



# PROPIEDADES DE TRANSPORTE Y DE LA SUPERCONDUCTIVIDAD EN SISTEMAS METALICOS

**Viviana Patricia Ramunni**

GRUPO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA Y FENÔMENOS COLETIVOS NA MATÉRIA CONDENSADA.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Dr. Xavier Sigaud 150, CEP: 22290-180, Rio de Janeiro, Brasil.

Director: *Prof. Dr. Amós Troper*  
CBPF-UERJ.

Trabajo de tesis para optar por el grado de Doctora en Cs. Físicas.  
Fecha de la defensa: 11 de noviembre de 2001

## 1. Introducción

Este trabajo tiene por objetivo estudiar la resistividad independiente de la temperatura en sistemas con impurezas magnéticas y no magnéticas diluídas en metales nobles y el efecto de la hibridización electrónica en la superconductividad para sistemas de dos bandas superpuestas dentro del contexto de la teoría de Bardeen, Cooper y Shrieffer (BCS)<sup>1</sup>.

## 2. Resistividad de impurezas sp, nd y tierras raras diluídas en matrices metálicas

Estudiamos la resistividad independiente de la temperatura de sistemas de impurezas s-p y tierras raras en matrices de metales nobles empleando la formulación de la matriz  $T$ . Consideramos la quiebra de la simetría de translación para el sistema de banda única, en el cual obtenemos un potencial de carga no local, calculado a través de la regla de suma de Friedel extendida. El efecto de la diferencia de volumen,  $\delta v$ , entre la impureza y la matriz, también fue considerado en este trabajo. En el caso de impurezas "magnéticas" (prácticamente todas las impurezas de tierras raras), calculamos la resistividad de desorden de *spin* y renormalizamos la resistividad de De Gennes - Friedel,  $J^2 S_0 (S_0 + 1)$ , incluyendo el potencial de carga[1,2]. Nuestros resultados numéricos describen muy bien los resultados experimentales encontrados en la literatura. Dentro del modelo de banda única, calculamos también la resistividad residual de impurezas de transición nd(n=3,4) en matrices de Cu. Comparamos los resultados obtenidos con datos experimentales y otros tratamientos teóricos. Los sistemas diluídos tipo Kondo, no fueron tratados en este trabajo.

---

<sup>1</sup> La superconductividad (SC) a bajas temperaturas ( $T < 22K$ ) es bien explicada por la teoría BCS y la interacción convencional mediada por " fonones " es la responsable por este fenómeno.

## 2.1 El Modelo

El Hamiltoniano que describe nuestro sistema es,

$$H = H_0 + H_I^q + H_I^\tau + H_I^{\vec{S}_0} \quad , \quad (1)$$

donde  $H_0$  corresponde al Hamiltoniano de la red pura, formada por la banda de conducción s-p,  $H_0 = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{(s)} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}$  con  $c_{i\sigma}^+, c_{j\sigma}$  los operadores de creación y

aniquilación respectivamente para electrones con *spin*  $\sigma$  en el sitio  $i$ -ésimo,  $t_{ij}^{(s)}$  es la integral de transferencia ("hopping") entre los sitios  $i$  y  $j$  definida por  $t_{ij}^{(s)} = \sum_k \varepsilon_k e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}$ ,

donde  $\varepsilon_k$  es la relación de dispersión de la banda s(-p). Por simplicidad consideramos las subbandas s-p idénticas. Al introducir la impureza independiente de *spin* tenemos los siguientes términos:

$$H_I^q = \sum_{\sigma} V_0 c_{0\sigma}^+ c_{0\sigma} \quad , \quad (2)$$

donde  $V_0$  es el potencial local de carga, y

$$H_I^\tau = \tau \left\{ \sum_{m=0} t_{0m}^{(s)} c_{0\sigma}^+ c_{m\sigma} + \sum_{m=0} t_{m0}^{(s)} c_{m\sigma}^+ c_{0\sigma} \right\} \quad , \quad (3)$$

$\tau$  es un factor de proporcionalidad que permite la renormalización del "hopping" de la impureza - matriz con relación al "hopping" matriz - matriz. Finalmente, si la impureza tiene *spin*, tenemos que considerar el término

$$H_I^{\vec{S}_0} = -2J^{(s)} \vec{S}_0 \cdot \vec{\sigma} \quad , \quad (4)$$

donde  $J^{(s)}$  es la integral de intercambio que por simplicidad la consideramos constante.

