

## A TEORIA BCS DA SUPERCONDUTIVIDADE

Em 1957, J. Bardeen, L. Cooper e J.R. Schrieffer formularam uma teoria quântica para os supercondutores. A concordância com as propriedades microscópicas observadas nesses materiais foi tão bem sucedida que esses autores receberam o prêmio Nobel de Física em 1972 pelo que ficou conhecido como a teoria BCS da supercondutividade.

No Capítulo anterior observou-se que, para um condutor normal, o estado fundamental do gás de elétrons a uma temperatura  $T = 0$ , é representado por uma esfera de Fermi no espaço do vetor de onda  $\mathbf{k}$ . Os elétrons devem preencher todos os estados disponíveis até um valor máximo de energia  $\epsilon_F$  de todos os estados acima desse permanecem vazios. Nesse caso, um estado excitado pode ser formado elevando-se um elétron imediatamente acima da superfície da esfera de Fermi. A teoria BCS mostra que, a partir de uma interação atrativa apropriada entre elétrons, o novo estado fundamental, a uma temperatura  $T = 0$ , é supercondutor. Os orbitais próximos da energia de Fermi  $\epsilon_F$  devem ser preenchidos de modo semelhante ao fornecido pela distribuição de Fermi-Dirac. Entretanto, a característica principal da teoria BCS é que estes orbitais sejam ocupados aos pares. Se um orbital com vetor de onda  $\mathbf{k}$  e spin por cima for ocupado, então o orbital com vetor de onda  $-\mathbf{k}$  e spin para baixo também será ocupado.

De acordo com a teoria BCS, esses pares de elétrons podem ser formados em determinadas condições, definem um sistema de partículas denominadas de pares de Cooper que possuem spins nulos e muitas outras propriedades atribuídas aos bósons. Os pares de Cooper são formados à baixas temperaturas devido a uma interação entre os elétrons e os íons positivos de rede cristalina. Essa interação cria uma deformação local que se propaga no cristal, junto com o elétron, como uma perturbação mecânica, na forma de um fônon como mostrado na figura 01.

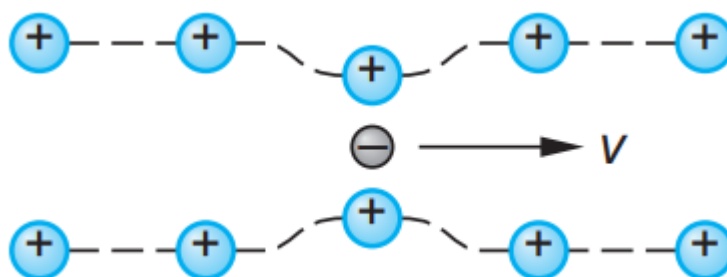


Figura 1: Deformação local de uma rede cristalina devido ao movimento de um elétron

A deformação da rede cristalina aumenta a concentração local de cargas positivas, que acaba por atrair outro elétron. Dessa forma, os dois elétrons acabam sendo atraídos mutuamente, por intermédio do fônon associado à deformação local. A partícula composta pelos dois elétrons e o fônon é o que se denomina par de Cooper. A energia máxima que pode ser transferida de um elétron para o outro elétron num par de Cooper por intermédio de fônon é da ordem da energia característica de fônon dada por:

$$\epsilon_D = k_B \Theta_D \quad (1)$$

Onde  $\Theta_D$  é a temperatura de Debye e  $k_B$  é a constante de Boltzman. Tipicamente,  $\Theta_D \cong 10^2 \text{K}$  enquanto que a temperatura de Fermi é  $T_F \cong 10^5 \text{K}$ . Assim, a energia de fônon  $\epsilon_D = k_B \Theta_D$  é muito menor do que a energia de Fermi  $\epsilon_D = k_B T_F$ .

