

## Um Novo Paradigma: Teoria BCS

WILLIAN MIGUEL PEREIRA RAMOS<sup>1</sup>

*Universidade do Estado do Amazonas – UEA, Tefé – Amazonas, Brasil*

JOSEFINA DIOSDADA BARRERA KALHIL

*Universidade do Estado do Amazonas – UEA, Manaus – Amazonas, Brasil*

### Resumo

*A evolução científica acontece quando paradigmas da ciência tidos como hegemônico são quebrados, na maioria das vezes dentro de uma mesma comunidade científica e outras vezes em escala geral. Nesse sentido o ano de 1911 foi fundamental para o início de um paradigma que hoje já possui 5 Nobel de física, a supercondutividade observada por Heike Kamerlingh Onnes em 1911 e compreendida quanticamente em 1953 pela publicação da teoria BCS. Contudo a proposta de solução do modelo de Hubbard atrativo a partir dos métodos das funções de Green fornece uma solução elegante para um problema análogo ao investigado pela teoria BCS. Sendo que o método das funções de Green é recorrente na literatura como ferramenta matemática na compreensão dos supercondutores multibandas não descritos pela teoria BCS.*

### 1. INTRODUÇÃO

Os fenômenos naturais sempre serviram de motivação para que a humanidade se preocupasse em entender o mundo ao seu redor. Neste sentido a supercondutividade, apesar de ocorrer em condições Termodinâmicas específicas, tem despertado em todo universo acadêmico grande interesse [1]. A supercondutividade teve seu início em 1911, quando o físico holandês Heike Kamerlingh Onnes observou, em seu laboratório na cidade de Leiden, uma mudança abrupta nas propriedades elétricas do mercúrio quando em baixas temperaturas. Especialmente foi observado que a resistência do mercúrio caía abruptamente a zero para temperaturas abaixo de 4,2 K, contrariando a ideia de que a resistência só seria nula no zero absoluto, situação chamada de condutor perfeito, expondo um novo universo fértil para pesquisas [2, 3].

A evolução da ciência normal é extraordinária [4]. A supercondutividade desde 1911 vem quebrando vários paradigmas e introduzindo outros novos. Corroborando para o desenvolvimento tecnológico optou-se inicialmente pela obtenção de materiais que alcançassem o estado supercondutor em temperatura cada vez mais altas e a partir dessa necessidade desenvolveram-se várias teorias fenomenológicas como por exemplo as propostas: Irmãos Fritz e Heinz London e Ginzburg–Landau [2]. O campo da supercondutividade apesar de cinco (5) prêmios Nobel ainda não se descobriu um material que atinja a supercondutividade em temperatura ambiente e muito menos uma teoria que descreva todos os tipos de supercondutores [5].

Contudo é imperativo que teorias como a BCS, iniciais de Bardeen, Cooper e Schrieffer deve ser exaustivamente investigada na tentativa de que seja proposta uma

---

<sup>1</sup> E-mail para correspondências: wramos@uea.edu.br

teoria nova que venha a predizer as propriedades de quaisquer materiais ou compostos que quando em baixas temperaturas tornam-se supercondutor. A descoberta da supercondutividade já tem mais de 110 anos e vários são os paradigmas que ainda impedem o avanço da ciência normal como descrita por Kuhn [4]. Para que isso seja possível é apresentando uma abordagem do modelo de Hubbard atrativo na perspectiva do método das funções de Green [6, 10].

O artigo está organizado da seguinte forma: Na Sec. 2 apresenta-se o método das funções de Green, na Sec. 3 apresentamos os cálculos necessários utilizando o método das funções de Green para obter as correlações imprescindíveis para obtenção das equações de Gap do sistema e exibimos os resultados numéricos obtidos da equação de Gap do modelo e é apresentado o gráfico do parâmetro de ordem supercondutor  $\delta X_T$ . Por fim na Sec. 4 é apresentado a conclusão.

## 2. MÉTODO DAS FUNÇÕES DE GREEN

No ano de 1959, Bogoliubov e Tyablikov, introduziram o método das funções de Green retardada e avançada de duplo tempo com dependência da temperatura em sistemas de muitos corpos estudados pela termodinâmica e mecânica estatística [7]. É possível obter a partir dessa ferramenta as energias de excitação de um sistema, ou até expressar a resposta de um sistema a uma perturbação externa.