$\vec{S}_0$  es el *spin* local de la impureza y las componentes de *spin* de los electrones son definidas por:  $\sigma_i^z = c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow}$ ,  $\sigma_i^+ = c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}$  y  $\sigma_i^- = c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow}$ .

## 2.2 Ecuaciones de Movimiento: Funciones de Green

En la aproximación de Born pretendemos obtener el propagador  $z \ll c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \gg$  empleando la técnica de las funciones de Green y partiendo de la ecuación de movimiento

$$z \ll c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \gg = \frac{1}{2\pi} \left\{ c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \right\} + \ll [c_{i\sigma}, H]; c_{j\sigma}^+ \gg \quad , \quad (5)$$

obtenemos la solución general del problema.

Solución al problema puramente de carga: En término de las funciones de Green para la red pura  $g_{ij}(z)$  y considerando que  $\tau = \alpha - 1$ , a primer orden en  $\tau$ , la ecuación completa para el potencial de carga independiente de *spin* se escribe

$$\tilde{G}_{ij}(z) = g_{ij}(z) + g_{i0}(z) T_{00}^{ef}(z) g_{0j}(z) + \theta(\tau) \quad , \quad (6)$$

$$T_{00}^{ef}(z) = \frac{V_{eff}(z)}{\alpha^2 - V_{ef}(z) g_{00}(z)} \quad ; \quad V_{ef}(z) = \frac{V_0 + (\alpha^2 - 1)(z - \varepsilon_c)}{\alpha^2} \quad , \quad (7)$$

$T_{00}^{ef}(z)$  es la matriz de dispersión y  $V_{ef}(z)$  el potencial efectivo ( $\varepsilon_c$  es la energía del centro de la banda s(-p)). El potencial  $V_0$  es determinado auto-consistentemente a través de la regla de suma de Friedel extendida [3]. Incorporamos la diferencia de volumen entre la impureza ( $\Omega_{imp}$ ) y substrato ( $\Omega$ ) en la diferencia de carga efectiva como [4,5]

$$\Delta Z' = \Delta Z - \frac{\Omega_{imp} - \Omega}{\Omega} = \Delta Z - \frac{\delta v}{\Omega} \quad , \quad (8)$$

$\Delta Z$  y  $\Delta Z'$  son la diferencia de carga real y efectiva entre la impureza y la matriz. Los valores de  $\Omega_{imp}$  en la ec. (8) son extraídos de la Tabla Periódica.

Solución del problema completo: Cuando consideramos el potencial de *spin* el propagador  $\Gamma_{ij}$ , se escribe:

$$\Gamma_{ij}(z) = g_{ij}(z) + g_{i0}(z)T^R(z)g_{0j}(z) \quad , \quad (9)$$

asumimos que  $J^{(s)} = J$  y  $T^R(z)$  representa la matriz de dispersión del problema de una impureza en una red periódica cuya expresión esta dada por

$$T^R(z) = \frac{V_{ef}(z)}{1 - V_{ef}(z)g_{00}(z)} + \frac{J^2 S_0(S_0 + 1)g_{00}(z)}{[1 - V_{ef}(z)g_{00}(z)]^3} \rightarrow J_{ef} = \frac{J}{[1 - V_{ef}(z)g_{00}(z)]^2} \quad , \quad (10)$$

El primer término de (10) representa el potencial de dispersión de carga dependiente de la energía de caracter no local debido a la quiebra de la simetría de translación. El segundo término corresponde a una extensión del término de De Gennes – Friedel  $J S_0(S_0 + 1)$  donde aparece explícitamente el intercambio entre potencial de carga y de *spin*.