## A TEORIA BCS DA SUPERCONDUTIVIDADE

O Valor esperado  $\langle V_{ep} \rangle = -F$  do potencial atrativo entre os elétrons  $l$  e  $p$  em um par de Cooper é uma quantidade importante na interpretação quântica da supercondutividade. De acordo com a teoria BCS, a existência de estados de pares ligados será possível somente para pequenos valores da quantidade positiva  $F$ . Nesse caso e para  $T=0$ , a teoria BCS prevê que a energia de ligação entre os elétrons num par de Cooper é

$$E_B = 2\varepsilon_D e^{-2/R_0 F} \quad (2)$$

Onde  $R_0$  é a densidade numérica de partículas  $\rho$  por unidade de energia,

$R(\varepsilon) = \frac{3}{2} \rho \frac{\varepsilon^{1/2}}{\varepsilon_F^{3/2}}$  definida no capítulo anterior, calculada para  $\varepsilon = \varepsilon_F$  isto é,

$$R_0 = R(\varepsilon) = \frac{3\rho}{2\varepsilon_F} \quad (3)$$

A equação (2). Mostra que a energia de ligação  $E_B$  pode ser muito menor do que a energia  $\varepsilon_D$  característica de fônon. Este fato é fundamental na supercondutividade pois, como se sabe, a temperatura crítica de transição  $T_c$ , que é da ordem de  $T_b = \frac{E_b}{k_b}$  É usualmente 100 vezes menor do que a temperatura de Debye  $\theta_D = \frac{\varepsilon_D}{k_b}$

A teoria BCS prevê que, no estado fundamental a uma temperatura  $T=0$ , existem vários pares de Cooper ocupando estados numa cama em torno da superfície da esfera de Fermi. Um único elétron do par tem uma energia  $E$ , medida relativamente ao estado fundamental, dada por:

$$E_p = \sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}, \quad (4)$$

onde  $\varepsilon_p = p^2/2m$  e

$$\Delta = 2\varepsilon_D e^{-1/R_0 F} \quad (5)$$

Quando um par de Cooper se rompe, dois elétrons são excitados e a menor energia envolvida na excitação é um “gap” de energia dado por

$$\varepsilon_g = 2\Delta = 4\varepsilon_D e^{-1/R_0 F} \quad (6)$$

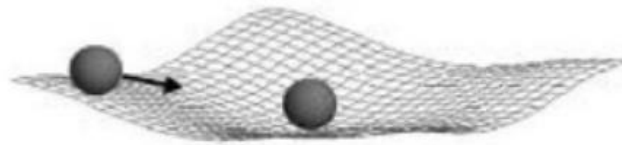


Figura 2: Representação da atração entre elétrons na formação dos pares de Cooper

## A TEORIA BCS DA SUPERCONDUTIVIDADE

Diferentemente do caso de um condutor normal, mostrado na figura (3), no supercondutor não existe nenhum estado de energia disponível na região do “gap” de energia.

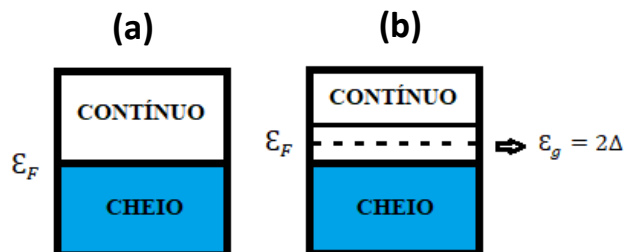


Figura 3: Estado fundamental a uma temperatura  $T=0$  (a) para um condutor normal e (b) para um supercondutor

Entretanto, assim como no condutor normal, existe um contínuo de estados acima do “gap” de energia tipicamente, observa-se que  $\epsilon_g \cong 10^{-4}\epsilon_F$ . O “gap” de energia é responsável pelas características incomuns de supercondutores, como a supercorrente e o efeito Messier.

