tipos de supercondutores: (a) Materiais 3-D. (b) Materiais planares.....	12
Figura 2.1: Comportamento da energia livre de Ginzburg – Landau segundo o valor de α	20
Figura 2.2: Dependência do calor específico com a temperatura (campos altos).....	30
Figura 2.3: Dependência do calor específico com a temperatura (campos baixos).....	31
Figura 2.4: Dependência da magnetização com a temperatura (campos altos).....	32
Figura 2.5: Dependência da magnetização com a temperatura (campos baixos).....	33
Figura 3.1: Dependência do calor específico com a temperatura para diferentes de incidência do campo magnético (aproximação LLL).....	42
Figura 3.2: Dependência da magnetização com a temperatura para diferentes ângulos de incidência do campo magnético (aproximação LLL).....	42
Figura 3.3: Dependência do calor específico com a temperatura. Caso isotrópico. (aproximação LLL).....	46

Figura 3.4: Dependência da magnetização com a temperatura. Caso isotrópico. (aproximação LLL).....	46
Figura 5.1: Dados experimentais de Magnetização vs. Temperatura para campos magnéticos baixos.....	65
Figura 5.2: Dados experimentais de Magnetização vs. Temperatura para campos magnéticos altos.....	65
Figura 5.3: Scaling da Magnetização do modelo X-Y para campos magnéticos baixos usando temperatura de cruzamento.....	67
Figura 5.4: Scaling da Magnetização do modelo X-Y para campos magnéticos baixos usando temperatura livre.....	68
Figura 5.5: Scaling da Magnetização usando LLL para campos magnéticos baixos.....	69
Figura 5.6: Scaling da Magnetização usando X-Y para campos magnéticos altos.....	70
Figura 5.7: Scaling da Magnetização usando LLL para campos magnéticos altos.....	71
Figura 5.8: Comparação da curva teórica do modelo LLL com os dados experimentais. Cortesia de [25].....	72
Figura C.1: Transformação da rede de spins original para a rede por blocos.....	96

Capítulo 1

Introdução

Introdução

Desde a descoberta da supercondutividade em 1911 [1] feita por Kamerlingh Onnes (medindo a resistividade do mercúrio a temperaturas muito baixas, usando hélio líquido) até nossos dias, muitas foram as teorias desenvolvidas para explicar com a maior clareza possível este fenômeno. A supercondutividade está associada principalmente a duas características fundamentais, que são a condutividade perfeita e a expulsão total do fluxo magnético desde dentro da amostra. A primeira destas características é o fato de que abaixo de uma certa temperatura chamada de temperatura crítica T_c a resistividade elétrica é zero. Esta temperatura é característica do material e em geral é muito baixa. Este fenômeno pode ser visto a seguir no gráfico que Kamerlingh Onnes apresentou na sua palestra, na entrega de seu prêmio Nobel (1913).

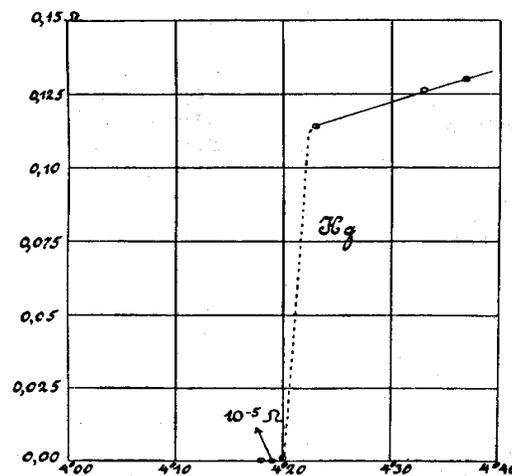
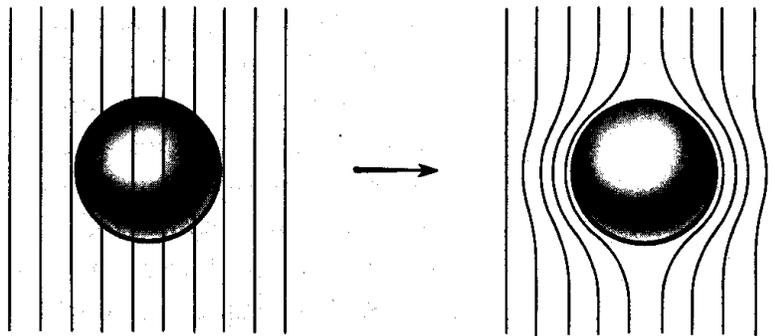


Figura 1.1: Medida da resistividade do mercúrio. Evidenciando a supercondutividade.

A segunda das características provem do fato de que segundo as leis da eletrodinâmica, existiria no interior de uma amostra, um fluxo magnético se esta se encontrar na presença de um campo magnético aplicado. Se diminuirmos a temperatura até chegar à temperatura crítica T_c vemos que após esta temperatura o fluxo magnético é expelido da amostra. Este fenômeno de expulsão total do fluxo magnético é chamado de efeito Meissner e encontra-se representado na figura 1.2 .



**Figura 1.2: Diagrama de expulsão do fluxo magnético.
Efeito Meissner.**

É importante dizer que o efeito Meissner pode ser destruído se aumentamos a intensidade do campo magnético aplicado até um valor que chamaremos de campo crítico H_c . Ao atingir esse valor as linhas de fluxo magnético começam a penetrar na amostra e o efeito desaparece.

Uma das primeiras tentativas para explicar estas características foi a dos irmãos London em 1935 [2], eles modificaram as equações da eletrodinâmica clássica para conseguir descrever corretamente a condutividade perfeita e a expulsão total do fluxo magnético. Um dos sucessos mais importantes dessa teoria foi o de estimar corretamente a

Capítulo 1 - Introdução.

magnitude da distância característica de penetração do fluxo magnético nos supercondutores, assim como a forma com que o campo magnético decai dentro deles.

Já no ano de 1950, Ginzburg e Landau propuseram a sua teoria fenomenológica da supercondutividade [3], mas na época em que esta teoria foi desenvolvida, ela não chamou a atenção da comunidade científica. A comunidade científica prestou mais atenção a esta teoria quando Gor'kov [4] em 1959 demonstrou que ambas teorias (a BCS e a de Ginzburg - Landau) podiam ser obtidas de um formalismo geral, sendo estas duas limites para diferentes casos. Gor'kov demonstrou também que a teoria de Ginzburg - Landau era válida para um intervalo de temperaturas perto de T_c .

A teoria de Ginzburg - Landau permitia tratar efeitos não lineares, os quais não podiam ser tratados com as equações de London, porém o principal triunfo da teoria foi prever a existência de dois tipos de supercondutores e explicar o estado mixto dos supercondutores do tipo II. Esta existência de dois tipos diferentes de supercondutores é devido à um parâmetro κ que sai naturalmente da teoria (proposto por Abrikosov [5]), e é característico de cada supercondutor. Este parâmetro está definido como um quociente entre duas distâncias características dos supercondutores, que são a distância de penetração do fluxo magnético λ e a distância de correlação ξ do parâmetro de ordem. A primeira fornece a escala de distância da penetração do campo magnético dentro da amostra e a segunda esta relacionada com a escala característica na qual o parâmetro de ordem varia no espaço. O valor deste parâmetro define o tipo de supercondutor, para um valor de $\kappa < 2^{-1/2}$ o supercondutor é do tipo I, para $\kappa > 2^{-1/2}$ é do tipo II. Os supercondutores do tipo I apresentam um diagrama de fases como mostramos a seguir

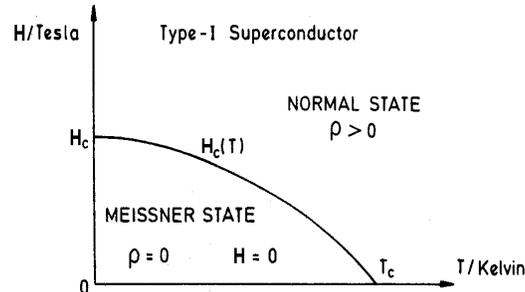


Figura 1.3: Diagrama de fase de supercondutores do Tipo I.

no qual se distinguem duas regiões características, a região do estado Meissner onde a resistividade e o campo magnético são zero, e a região de estado normal.

Os supercondutores do tipo II apresentam um diagrama de fase como mostramos a seguir

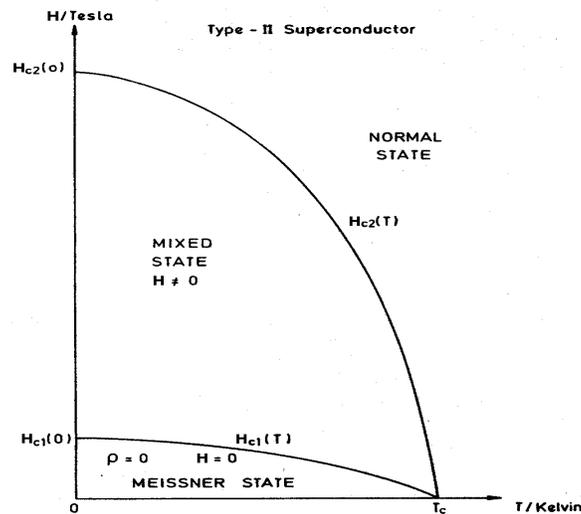


Figura 1.4: Diagrama de fase de supercondutores do Tipo II.

neste diagrama se distingue além das regiões conhecidas dos supercondutores do tipo I, uma região chamada mixta, na qual os vórtices penetram na amostra. Este estado aparece para um campo magnético acima de H_{c1} . Uma vez alcançado este valor de

Capítulo 1 - *Introdução.*

campo, o fluxo magnético começa a penetrar parcialmente na amostra em forma de cilindros, estes cilindros são chamados de vórtices e se apresentam dentro da amostra formando redes. Em supercondutores tradicionais esta rede é triangular, que é a configuração que minimiza a sua energia livre. Neste tipo de supercondutores é preciso um valor de campo maior H_{c2} para destruir a supercondutividade.

Como explicar estes fenômenos continuava sendo um mistério até que em 1957 surgiu a teoria que revolucionou a forma de pensar sobre os supercondutores, a teoria BCS, levada a cabo por J. Barden, L.N. Cooper e J.R. Schieffer [6]. Usando uma descrição quântica e a idéia de que os elétrons sentiam uma força atrativa devido a interações com a rede, eles conseguiram descrever corretamente o fenômeno da supercondutividade, em particular a expulsão do fluxo magnético e a condutividade perfeita.

Perto de T_c a teoria de Ginzburg – Landau é válida e seu uso conveniente, conveniente devido a que usa-se só variáveis macroscópicas e parâmetros fenomenológicos com os quais é relativamente mais fácil trabalhar, é por isso que para o estudo das flutuações termodinâmicas perto de T_c usa-se em geral a teoria de Ginzburg – Landau.

O estudo das flutuações termodinâmicas em supercondutores em presença de campos magnéticos aplicados, tem tido uma atenção especial por parte da comunidade científica com o aparecimento dos supercondutores de alta T_c (SAT) [7]. Esta nova classe de supercondutores (que são supercondutores do tipo II), apresentam como características principais uma temperatura crítica alta (entre 92 e 130 K), uma distância de correlação ξ pequena e a distância de penetração do campo magnético λ grande, estas características levam a propriedades interessantes destes supercondutores.

Capítulo 1 - Introdução.

De um modo geral estes supercondutores são óxidos cerâmicos. As estruturas dos SAT em geral são planares, com planos de CuO_2 intercalados com outros planos de CuO_2 ou de metal-oxigênio. É sabido que a supercondutividade ou condutividade nestes materiais se produz por intermédio destes planos. As temperaturas críticas nestes materiais estão associadas (não exclusivamente) à quantidade destes planos. Pode-se achar materiais com dois planos juntos de CuO_2 , com três, etc, mas sempre intercalados com outros planos de diferentes materiais. Os óxidos em sua maioria são isolantes mas estes podem se converter em SAT mediante a variação da quantidade de oxigênio, um deles é o $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ que para uma estequiometria adequada de oxigênio torna-se supercondutor.

Outra característica importante dos SAT é o alto grau de anisotropia que eles apresentam, esta anisotropia faz como que as distâncias características ξ e λ variem dependendo da direção, um exemplo disto é que para materiais do tipo $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ a distância de correlação no plano ab seja aproximadamente de $\xi_{ab} \sim 15A^0$, e na direção c de $\xi_c \sim 4A^0$, isto traz conseqüências fundamentais no estudo destes materiais já que a distância entre os planos condutores é aproximadamente de $4A^0$, o que significa que os planos estão levemente acoplados. Devido a esta anisotropia, podem-se apreciar nestes materiais diferentes comportamentos, estes vão desde um comportamento quase bidimensional até um tridimensional anisotrópico [8]. Existem vários modelos alternativos usando o formalismo de Ginzburg – Landau para tratar estes materiais, o mais conhecido é o modelo de Lawrence - Doniach [9], este modelo acopla planos de material supercondutor mediante acoplamento Josephson (“Josephson Junction”). O importante

Capítulo 1 - Introdução.

deste modelo é que permite trabalhar os diferentes tipos de comportamentos, já que possui os dois limites, tanto bi como tridimensional. Para materiais com grau menor de anisotropia o comportamento é quase tridimensional, isto permite o uso do formalismo de Ginzburg – Landau com bastante êxito.

O estado normal destes materiais apresenta uma resistividade praticamente linear (em um intervalo de temperatura de várias centenas graus Kelvin). A resistividade depende também da orientação do cristal, em geral esta vai ser maior na direção do eixo de anisotropia c que no plano ab [10].

Os campos críticos H_{c2} nos SAT são muito altos, estimativas para os materiais de tipo *YBCO* mostram que os campos variam apreciavelmente em relação aos supercondutores tradicionais. Temos que para estes materiais o campo crítico no plano ab é de $H_{c2}^{ab} \approx 674T$ entretanto que para a direção c temos $H_{c2}^c \approx 122T$. Por outro lado os campos críticos H_{c1} são $H_{c1}^{ab} \approx 2 \cdot 10^{-2}T$ e $H_{c1}^c \approx 5 \cdot 10^{-2}T$ no plano ab e direção c respectivamente [8].

O estado mixto dos SAT apresenta propriedades interessantes, uma delas é a existência de uma curva de irreversibilidade abaixo de uma temperatura que chamaremos de T_i . Isto pode ser visto no seguinte experimento. Primeiro se esfria a amostra sem campo magnético até uma certa temperatura abaixo da transição, depois liga-se o campo magnético e o momento diamagnético é medido em intervalos de temperatura aumentados lentamente, obtendo-se assim a curva de “zero field cooling” (ZFC). Se agora reduzimos a temperatura fazendo o caminho inverso até o valor inicial obtemos a curva “field cooled” (FC). O valor do momento diamagnético obtido neste caso é diferente do

Capítulo 1 - *Introdução.*

obtido no caso ZFC a partir de um ponto, no qual as duas curvas se separam. Acima deste ponto o comportamento é reversível evidenciando uma linha de irreversibilidade. Este ponto está associado a uma temperatura T_i que é função do campo magnético aplicado. Este fenômeno não parece depender da desordem do material já que estas características permanecem ainda nos cristais de grande qualidade, o que parece indicar que esta propriedade é inerente dos SAT. A linha de irreversibilidade também marca o limite da corrente crítica máxima permitida no supercondutor já que acima desta linha os vórtices começam a se movimentar pelo material, o que leva a uma difusão e por conseguinte a uma diminuição da corrente crítica máxima. Esta corrente é máxima perto da linha de irreversibilidade. A linha de irreversibilidade separa duas regiões, a de temperaturas mais baixas que é rígida, aonde os vórtices podem formar redes ou não, dependendo do material, e a de temperaturas mais altas que é chamada de “Giant Flux Creep”, nesta região existe uma grande movimentação dos vórtices pelo material [8, 10]. Outra propriedade do estado mixto dos SAT é que em geral a sua rede não possui uma correlação de longo alcance. Em microescalas pode-se observar a rede triangular característica de Abrikosov mas esta desaparece se observamos em uma escala maior. Os vórtices neste estado possuem uma forma especial, que depende da direção do campo magnético aplicado. Se o campo está aplicado na direção c o vórtice tem uma seção transversal circular, para campos aplicados no plano ab a forma é elíptica, isto é devido à anisotropia existente.