### 2.3 Cálculo de la Resistividad

En el caso del límite de De Gennes – Friedel[1], i.e, la resistividad independiente de la temperatura, consideramos los términos a segundo orden en  $J$ . Para pequeñas concentraciones  $c$  de impurezas, la vida efectiva media de excitación  $\tau$  definida como [2]

$$\frac{1}{\tau} = -c \text{Im}\{T(z)\} \rightarrow R = \frac{A}{\tau_F} \quad , \quad (11)$$

es inversamente proporcional a la resistividad  $R$  donde  $A$  es una constante asociada a la matriz y  $T(z) = T^R(z)$  (ec. (10)). Siguiendo la metodología de Blackman [2] e introduciendo el concepto de "Phase-shift", usando las (10) y (11) encontramos que la resistividad,  $R$ , en el nivel de Fermi ( $z = \omega + i\delta$ ,  $\omega = E_F$ ) se escribe en términos de  $g_{00}$  asociada a la red perfecta como:

$$R(z) = c \pi \rho(z) A \left\{ \frac{V_{ef}^2(z)}{|1 - V_{ef}(z)g_{00}(z)|^2} + \frac{J^2 S_0(S_0 + 1)}{|1 - V_{ef}(z)g_{00}(z)|^3} \left[ \frac{2 \cos(2\eta)}{|1 - V_{ef}(z)g_{00}(z)|} - 2 \cos(\eta) \right] \right\} \quad (12)$$

donde  $\rho(z)$  es la densidad de estados (**DOS**),  $\eta(z) = \sin^{-1} \left[ \frac{V_{ef}(z) \text{Im}(g_{00}(z))}{|1 - V_{ef}(z)g_{00}(z)|} \right]$ .

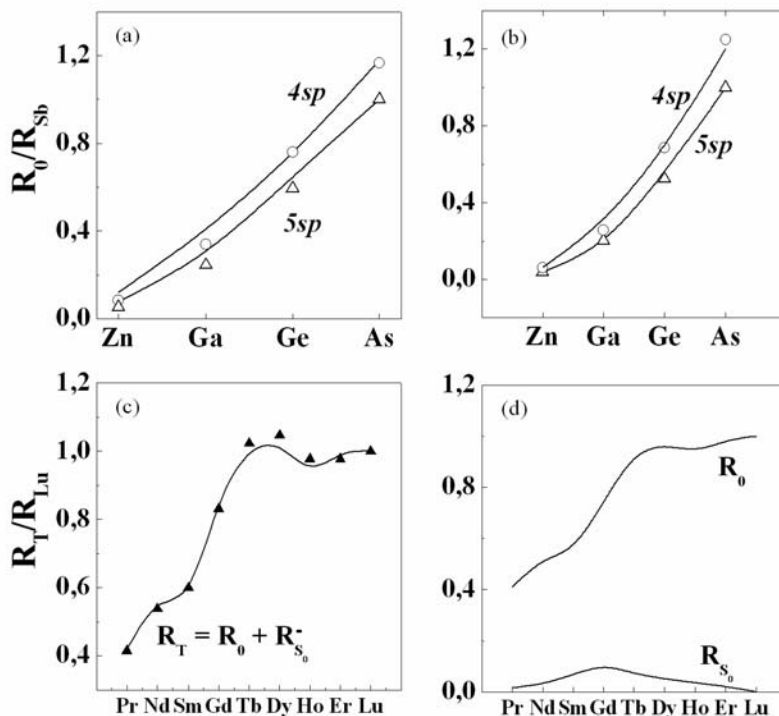
### 3 Resultados

Resumimos los aspectos fundamentales de los resultados analíticos y numéricos corroborados con datos experimentales encontrados en la literatura como también con técnicas ab-initio. Empleamos una DOS parabólica (Moriya) dada por

$$\rho_s(z) = \frac{3}{4\Delta_s} \left\{ 1 - \left( \frac{z}{\Delta_s} \right)^2 \right\}, \quad (13)$$

ya que imita muy bien la desidad de estados s-p extraída de cálculos efetuados por primeros principios [6]. Asumimos para el parámetro de intercambio  $J/\Delta_s = 0.1$  y ancho de la banda s  $\Delta_s = 10eV$  para el cobre y  $\Delta_s = 11.2eV$  en el caso de la plata. En la Figura 1 graficamos la resistividad de impurezas (a) 4sp y (b) 5sp diluídas en Cu y Ag en funcion de Z. Los resultados experimentales también son mostrados en las figuras. Observamos que nuestros cálculos teóricos describen razonablemente bien las principales características de los datos experimentales [7]. En particular, notamos que cuando vamos de la serie 4sp (Zn  $\rightarrow$  As) a la 5sp (Cd  $\rightarrow$  Sb) sistemáticamente obtenemos que la resistividad renormalizada de las impurezas 5sp es menor que las isoelectrónicas 4sp, o sea,  $\left. \frac{R}{R_{Sb}} \right|_{5sp} > \left. \frac{R}{R_{Sb}} \right|_{4sp}$ . Esto, se debe a que en el caso 5sp,  $\Delta Z'(5sp) < \Delta Z'(4sp)$ , i.e.,