Apesar dos inúmeros sistemas onde se pode fazer uso dessa ferramenta, destaca-se a mecânica estatística e a termodinâmica onde os valores médios dos produtos de operadores que aparecem são tirados sobre os ensembles estatísticos caracterizando as funções de Green de tempo duplo dependentes da temperatura [8]. Essas funções serviram de ferramentas para concepção desse trabalho, que consiste em um sistema interagente.

### 2.1. Tipos de Funções de Green

As funções de Green são definidas como: Retardada, Avançada e Causal [9]:

$$\widehat{G}_r(t, t') = \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle\rangle = -i\theta(t - t') \langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\eta}\rangle \quad 2.1$$

$$\widehat{G}_a(t, t') = \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle\rangle = i\theta(t' - t) \langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\eta}\rangle \quad 2.2$$

$$\widehat{G}_c(t, t') = \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle\rangle = i\langle T_r[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\eta} \rangle \quad 2.3$$

Onde  $\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle = \hat{A}(t)\hat{B}(t') - \eta\hat{B}(t)\hat{A}(t')$  comutador ou anticomutador dependendo do tipo de partículas analisadas, ou seja, para bósons temos  $\eta = 1$ , por sua vez para férmions temos  $\eta = -1$ . Já o termo  $\langle\hat{A}(t), \hat{B}(t')\rangle$  representa a média do produto desses dois operadores em um ensemble grão- canônico [8].

### 2.2. Equação de Movimento

Partindo da representação de Heisenberg, que para um operador  $\hat{A}(t)$  pode ser escrito na seguinte expressão [8]:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \quad 2.4$$

Aplicando a equação 2.4 na equação 2.3 encontra-se a equação:

$$i \frac{d\widehat{G}_c(t, t')}{dt} = i \frac{d\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle\rangle}{dt} \quad 2.5$$

Da equação 2.5 se obtém a equação:

$$i \frac{d\widehat{G}_c(t, t')}{dt} = \delta(t - t') \langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t)]_{\eta}\rangle + \langle[\hat{A}(t), \hat{H}], \hat{B}(t)]_{\eta}\rangle \quad 2.6$$

O resultado obtido na equação [6] para função de Green Causal vale para quaisquer das funções de Green, causal, retardada e avançada, definidas acima. Nessa equação é feito uso da transformada de Fourier dada por:

$$\widehat{G}_c(t, t') = \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{G}_c(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad 2.7$$

A inversa da equação 2.7 pode ser escrita como:

$$\widehat{G}_c(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{G}_c(t, t') e^{-i\omega(t-t')} d(t-t') \quad 2.8$$

Agora multiplicando a equação 2.6 por  $e^{-i\omega(t-t')} d(t-t')$  e integrando além de fazer uso da equação 2.8, obtém-se:

$$\omega \cdot 2\pi \cdot \widehat{G}_c(\omega) = \langle [\widehat{A}(t), \widehat{B}(t)]_{\eta} \rangle + 2\pi \widehat{G}_c(\omega) \quad 2.9$$

Chega-se a equação de movimento,

$$\omega \langle \langle \widehat{A}, \widehat{B} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [\widehat{A}, \widehat{B}]_{\eta} \rangle + \langle \langle [\widehat{A}, \widehat{H}], \widehat{B} \rangle \rangle \quad 2.10$$

A equação 2.10 está escrita no espaço dos momentos, sendo que nesta forma ela se apresenta como uma equação algébrica e não diferencial ou integral facilitando assim o tratamento do modelo analisado [8]. Tal equação é conhecida como Equação de Movimento do propagador  $\langle \langle \widehat{A}, \widehat{B} \rangle \rangle$ .

### 2.3. Representação Espectral para as Funções de Green Avançada e Retardada

No presente trabalho faremos uso do teorema do salto representado pela equação abaixo:

$$\langle \widehat{A}(0) \widehat{B}(0) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_{FD}(\omega) \text{Im}(\langle \langle \widehat{B} | \widehat{A} \rangle \rangle) \quad 2.11$$

Onde  $F_{FD}$  é a função de distribuição de probabilidade de Fermi-Dirac no espaço dos momentos [7].