Dentre os atributos da teoria BCS, ela leva em conta também a natureza cooperativa do emparelhamento dos pares do Cooper. Quando  $T>0$ , um único elétron é termicamente excitado para além da superfície da esfera de Fermi. Por causa do princípio de Pauli, esses estados ficam indisponíveis para a formação dos estados de pares. Quando a temperatura sobe. Aparece um bloqueio cooperativo para a formação dos estados ligados, tornando a energia de ligação  $E_b$  e o “gap” de energia  $\epsilon_g$  dependentes da temperatura. Em alguma temperatura crítica  $T_c$ , a energia de ligação  $E_b$  e o “gap”, de energia  $\epsilon_g$ , vão ambos a zero. Por exemplo, de acordo com a teoria BCS, a dependência de  $\epsilon_g$  com a temperatura  $T$  é

$$\frac{\epsilon_g(T)}{\epsilon_g(0)} = \operatorname{tgh} \left[ \frac{\epsilon_g(T)T_c}{\epsilon_g(0)T} \right] \quad (7)$$

Esta é uma equação transcendental, ou igualdade de duas funções cuja incógnita  $\epsilon_g(T)$  é um argumento das funções, que deve ser resolvida graficamente ou numericamente. A figura (4) mostra o resultado experimental do comportamento do “gap” de energia  $\epsilon_g$  normalizado em função da temperatura  $T$  normalizada para alguns elementos supercondutores. A curva contínua mostra o mesmo comportamento previsto pela teoria BCS.

## A TEORIA BCS DA SUPERCONDUTIVIDADE

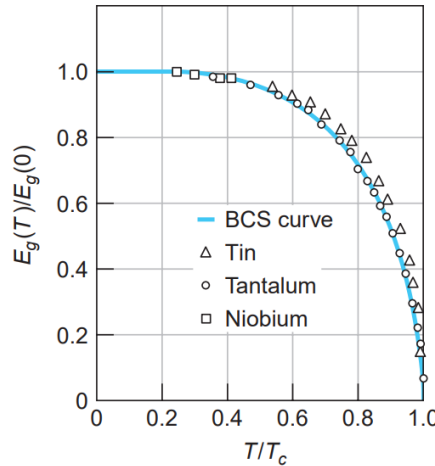


Figura 4: Comportamento teórico e experimental do "gap" de energia normalizado em função da temperatura normalizada

A Temperatura crítica  $T_c$  é uma temperatura de transição para o estado supercondutor e, de acordo com a teoria BCS, tem-se:

$$k_b T_c = 1,14 \epsilon_D e^{-1/R_0 F} \quad (8)$$

Viu-se que o efeito isótopo  $M^\alpha T_c = Cte$ , é proporcional às vibrações da rede cristalina. Uma relação simples entre a quantidade experimental  $T_c$  e o "gap" de energia  $\epsilon_g$  é obtida combinado as equações (1) com (8), isto é:

$$\frac{\epsilon_g}{k_b T_c} = \frac{4}{1,14} = 3,51$$

ou

$$\epsilon_g = 3,51 k_b T_c \quad (9)$$

Resultados experimentais mostram que a razão  $\frac{\epsilon_g}{k_b T_c}$  varia num intervalo entre 2,8 e 4,6.

A experiência mostra que um campo magnético  $B \gg B_c$  é capaz de transformar um estado supercondutor em um estado normal. A teoria BCS pode ser usada para prevê a energia mínima  $W_0 = \frac{B_c^2}{2\mu_0}$  necessária para transformação. Se um par de Cooper é formado por dois elétrons, onde cada elétron tem uma energia  $\Delta$  em torno da superfície da esfera de Fermi em torno da superfície da esfera de Fermi, então:

$$\text{densidade de pares} = \frac{1}{2} R_0 \Delta$$

Na passagem do estado supercondutor para o estado normal, cada elétron do par de Cooper é rebaixado  $-\Delta$  em energia. Assim, a redução total na densidade de energia é.

$$W_0 = R_0 \Delta (-\Delta) = -\frac{1}{2} R_0 \Delta^2 = -2 R_0 \epsilon_D^2 e^{-2/R_0 F} \quad (10)$$

O valor de  $B_c$  obtido de  $W_0 = \frac{B_c^2}{2\mu_0}$  como substituição da (3), tem uma boa concordância com os resultados experimentais.

## A TEORIA BCS DA SUPERCONDUTIVIDADE

No sistema supercondutor os pares de Cooper possuem estados fortemente coerentes tal que a formação de alguns estimula a formação de muitos do modo cooperativo. Essa tendência é análoga ao que ocorre na condensação de Bose-Einstein.