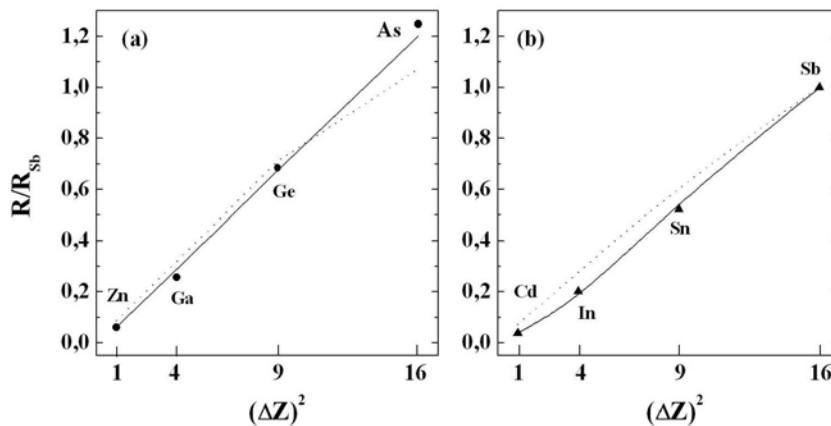
tenemos una diferencia de carga efectiva menor en torno de la impureza. De este modo se espera que  $V_{ef}|_{5sp}$  sea menor que el correspondiente  $V_{ef}|_{4sp}$ . La dispersión de las 5sp es menor que la de las 4sp, implicando una menor resistividad.



**Figura 1:** Resistividades para impurezas 4sp (línea punteada) y 5sp (línea sólida) diluídas en una matriz de a) Cu y b) Ag renormalizadas por la resistividad del Sb. Los círculos y triángulos son los datos experimentales para las impurezas 4sp y 5sp [7] respectivamente. En (c) y (d) la Resistividad renormalizada de impurezas de tierras raras diluídas en Ag. Las líneas sólidas corresponde a nuestros cálculos y los triángulos a los datos experimentales [7]. La figura de la izquierda muestra las distintas contribuciones a la resistividad renormalizadas por la resistividad del Lu.

En la Figura 1 (c), mostramos la resistividad para impurezas magnéticas de tierras raras diluídas en Ag. En este caso, donde ambos términos de la ec. (12) contribuyen a la resistividad, obtenemos excelente acuerdo con los datos experimentales [7]. En (d) se muestran separadamente las contribuciones provenientes del potencial puramente de carga y el de spin. Observamos que la resistividad dependiente de spin es mucho menor que la de carga, hecho que justifica nuestra aproximación a segundo orden en J.

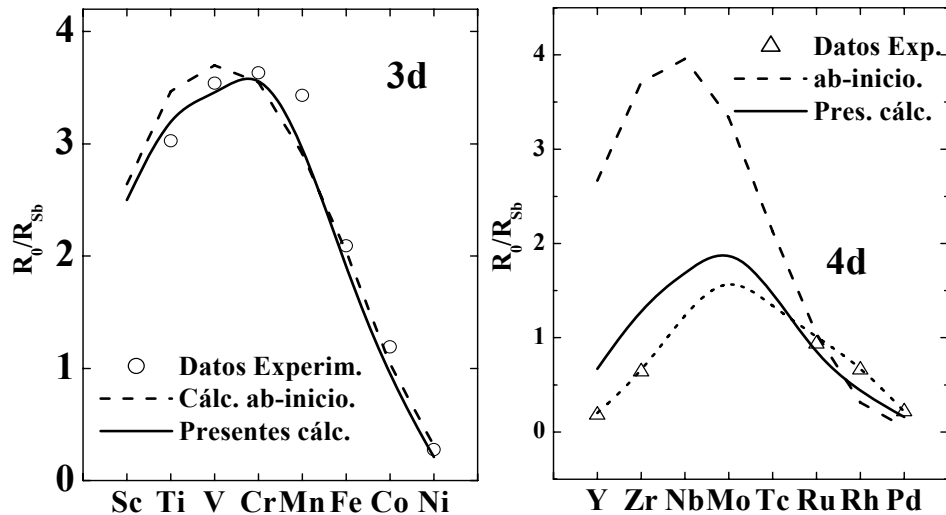
En la Figura 2 comparamos nuestros resultados con los obtenidos via primeros principios por Vojta y colaboradores[8] (líneas puntiadas). Estos autores no consideran el término de volumen ni la quiebra de simetría de translación como en nuestros cálculos. Verificamos que la resistividad calculada como función de la diferencia de valencia al cuadrado,  $\Delta Z^2$ , satisface la regla de Linde de acuerdo con los datos experimentales. La dependencia del período en los sistemas de impurezas en metales nobles se refleja en otros fenómenos de transporte como por ejemplo el estudio de la sistemática de la potencia termoeléctrica en aleaciones de cobre y plata. Esta dependencia fue observada en de aleaciones de magnesio.