Como as funções de Green dependem do tempo, é possível através de uma transformação de Fourier passar da dependência temporal para o espaço das frequências e assim escrever os espectros delas.

$$\widehat{G}_r(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{G}(E) e^{-iE(t-t')} dE \quad 2.12$$

Cuja inversa,

$$\widehat{G}_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{G}(t-t') e^{-iE(t-t')} d(t-t') \quad 2.13$$

Substituindo a equação 2.1 na equação 2.13, obtemos:

$$\widehat{G}_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') [\widehat{A}(t), \widehat{B}(t') - \eta \widehat{B}(t), \widehat{A}(t')] e^{-i\omega(t-t')} d(t-t') \quad 2.14$$

Definindo neste momento as representações espectrais dos produtos de operadores  $\widehat{A}$  e  $\widehat{B}$  que aparecem na equação 2.14, com:

$$F_{AB}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad 2.15A$$

$$F_{BA}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad 2.15B$$

Agora substituindo as equações 2.15 na equação 2.14, é obtido:

$$\widehat{G}_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \theta(t-t') e^{i(E-\omega)(t-t')} \quad 2.16$$

A função degrau que aparece em na equação 2.16 pode ser representada para  $\varepsilon \rightarrow 0^+$ , como:

$$\theta(t-t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\varepsilon(t-t')} \delta(t-t') d(t-t') \quad 2.17$$

em que a função é dada por:

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ix(t-t')} dx \quad 2.18$$

Da combinação das equações 2.17 e 2.18, chega-se em:

$$\theta(t - t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ix(t-t')}}{x+i\varepsilon} dx \tag{2.19}$$

Aplicando a equação 2.19 na equação 2.16 encontra-se:

$$\hat{G}_r(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta)}{E - \omega + i\varepsilon} \tag{2.20A}$$

$$\hat{G}_a(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta)}{E - \omega - i\varepsilon} \tag{2.20B}$$

Analisando as equações 2.20 no plano complexo onde consideramos  $E$  como variável complexa, percebemos que a equação 2.20A é contínua no semi-plano complexo superior e a equação 2.20B é contínua no semi-plano complexo inferior ambas com singularidade no eixo real, logo pode-se considerar um função complexa  $\hat{G}(E)$  de dois ramos  $\hat{G}_r(E)$  e  $\hat{G}_a(E)$  [9].

Uma vez determinada  $\hat{G}(E)$  é possível obter  $J(\omega)$ :

$$\hat{G}(\omega + i\varepsilon) - \hat{G}(\omega - i\varepsilon) = -i(\beta\omega - \eta)J(E) \tag{2.21}$$

Tomando a diferença entre as equações 2.20, fica:

$$\hat{G}(\omega + i\varepsilon) - \hat{G}(\omega - i\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta) \left( \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon} - \frac{1}{E - \omega - i\varepsilon} \right) \tag{2.22}$$

Para resolver a integral da equação 2.23 vamos utilizar a identidade de Dirac,

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x) \tag{2.23}$$

onde  $x$  é uma variável real e  $P$  é o valor principal na integração sobre  $x$  [8].

Aplicando a equação 2.24 na equação 2.23, chegamos:

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{E - \omega}\right) \mp i\pi\delta(E - \omega) \tag{2.24}$$

Desta forma, obtém-se  $J(\omega)$

$$J(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} i \frac{\hat{G}(\omega + i\varepsilon) - \hat{G}(\omega - i\varepsilon)}{e^{\beta\omega} - \eta} \tag{2.25}$$

Agora voltamos a equação 2.15B e substituímos  $J(\omega)$  pela equação 2.25,

$$F_{AB}(t - t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} i \frac{\hat{G}(\omega + i\varepsilon) - \hat{G}(\omega - i\varepsilon)}{e^{\beta\omega} - \eta} e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \tag{2.26}$$

Como o sistema considerado neste trabalho é estudado a tempo fixo, podemos fazer  $t = t'$ , onde na maioria dos casos de interesse a diferença  $\hat{G}(\omega + i\varepsilon) - \hat{G}(\omega - i\varepsilon) = Im[\hat{G}(\omega)]$ . Logo, a equação 2.26 pode ser escrita, por exemplo, para um sistema superconductor assim [7]:

$$\langle \hat{A}(0)\hat{B}(0) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_{FD}(\omega) Im(\langle \hat{B} | \hat{A} \rangle) \tag{2.27}$$

onde para um sistema composto por férmions,  $\eta = -1$ . Logo, a ocorrência da distribuição de Fermi-Dirac  $F_{FD}$ .