O diagrama de fases dos SAT é bastante mais complexo que os dos supercondutores tradicionais e apresentam configurações diferentes. Além das redes tradicionais, existem duas regiões aonde os vórtices adquirem outras configurações, entre elas estão as

Capítulo 1 - *Introdução.*

chamadas “Vortex Glass” e “Vortex Fluid” [11]. A primeira é uma região sem ordem de longo alcance e estática, a segunda é uma fase onde os vórtices se movimentam devido às forças de Lorentz exercidas pelo campo magnético. Últimas investigações evidenciam uma linha de “Melting” [11], esta linha representa uma transição de primeira ordem entre o estado de “Vortex Glass” e “Vortex Fluid”. Esta pode ser apreciada olhando para a resistividade do material, no “Vortex Glass” a resistividade é quase zero, no “Vortex Fluid” a resistividade é ohmica. Alguns cenários possíveis do diagrama de fases dos SAT podem ser vistos na figura-1.5 [12]. Estas complexidades no diagrama de fases são devido ao fato de que os vórtices nestes sistemas são bastantes flexíveis. Uma consequência da flexibilidade dos vórtices é que as suas flutuações termodinâmicas são mais evidentes que a dos supercondutores tradicionais, que apresentam redes mais rígidas.

O estudo das flutuações termodinâmicas é um assunto controverso, devido ao fato que algumas regiões do diagrama de fases apresentam flutuações de diferentes tipos, o que levou a duas linhas de pesquisa (bastante exploradas). Uma usa a descrição de Níveis de Landau, a qual tem tido bastante sucesso para o caso de campos magnéticos altos aplicados (aproximação de Níveis de Landau mais baixos (LLL)). A outra tem explorado enfoques baseados no Modelo XY 3D de spins [13], e parece ser adequada para campos magnéticos baixos. No entanto comparações com os dados experimentais dos vários esquemas de escala levam a resultados conflitantes.

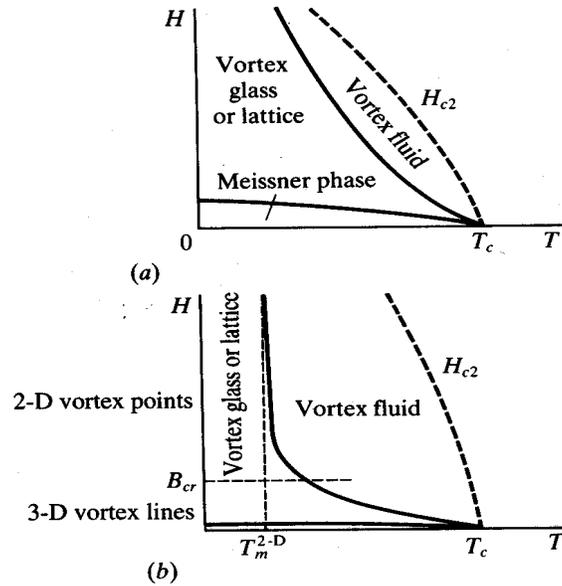


Figura 1.5: Diagrama de fases onde se representa a linha de “Melting para diferentes tipos de supercondutores:
(a) Materiais 3-D.
(b) Materiais planares.

O caso de campos altos, $H > 2 \text{ T}$, o enfoque que usa (LLL) tem grande sucesso em explicar o comportamento universal de várias propriedades dos materiais, como a magnetização e o calor específico. Mais recentemente, a forma funcional destas funções universais foram obtidas para o caso de campos aplicados ao longo da direção c de anisotropia do supercondutor [14]. Estes resultados foram generalizados para uma direção qualquer do campo magnético aplicado [15] e os resultados concordam muito bem com resultados experimentais publicados [16,17].

No caso de campos baixos, acredita-se que a aproximação LLL não seja adequada e algo além dos níveis mais baixos de Landau devam ser incluídos. Nesta região do diagrama de

Capítulo 1 - Introdução.

fases o modelo XY 3D é usado com algum sucesso. Os defensores deste enfoque tentam usar este tipo de análise para campos altos [18].

Um enfoque alternativo tem sido desenvolvido por Tesanovic [19] para o caso de campos baixos, situação onde a aproximação LLL não funciona.

A polêmica sobre o enfoque que melhor descreve o problema não chegou a um consenso. Um estudo comparativo das suas hipóteses, de seus resultados e finalmente como as descrições se comparam com os resultados experimentais é objeto da presente Tese.

O presente trabalho está organizado da seguinte forma, no capítulo 1 encontra-se uma pequena introdução da história da supercondutividade, como também uma descrição das propriedades e características fundamentais dos supercondutores e os motivos pelos quais estudamos as flutuações termodinâmicas em supercondutores. No capítulo 2 apresentamos o formalismo de Ginzburg – Landau (1950), este formalismo fenomenológico é o adequado para o estudo das flutuações termodinâmicas em supercondutores. Usando este formalismo, junto com a teoria da mecânica estatística de Boltzmann, estudamos as flutuações termodinâmicas de quantidades termodinâmicas como a magnetização e calor específico no contexto da aproximação gaussiana, analisando os resultados obtidos nessa aproximação. No capítulo 3 usamos uma aproximação melhor, a aproximação de Hartree, para calcular a expressão da energia livre de Helmholtz, este cálculo foi feito considerando a anisotropia de massa existente nos supercondutores de alta temperatura crítica. Devido a este fato, estudamos também a dependência angular desta função com relação ao ângulo de incidência do campo magnético aplicado. Uma vez obtida esta função estudamos as propriedades físicas da

Capítulo 1 - *Introdução.*

magnetização e calor específico nesta aproximação. No capítulo 4 encontra-se um resumo do modelo X-Y 3D para supercondutores, introduzimos neste capítulo a hipótese de universalidade, assim como os expoentes críticos deste modelo chegando finalmente à forma funcional na região crítica da parte singular da energia livre de Helmholtz. No capítulo 5 fizemos uma análise para a magnetização usando dados obtidos de uma mostra supercondutora de YBCO que possuía uma temperatura crítica de 92.3 Kelvin, em nosso análise consideramos tanto a descrição baseada nos níveis de Landau como também o modelo X-Y 3D, obtendo desta forma uma comparação dos dois modelos e seus respectivos limites de validade, por último no capítulo 6 resumimos as principais conclusões desta tese.

Capítulo 2

Teoria de Ginzburg – Landau
e Flutuações Termodinâmicas

2.1 – Introdução

Neste capítulo começaremos o estudo das ferramentas necessárias para o entendimento das flutuações termodinâmicas na transição supercondutora. Estes estudos são importantes devido ao fato que tem-se observado experimentalmente que na transição, quantidades termodinâmicas como a magnetização, calor específico, etc, apresentam contribuições características em suas magnitudes devidas ao efeito das flutuações termodinâmicas. Um ponto de partida para estudar estes problemas é a teoria fenomenológica de Ginzburg – Landau [3], esta teoria permite de forma relativamente simples dar conta das propriedades físicas dos supercondutores na região de interesse, como por exemplo os vórtices [5], etc. Primeiro estudaremos esta teoria em sua forma mais simples (sem campos magnéticos aplicados), da qual tiraremos resultados importantes para o nosso estudo. Apresentaremos os formalismos que levam as equações linearizadas de Ginzburg – Landau [12], ponto de partida para todas as nossas investigações, como também algumas aplicações importantes desta teoria. Para estudar as flutuações precisaremos de alguns conceitos da mecânica estatística de Boltzmann [20]. Como primeiro passo estudaremos a aproximação Gaussiana [20], que provém da eliminação do termo quártico na equação de Ginzburg – Landau. Veremos que já nesta aproximação podem-se observar resultados interessantes devido as flutuações termodinâmicas, por exemplo, contribuições às magnitudes das quantidades físicas estudadas para uma temperatura acima de T_c . Existe outro tipo de aproximação que inclui o termo quártico na equação de Ginzburg – Landau, esta será tratada no capítulo seguinte.

2.2 - Teoria de Ginzburg - Landau.

A física do estado supercondutor perto da sua transição, dada pela linha $H_{c2}(T)$, pode ser descrita pela teoria fenomenológica de Ginzburg – Landau de 1950 [3]. Ginzburg e Landau propuseram uma forma para a energia livre de um supercondutor perto de T_c . Por meio desta descrição o problema das flutuações termodinâmicas é tratado de forma fenomenológica, esquecendo assim os problemas complexos que apresenta a abordagem microscópica, obtendo resultados que estão em acordo com os dados experimentais.

Ginzburg e Landau, baseando-se na teoria deste último sobre as transições de fase, identificaram a transição entre o estado normal e supercondutor como uma transição de segunda ordem, e propuseram para a energia livre um funcional do parâmetro de ordem Ψ . O parâmetro de ordem é uma variável que descreve a física nas transições de fase, neste caso uma transição entre os estados normal e supercondutor.

O parâmetro de ordem varia para cada fenômeno e pode adquirir diferentes significados. Para o caso dos supercondutores, Ginzburg e Landau escolheram Ψ como um parâmetro de ordem complexo da forma $\Psi = |\Psi|e^{i\phi}$ onde $|\Psi|$ e ϕ são a amplitude e a fase respectivamente. Neste caso, $|\Psi|^2$ pode ser relacionado com a densidade local dos elétrons supercondutores. Podemos definir então que $|\Psi|^2 = 0$ representa o estado normal do material pois nesta região não existem partículas supercondutoras, e $|\Psi|^2 \neq 0$ o estado supercondutor, isto nos leva à seguinte definição para $|\Psi|^2$

$$|\Psi|^2 = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \Psi_0 & T < T_c \end{cases} \quad (2.1)$$

Perto da transição, $|\Psi|^2$ é pequeno e a energia livre pode ser expandida em serie de Taylor, obtendo assim

$$f = f_{n0} + \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar \nabla}{i} - \frac{e^* \vec{A}}{e} \right) \Psi \right|^2 + \frac{h^2}{8\pi} , \quad (2.2)$$

onde α e β são parâmetros da teoria, \vec{A} é o potencial vetor magnético e h a densidade do fluxo magnético em uma escala microscópica. Vemos que esta energia livre não possui potências ímpares do parâmetro de ordem $|\Psi|$. Potências ímpares na equação (2.2) levariam a uma descrição de uma transição de fase de primeira ordem, na qual não estamos interessados.

2.3 - Estudo da energia livre de Ginzburg - Landau

Para entender um pouco mais a energia livre de Ginzburg – Landau, estudaremos o caso em que não existe campo magnético aplicado nem variações espaciais do parâmetro de ordem, portanto a equação (2.2) fica

$$f_s - f_n = \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 , \quad (2.3)$$

vemos que a diferença das energias livres neste caso depende só dos parâmetros α , β , e Ψ . Procuraremos pela solução mais estável, já que todo sistema tende a estar no seu

estado de equilíbrio. Para isto minimizamos a energia livre de Ginzburg – Landau (2.3) com relação ao parâmetro de ordem.

Por simples inspeção vemos que β tem que ser positivo para que a teoria seja válida. Se fosse negativo, a equação (2.3) não apresentaria um mínimo absoluto, portanto a solução não seria estável.

Considerando $\beta > 0$ temos duas possibilidades para o mínimo, estas vão depender da variável α ser positiva ou negativa. Para α positivo vemos que o mínimo acontece quando $|\Psi|^2 = 0$, se α fosse negativo o mínimo aconteceria quando

$$|\Psi|^2 = |\Psi_\infty|^2 \equiv -\frac{\alpha}{\beta} . \quad (2.4)$$

As duas possibilidades estão representadas na figura 2.1,

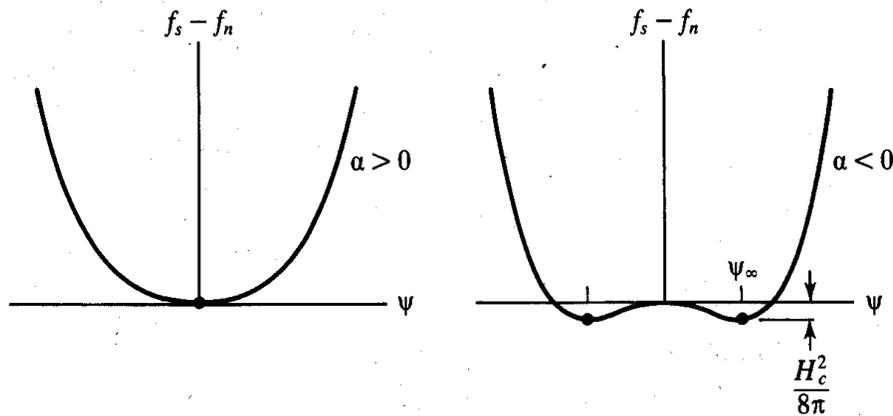


Figura 2.1: Comportamento da energia livre de Ginzburg – Landau segundo o valor de α .

em um caso o mínimo acontece no valor zero (estado normal) e no outro caso em um valor diferente de zero (estado supercondutor), isto significa que na transição do estado normal para o estado supercondutor o valor de α muda de sinal.

Fazendo uma expansão de $\alpha(T)$ em serie de Taylor em torno do ponto T_c chegamos a seguinte expressão

$$\alpha(t) = a_0(t - 1) \quad (2.5)$$

onde $t = T/T_c$ e a_0 esta relacionada com a primeira derivada da expansão. A variável $\alpha(t)$ indica quão próximos estamos do ponto de transição.

Consideremos agora a existência de um campo magnético e a variação espacial do parâmetro de ordem, neste caso devemos incluir os termos não considerados previamente da equação (2.2)

$$\frac{1}{2m^*} \left[\hbar^2 (\nabla |\Psi|)^2 + \left(\hbar \nabla \varphi - \frac{e^* \vec{A}}{c} \right)^2 |\Psi|^2 \right]. \quad (2.6)$$

O primeiro termo representa a energia extra associada com os gradientes da magnitude do parâmetro de ordem e o segundo termo esta relacionado com a energia cinética associada às correntes supercondutoras.

Se procuramos uma solução estável do problema todo, temos que minimizar a expressão da energia livre de Ginzburg – Landau (2.2) com relação a Ψ e \vec{A} , chegando assim às equações diferenciais de Ginzburg - Landau

$$\frac{\partial f}{\partial \Psi} = 0 \Rightarrow \left(\alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi + \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar \nabla}{i} - \frac{e^* \vec{A}}{c} \right)^2 \Psi = 0 \right), \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{A}} = 0 \Rightarrow \left(J = \frac{e^* \hbar}{2m^* i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^* c} \Psi^* \Psi \vec{A} \right). \quad (2.8)$$

Estas duas equações formam a base fenomenológica para tratar problemas associados à supercondutividade.

2.4 - Aplicação das equações de Ginzburg - Landau.

Nesta seção estudaremos uma aplicação importante das equações de Ginzburg – Landau a qual iremos utilizar mais adiante. Trata-se de uma amostra (infinita) na presença do campo magnético H perto da transição [12], devido a este fato o origem das coordenadas é imaterial.

Perto da transição, o valor de $|\Psi|^2$ é muito pequeno e portanto a equação (2.7) pode ser simplificada eliminando o termo de ordem $|\Psi|^4$, chegando assim à equação linearizada de Ginzburg – Landau:

$$\alpha\Psi + \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar\nabla}{i} - \frac{e^* \vec{A}}{c} \right)^2 \Psi = 0 \quad . \quad (2.9)$$

Introduzindo nesta equação $\vec{A} = H(0, x, 0)$ o calibre que representa um campo H na direção z obtemos:

$$\left[-\nabla^2 + \frac{4\pi i}{\Phi_0} Hx \frac{\partial}{\partial y} + \left(\frac{2\pi H}{\Phi_0} \right)^2 x^2 \right] \Psi = \frac{1}{\xi^2} \Psi \quad , \quad (2.10)$$

onde $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ é o quanta de fluxo magnético e $\xi^{-2} = \frac{4m\alpha}{\hbar^2}$ é a distância de correlação

do parâmetro de ordem. Notando que a equação acima só depende da variável x , procuramos uma solução do tipo

$$\Psi = e^{ik_y y} e^{ik_z z} f(x) , \quad (2.11)$$

que substituída em (2.10) fornece

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi H}{\Phi_0} \right)^2 (x - x_0)^2 f = \left(\frac{1}{\xi^2} - k_z^2 \right) f , \quad (2.12)$$

onde

$$x_0 = \frac{k_y \Phi_0}{2\pi H} . \quad (2.13)$$

Pode-se obter uma solução imediata de (2.12) notando que se a multiplicamos por $(\hbar^2 / 2m)$ recuperamos a equação de um oscilador harmônico centrado no ponto x_0 (este ponto deve ficar dentro da amostra). Este problema é o mesmo que achar os estados quantizados de uma carga eletrônica na presença de um campo magnético, da qual obtemos como solução os níveis de Landau [12] separados pela energia de ciclotron $(\hbar^2 \omega_c)$. Os autovalores resultantes são

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \left(\frac{2eH}{m^* c} \right) , \quad (2.14)$$

É muito importante notar que no valor da energia não aparece a variável x_0 . Isto traz como consequência a degenerescência da energia com relação a k_y , devido a que o centro do oscilador x_0 pode ser colocado dentro da amostra em qualquer lugar do eixo x . Usando estes autovalores em (2.12), achamos uma condição para o valor do campo magnético aplicado na transição

$$H = \frac{\Phi_0}{2\pi(2n+1)} \left(\frac{1}{\xi^2} - k_z^2 \right) . \quad (2.15)$$

Observando a equação (2.15), vemos que é maximizada quando k_z e n adquirem o valor zero, fazendo isto obtemos

$$H_{c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} . \quad (2.16)$$

Este campo define o valor máximo no qual se produz a transição entre os estados mixto e normal nos supercondutores do tipo II. É importante saber que a dependência com a temperatura do campo crítico (2.16) é dada por $(t-1)$. Experimentalmente (2.16) é muito usada para calcular distâncias de correlação, devido a H_{c2} ser conhecido com grande precisão. Estes resultados vão ser usados nas seções seguintes para o estudo das flutuações termodinâmicas na transição supercondutora.