**Figura 2:** Técnicas "ab-initio" vs "Tight Binding" para impurezas 4sp y 5sp diluídas en la matriz de Ag. Resistividad residual de impurezas de la serie (a) 4sp (Zn - As) y (b) 5sp (Cd - Sb), diluídas en matriz de Ag renormalizadas por la resistividad del Sb. Las líneas sólidas representan nuestros cálculos y las puntiadas a los cálculos *ab-initio*[8]. Los círculos corresponden a los datos experimentales[7].

En estos sistemas además de la dependencia de la diferencia de valencia en la potencia termoeléctrica, ésta también depende de la serie en la tabla periódica a la cual pertenece la impureza.

Aunque las configuraciones de los metales de transición 4d sea similar a la de los 3d las propiedades físicas de estos sistemas son muy diferentes. En la serie 3d, Fe, Co y Ni son ferromagnéticos y Cr, Mn son antiferromagnéticos mientras que los metales de la serie 4d nunca están en tales estados magnéticos ordenados. Pretendemos, por estos motivos extender nuestro modelo al caso de impurezas nd(n=3,4) y comparar las propiedades físicas de átomos aislados de impurezas 4d diluídos en la matriz de Cu con las de impurezas 3d diluídas en la misma matriz.



**Figura 3:** Resistividades calculadas de impurezas 3d y 4d diluídas en Ag, renormalizadas al Sb (líneas sólidas). Los círculos y triángulos son datos experimentales refs. [9]. Por comparación, cálculos ab-inicio son exhibidos [9] (líneas en trazos). En b) para las 4d usamos valores efectivos de los radios atómicos que no superan el 10% del valor real obtenido directamente de la tabla periódica (líneas punteadas).

La resistividad residual calculada para impurezas 3d y 4d diluídas en Cu es mostrada en la Figura 3 (Impurezas Kondo son exluídas en el presente cálculo). Podemos ver que nuestros cálculos teóricos describen bastante bien las principales características de los datos experimentales [9]. Primeramente uno observa que la resistividad de las impurezas 4d es sistemáticamente menor que las isoelectrónicas 3d, i.e., como antes

$$\left. \frac{R}{R_{Sb}} \right|_{4d} > \left. \frac{R}{R_{Sb}} \right|_{3d}$$

Observamos que la resistividad residual de las impurezas 3d tienen un máximo alrededor de la mitad de la serie (la misma tendencia es observada para las 4d). Esto se debe a que un estado ligado 3d(4d) es extraído desde el núcleo del Cu, el cual esta en resonancia en las vecindades del nivel de Fermi, aumentando la dispersión de carga y por lo tanto la resistividad residual<sup>2</sup>.