### 3. APLICAÇÃO DO MÉTODO DAS FUNÇÕES DE GREEN NO MODELO

Os modelos descritos pela teoria BCS da supercondutividade apresentam apenas uma banda de elétrons interagente [11]. O modelo BCS despreza os espalhamentos não relacionados com a formação e transição de pares eletrônicos (pares de Cooper) [12]. Neste momento apresentaremos o hamiltoniano reduzido do modelo acima citado:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{K}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{K}} a_{\mathbf{K}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{K}\sigma} - g_a \sum_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} a_{\mathbf{K}\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{K}\downarrow} a_{-\mathbf{K}\downarrow} a_{\mathbf{K}\uparrow} \tag{3.1}$$

Os operadores  $a_{\mathbf{K}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{K}\sigma}$  criam (aniquilam) respectivamente um elétron com momento  $\mathbf{K}$  e spin  $\sigma$ . Por outro lado, os elétrons possuem energia cinética dada pela relação de dispersão  $\varepsilon_{\mathbf{K}} = \frac{\hbar K^2}{2m_a}$ , sendo que  $m_a$  representa a massa das quasi-partículas presentes na banda  $a$  e  $g_a$  é a interação atrativa entre os elétrons da respectiva banda [12, 14, 15]. Nesse modelo os pares de cooper são formados em uma estreita faixa definida pela

energia de Debye  $\frac{h\omega}{2\pi}$  na vizinhança da energia de Fermi, nessa região a interação atrativa entre elétrons é mediada pelos fônons formados após a interação do movimento dos elétrons com a rede cristalina. A teoria BCS considera no seu escopo o regime de acoplamento fraco, ou seja, a distribuição de momentos das quasi-partículas é modificada em uma pequena região próximo ao nível de Fermi. Para ilustrar o problema explicado pela teoria BCS, utilizaremos as funções de Green para encontrar a equação de Gap do modelo partindo do hamiltoniano presente na equação 3.1, após as aproximações necessárias, assim apresentamos o propagador que será o ponto de partida para o cálculo da equação de gap do sistema:

$$\Delta = \sum_{k\sigma} \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle \quad 3.2$$

Chegando ao seguinte hamiltoniano:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \sum_{k\sigma} (\Delta a_{k\sigma}^+ a_{-k-\sigma}^+ + \Delta^* a_{-k-\sigma} a_{k\sigma}) - \frac{\Delta^2}{g_a} \quad 3.3$$

Após um longo caminho através das funções de Green  $\langle a_{-k-\sigma} a_{k\sigma} \rangle$ , chegamos a equação de Gap do sistema:

$$\frac{1}{\rho U} = \int_0^{h\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2K_B T} d\xi \quad 3.4$$

neste momento analisaremos duas situações muito importante a primeira para temperatura do sistema  $T$  igual a temperatura crítica e a segunda para temperatura do sistema nula.

i. Para temperatura crítica, ou seja,  $\Delta(T_c) = 0$ , a equação 3.4 reduz a forma:

$$\frac{1}{\rho U} = \int_0^{h\omega_D} \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2K_B T} d\xi \quad 3.5$$

resolvendo a integral da equação 3.4, obtemos a seguinte relação, para  $\frac{h\omega_D}{2K_B T} \gg 1$ :

$$\frac{1}{\rho U} = \ln \frac{4e^Y}{\pi} \quad 3.6$$

onde  $Y$  é uma constante.

ii. Para temperatura nula  $T = 0K$  a equação 3.4 resulta:

$$\sinh \frac{1}{\rho U} = \frac{h\omega_D}{\Delta(T=0)} \quad 3.7$$

Agora podemos combinar as equações 3.6 e 3.7, obtemos a seguinte relação:

$$\sinh \frac{4e^Y h\omega_D}{2K_B T} = \frac{h\omega_D}{\Delta(T=0)} \quad 3.8$$

admitindo que  $h\omega_D \gg \Delta(T = 0K)$  encontramos a seguinte relação:  $\Delta(T_c) = 1.76K_B T$ .

Assim, podemos reescrever a equação 3.5 como se segue:

$$\frac{1}{\rho U} = \int_0^{\sinh \frac{1}{\rho U} \delta^{-1}} \tanh \left( \frac{1.76 \delta}{2} \frac{\delta}{\tau} \sqrt{1 + Z^2} \right) \frac{dZ}{\sqrt{1 + Z^2}} \quad 3.9$$

onde  $\delta = \frac{\Delta(T)}{\Delta(\tau)}$ ,  $\tau = \frac{T}{T_c}$  e  $Z = \xi$ .