Como existe um número par de férmions num par de Cooper, assim como ocorre com o  $^4\text{He}$ , tais partículas tem spin inteiro (zero em particular), se comportam como bósons e podem ocupar um mesmo estado quântico. Entretanto, a teoria BCS prevê que o raio médio de ação da função de onda de um par de Cooper é muito grande. Isso significa que milhões de funções de onda de pares de Cooper podem ser superpostas. Como esse fato não ocorre como o  $^4\text{He}$ , então não se pode pensar na transição de um supercondutor simplesmente como uma condensação de Bose-Einstein. No estado supercondutor, os pares de Cooper estão todos correlacionados e se comportam como uma entidade única.

### Exemplo

Para o alumínio ( $[N_e]3s^23p$ ), que tem um elétron na subcamada mais externa,  $\epsilon_F/k_b = 1,4 \times 10^5 K$ ,  $\Delta/k_b = 2,1 K$ , a temperatura de Debye é  $\Theta_D = 420 K$ , a temperatura crítica é  $T_c = 1,2 K$  e a densidade de átomos é  $\rho = 6,0 \times 10^{28} \text{ atomos}/m^3$

- (a) Calcule a constante de interação adimensional de pares de Cooper nesse material.
- (b) Calcule o campo magnético crítico, previsto pela teoria BCS.

(a) Das equações (1) e (8), obtém-se

$$k_b T_c = 1,14 \epsilon_D e^{-1/R_0 F} = 1,14 k_b \Theta_D e^{-1/R_0 F}$$

$$R_0 = -\frac{1}{\ln(1,2K/1,14 \times 420K)} = 0,17$$

(b) Da equação (10), do fato que  $W_0 = \frac{B_c^2}{2\mu_0}$  e  $R_0 = \frac{3\rho}{2\epsilon_F}$  obtém-se

$$B_c = \sqrt{R_0 \mu_0} \Delta = \Delta \sqrt{\frac{3 \mu_0 \rho}{2 \epsilon_F}} = (2,1 K) k_b \sqrt{\frac{3 \mu_0 \rho}{2 (1,4 \times 10^5 K) k_b}} \cong 7 mT$$

## A TEORIA BCS DA SUPERCONDUTIVIDADE

Exercícios:

1) Para o estado supercondutor do tungstênio a temperatura crítica é  $T_c = 12mK$  e o campo magnético é  $B_c = 10^{-4}T$ . Para o tungstênio a densidade de massa é  $19,3g/cm^3$  e a temperatura de Debye é  $\Theta_D = 310K$

(a) Calcule a energia do “gap”  $\epsilon_g = 2\Delta$

(b) Calcule a densidade numérica de partículas  $\rho = \frac{N}{V}$  e a densidade de partículas por unidade de energia  $R_0 = \frac{3\rho}{2\epsilon_F}$

(c) Calcule a densidade de energia do estado supercondutor usando a equação  $W_0 = \frac{B_c^2}{2\mu_0}$

2) Para o alumínio a temperatura da transição supercondutora é  $T_c = 1,2K$ , a temperatura de Debye é  $\Theta_D = 420K$ , a densidade numérica de átomos é  $\rho = \frac{6 \times 10^{28} \text{ átomos}}{m^3}$  e  $\frac{\epsilon_F}{k_b} = 1,4 \times 10^5 K$

(a) Calcule a constante de interação adimensional  $R_0 F$  de um par de Cooper nesse material.

(b) Calcule a razão  $\frac{\epsilon_g}{k_b} = \frac{2\Delta}{k_b}$  para o alumínio.

(c) das relações de densidade de energia do estado supercondutor  $W_0 = -\frac{B_c^2}{2\mu_0} = \frac{R_0 \Delta^2}{2}$ , e da densidade de partículas por unidade de energia  $R_0 = \frac{3\rho}{2\epsilon_F}$ , encontra-se o seguinte valor teórico para o campo magnético crítico  $B_c = \Delta \sqrt{\frac{3\mu_0 \rho}{2\epsilon_F}}$ . Usando essa equação, calcule o campo magnético crítico no alumínio. Sabendo-se que o valor experimental é  $B_c = 10 \times 10^{-3}T$ , o que se pode dizer sobre o modelo teórico.