2.5 - Flutuações Termodinâmicas

Sabemos que as equações de Ginzburg – Landau fornecem uma boa descrição dos fenômenos que acontecem no supercondutor, quando sobre ele aplicamos um campo magnético. Estes fenômenos vão desde a formação da rede de vórtices [5, 12] até descrições dos campos críticos.

As soluções das equações de Ginzburg – Landau achadas na seção anterior, são as chamadas soluções de Campo Médio (são as mais estáveis já que minimizam o funcional de Ginzburg – Landau). Quando nos aproximamos da linha $H_{c2}(T)$, existe uma região na qual as flutuações do parâmetro de ordem Ψ tem que ser levadas em conta.

Os efeitos das flutuações podem ser vistos nos dados experimentais da magnetização e calor específico, já que apresentam contribuições para um valor de temperatura acima de T_c , as quais não poderiam existir se não fosse pelas flutuações termodinâmicas.

Um ponto de partida para estudar qualquer quantidade termodinâmica é a função de partição, já que desta pode-se calcular qualquer função termodinâmica. Para calculá-la utilizaremos alguns conceitos da mecânica estatística de Boltzmann. Vamos supor que cada parâmetro de ordem contribui para a função de partição com um peso estatístico dado pelo fator de Boltzmann

$$P = D\Psi e^{-\frac{F}{k_B T}}, \quad (2.17)$$

onde F representa a energia por estado ocupado e k_B é a constante de Boltzmann.

Segundo a teoria de Boltzmann, para um ensemble canônico a função de partição é dada pela integral funcional

$$Z = \int D\Psi e^{-\frac{F}{k_B T}}. \quad (2.18)$$

É importante lembrar que na teoria de Boltzmann as medias estatísticas estão dadas pela expressão:

$$\langle f \rangle = \frac{\int d^3 r f e^{-\frac{H}{k_B T}}}{\int d^3 r e^{-\frac{H}{k_B T}}}. \quad (2.19)$$

Para usar (2.18) é preciso interpretar a energia por estado ocupado F , como a energia por estado do parâmetro de ordem dada pela expressão (2.2), deste modo a equação (2.18) fica:

$$Z = \int D\Psi e^{-\int d^3r \left\{ \frac{1}{k_B T} \left(\alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{4m} \left| \left(\frac{\hbar \nabla}{i} - \frac{2eA}{c} \right) \Psi \right|^2 \right) \right\}} \quad (2.20)$$

É importante notar que a função de partição (2.20) tem a forma de uma integral funcional, estes tipos de integrais só possuem solução exata quando são do tipo gaussiano.

2.6 - Aproximação Gaussiana

Como primeira aproximação para a equação (2.20), estudaremos a solução para o caso no qual desprezamos o termo quártico. Isto pode ser feito pensando que estando próximos à transição o valor do parâmetro de ordem $|\Psi|^2$ é muito pequeno. Com esta aproximação (2.20) fica:

$$Z = \int D\Psi e^{-\int d^3r \left\{ \frac{1}{k_B T} \left(\alpha |\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left| \left(\frac{\hbar \nabla}{i} - \frac{2eA}{c} \right) \Psi \right|^2 \right) \right\}} \quad , \quad (2.21)$$

neste ponto fazemos uso da solução (2.15), introduzindo-a em (2.21), com o que obtemos:

$$Z = \int D\Psi e^{-\left[\frac{1}{k_B T} \left\{ \alpha + \xi^2(0) k_z^2 + 2h \left(n + \frac{1}{2} \right) \right\} \right] \int d^3r |\Psi|^2} \quad , \quad (2.22)$$

com h definida como

$$h = \xi^2(0) \left(\frac{2eH}{\hbar c} \right) \quad . \quad (2.23)$$

Consideramos o caso em que o campo magnético esta aplicado paralelo ao eixo z (em geral, vamos considerar o campo magnético nesta direção, até mencionarmos o contrário). De (2.22) vemos que as flutuações estão consideradas dentro da integral, já que se está integrando Ψ em torno de todos os seus valores possíveis na transição, cada um deles com seu respectivo peso estatístico (2.17). Resolvendo (2.22), obtemos a seguinte expressão para a função de partição (Apêndice A)

$$Z = \prod_{k_z, k_y, n} \left(\frac{\pi k_B T}{\alpha + \xi^2(0)k_z^2 + 2h\left(n + \frac{1}{2}\right)} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (2.24)$$

É sabido da mecânica estatística que a energia livre de Helmholtz esta relacionada com a função de partição da forma

$$F = -k_B T \ln(Z) , \quad (2.25)$$

portanto, introduzindo em F a função de partição calculada em (2.24), obtemos

$$F = -k_B T \ln \left[\prod_{k_z, k_y, n} \left(\frac{\pi k_B T}{\alpha + \xi^2(0)k_z^2 + 2h\left(n + \frac{1}{2}\right)} \right)^{\frac{1}{2}} \right] . \quad (2.26)$$

Vemos de (2.26) que F depende dos diferentes níveis de Landau (n), o vetor de onda na direção do eixo z (k_z), e por último de k_y , o vetor de onda na direção do eixo y que esta associado com a localização do centro das órbitas dos níveis de Landau, as quais estão degeneradas. Considerando isto, a energia livre de Helmholtz (2.26) pode ser escrita como

$$F = -\frac{Vk_B TeH}{2\pi^2 \hbar c} \int dk_z \sum_0^{\infty} \ln \left(\frac{\pi k_B T}{\alpha_H + \xi^2(0)k_z^2 + 2hn} \right), \quad (2.27)$$

onde

$$\alpha_H = \alpha + h. \quad (2.28)$$

Esta nova variável representa uma translação da variável α (que no diagrama de fases fica na linha do eixo da temperatura) para a linha de H_{c2} , portanto α_H indica a proximidade ao ponto de transição quando estamos na presença de um campo magnético aplicado.

A partir da expressão (2.27) para a energia livre de Helmholtz, pode-se calcular a magnetização e o calor específico do supercondutor usando as seguintes relações termodinâmicas

$$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T, \quad (2.29)$$

$$C_v = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}. \quad (2.30)$$

2.7 - Calor específico

Nesta seção estudaremos as conseqüências das flutuações termodinâmicas no calor específico, para isto usamos a equação (2.30) junto com (2.27) obtendo

$$C_v = \frac{Vk_B eH \sqrt{a_0 m}}{2\hbar^2 c \pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\alpha_H + 2hn)^{3/2}}. \quad (2.31)$$

Notemos que para chegar em (2.31) consideramos que a dependência da temperatura na expressão da energia livre de Helmholtz (2.27) é dada principalmente pela variável α_H , já que pequenas variações da temperatura influem muito no comportamento de α_H .

A expressão (2.31) do calor específico depende, entre outras coisas, do somatório sobre os níveis de Landau. Este somatório pode ser simplificado para o limite dos campos magnéticos altos devido ao espaçamento dos níveis de Landau ser diretamente proporcional à magnitude do campo magnético aplicado. Para campos altos o espaçamento vai ser grande e portanto é muito improvável que os elétrons ocupem um nível que não seja o fundamental ($n = 0$), logo para campos magnéticos altos só é preciso considerar o termo de $n = 0$ no somatório.

Para campos magnéticos baixos o espaçamento dos níveis é cada vez menor, por conseguinte, todos os termos do somatório têm que ser considerados uma vez que os elétrons podem ocupar níveis excitados.

Para o caso de campos altos (considerando só $n = 0$) a expressão (2.31) fica

$$C_v = \frac{Vk_B eH \sqrt{a_0 m}}{2\hbar^2 c\pi} \frac{1}{\alpha_H^{3/2}}, \quad (2.32)$$

esta expressão tem uma dependência com a temperatura através da variável $\alpha_H^{3/2}$.

Notemos que a aproximação feita ao desprezar o termo quártico leva a uma divergência de (2.32) na transição, e segundo os dados experimentais na transição o valor do calor específico é finito. O que é importante ressaltar é que apesar da expressão divergir, ela não é nula para uma temperatura acima de T_c , isto é devido as flutuações do parâmetro de ordem que contribuem para o valor da magnitude do calor específico acima de T_c .

A seguir, o gráfico da dependência com a temperatura do calor específico para campos magnéticos altos, usando (2.32)

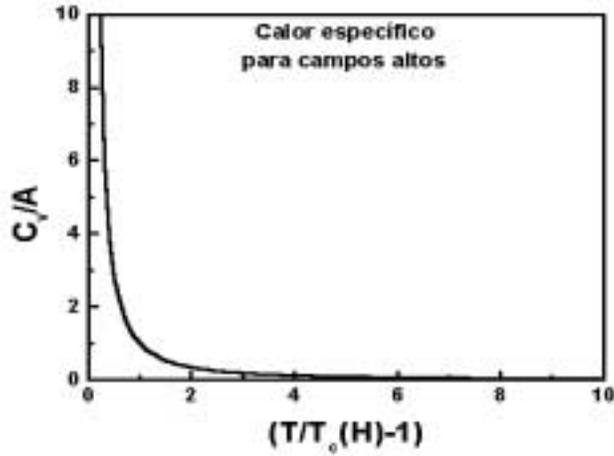


Figura 2.2: Dependência do calor específico com a temperatura.

Para o caso de campos magnéticos baixos (muito próximos a zero), podemos transformar o somatório em n da equação (2.31) em uma integral, ficando

$$C_v = \frac{Vk_B eH \sqrt{a_0 m}}{2\hbar^2 c\pi} \int_0^\infty dn \frac{1}{(\alpha_H + 2hn)^{3/2}}, \quad (2.33)$$

que resolvida leva à seguinte expressão para o calor específico:

$$C_v = \frac{Vk_B (4ma_0)^{3/2}}{8\pi\hbar^3} \frac{1}{\alpha_H^{1/2}}. \quad (2.34)$$

Esta expressão merece os mesmos comentários que (2.32) sobre a divergência, mas neste caso a divergência é mais lenta, devido à dependência da temperatura ser dada pela variável $\alpha_H^{1/2}$.

A seguir, o gráfico da dependência com a temperatura do calor específico para campos magnéticos baixos, usando (2.34)

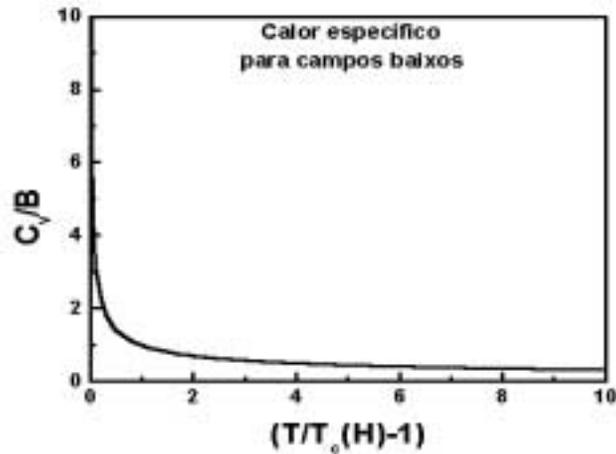


Figura 2.3: Dependência do calor específico com a temperatura.

2.8 - Magnetização

Para o caso da magnetização obtemos usando (2.29) e (2.27)

$$M = -\frac{Vk_B T e^2 H}{\sqrt{a_0 m \hbar c^2} 2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\alpha_H + 2hn)^{1/2}} \quad (2.35)$$

Este resultado também depende do somatório dos níveis de Landau n , tendo assim dois limites para esta expressão, um para campos magnéticos baixos e outro para campos magnéticos altos.

Para o caso dos campos magnéticos altos só consideramos o termo com $n = 0$ (pelo argumento dado para o calor específico na seção 2.7) no somatório, obtendo assim

$$M = - \frac{Vk_B T e^2 H}{\sqrt{a_0 m \hbar c^2} 2\pi} \frac{1}{\alpha_H^{1/2}} . \quad (2.36)$$

A dependência desta equação com a temperatura pode-se ver claramente no seguinte gráfico

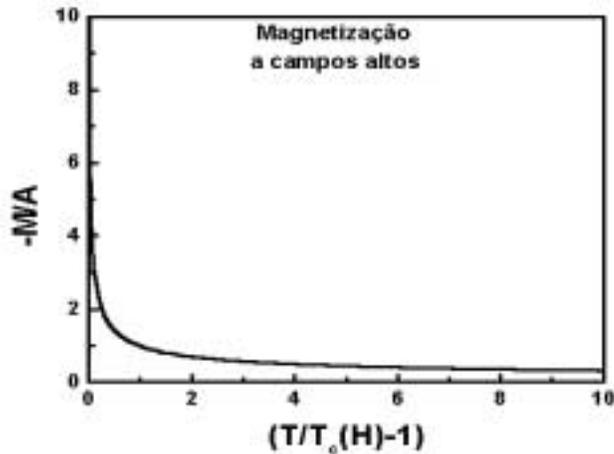


Figura 2.4: Dependência da magnetização com a temperatura.

Para o caso dos campos magnéticos baixos o problema se complica, já que, uma vez convertido o somatório em integral, este diverge, esta divergência não é física. Este problema foi resolvido por Prange [21], usando uma aproximação para o somatório da energia livre de Helmholtz (2.27), desta forma se obtém

$$M = - \frac{Vk_B T e^2 H}{12\sqrt{a_0 m \hbar c^2} \pi} \frac{1}{\alpha^{1/2}} \quad (2.37)$$

cuja dependência com a temperatura pode-se ver no seguinte gráfico

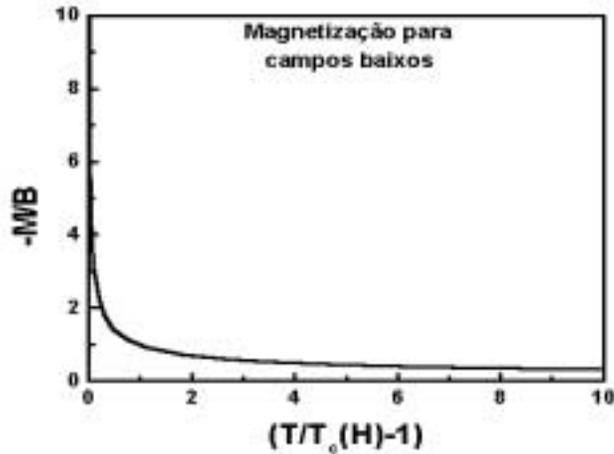


Figura 2.5: Dependência da magnetização com a temperatura.

Ao contrário do caso do calor específico, as expressões (2.36) e (2.37) divergem com os mesmos expoentes. A diferença entre elas consiste em que no caso de campos magnéticos altos esta acontece por meio da variável α_H , e para campos baixos por α .

No próximo capítulo tentaremos resolver as falhas na aproximação gaussiana às diversas expressões, tanto do calor específico como da magnetização. Para este fim consideraremos o termo quártico em (2.21) de uma forma particular, esta nova aproximação é a chamada aproximação de Hartree.

Capítulo 3

Aproximação de Hartree

3.1 - Introdução

No capítulo anterior, vimos como a aproximação gaussiana gerava resultados interessantes, tais como as contribuições para a magnetização e calor específico devido às flutuações termodinâmicas, mas ainda incorretos devido à divergência na transição destas quantidades termodinâmicas. Neste capítulo estudaremos as conseqüências da aproximação de Hartree [22] (que é uma forma de introduzir o termo quártico na expressão da função de partição), e veremos como são modificados os resultados da magnetização e calor específico dados pela aproximação gaussiana. Estudaremos também uma generalização destes resultados, considerando materiais anisotrópicos e com campos magnéticos aplicados em direções arbitrárias com relação ao eixo z de anisotropia.

3.2 - Aproximação de Hartree

No capítulo anterior mostramos que se desprezarmos o termo quártico na energia livre de Landau, os resultados tanto para a magnetização como para o calor específico divergem na transição, este comportamento não é físico.