A partir da equação 3.9 podemos obter um gráfico do parâmetro de ordem  $\delta$  pela temperatura  $\tau$ , resolvendo auto consistentemente. Assim apresentamos o gráfico:

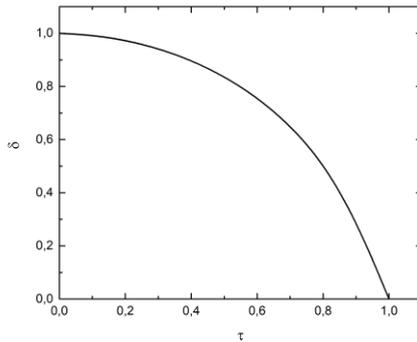


Figure 1: Gráfico do parâmetro de ordem supercondutor pela temperatura.  
Fonte: Próprio Autor.

A Figura 1 representa para o modelo BCS [11] o gráfico do parâmetro de ordem supercondutor pela temperatura, onde é apresentado uma curva suave de onde podemos afirmar que há uma transição de fase de segunda ordem do sistema supercondutor área abaixo do diagrama, fase supercondutor, para área fora da curva, fase normal.

#### 4. CONCLUSÃO

A compreensão de que todos os campos de estudo das ciências são construídos de acordo com a evolução da ciência que vem a ocorrer com a quebra de paradigmas que levam exaustivo trabalho de pesquisadores, bem como longos intervalos de tempo que em muitos casos ultrapassam gerações.

Com esse entendimento de evolução da ciência dita normal de Kuhl faz com que surja a necessidade de que as dificuldades de transpor os paradigmas sejam estudados cada vez mais das mais variadas formas possíveis e utilizando todas as ferramentas que se possui até aquele momento. Mesmo que não venha a ocorrer uma quebra de paradigma é possível que outros campos de pesquisa e outras ferramentas surjam desse estudo exaustivo. Um exemplo formidável é a área da supercondutividade que apesar de vários Nobel ainda se encontra eivadas de paradigmas.

Por conseguinte, é fundamental que todos os ramos das ciências sejam estudados nos seus mínimos detalhes e com o mais alto nível possível sempre visando a evolução da ciência que pode ser com novos testes de paradigma ou quebra desses e propostas de outros novos.

#### REFERENCIAS

- [1] KAMERLINGH ONNES, Heike The superconductivity of mercury, (Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, 122, 1911).
- [2] Costa, Marconi and Pavao, Antonio C Supercondutividade: um século de desafios e superação, (Revista Brasileira de Ensino de Física, SciELO Brasil, 2012).

- [3] Tipler, Paul Allen and Mosca, Gene Física para cientistas e engenheiros. Vol. 3: física moderna: mecânica quântica, relatividade ea estrutura da matéria, (Grupo Gen-LT, 2000).
- [4] Kuhn, Thomas The structure of scientific revolutions, (Princeton University Press, 2021).
- [5] Suhl, H and Matthias, BT and Walker, LR Bardeen-Cooper-Schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands, (Physical Review Letters, APS, 1959)
- [6] Zubarev, DN Double-time Green functions in statistical physics, (Physica B: Condensed Matter, Elsevier, 1991).
- [7] Pecinato, Henrique and others Efeitos da paridade da hibridização em supercondutores multibandas, (Universidade Federal do Amazonas, 2017).
- [8] Bogolyubov, NN and Tyablikov, SV Retarded and advanced Green functions in statistical physics, (SPhDs, 1959).
- [9] Nazareno, Hugo N Mecânica estatística e funções de Green, (Ed. da Universidade de Brasília, 1986).
- [10] Essler, Fabian HL e Frahm, Holger e Göhmann, Frank e Klümper, Andreas e Korepin, Vladimir E O modelo unidimensional de Hubbard, (Cambridge University Press, 2005).
- [11] Bardeen, John and Cooper, Leon N and Schrieffer, John Robert Theory of superconductivity, (Physical Review, APS, 1957).
- [12] Bardeen, John and Cooper, Leon N and Schrieffer, John Robert Crossover from weak to strong coupling superconductivity in multi-band systems, (Physical Review, APS, 1975).
- [13] Neto, Francisco Dinóla and Continentino, Mucio A and Lacroix, Claudine Quantum criticality in heavy-fermion metals, (Journal of Physics: Condensed Matter, IOP Publishing, 2010)
- [14] Padilha, Igor T and Ramires, Aline and Dinola-Neto, Francisco and Continentino, Mucio A Superconducting quantum critical points., (2010)
- [15] Caldas, Heron and Batista, FS and Continentino, Mucio A and Deus, Fernanda and Nozadze, David A two-band model for p-wave superconductivity, (Annals of Physics, Elsevier, 2017)