Para evitar este problema consideremos agora o termo quártico na expressão da energia livre de Ginzburg – Landau (2.2). Do capítulo anterior sabemos que as únicas integrais que possuem solução exata são as gaussianas, considerando este fato, introduziremos o termo quártico de uma forma especial

$$|\Psi|^4 = \langle \Psi^2 \rangle |\Psi|^2, \quad (3.1)$$

onde $\langle \Psi^2 \rangle$ é a média estatística do parâmetro de ordem. Este tipo de aproximação foi feita pela primeira vez por Hartree [23] para tratar problemas de muitos corpos. Introduzindo (3.1) em (2.2) definimos uma nova variável

$$\tilde{\alpha} = \alpha + \beta \langle \Psi^2 \rangle . \quad (3.2)$$

Comentaremos um pouco as vantagens de (3.1). Uma delas é que o termo quártico escrito desta forma permite que a função de partição possa ser resolvida de forma exata, já que continua sendo gaussiana. Outra vantagem importante é que escrevendo-a desta forma, estamos introduzindo as interações entre os parâmetros de ordem em forma de médias estatísticas. Isto pode ser visto da seguinte forma, a média do parâmetro de ordem representa a interação entre todos os parâmetros de ordem, portanto $\langle \Psi^2 \rangle |\Psi|^2$ representa a interação de um parâmetro de ordem em particular com o resto (como um todo).

Com o termo quártico descrito por (3.1) a função de partição fica

$$Z = \int D\Psi e^{-\int d^3r \left\{ \frac{1}{k_B T} \left(\tilde{\alpha} |\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left(\frac{\hbar \nabla}{i} - \frac{2eA}{c} \right) |\Psi|^2 \right) \right\}} . \quad (3.3)$$

A situação apresentada pelos novos supercondutores de alta T_c , que são materiais altamente anisotrópicos, pode ser discutida mediante este formalismo se incluirmos a anisotropia. Para este fim, introduzimos explicitamente a anisotropia mediante a substituição do termo de massa (m) das equações de Ginzburg – Landau por um tensor de massa

$$m \rightarrow \begin{pmatrix} m_{ab} & 0 & 0 \\ 0 & m_{ab} & 0 \\ 0 & 0 & m_c \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

onde m_{ab} e m_c refere-se às massas efetivas dos elétrons no plano ab (que é isotrópico) e na direção do eixo $c \equiv z$ (eixo de anisotropia) respectivamente.

A anisotropia apresentada nos supercondutores de alta T_c , introduz um efeito de dependência angular nas propriedades da magnetização e calor específico, uma vez que as direções c e ab não são mais equivalentes. É interessante portanto considerar um campo magnético aplicado em uma direção qualquer com relação à direção de anisotropia c , e assim estudar também a dependência angular na magnetização e no calor específico. Para este fim escolhemos o calibre onde seja explícita a dependência angular do campo aplicado, isto nos leva à escolha

$$A_y = H(x \cos(\theta) - z \sin(\theta)) \quad , \quad (3.5)$$

que representa um campo magnético H no plano xz formando um ângulo θ com relação ao eixo z ($// c$).

Neste caso, a função da energia livre de Helmholtz pode ser expressada como (Apêndice B)

$$F = -\frac{k_B T e H V g(\theta)}{2 \hbar c \pi^2} \int dk \sum_{n=0}^{\infty} \ln \left(\frac{\pi k_B T}{\tilde{\alpha}_\theta + 2 n h_\theta + \xi_{ab}^2(0) g(\theta) k^2} \right) \quad , \quad (3.6)$$

onde

$$h_\theta = \xi_{ab}^2(0) \left(\frac{2 H e}{\hbar c} \right) \sqrt{\frac{m_{ab}}{m_c}} g(\theta)^{1/2} \quad , \quad (3.7)$$

$$g(\theta) = \left(\sin^2(\theta) + \frac{m_c}{m_{ab}} \cos^2(\theta) \right), \quad (3.8)$$

$$\tilde{\alpha}_\theta = \tilde{\alpha} + h_\theta, \quad (3.9)$$

e

$$\xi_{ab}^2 = \frac{\hbar^2}{4m_{ab}a_0}. \quad (3.10)$$

Seguindo os mesmos procedimentos do capítulo anterior, podemos calcular as expressões para a magnetização e calor específico, obtendo:

$$C_v = \frac{Vk_B eH \sqrt{a_0 m_{ab}} \sqrt{g(\theta)}}{2\hbar^2 c \pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\tilde{\alpha}_\theta + 2h_\theta n)^{3/2}} \left(\frac{\partial \tilde{\alpha}_\theta}{\partial \alpha_\theta} \right) \quad (3.11)$$

e

$$M = - \frac{Vk_B T e^2 H g(\theta)}{\sqrt{a_0 m_c} \hbar c^2 2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\tilde{\alpha}_\theta + 2h_\theta n)^{1/2}}. \quad (3.12)$$

Comparando estes resultados com os já obtidos na aproximação gaussiana vemos que diferem consideravelmente. Uma das diferenças fundamentais é a inclusão da variável $\tilde{\alpha}_\theta$, que é mais complexa que α_H já que envolve a média estatística do parâmetro de ordem. A dependência com as massas nestas funções é evidente, tanto nas constantes como na variável $g(\theta)$, portanto os valores destas funções vão depender muito do grau de anisotropia do supercondutor. A dependência angular com relação ao campo magnético se encontra na variável $g(\theta)$ e h_θ , por conseguinte, $\tilde{\alpha}_\theta$ vai depender também do ângulo de incidência do campo aplicado. Agora é necessário conhecer a variável $\tilde{\alpha}_\theta$ para obter valores da magnetização e do calor específico. Para calcular $\tilde{\alpha}_\theta$, usamos a média estatística (2.19) do capítulo anterior em (3.2), obtendo

$$\tilde{\alpha}_\theta = \alpha_\theta + \beta \frac{\int d^3 r \Psi^2 e^{-F/k_B T}}{\int d^3 r e^{-F/k_B T}}, \quad (3.13)$$

resolvendo-a chega-se à seguinte expressão:

$$\tilde{\alpha}_\theta = \alpha_\theta + \frac{\beta e H k_B T \sqrt{m_{ab}} \sqrt{g(\theta)}}{\hbar^2 c \pi a_0^{3/2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\tilde{\alpha}_\theta + 2h_\theta n)^{1/2}}, \quad (3.14)$$

que junto a (3.11) e (3.12) formam um conjunto de equações iterativas na variável $\tilde{\alpha}_\theta$.

Com esta expressão, é possível calcular a magnetização e calor específico para diferentes ângulos de incidência do campo magnético aplicado, e desta forma, estudar como variam seus comportamentos devido à anisotropia existente.

As expressões para a magnetização, calor específico e $\tilde{\alpha}_\theta$ podem também ser escritas nos limites de campos magnéticos altos e baixos. Para o caso de campos magnéticos altos se considera só o termo com $n = 0$, na magnetização, calor específico e em $\tilde{\alpha}_\theta$ obtendo

$$C_v = \frac{V k_B e H \sqrt{a_0 m_{ab}} g(\theta)^{1/2}}{2 \hbar^2 c \pi} \frac{1}{\tilde{\alpha}_\theta^{3/2}} \left(\frac{\partial \tilde{\alpha}_\theta}{\partial \alpha_\theta} \right), \quad (3.15)$$

$$M = - \frac{V k_B T e^2 H g(\theta)}{\sqrt{a_0 m_c} \hbar c^2 2 \pi} \frac{1}{\tilde{\alpha}_\theta^{1/2}}, \quad (3.16)$$

e

$$\tilde{\alpha}_\theta = \alpha_\theta + \frac{\beta e H k_B T \sqrt{m_{ab}} g(\theta)^{1/2}}{\hbar^2 c \pi a_0^{3/2}} \frac{1}{\tilde{\alpha}_\theta^{1/2}}. \quad (3.17)$$

Para obter os valores da magnetização e do calor específico neste limite, é necessário calcular $\tilde{\alpha}_\theta$ de (3.17) e depois usar estes valores nas expressões (3.15) e (3.16), fazendo

isto obtemos os seguintes gráficos para a magnetização e calor específico (para distintos ângulos de incidência do campo magnético aplicado).

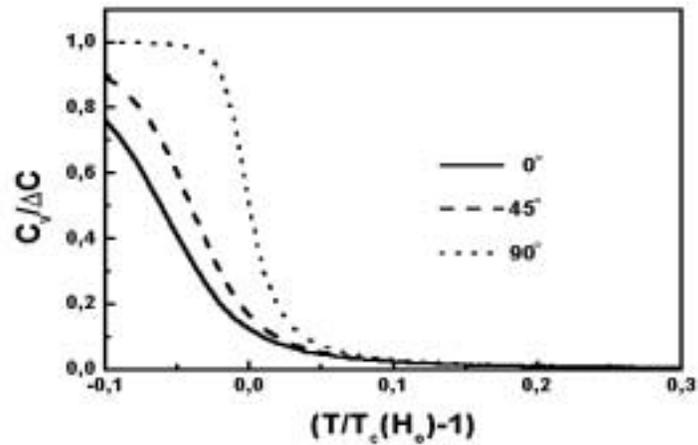


Figura 3.1: Dependência do calor específico com a temperatura para diferentes ângulos de incidência do campo magnético.

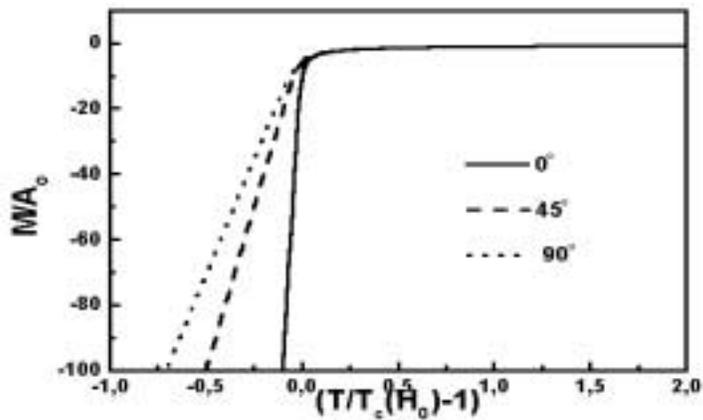


Figura 3.2: Dependência da magnetização com a temperatura para diferentes ângulos de incidência do campo magnético.

É importante notar que a inclusão do termo quártico na função de partição, fez desaparecer a divergência na transição na magnetização e no calor específico. Para o calor específico, vemos que o ângulo de aplicação do campo faz com que a transição seja mais abrupta quando o campo está aplicado no plano ab (90°), nos outros casos a transição é mais suave. Bem acima de T_c temos que $\alpha_\theta \gg 0$, com esta condição, (3.17) fornece a relação $\alpha_\theta \approx \tilde{\alpha}_\theta$. Introduzindo esta expressão em (3.15), vemos que todas as curvas recuperam o comportamento gaussiano de $\alpha_\theta^{-3/2}$ [24]. Quando a temperatura se encontra abaixo de T_c , os valores de $\alpha_\theta \ll 0$, e a equação (3.17) fornece

$$\alpha_\theta \approx - \frac{\beta e H k_B T \sqrt{m_{ab} g(\theta)^{1/2}}}{\hbar^2 c \pi a_0^{3/2} \tilde{\alpha}_\theta^{1/2}} . \quad (3.18)$$

Usando esta condição para valores de temperatura abaixo de T_c , pode-se demonstrar que todas as curvas convergem ao valor ΔC (que é a diferença entre os calores específicos do estado supercondutor e do estado normal a campo zero).

Para a magnetização, observamos que o ângulo de aplicação do campo influi sobre o comportamento na transição, sendo a do campo no eixo c mais abrupta que a dos outros casos. Para temperaturas acima de T_c a equação (3.16) recupera o comportamento gaussiano de $\alpha_\theta^{-1/2}$. Para temperaturas abaixo de T_c o comportamento é linear com relação ao campo magnético aplicado.

Para o caso de campos baixos o panorama se complica, já que ao considerar todos os termos do somatório em (3.8) é muito complicado calcular $\tilde{\alpha}_\theta$, devido a este fato as

Capítulo 3 – Aproximação de Hartree.

expressões para a magnetização e calor específico são difíceis de calcular, perdendo este formalismo sua simplicidade.

Com as expressões (3.15), (3.16) e (3.17) é possível calcular as expressões da magnetização e do calor específico para os diferentes limites de campo magnético

aplicado. Vemos que o caso de $H // \hat{z}$ implica $\theta = 0^\circ$, logo $g(\theta) = \frac{m_c}{m_{ab}}$ e a equação (3.7)

fica

$$h_\theta = \xi_{ab}^2(0) \left(\frac{2He}{\hbar c} \right) \rightarrow h_c, \quad (3.19)$$

usando (3.19) nas equações (3.15), (3.16) e (3.17) obtemos

$$C_v = \frac{Vk_B eH \sqrt{a_0 m_c}}{2\hbar^2 c \pi} \frac{1}{\tilde{\alpha}_c^{3/2}} \left(\frac{\partial \tilde{\alpha}_c}{\partial \alpha_c} \right), \quad (3.20)$$

$$M = - \frac{Vk_B T e^2 H \sqrt{m_c}}{\sqrt{a_0} \hbar c^2 2\pi m_{ab}} \frac{1}{\tilde{\alpha}_c^{1/2}}, \quad (3.21)$$

$$\tilde{\alpha}_c = \alpha_c + \frac{\beta e H k_B T \sqrt{m_c}}{\hbar^2 c \pi a_0^{3/2}} \frac{1}{\tilde{\alpha}_c^{1/2}}, \quad (3.22)$$

e

$$\tilde{\alpha}_c = \tilde{\alpha} + h_c. \quad (3.23)$$

O caso de $H \perp \hat{z}$ implica $\theta = 90^\circ$, logo $g(\theta) = 1$ e a equação (3.7) fica

$$h_\theta = \xi_{ab}^2(0) \left(\frac{2He}{\hbar c} \right) \sqrt{\frac{m_{ab}}{m_c}} = \xi_{ab}(0) \xi_c(0) \left(\frac{2He}{\hbar c} \right) \rightarrow h_{ab}, \quad (3.24)$$

usando (3.24) nas equações (3.15), (3.16) e (3.17) obtemos

$$C_v = \frac{Vk_B eH \sqrt{a_0 m_{ab}}}{2\hbar^2 c \pi} \frac{1}{\tilde{\alpha}_{ab}^{3/2}} \left(\frac{\partial \tilde{\alpha}_{ab}}{\partial \alpha_{ab}} \right), \quad (3.25)$$

$$M = -\frac{Vk_B T e^2 H}{\sqrt{a_0 m_c} \hbar c^2 2\pi} \frac{1}{\tilde{\alpha}_{ab}^{1/2}}, \quad (3.26)$$

$$\tilde{\alpha}_{ab} = \alpha_{ab} + \frac{\beta e H k_B T \sqrt{m_{ab}}}{\hbar^2 c \pi a_0^{3/2}} \frac{1}{\tilde{\alpha}_{ab}^{1/2}}, \quad (3.27)$$

e

$$\tilde{\alpha}_{ab} = \tilde{\alpha} + h_{ab}. \quad (3.28)$$

Vemos que as expressões entre os dois limites diferem apreciavelmente em relação à sua dependência com as massas, já que para um fator de anisotropia de $\gamma = 7$, $m_c \approx 50m_{ab}$. Isto pode ser visto nos gráficos 3.1 e 3.2.

O caso isotrópico se obtém fazendo $m_c = m_{ab}$, $h = \xi^2(0) \left(\frac{2He}{\hbar c} \right)$, com o que as expressões (3.15), (3.16) e (3.17) ficam

$$C_v = \frac{Vk_B e H \sqrt{a_0 m}}{2\hbar^2 c \pi} \frac{1}{\tilde{\alpha}_H^{3/2}} \left(\frac{\partial \tilde{\alpha}_H}{\partial \alpha_H} \right), \quad (3.29)$$

$$M = -\frac{Vk_B T e^2 H}{\sqrt{a_0 m} \hbar c^2 2\pi} \frac{1}{\tilde{\alpha}_H^{1/2}}, \quad (3.30)$$

$$\tilde{\alpha}_H = \alpha_H + \frac{\beta e H k_B T \sqrt{m}}{\hbar^2 c \pi a_0^{3/2}} \frac{1}{\tilde{\alpha}_H^{1/2}}, \quad (3.31)$$

e

$$\tilde{\alpha}_H = \tilde{\alpha} + h. \quad (3.32)$$

Os gráficos para a magnetização e calor específico para este caso são

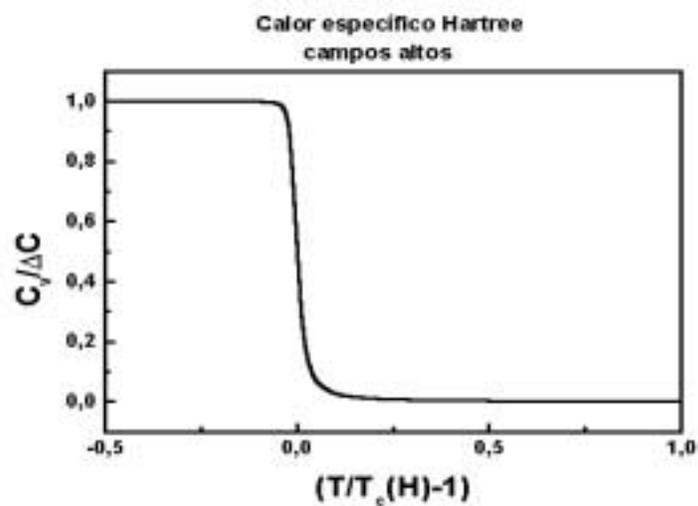


Figura 3.3: Dependência do calor específico com a temperatura.
Caso isotrópico.

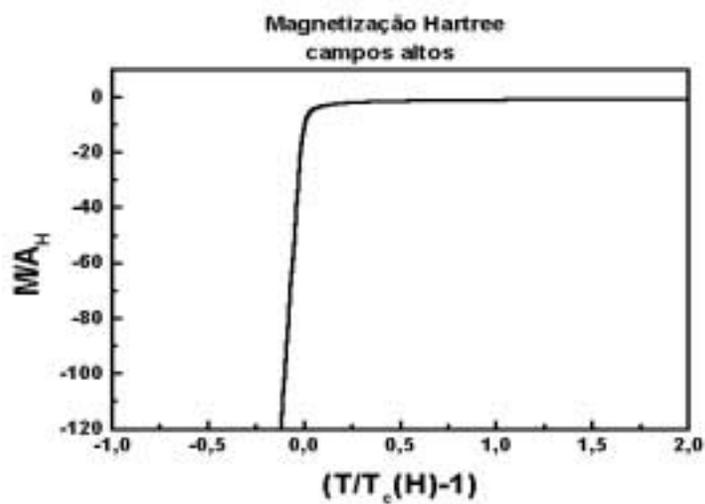


Figura 3.4: Dependência da magnetização com a temperatura.
Caso isotrópico.

3.3 – “Scaling” na aproximação de Hartree.

É importante notar que já na aproximação de Hartree aparecem indícios de “scaling” nas expressões termodinâmicas estudadas. Se definimos em (3.15) uma nova variável x dada por

$$x = \frac{2\hbar^2 c \pi a_0^{3/2}}{\beta e H k_B T \sqrt{m_{ab}} g(\theta)^{1/2}} \tilde{\alpha}_\theta^{3/2} , \quad (3.33)$$

podemos escrever (3.15), (3.16) e (3.6) como

$$C_v = \frac{\Delta C}{(x+1)} , \quad (3.34)$$

$$M = -V \left(\frac{THk_B}{2\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{e}{c} \right)^{5/3} \frac{g(\theta)^{5/6}}{\sqrt{m_c}} \frac{1}{(\beta \hbar m_{ab})^{1/3}} \frac{1}{x^{1/3}} , \quad (3.35)$$

$$F = 2\beta^{1/3} \left(\frac{eH \sqrt{m_{ab}} g(\theta)^{1/2} k_B T}{2c\hbar^2 \pi} \right)^{4/3} f(x) , \quad (3.36)$$

onde

$$f(x) = \left(\frac{2x-1}{x^{2/3}} \right) . \quad (3.37)$$

Quer dizer, não importa em que condições estejamos trabalhando o problema, se as quantidades termodinâmicas estão devidamente normalizadas, todas as curvas vão se sobrepor umas com as outras evidenciando um comportamento universal.

De (3.36) vemos que conseguimos expressar F como uma constante mais uma função $f(x)$. Isto pôde ser feito nesta aproximação mas podemos generalizar este resultado

Capítulo 3 – Aproximação de Hartree.

dizendo que F pode ser escrito em termos de uma função universal $f(x)$, que no limite de Hartree, fornece o valor (3.37).

A expressão (3.35) vai ser usada no capítulo 5 para confrontar (mediante dados experimentais obtidos de uma amostra de $YBCO$) o modelo LLL com o modelo X-Y 3D.

Capítulo 4

Modelo X-Y

4.1 - Introdução

Neste capítulo estudaremos o modelo X-Y, seus expoentes críticos e faremos uma conexão deste com outros modelos (gás de Coulomb, superfluidos, etc), comentando suas aplicações. Esta conexão vai se realizar mediante o uso de idéias vindas da teoria de transições de fase, introduzindo também o conceito de universalidade. O conceito de universalidade vai ser importante pois segundo ele, vários modelos como supercondutividade e superfluidez podem ser descritos usando modelos isomorfos ao modelo X-Y. Se estudará a relação de universalidade que existe entre o modelo X-Y e o de Ginzburg – Landau. A partir deste fato, pode-se usar os resultados já obtidos do modelo X-Y para estudar e entender o comportamento das flutuações termodinâmicas na transição.

4.2 – Modelo X-Y

Em geral, e sem fazer nenhuma referência a um sistema físico em particular, é possível escrever a Hamiltoniana geral para um problema de spins. Esta Hamiltoniana anisotrópica é dada pelo modelo de Heisenberg [13]

$$H = -(4s^2)^{-1} \sum_{r,r'} \{ J_{r-r'}^{\perp} (S_r^x S_{r'}^x + S_r^y S_{r'}^y) + J_{r-r'}^{\parallel} S_r^z S_{r'}^z \} - s^{-1} \sum_r \{ m_{\perp} H^x S_r^x + m_{\parallel} H^z S_r^z \} \quad (4.1)$$

onde S_r^{α} é a coordenada α (cartesiana) da matriz de spins, H^x e H^z são campos externos aplicados, J^{\perp} e J^{\parallel} são constantes de acoplamento entre spins e m_{\perp} , m_{\parallel} são constantes de acoplamento entre os spins e o campo externo.

Três modelos são limites desta Hamiltoniana, fazendo $J^\perp = 0$ obtemos o modelo de Ising, com $J^\perp = J''$ obtemos o modelo isotrópico de Heisenberg e com $J'' = 0$ obtemos o modelo X-Y.

Uma característica do modelo X-Y é que ao contrário do modelo de Ising onde a variável de spin s só tem uma dimensão, este modelo possui uma variável de spin que é um vetor de duas componentes que pode rodar no plano.

O modelo X-Y tem sido bastante estudado nos casos de spin infinito e spin $\frac{1}{2}$. No caso de uma dimensão existe solução exata e várias propriedades deste modelo já foram estudadas. Para o caso de duas ou três dimensões não se conhece uma solução exata do problema. Supõe-se que o modelo X-Y em três dimensões possua uma transição de fase para uma fase ordenada em uma temperatura suficientemente baixa.

4.3 – Conexão do modelo X-Y com modelos planares.

Existem vários tipos de modelos e sistemas que são equivalentes ou ao menos nos faz lembrar do modelo X-Y no sentido que são planares, dentre estes modelos podemos mencionar o gás de coulomb, superfluidez, supercondutividade, deslocamentos, etc [25]. Chamamos de sistemas planares aos que possuem um parâmetro de ordem especificado por duas componentes (como um vetor no plano), entre eles se encontram também os modelos X-Y antiferromagnético e os ferromagnetos fracos [13]. Existem em 2D muitos casos de isomorfismos estudados, comentaremos sobre algum deles.

No caso da superfluidez, a energia que governa a termodinâmica do sistema é a energia cinética do fluxo de massa. Para temperaturas finitas, as flutuações do fluxo de massa

formarão espontaneamente uma configuração de vórtices. Uma descrição deste tipo de flutuações nos leva a um modelo que é isomorfo a um gás de Coulomb em duas dimensões [25].

Outro isomorfismo pode ser apreciado no estudo das flutuações de vórtices em supercondutores, já que é possível usar neste caso uma descrição análoga ao caso de um superfluido neutro. Existe uma generalização do modelo de superfluido neutro para o caso de partículas carregadas de cargas e^* e massa m^* , esta generalização também pode ser usada para o caso dos supercondutores, substituindo $e^* = 2e$ e $m^* = 2m_e$, já que desta forma pode-se representar um par de Cooper.

A Hamiltoniana do modelo X-Y em duas dimensões pode ser escrita da forma

$$H_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (4.2)$$

onde i, j denotam os sítios de uma rede quadrada e a soma é sobre pares de primeiros vizinhos, J é a constante de acoplamento entre primeiros vizinhos e θ_i é o ângulo associado ao spin i no seu respetivo sítio da rede.

Matsubara e Matsuka 1956 [26], propuseram que o modelo X-Y em duas dimensões podia ser visto como uma descrição microscópica aproximada de um superfluido neutro em duas dimensões. Eles associaram o parâmetro de ordem $\Psi_j = |\Psi| e^{i\phi_j}$ a cada sítio da rede j , e argumentaram que a fase entre vizinhos mais próximos deste modelo estão acopladas mediante a Hamiltoniana

$$H = -\frac{1}{2} \left[\frac{\hbar}{m^*} \right]^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\Psi_i^* \Psi_j + \Psi_j^* \Psi_i) . \quad (4.3)$$

Vemos que fixando a magnitude $|\Psi|$ e usando $\Psi = |\Psi|e^{i\phi}$ se recupera a forma funcional da Hamiltoniana H_{XY} .

No caso do modelo X-Y vemos que ele está intimamente relacionado com a descrição fenomenológica da superfluidez e supercondutividade. Kosterlitz e Thouless em 1973 [27] mostraram uma forma de conectar o modelo X-Y e flutuações de vórtices em duas dimensões com a descrição dada pelo gás de Coulomb em duas dimensões. Isto foi feito considerando que só as configurações com $|\theta_i - \theta_j| \ll 1$ da Hamiltoniana (4.2) eram facilmente excitáveis, logo é de se esperar, que estas devam ser as configurações importantes para o estudo das propriedades termodinâmicas. Uma expansão de (4.2) na variável $|\theta_i - \theta_j| \ll 1$ leva a um isomorfismo com o gás de Coulomb.

No caso de um filme supercondutor, pode-se ver que também o modelo X-Y fornece uma descrição adequada para seu estudo. Quando o filme apresenta muitos vórtices na sua estrutura, as regiões de estado normal e estado supercondutor vão-se alternando, isto leva à formação de pequenas regiões de material supercondutor que podem ser vistos como “grãos” supercondutores. Como a supercondutividade pode ser estudada mediante um parâmetro de ordem da forma $\Psi = |\Psi|e^{i\phi}$, que pode ser representada como um vetor em um plano, cada “grão” vai estar associado a um vetor $\vec{\Psi}$ de duas componentes. Um ponto de partida natural para a descrição da energia que formam as flutuações termodinâmicas deste tipo de supercondutores, é a Hamiltoniana de acoplamento entre os parâmetros de ordem de vizinhos mais próximos, isto leva a um modelo isomorfo ao de X-Y [25].

Com estes exemplos mostramos como sistemas físicos que parecem ter descrições tão diferentes podem ser tratados mediante um mesmo formalismo. Estes tipos de idéias deram origem à hipótese de universalidade.

4.4 - Hipótese de universalidade

Existe uma abundante e forte evidência de que os expoentes críticos para uma certa Hamiltoniana de interação vão depender de d , a dimensionalidade do espaço. Outro parâmetro adicional do qual parece depender também os expoentes críticos é a dimensionalidade do parâmetro de ordem D , onde D significa o número de variáveis reais que são necessárias para especificar o parâmetro de ordem.

A evidência experimental da dependência dos expoentes críticos com os parâmetros D e d levaram à hipótese de universalidade, que pode ser enunciada assim: *“Todos os sistemas que possuam a mesma dimensionalidade de “rede” d , a mesma dimensionalidade do parâmetro de ordem D e alcance de interação σ podem ser descritos na região crítica por uma equação de estado da mesma forma”*. Isto quer dizer que na região crítica as equações de estado dos sistemas que pertencem à mesma classe de universalidade só vão diferir nos valores dos coeficientes mas não nos valores dos expoentes críticos. A hipóteses de universalidade foi introduzida pela primeira vez por Kadanoff em 1970 [28].

4.5 – Expoentes críticos do modelo 3D X-Y.

Nesta seção mostraremos os expoentes críticos que provem da Hamiltoniana do modelo X-Y. Chama-se de expoentes críticos aos expoentes que descrevem a natureza das singularidades de varias quantidades termodinâmicas no ponto crítico. Introduzindo a quantidade

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (4.4)$$

supomos que no limite de $t = 0$ qualquer quantidade termodinâmica pode ser decomposta em duas partes, uma regular que é finita mas não necessariamente continua e outra singular que é divergente. Supõe-se que a parte singular é proporcional a uma potência de t no ponto crítico.

Os expoentes críticos são definidos da seguinte forma

Calor específico	$C \approx t ^{-\alpha}$	
Magnetização	$M \approx t ^\beta$	
Susceptibilidade Magnética	$\chi \approx t ^{-\gamma}$	(4.5)
Equação de Estado	$M \approx H^{1/\delta}$	
Distância de Correlação	$\xi \approx t ^{-\nu}$	

Os expoentes críticos do modelo X-Y em 3D, podem ser obtidos mediante o uso de séries de altas temperaturas da Hamiltoniana (4.1) [13]. Existe uma grande variedade de métodos para obter estes expoentes mas estes não diferem consideravelmente entre si.

Capítulo 4 – Modelo X-Y.

Abaixo resumiremos alguns valores de expoentes críticos deste modelo obtidos por diferentes pesquisadores (* [29], ** [30], *** [31], **** [32]).

γ	$1.318 \pm 0.010^*$	$1.315 \pm 0.015^{**}$	$1.333 \pm 0.010^{***}$
ν	$0.670 \pm 0.006^*$	$0.673 \pm 0.006^{**}$	$0.678 \pm 0.005^{***}$
α	$-0.02 \pm 0.03^*$	$0.02 \pm 0.02^{**}$	$0.02 \pm 0.05^{****}$

Notemos que os valores dos expoentes críticos diferem pouco entre um autor e outro. Nas análises que faremos mais adiante utilizaremos o valor de $\nu = 0.670 \pm 0.006$. Existem relações universais entre os diferentes expoentes críticos, em total são 4 relações (“scaling laws”) nas quais só dois expoentes são independentes, estas são [20]

Fisher $\gamma = \nu(2 - \eta)$

Rushbrooke $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ (4.6)

Widom $\gamma = \beta(\delta - 1)$

Josephson $\nu d = 2 - \alpha$

aonde d na última relação é a dimensionalidade do espaço. Estas relações são muito importantes devido permitirem conhecer expoentes críticos não calculados, ou impossíveis de calcular em forma direta.

4.6 – Modelo X-Y para supercondutores.

Vimos anteriormente que a supercondutividade pode ser descrita pela teoria de Ginzburg – Landau mediante o uso de um parâmetro de ordem complexo Ψ , da forma $\Psi = |\Psi|e^{i\phi}$. Este parâmetro de ordem pode ser escrito como um vetor no plano de duas componentes. Isto nos leva a considerar o modelo de Ginzburg – Landau como parte da classe dos modelos planares. Devido à hipóteses de universalidade, o modelo X-Y e o modelo de Ginzburg – Landau pertencem à mesma classe. Isto leva ao fato que na região crítica a parte singular da energia livre de Helmholtz do supercondutor possa ser descrita pela forma dada pelo modelo X-Y, isto é (Apêndice C)

$$f_{sig} = H^{\frac{d}{2}} f\left(\frac{t}{H^{\frac{1}{2\nu}}}\right), \quad (4.7)$$

aqui d é a dimensionalidade do sistema e ν o expoente crítico associado à distância de correlação na transição. Este resultado que foi obtido usando idéias de transformações de escala (scaling) e grupo de renormalização, fornece uma expressão para a parte singular da energia livre do modelo X-Y.

Usando a expressão (4.7) da energia livre em (2.29) e (2.30) se calculam as expressões para a magnetização e calor específico. Para a magnetização, vemos que a dependência

de (4.7) com relação a H vem dada tanto pela variável y como pela normalização $H^{\frac{d}{2}}$.

Derivando com relação a H se obtém

$$M = H^{\frac{d}{2}-1} m(y) \quad (4.8)$$

onde $m(y)$ é uma função universal da variável $y = \frac{t}{H^{\frac{1}{2\nu}}}$ dada por

$$m(y) = \frac{d}{2} f(y) - \frac{1}{2\nu} y f'(y) , \quad (4.9)$$

notemos que em (4.9) a derivada de f é com relação a y .

Para o caso do calor específico, a dependência com a temperatura em (4.7) vem dada exclusivamente pela variável y . Derivando se obtém

$$\frac{C_v}{T} = H^{\frac{d-1}{2\nu}} c(y) \quad (4.10)$$

onde $c(y)$ é uma função universal de y dada por

$$c(y) = f''(y) , \quad (4.11)$$

notemos que em (4.11) as derivadas de f são com relação a y .

Devido à hipótese de universalidade, usaremos os expoentes críticos do modelo X-Y da seção anterior para o problema dos supercondutores perto de $H \approx 0$. Para três dimensões as expressões (4.8) e (4.10) ficam

$$M = H^{0.5} m(y) \quad (4.12)$$

$$\frac{C_v}{T} = H^{\frac{3-1}{2\nu}} c(y) \quad (4.13)$$

A equação (4.12) vai ser utilizada para estudar a magnetização do modelo X-Y no capítulo seguinte.

Neste ponto temos duas descrições para o problema das flutuações termodinâmicas, por um lado temos para campos baixos uma descrição baseada no modelo X-Y, por outro lado para campos altos temos a descrição baseada nos níveis de Landau mais baixos

Capítulo 4 – Modelo X-Y.

(LLL). Existe uma região intermediária aonde as duas descrições dizem ter validade. No próximo capítulo faremos um estudo comparativo das duas descrições usando medidas de magnetização de uma amostra de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ para ver qual é o intervalo de validade de cada uma delas.

Capítulo 5

Discussão dos Resultados em
Confronto com os Experimentos

5.1 – Introdução

Nos últimos anos, o estudo das flutuações termodinâmicas na transição entre o estado normal e o estado supercondutor dos SAT tem tido um papel importante no entendimento das propriedades termodinâmicas destes materiais. Na atualidade, há um debate sobre qual é o modelo que melhor consegue descrever estas flutuações. Existem duas linhas principais de pesquisa, a do modelo X-Y 3D e a do LLL. O grupo de pesquisadores que defendem a descrição baseada no modelo X-Y argumentam que este é o formalismo adequado para descrever flutuações em campos magnéticos baixos (abaixo de 1T), inclusive tentam extrapolar sua validade para campos altos acima de 1T mas menores que 10T. Existe evidência experimental para estes argumentos [33, 34, 35]. Por outro lado o grupo de pesquisadores que trabalham com o modelo LLL argumentam que essa descrição é adequada para descrever flutuações em campos magnéticos altos (acima de 1T), conforme evidências experimentais [35, 36, 37, 38]. Segundo estes últimos, o modelo LLL descreve melhor as flutuações em campos altos e confinam a validade do modelo X-Y só para campos baixos. Neste capítulo, faremos um estudo comparativo das duas descrições, usando dados de magnetização obtidos de uma amostra supercondutora de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ para distintos valores de campo magnético aplicado na direção do plano ab . Estes campos vão variar entre 0.05T e 5T. Veremos também qual é o intervalo de validade de cada uma destas descrições.

5.2 – Dados Experimentais

Os dados que discutimos aqui foram medidos em uma amostra de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ de grande qualidade, a qual possui uma transição bem aguda, a qual acontece em um intervalo de temperatura $\Delta T < 300 \text{ mK}$. Esta amostra possui uma temperatura crítica de transição de $T_c = 92.3 \text{ K}$ (a campo zero). As medidas foram feitas com um SQUID comercial e com o campo magnético aplicado paralelo aos planos ab do cristal. “Scans” de 3 cm foram usados. A amostra tinha uma forma triangular com $\approx 3 \text{ mm}$ de altura, colada com graxa de vácuo a uma superfície de plástico suave e limpa paralela ao campo magnético H . O sinal de fundo devido ao suporte da amostra é muito pequeno (menor que 10^{-7} emu para $H = 0.05 \text{ T}$), e é independente da temperatura para um valor fixo de campo magnético aplicado. Uma calibração prévia da posição da amostra com a temperatura, e o uso de uma rotina apropriada para a aquisição dos dados, permitem que a amostra seja centrada durante qualquer experimento no qual a temperatura fique variando. Medidas a “Zero field-cooled” (ZFC) da magnetização vs. temperatura foram obtidas para diferentes campos magnéticos aplicados, estes dados estão apresentados nos gráficos das figuras 5.1 e 5.2.

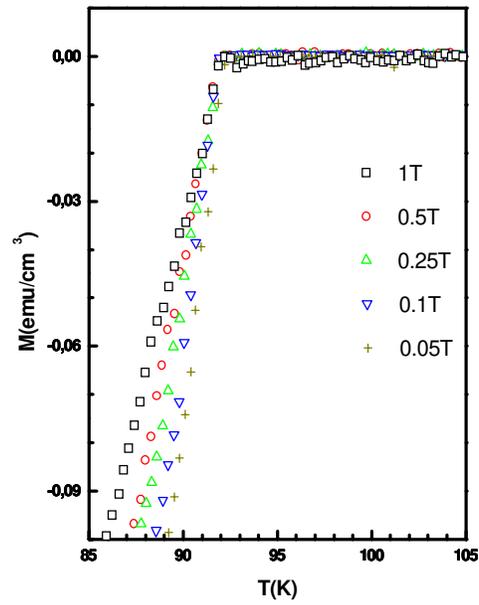


Figura 5.1: Dados experimentais de Magnetização vs. Temperatura para campos magnéticos baixos.

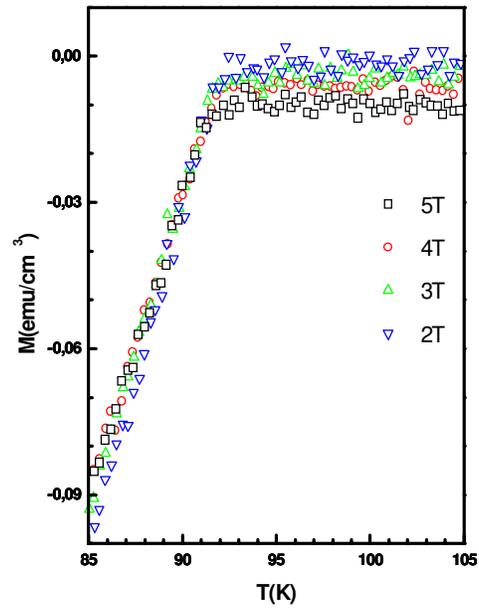


Figura 5.2: Dados experimentais de Magnetização vs. Temperatura para campos magnéticos altos.

Estas medidas foram precedidas de uma descarga oscilante do magneto desde 1T para $T = 130 K$. A magnetização foi lida com intervalos de 0.3 K, desde 80 K até 130 K. As medidas foram realizadas com o campo magnético paralelo às paredes de macla (“twin bondaries”) do cristal. Maiores informações sobre os dados experimentais desta amostra podem ser encontrados em [38].

5.3 - Análises da magnetização para campos baixos.

Nesta seção analisaremos os dados obtidos na seção 5.2 para campos magnéticos baixos. Usaremos para isto as duas descrições X-Y e LLL e as confrontaremos. Para o caso de X-Y usaremos a expressão (4.12), e para o caso de LLL a expressão (3.35). Segundo a expressão (4.12) a variável adequada para que as curvas apresentem

comportamento de escala (“scaling”) é $y = \frac{t}{H^{\frac{1}{2\nu}}}$, onde ν é o expoente crítico associado

à distância de correlação na transição. Nós usaremos o valor de $\nu = 0.670 \pm 0.006$ que é

o valor tirado do modelo X-Y 3D [13]. Esta variável vai ser graficada vs. $\frac{M}{H^{0.5}}$ que é o

parâmetro natural que sai da normalização de (4.12). Fazendo isto com os dados da magnetização para campos baixos se obtém o gráfico da figura 5.3 .

Notemos que para o campo magnético de 1T, o intervalo no gráfico equivale a uma temperatura que varia entre $\approx 78K \rightarrow 97K$. Para o campo de 0.05T, o intervalo no gráfico equivale a uma temperatura entre $\approx 83K \rightarrow 94K$. Deste gráfico podemos tirar

algumas conclusões interessantes. Como era de se esperar os dados para X-Y escalam relativamente bem para campos magnéticos baixos.

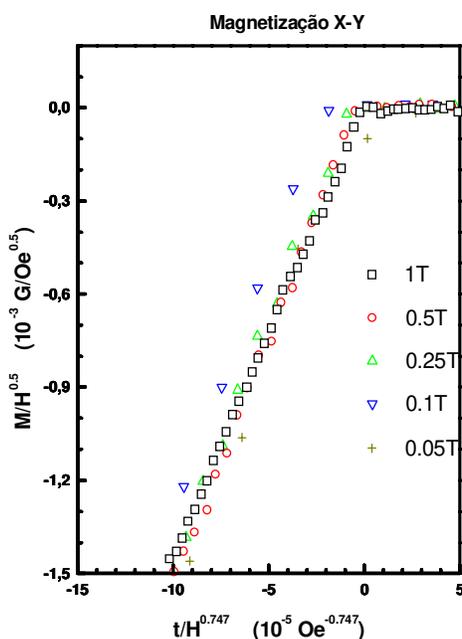


Figura 5.3: “Scaling” da Magnetização do modelo X-Y para campos magnéticos baixos usando temperatura de cruzamento.

Um ponto importante a notar é o fato que a linha de 0.1T não obedece o comportamento de “scaling”. Uma explicação para este comportamento, é um possível desalinhamento da amostra com relação ao campo magnético aplicado na direção ab , já que pequenos desvios do campo magnético com relação ao plano produzem grandes mudanças nas medidas.

Existe um fato importante a notar, que é o seguinte, a temperatura usada para o “scaling” dos dados experimentais no gráfico 5.3, foi obtida do cruzamento das curvas da magnetização do gráfico 5.1, este ponto é usado com bastante frequência por alguns pesquisadores que trabalham com o modelo X-Y. Se fazemos uma análise deixando a

temperatura livre para fitar os dados, obtemos uma melhor descrição do problema. Isto pode ser visto claramente no gráfico 5.4.

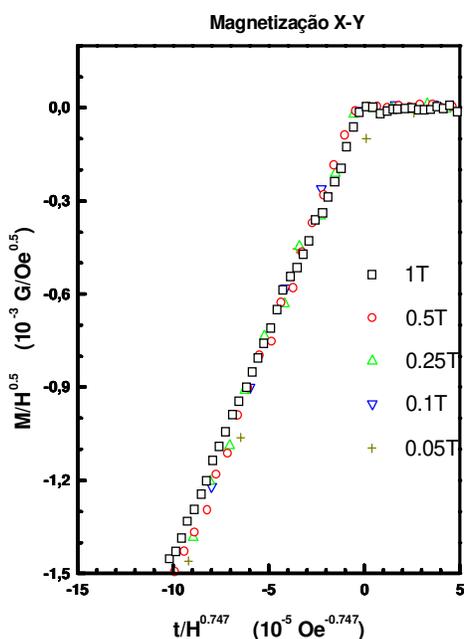


Figura 5.4: “Scaling” da Magnetização do modelo X-Y para campos magnéticos baixos usando temperatura livre.

Estas pequenas variações das temperaturas são aceitáveis devido ao fato que as medidas da magnetização possuem um erro experimental de $300mK$. Estes resultados evidenciam que o “scaling” para campos menores que 1T, usando a descrição X-Y, é excelente. Existem trabalhos que argumentam que o “scaling” X-Y é o adequado para campos baixos [33, 34, 35]. Com nossa análise podemos dizer que efetivamente se observa indícios de “scaling” nesta descrição.

Usaremos agora a expressão (3.35) para estudar o modelo LLL com os dados de campos magnéticos baixos. A variável de “scaling” neste caso é $\frac{T - T_c(H)}{(HT)^{2/3}}$. Para obter um

“scaling” adequado, fazemos o gráfico de $\frac{M}{(HT)^{2/3}}$ (que é a normalização natural da expressão 3.35) vs. $\frac{T - T_c(H)}{(HT)^{2/3}}$, obtendo desta forma a figura 5.5 .

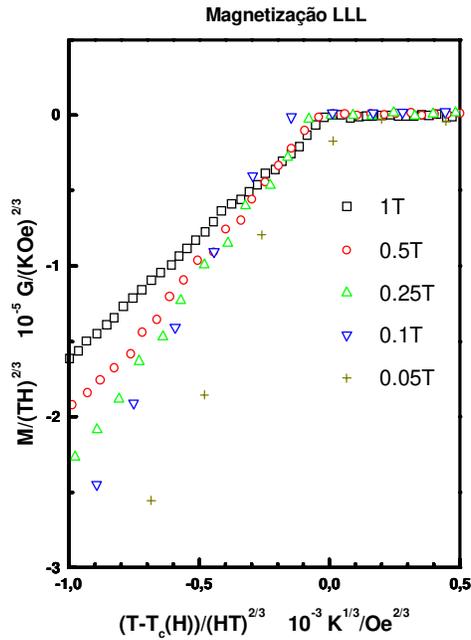


Figura 5.5: Scaling da Magnetização usando LLL para campos magnéticos baixos.

Neste gráfico, a escala para o campo de 1T equivale a um intervalo de temperatura de $\approx 82K \rightarrow 97K$ e de $\approx 90K \rightarrow 94K$ para o campo de 0.05T. Vemos aqui que não existe nenhum tipo de “scaling” usando as variáveis acima definidas, mas isto não é surpreendente, já que a própria teoria LLL argumenta não ser válida para campos magnéticos baixos. Notemos que as inclinações das curvas vão diminuindo progressivamente a medida que o campo magnético aplicado vai aumentando. Existem outros trabalhos que confirmam estes resultados [35, 36, 37, 38]. Para campos

magnéticos baixos vemos que o “scaling” baseado no modelo X-Y fornece uma melhor descrição que a do modelo LLL.

5.4 – Análises da Magnetização para campos altos.

Nesta seção analisaremos os dados para campos magnéticos altos obtidos na seção 5.2. Usaremos as mesmas expressões (4.12) e (3.35) para estes fins, obviamente as variáveis a usar são as mesmas definidas na seção anterior. Usando os dados de campo alto com a descrição do modelo X-Y obtemos a figura 5.6 .

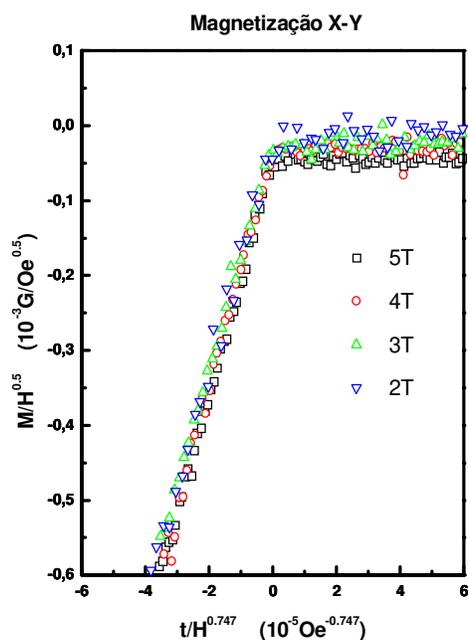


Figura 5.6: Scaling da Magnetização usando X-Y para campos magnéticos altos.

Neste gráfico a escala para o campo de 5T equivale a um intervalo de temperatura de $\approx 73K \rightarrow 109K$ e de $\approx 82K \rightarrow 100K$ para o campo de 2T. Observemos que os dados

não ficaram em uma mesma linha mas formam uma faixa definida, evidenciando que a descrição do modelo X-Y é satisfatória. Este resultado é interessante devido esta teoria não contemplar sua validade para este intervalo de campos magnéticos. Existem trabalhos [34] que evidenciam um “scaling” X-Y perfeito para campos altos, o qual não corroboramos totalmente.

Para a descrição LLL, os dados de campos altos fornecem o seguinte gráfico da figura 5.7 .

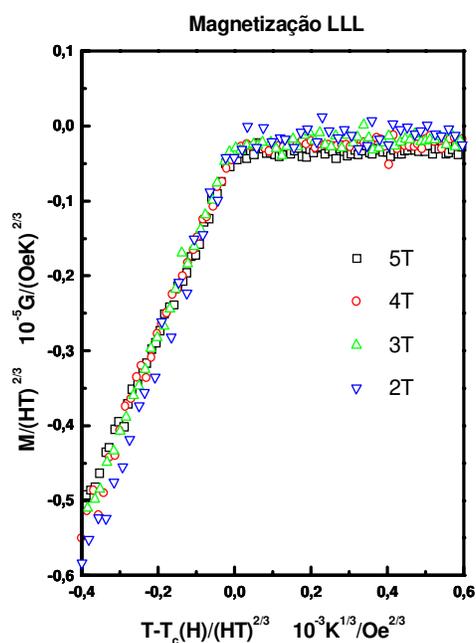
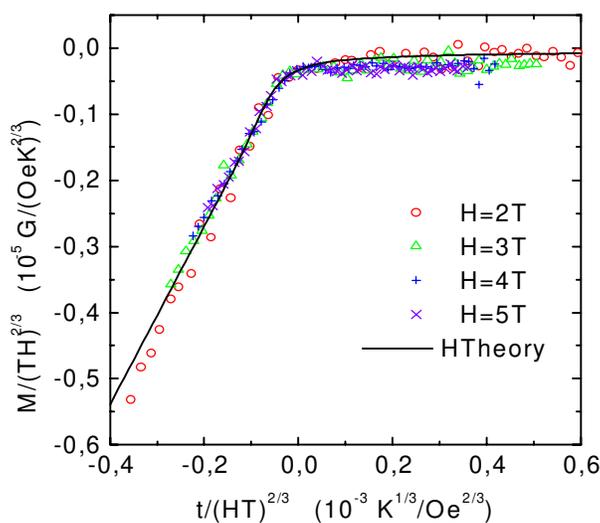


Figura 5.7: Scaling da Magnetização usando LLL para campos magnéticos altos.

Neste gráfico, a escala usada para o campo de 5T equivale a um intervalo de temperatura de $\approx 81\text{K} \rightarrow 110\text{K}$ e de $\approx 86\text{K} \rightarrow 100\text{K}$ para o campo de 2T. Vemos que o “scaling” é evidente já que as linhas não formam uma faixa como no caso X-Y, senão que batem uma sobre as outras formando uma mesma linha, evidenciando assim que as variáveis

utilizadas para este “scaling” são as adequadas para campos altos. Cabe destacar que a linha de 2T já começa a mostrar indícios de não escalar, dando assim uma cota inferior sobre o intervalo de validade do modelo LLL, este estaria confinado para campos acima de 2T. Para temperaturas maiores a 90K (que é quando a linha 2T se separa do grupo) o “scaling” entre 2T e 5T é excelente.

É importante notar uma vantagem que possui o modelo LLL com relação ao modelo X-Y. Esta vantagem provem do fato que a curva da magnetização para LLL foi calculada em forma teórica usando uma aproximação melhor [39], o que ainda não foi feito para o modelo X-Y. Este resultado foi generalizado para uma direção arbitrária do campo magnético aplicado [15], cuja curva teórica na direção do plano *ab* ajusta muito bem os dados experimentais, como vemos a seguir



Magnetization // **ab**

Figura 5.8: Comparação da curva teórica do modelo LLL com os dados experimentais. Cortesia de [38].

Este gráfico evidencia o bom acordo existente entre a teoria LLL e os dados experimentais para campos magnéticos altos, em uma faixa de temperaturas em torno a T_c .

5.5 Discussão do Calor Específico.

Lamentavelmente não possuímos medidas de calor específico para fazer uma análise detalhada, mas podemos nos referir à literatura para comentar sobre os problemas que apresenta o “scaling” no calor específico. Existe um problema fundamental com relação as medidas do calor específico devido à contribuição do “background”. Este “background” é muito difícil de determinar na transição, portanto as medidas das flutuações não possuem uma qualidade desejada. Alguns autores trabalham com a derivada do calor específico [35], argumentando que desta forma o problema de background é diminuído notavelmente. Outro problema das medidas de calor específico é a não existência de uma única escolha da forma do “background” na transição [35].

Como no caso da magnetização, existem discrepâncias no modelo que melhor descreve o “scaling”. Recentemente várias pesquisas foram feitas [33, 35] tratando o calor específico e em muitas delas o “scaling” baseado no modelo X-Y parece ser o mais adequado, embora existam pesquisadores que sustentem o modelo LLL. O argumento principal para que a descrição LLL não funcione corretamente (segundo os simpatizantes do X-Y), é o fato de não considerar a curvatura na região de altas temperaturas da linha de transição H_{c2} . Eles consideram para este efeito uma dependência linear na linha de H_{c2} . Por outro lado se a curvatura de H_{c2} é considerada para calcular $T(H)$, o “scaling” usando

Capítulo 5 – *Discussão dos resultados em confronto com os experimentos.*

LLL é excelente para campos acima de 2T [33, 35]. Segundo os simpatizantes da descrição X-Y não existe nenhuma justificativa teórica para fazer isto, já que os dados foram obtidos com valores de campo magnético entre 0 e 10T. Análises destes trabalhos evidenciam que o “scaling” X-Y é o adequado para o estudo do calor específico, deixando muitas interrogações sobre o modelo LLL para o caso do calor específico.

Capítulo 6

Conclusões

Conclusões

Neste capítulo resumiremos os principais resultados obtidos nesta tese.

Para o estudo dos supercondutores na região de transição foi usada com grande sucesso a teoria de Ginzburg – Landau, esta teoria permitiu trabalhar as flutuações termodinâmicas de uma forma compacta e elegante. Estas flutuações foram estudadas inicialmente mediante a aproximação Gaussiana. Nesta aproximação se demonstrou que quantidades termodinâmicas, como a magnetização e calor específico, apresentavam contribuições acima da temperatura crítica, mas divergentes na transição.

Mediante o uso de uma aproximação melhor, a aproximação de Hartree, demonstramos que esta divergência é eliminada. Nesta aproximação consideramos o limite de altos campos aplicados, que considera só os estados de Landau de mais baixa energia LLL. Nesta aproximação observamos indícios de que as diferentes quantidades termodinâmicas podem ser expressadas mediante uma função universal geralmente complicada. As quantidades calculadas foram estudadas incluindo-se anisotropia de massa ao longo da direção z , que procura simular a situação dos supercondutores de alta temperatura crítica. Neste modelo se estudou a dependência angular da magnetização e calor específico com relação ao campo magnético aplicado.

Na região de campos baixos se calculou, usando conceitos de grupos de renormalização e da hipótese de universalidade, a parte singular da energia livre de Helmholtz, a qual possui um caráter universal.

Capítulo 6 - Conclusões.

Estas duas teorias foram confrontadas em diferentes regiões do diagrama de fase, tanto para campos magnéticos altos ($5T > H > 2T$) como para campos magnéticos baixos ($H \ll 1T$).

Demostramos que para a magnetização em campos magnéticos altos, a descrição baseada no modelo LLL é superior a do X-Y. Para a magnetização em campos magnéticos baixos, a descrição baseada no modelo LLL falha, entretanto a do modelo X-Y fornece uma boa descrição do problema.

Para o caso do calor específico existem evidências experimentais de que o modelo que melhor descreve estas flutuações é o X-Y, tanto para campos magnéticos altos como para os baixos.

Referências

- [1] – H. Kamerlingh Onnes, Leiden Comm. **120b**, **122b**, **124c** (1911).
- [2] – F. and H. London, Proc. Roy. Soc. (London) **A149**, 71 (1935).
- [3] – V. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksperim. I Teor. Fiz. **20**, 1064 (1950).
- [4] – L. P. Gor'kov, Zh. Eksperim. I Teor. Fiz. **36**, 1918 (1959) [Sov. Phys. –JETP **9**, 1364 (1959)].
- [5] – A. A. Abrikosov, Zh. Eksperim. I Teor. Fiz. **32**, 1442 (1957) [Sov. Phys. –JETP **5**, 1174 (1957)].
- [6] – J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [7] – G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. **B64**, 189 (1986).
- [8] – Michael Cyrot, Davor Pavuna, Introduction to Superconductivity and High- T_c Materials, by World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (1992).
- [9] – W. E. Lawrence and S. Doniach, in E. Kanda (ed), Proc. 12th Int.Conf. Low Temp. Phys., Kyoto, Japan, p.631 (1970) [Keigaku, Tokyo, (1971)].
- [10] – Gerald Burns, High-Temperature Superconductivity, An Introduction, by Academic Press, Inc. (1992).
- [11] – G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, V. M. Vinokur, "Vortices in high-temperature superconductors" Reviews of Modern Physics, **66**, 4 (1994).
- [12] – Michael Tinkham, Introduction to Superconductivity, Second Edition, McGraw-Hill Inc. (1996).

- [13] – D. D. Betts, in Phase Transition and Critical Phenomena, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic, New York), **V.3** (1974).
- [14] – Z. Tesanovic and A. V. Andreev, Phys. Rev. B **49**, 4064 (1994).
- [15] – J. M. Calero, J. C. Granada, E. Z. da Silva, Phys. Rev. B **56**, 10, 6114 (1997).
- [16] – E. Z. da Silva and S. Salem – Sugui Jr, Physica **C 235**, 1919 (1994).
- [17] – E. Z. da Silva and S. Salem – Sugui Jr, Physica **C 257**, 173 (1996).
- [18] – Katerina Moloni, Mark Friesen, Shi Li, Victor Souw, P. Metcalf, Litang Hou and M. McElfresh, Phys. Rev. Lett. **78**, 16, 3173 (1997).
- [19] – Z. Tesanovic, Phys. Rev. B **51**, 16204 (1995).
- [20] – Kerson Huang, Statistical Mechanics, Second Edition, John Wiley and Sons, (1987).
- [21] – R. E. Prange Phys. Rev. B. **1**, 5, 2349 (1970).
- [22] – Marcelja S., Phys. Lett. **28A** 180-1 (1968) and Phys. Rev. B **1** 2351-3 (1970)
- [23] – Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, Solid State Physics, page 331, by Saunders College Publishing (1976).
- [24] – Salman Ullah and Alan T. Dorsey, Phys. Rev. B. **44**, 1, 262 (1991).
- [25] – Petter Minnhagen, “The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films”, Reviews of Modern Physics, **59**, 4 (1987).
- [26] – Maturaba, T., and H. Matsuba, Prog. Theor. Phys. **16**, 416 (1956).
- [27] – Kosterlitz, J. M., and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [28] – Kadanoff, L. P. “Proceeding of 1970 Varenna Summer School on Critical Phenomena”, ed. M. S. Green (Academic Press N.Y.) (1971).
- [29] – M. Ferer, M. A. Moore, and M. Wortis, Phys. Rev. B **8**, 5205 (1973).
- [30] – P. Pfeuty, D. Jasnow, and M. E. Fisher, Phys. Rev. B **10**, 2088 (1974).
- [31] – J. Rogiers, M. Ferer, and E. R. Scaggs, Phys. Rev. B **19**, 1644 (1979).
- [32] – D. D. Betts, in Phase Transition and Critical Phenomena, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic, New York), **V.3**, p.647 and 621 (1974).

- [33] – Neil Overend, Mark A. Howson, Ian D. Lawrie, Stuart Abell, P. J. Hirst, Chen Changkang, Shamina Chowdbury, John W. Hodby, S. E. Inderhees and Myron B. Salomon, Phys. Rev. B, **54**, 13 9499 (1996).
- [34] – M. B. Salomon, Jing Shi, Neil Overend and M. A. Howson, Phys Rev. B. **47**, 9 5520 (1993).
- [35] – M. Roulin, A. Junod and E. Walker, Physica C **260**, 259 (1996).
- [36] – N. Kobayashi, K. Egowa, K. Miyoshi, H. Iwasaki, H. Ikeda and R. Yoshizaki, Physica C **219**, 265 (1994).
- [37] – B. Zhou, J. Buan, Stephen Pierson, C. C. Huang, Oriol T. Valls, J. Z. Liu and R. N. Shelton, Phys. Rev. B. **47**, 11 631 (1993).
- [38] – S. Salem – Sugui Jr and E. Z. da Silva, Solid State Comm. **90**, 10 pp 647 (1994).
- [39] – Z. Tesanovic, Phys. Rev. B **44**, 12635 (1991).

Apêndice A

Apêndice A

Neste apêndice mostraremos a solução da integral gaussiana. A integral gaussiana é obtida considerando somente o termo $|\Psi|^2$ na expansão da energia livre de Landau. Esta integral tem a característica de possuir solução exata. A integral vem representada da seguinte forma

$$I = \int (D\phi) \exp \int (dx) \left[-\frac{1}{2} |\nabla\phi(x)|^2 - \frac{1}{2} r_0 \phi^2(x) + \phi(x) \eta(x) \right], \quad (\text{A.1})$$

a qual pode ser rescrita da forma

$$I = \int (D\phi) \exp \left[-\frac{1}{2} (\phi, K\phi) + (\eta, \phi) \right]. \quad (\text{A.2})$$

Esta última integral escreve a integral em x de (A.1) como um produto interior, com $K \equiv r_0 - \nabla^2$. Considerando a integral elementar (completando o quadrado)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\phi}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} K\phi^2 + \eta\phi \right) = \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left(\frac{\eta^2}{2K} \right) \quad (\text{A.3})$$

vemos que (A.2) pode ser generalizada a

$$I = \int (D\phi) \exp \left[-\frac{1}{2} (\phi, K\phi) + (\eta, \phi) \right] = (\det K)^{-1/2} \exp \frac{1}{2} (\eta, K^{-1}\eta), \quad (\text{A.4})$$

onde $\det K$ é o produtório dos autovalores do operador K . Esta fórmula é invariante mediante transformações unitárias do vetor ϕ , que geralmente transforma K em uma matriz diagonal.

Apêndice B

Apêndice B.

Neste apêndice desenvolveremos os cálculos que levaram a forma da expressão (3.6) para a energia livre de Helmholtz.

Para chegar à expressão (3.6) é preciso resolver a equação linearizada de Ginzburg – Landau (2.9) quando nesta se encontram presentes a anisotropia de massa da amostra e a dependência angular do campo magnético aplicado.

A anisotropia de massa é introduzida por meio do tensor de massa (3.4), com isto a expressão (2.9) fica

$$\alpha\Psi - \frac{\hbar^2}{4m_{ab}} \nabla_{\perp}^2 \Psi - \frac{\hbar^2}{4m_c} \nabla_{\parallel}^2 \Psi + \frac{1}{4m_{ab}} \left(\frac{4e^2 A_y^2}{c^2} - \frac{4e\hbar A_y}{ic} \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi = 0 \quad , \quad (\text{B.1})$$

onde ∇_{\perp} e ∇_{\parallel} são os Laplacianos no plano ab e c respectivamente, A_y representa a nossa escolha de campo magnético aplicado. Neste caso A_y vem dada pela escolha (3.5). Introduzindo A_y em (B.1) e usando $\Psi = e^{ik_y y} \Psi^*$ como função tentativa para a solução, obtemos

$$\alpha\Psi^* - \frac{\hbar^2}{4m_{ab}} \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{4m_{ab}} \Psi^* - \frac{\hbar^2}{4m_c} \frac{d^2 \Psi^*}{dz^2} + \frac{1}{4m_{ab}} \left(\frac{4e\hbar H k_y}{c} (z \sin \theta - x \cos \theta) + \frac{4e^2 H^2}{c^2} (x \cos \theta - z \sin \theta)^2 \right) \Psi^* = 0 \quad . \quad (\text{B.2})$$

Esta equação diferencial pode ser separada se usarmos uma substituição adequada, esta vem dada pela relação

$$\begin{pmatrix} x' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ a \sin \theta & b \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ z \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Apêndice B – Expressão da energia livre de Helmholtz com anisotropia.

com a qual obtemos as seguintes relações para as derivadas segundas de x e z

$$\frac{d^2}{dx^2} = \cos^2 \theta \frac{d^2}{dx'^2} + 2a \sin \theta \cos \theta \frac{d^2}{dz'dx'} + a^2 \sin^2 \theta \frac{d^2}{dz'^2} , \quad (\text{B.4})$$

e

$$\frac{d^2}{dz^2} = \sin^2 \theta \frac{d^2}{dx'^2} - 2a \sin \theta \cos \theta \frac{d^2}{dz'dx'} + b^2 \cos^2 \theta \frac{d^2}{dz'^2} . \quad (\text{B.5})$$

Introduzindo (B.4) e (B.5) em (B.2), vemos que é preciso ter os valores de $a = 1$ e

$b = \frac{m_c}{m_{ab}}$ para eliminar as derivadas segundas cruzadas. Já tendo eliminadas as derivadas

parciais cruzadas usamos outra função tentativa em (B.2), da forma $\Psi^* = e^{ik'_z z} \Psi'$, obtendo

$$\begin{aligned} & \alpha \Psi' - \frac{\hbar^2 \cos^2 \theta}{4m_{ab}} \frac{d^2 \Psi'}{dx'^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{4m_{ab}} \Psi' + \frac{\hbar^2 a^2 \sin^2 \theta k'_z \Psi'}{4m_{ab}} \\ & - \frac{\hbar^2 \sin^2 \theta}{4m_c} \frac{d^2 \Psi'}{dx'^2} + \frac{\hbar^2 b^2 \cos^2 \theta k'_z \Psi'}{4m_c} - \frac{1}{4m_{ab}} \left(\frac{4e\hbar H k_y x'}{c} - \frac{4e^2 H^2 x'^2}{c^2} \right) \Psi' = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Esta equação pode ser expressa na forma

$$\begin{aligned} & - \left(\cos^2 \theta + \frac{m_{ab}}{m_c} \sin^2 \theta \right) \frac{d^2}{dx'^2} + \left(\frac{H 2\pi}{\Phi_0} \right)^2 (x' - x_0)^2 = \\ & \frac{1}{\xi_{ab}^2} - k_z'^2 \left(\sin^2 \theta + \frac{m_c}{m_{ab}} \cos^2 \theta \right) \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Usando aqui os mesmos procedimentos do capítulo 2, obtemos uma condição para o campo magnético aplicado, que é

$$H = \frac{\Phi_0}{2\pi} \frac{1}{(2n+1)} \frac{\left(\frac{1}{\xi_{ab}^2} - k_z'^2 \left(\sin^2 \theta + \frac{m_c}{m_{ab}} \cos^2 \theta \right) \right)}{\left(\cos^2 \theta + \frac{m_{ab}}{m_c} \sin^2 \theta \right)^{1/2}} . \quad (\text{B.8})$$

Apêndice B – Expressão da energia livre de Helmholtz com anisotropia.

Para calcular neste caso o campo crítico H_{c2} (com dependência das massas e o ângulo de incidência do campo magnético), fazemos $k'_z = 0$ e $n = 0$ em (B.8), obtendo

$$H_{c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi} \frac{\left(\frac{1}{\xi_{ab}^2} \right)}{\left(\cos^2 \theta + \frac{m_{ab}}{m_c} \sin^2 \theta \right)^{1/2}} \quad (\text{B.9})$$

que pode ser escrito da forma

$$\left(\frac{H_{c2} \sin \theta}{H_{c2//ab}} \right)^2 + \left(\frac{H_{c2} \cos \theta}{H_{c2//c}} \right)^2 = 1 . \quad (\text{B.10})$$

Esta equação relaciona o campo crítico H_{c2} em qualquer direção de campo magnético aplicado com os campos críticos nas direções $//ab$ e $//c$. Notemos que para o caso de $\theta = 0^0$ e $\theta = 90^0$ o campo crítico H_{c2} se reduz a $H_{c2//c}$ e $H_{c2//ab}$ respectivamente.

Para obter (3.6) é preciso usar (2.21) com a solução (B.8). Fazendo isto, (2.21) pode ser expressa como

$$Z = \int D\Psi e^{-\frac{1}{k_B T} \left\{ \alpha + \frac{\hbar^2}{4m_{ab}} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{4He}{\hbar c} \left(\cos^2 \theta + \frac{m_{ab}}{m_c} \sin^2 \theta \right)^{1/2} + k^2 \left(\sin^2 \theta + \frac{m_c}{m_{ab}} \cos^2 \theta \right) \right] \right\} \int d^3r |\Psi|^2} \quad (\text{B.11})$$

que é a função de partição para o caso anisotrópico e com dependência angular.

Usando a integral gaussiana do Apêndice A em (B.11), e utilizando também a relação estatística entre função de partição e a energia livre de Helmholtz (2.25), obtemos

$$F = -\frac{k_B T e H V g(\theta)}{2\hbar c \pi^2} \int dk \sum_{n=0}^{\infty} \ln \left(\frac{\pi k_B T}{\tilde{\alpha}_\theta + 2n\hbar_\theta + \xi_{ab}^2(0)g(\theta)k^2} \right) \quad (\text{B.12})$$

onde

Apêndice B – Expressão da energia livre de Helmholtz com anisotropia.

$$h_{\theta} = \xi_{ab}^2(0) \left(\frac{2He}{\hbar c} \right) \sqrt{\frac{m_{ab}}{m_c}} g(\theta)^{1/2} , \quad (\text{B.13})$$

$$g(\theta) = \left(\sin^2(\theta) + \frac{m_c}{m_{ab}} \cos^2(\theta) \right) , \quad (\text{B.14})$$

$$\tilde{\alpha}_{\theta} = \tilde{\alpha} + h_{\theta} , \quad (\text{B.15})$$

e

$$\xi_{ab}^2 = \frac{\hbar^2}{4m_{ab}a_0} , \quad (\text{B.16})$$

que são as expressões (3.6) até (3.10) respectivamente.

Apêndice C

Apêndice C

Neste apêndice desenvolveremos o formalismo que leva à expressão da parte singular da energia livre de Helmholtz (4.6).

A forma mais geral da Hamiltoniana do modelo de spins, para uma rede quadrada em n dimensões, pode ser descrita por

$$E\{s\} = K_1 \sum_{i=1}^n s_i + K_2 \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + K_3 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} s_i s_j + K_4 \sum_{\langle\langle i,j,k \rangle\rangle} s_i s_j s_k + \dots, \quad (\text{C.1})$$

onde $E\{s\}$ corresponde à Hamiltoniana para uma certa configuração de spins $\{s\}$, $\langle i, j \rangle$ corresponde a interações entre primeiros vizinhos, $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ corresponde a interações entre segundos vizinhos, $\langle\langle i, j, k \rangle\rangle$ corresponde as interações entre os primeiros tripletos, etc. Os K_α são as constantes de acoplamento entre os spins da rede. Obviamente esta Hamiltoniana satisfaz a seguinte relação

$$\sum_{\{s\}} E\{s\} = 0. \quad (\text{C.2})$$

Imaginemos que estamos interessados em construir uma nova rede a partir da rede original, chamada rede por blocos. Esta rede consiste em dividir a rede inicial em blocos de iguais dimensões por meio de uma transformação de escala $x \rightarrow x' = \frac{x}{l}$, onde l é alguma distância característica da rede inicial. Esta rede tem que cobrir por completo a rede inicial e vai possuir um número $N' = l^{-d} N$ de spins. Um exemplo disto, para duas dimensões, se mostra na figura C.1 .

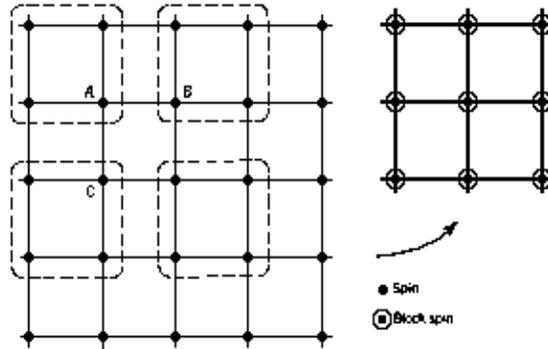


Figura C.1: Transformação da rede de spins original para a rede por blocos.

Pensemos em uma função que tome todos os spins de um determinado bloco (por exemplo C) da rede original, e designe para cada um deles uma variável de spins s'_c , isto é

$$s'_c = f\{s\}_c \quad , \quad (C.3)$$

onde a função f em geral não é conhecida mas pode ser por exemplo de “majority rule function”. Esta função vai mapear (dependendo da configuração $\{s\}_B$ de cada bloco) a rede original de spins em um conjunto de valores de s'_B (de 1 ou -1).

É conveniente definir

$$P_B = \delta(s', f\{s\}_B) \quad , \quad (C.4)$$

onde δ é a delta de Kronecker. Esta função indica se uma certa configuração de spins $\{s\}_B$ fornece o valor de $s'_B = 1$ ou $s'_B = -1$.

Fazendo o produtório dos P_B obtemos

$$P\{s', s\} = \prod_B P_B \quad . \quad (C.5)$$

Apêndice C – Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.

Esta função, chamada de função peso, possui as seguinte propriedades:

$$P\{s', s\} \geq 0 \quad (\text{C.6})$$

$$\sum_{\{s\}} P\{s', s\} = 1 \quad (\text{C.7})$$

Considerando isto, podemos escrever a função de partição do sistema da seguinte forma

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-E\{s\}} = \sum_{\{s'\}} \sum_{\{s\}} P\{s', s\} e^{-E\{s\}} . \quad (\text{C.8})$$

Por outro lado, definimos a Hamiltoniana da rede por blocos como

$$e^{-E'\{s'\}} \equiv e^{N\mu} \sum_{\{s\}} P\{s', s\} e^{-E\{s\}} , \quad (\text{C.9})$$

onde N é o número de spins da rede original e μ tem que ser escolhido de tal forma a satisfazer a relação

$$\sum_{\{s'\}} E'\{s'\} = 0 . \quad (\text{C.10})$$

Neste caso, E' tem a mesma forma funcional que E , só que agora as constantes de acoplamento K_α são substituídas por novas constantes K'_α . Invertendo (C.9) obtemos

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-E\{s\}} = e^{-N\mu} \sum_{\{s'\}} e^{-E'\{s'\}} \quad (\text{C.11})$$

que é a função de partição do sistema na rede por blocos. A transformação de E para E' é chamada de transformação de grupo de renormalização (TGR).

No limite de sistemas infinitos, as diferentes configurações $\{s\}$ e $\{s'\}$ são as mesmas, portanto em uma TGR as únicas variáveis que mudam são as constantes de acoplamento K_α . Devido a este fato é comum representar uma TGR da forma

$$K'_\alpha = R_\alpha(K_1, K_2, \dots) , \quad (\text{C.12})$$

Apêndice C – Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.

onde R_α é um operador que de alguma forma transforma as constantes de acoplamento K em K' .

Conhecendo a energia livre de Helmholtz por spin do sistema $f(K)$, podemos escrever

$$e^{-Nf(K)} = \sum_{\{s\}} e^{-E\{s\}} \quad (\text{C.13})$$

que é simplesmente a relação de Boltzmann da energia livre com a função de partição.

Para o sistema de blocos de spins temos

$$e^{-N'f(K')} = \sum_{\{s'\}} e^{-E'\{s'\}} \quad , \quad (\text{C.14})$$

onde N' é o número de spins no sistema por blocos. Usando as relações (C.11), (C.13) e (C.14) podemos escrever

$$f(K) = \mu(K) + l^{-d} f(K') \quad . \quad (\text{C.15})$$

Esta relação mostra como se comporta a energia livre de Helmholtz do sistema ao aplicar uma TGR.

Pontos fixos

As constantes de acoplamento que surgem de iterações sucessivas de TRG obedecem à seguinte relação

$$K^{n+1} = R(K^n) \quad , \quad (\text{C.16})$$

onde n representa o número de vezes que foi aplicado uma TGR.

Um ponto fixo no espaço K é um ponto K^* que satisfaz à seguinte relação

$$K^* = R(K^*) \quad . \quad (\text{C.17})$$

Apêndice C – Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.

Este ponto (se existe) é alcançado geralmente depois de muitas aplicações de TGR, isto é $n \rightarrow \infty$. Neste ponto, o sistema fica invariante quando aplicamos uma transformação de escala, o que significa que a distância de correlação é zero ou ∞ . O caso da distância de correlação infinita representa um ponto crítico (transição de fase).

Estudaremos agora o comportamento do sistema perto do ponto crítico. Fazendo uso de (C.16) e (C.17) escrevemos a relação

$$K^{n+1} - K^* = R(K^n) - K^* . \quad (\text{C.18})$$

Quando $n \rightarrow \infty$, $K^n \approx K^*$ e pode-se escrever $R(K^n)$ como

$$R(K^n) = R(K^*) + W(K^n - K^*) \quad (\text{C.19})$$

que é uma série de Taylor ao redor do ponto K^* aonde supomos que os termos com potências maiores não são relevantes. Neste caso W esta dada por

$$W_{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial R_\alpha(K)}{\partial K_\beta} \right|_{K=K^*} . \quad (\text{C.20})$$

Usando (C.19) em (C.18) obtemos

$$K^{n+1} - K^* = W(K^n - K^*) . \quad (\text{C.21})$$

Neste ponto é interessante notar que é conveniente trabalhar com variáveis que não mudem ao aplicar uma TGR. Para achar estas variáveis é preciso resolver o sistema de valores próprios

$$\phi W = \lambda \phi . \quad (\text{C.22})$$

Tendo resolvido (C.22) as variáveis ficam definidas como

$$v^n = \sum_\alpha \phi_\alpha (K^n - K^*)_\alpha , \quad (\text{C.23})$$

Apêndice C – Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.

que são as projeções dos vetores $(K^n - K^*)$ na base dos ϕ . As variáveis assim definidas não mudam em uma TGR, como mostraremos a seguir

$$\begin{aligned} v^{n+1} &= \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} (K^{n+1} - K^*)_{\alpha} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} W_{\alpha\beta} (K^n - K^*)_{\beta} \\ &= \lambda \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} (K^n - K^*)_{\alpha} = \lambda v^n . \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

Vemos que em uma TGR as variáveis assim definidas só são rescaladas por um fator λ . Como uma TGR incrementa a unidade de longitude por um fator l , esperamos que λ tenha a forma

$$\lambda = l^{D_{\lambda}} \quad (\text{C.25})$$

onde D_{λ} está associada à dimensionalidade do fator λ .

Perto do ponto crítico é preferível trabalhar com as variáveis definidas em (C.23), portanto a expressão (C.15) para a energia livre de Helmholtz fica

$$f(v_1, v_2, \dots) = \mu(v_1, v_2, \dots) + l^{-d} f(\lambda_1 v_1, \lambda_2 v_2, \dots) . \quad (\text{C.26})$$

Não temos uma razão em particular para supor que μ seja singular, portanto vamos supor μ regular e identificaremos o segundo termo da direita como a parte singular da energia livre.

Aplicamos isto para o caso em que temos só dois campos relevantes

$$v_1 = H \quad \lambda_1 = l^{D_H} \quad (\text{C.27})$$

e

$$v_2 = t \quad \lambda_2 = l^{D_t} , \quad (\text{C.28})$$

com isto podemos escrever para a parte singular

$$f_{sig} = l^{-d} f(l^{D_H} H, l^{D_t} t) . \quad (\text{C.29})$$

Apêndice C – Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.

Neste ponto, escolhendo como fator de escala $l = |t|^{-1/D_t}$, obtemos

$$f_{sig} = t^{d/D_t} f\left(\frac{H}{t^{D_H/D_t}}\right). \quad (C.30)$$

Isto significa escolher l (que representa a largura dos blocos) da ordem da distância de correlação. Fazendo isto l desaparece da expressão (C.29), ficando só variáveis que dependem das estruturas microscópicas do problema.

Para poder associar os expoentes d/D_t e D_H/D_t com os expoentes críticos, fazemos a seguinte argumentação: Ao aplicar sucessivas TGR chegaremos a um ponto no qual a distância de correlação vai ser da ordem do comprimento dos blocos, portanto estes blocos ficarão não correlacionados. Este ponto deve corresponder a uma certa temperatura t_0 que não pode depender da temperatura inicial. Suponhamos agora que começemos o processo em uma certa temperatura t e cheguemos a t_0 depois de muitas TGR, então

$$t_0 = l^{nD_t} t. \quad (C.31)$$

Notemos que neste ponto $\xi = l^n$, logo usando (C.31) obtemos

$$\xi \approx t^{-1/D_t}. \quad (C.32)$$

Como a distância de correlação na transição diverge da forma

$$\xi \approx |t|^{-\nu} \quad (C.33)$$

Apêndice C – Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.

tiramos que $\nu = 1/D_t$, e junto com as relações de “scaling” podemos escrever a parte singular da energia livre de Helmholtz como

$$f_{sig} = t^{2-\alpha} f\left(\frac{H}{t^{2\nu}}\right). \quad (C.34)$$

Esta expressão é uma das muitas expressões possíveis que pode-se obter dependendo da escolha do fator de escala l . Como exemplo, se escolhemos em (C.29) o fator de escala $l = |H|^{-1/D_H}$ e o introduzimos na expressão (C.29) obtemos

$$f_{sig} = H^{d/D_H} f\left(\frac{t}{H^{D_t/D_H}}\right), \quad (C.35)$$

que é outra forma de expressar a parte singular da energia livre de Helmholtz. Como no caso anterior, podemos usar as relações entre d/D_t e D_H/D_t e os expoentes críticos para deixar (C.35) da forma

$$f_{sig} = H^{d/D_H} f\left(\frac{t}{H^{\frac{1}{2\nu}}}\right). \quad (C.36)$$

Esta expressão que é equivalente a (C.34) é muito usada pelos físicos experimentais, portanto usaremos (C.36) para analisar os dados experimentais do modelo X-Y.

É importante notar que os pontos K^* definem uma hipersuperfície chamada de “superfície crítica”, qualquer ponto que fique nesta superfície vai se aproximar ao ponto crítico mediante aplicações sucessivas de TGR. Os pontos que ficam fora desta superfície vão se afastar do ponto crítico. Como cada ponto K representa um sistema físico, qualquer sistema físico que se encontre na superfície crítica vai pertencer à mesma

Apêndice C – *Expressão de Scaling para a Energia Livre de Helmholtz.*

classe universal, compartilhando os mesmos expoentes críticos. Outro ponto importante a ressaltar é que os expoentes críticos para um ponto fixo estão relacionados diretamente com os autovalores da matriz W .