### 3. Superconductividad: efecto de la hibridación electrónica en sistemas a dos bandas

Estudiamos los efectos de la hibridación ( $V$ ) en la superconductividad de sistemas físicos que pueden ser descriptos por un modelo a dos bandas adoptando un tratamiento BCS extendido. Partimos de un modelo tipo Hubbard, con términos de atracciones efectivas  $U_r < 0$  intrabandas  $r=dd$  e interbandas  $r=sd$ . Adoptamos la hipótesis de bandas

<sup>2</sup> El estudio del transporte electrónico de sistemas a dos bandas con impurezas magnéticas ( $G_d$ ,  $T_b$ ,  $D_y$ ) y no-magnéticas (s-p) diluídas en matrices de elementos de transición, que completarían la sistemática de la resistividad independiente de la temperatura, también fue realizado durante esta tesis doctoral.

homotéticas:  $\varepsilon_{dk} = \alpha \varepsilon_{sk}$ , donde  $\alpha$  es un parámetro fenomenológico y corresponde a la relación de masas efectivas entre los electrones s(p)-d y  $\varepsilon_{\lambda k}$  es la relación de dispersión de los electrones  $\lambda$  (con  $\lambda = s, d$ ). Describimos los efectos interbandas a través de un término de hibridización a un cuerpo. Consideramos la hibridización descrita en dos aproximaciones: una de carácter local ( $V=V_0$ ) y otra dependiente del vector de onda  $\mathbf{k}$  ( $V=V_k$ ). Analizamos nuestro modelo en dos situaciones diferentes considerando el sistema desacoplado, donde tenemos la posibilidad de formar pares de Cooper d-d, s-d no interactuantes y el sistema acoplado donde consideramos simultáneamente la formación de ambos pares. Empleamos el método de las funciones de Green para obtener expresiones analíticas para la energía de las quasipartículas del sistema y calculamos auto-consistentemente los parámetros SC relevantes.

### 3.1 El Modelo

Partimos del Hamiltoniano

$$H = H_0^{(s,d)} + H_a + H_V, \quad (14)$$

El término  $H_0$  representa el Hamiltoniano de red perfecta para las bandas s,d

$$H_0^{(s,d)} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{(s)} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{(d)} d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma}, \quad \text{como antes } t_{ij}^{(\lambda)} \text{ es la integral de transferencia.}$$

$H_a$  es el término que representa las atracciones atractivas entre electrones s,d cuya expresión es  $H_a = |U_{dd}| \sum_{ij\sigma} n_{i\sigma}^d n_{i-\sigma}^d + |U_{sd}| \sum_{ij\sigma} n_{i\sigma}^s n_{i-\sigma}^d$ , donde  $n_{i,\pm\sigma}^\lambda = \lambda_{i\sigma}^+ \lambda_{i,\pm\sigma}$  con

$U_{dd} < 0$  y  $U_{sd} < 0$  ( $U_{sd} < U_{dd}$ ) y el término de hibridización a un cuerpo dado por

$$H_V = \sum_{ij\sigma} V_{sd} (c_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} + d_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}). \quad \text{Empleando la ec. (5) obtenemos el sistema de ecs.}$$

acopladas

$$\begin{pmatrix} z - \tilde{\varepsilon}_{sk} & -V_k & 0 & \Delta_{sd}^* \\ -V_k & z - \tilde{\varepsilon}_{dk} & -\Delta_{sd}^* & \Delta_{dd}^* \\ 0 & -\Delta_{sd}^* & z + \tilde{\varepsilon}_{sk} & V_k \\ \Delta_{sd}^* & \Delta_{dd}^* & V_k & z + \tilde{\varepsilon}_{dk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\langle c_{k,\sigma}; A \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{k,\sigma}; A \rangle\rangle \\ \langle\langle c_{-k,-\sigma}^+; A \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{-k,-\sigma}^+; A \rangle\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \{c_{k,\sigma}; A\} \rangle \\ \langle \{d_{k,\sigma}; A\} \rangle \\ \langle \{c_{-k,-\sigma}^+; A\} \rangle \\ \langle \{d_{-k,-\sigma}^+; A\} \rangle \end{pmatrix}, \quad (15)$$

donde  $A = c_{k,\sigma}^+$  o  $d_{k,\sigma}^+$ . Finalmente, desde los propagadores  $\langle\langle c_{i\sigma}^+, d_{i-\sigma}^+ \rangle\rangle$  y  $\langle\langle d_{i\sigma}^+, d_{i-\sigma}^+ \rangle\rangle$  y usando el teorema del salto de las funciones de Green, calculamos la ec. de auto-consistencia para el parámetro de orden,

$$\Delta_r^* = \frac{|U_r|}{8\pi} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \rho_s(z) dz \sum_{n=1}^2 \frac{L_{nr}(z)}{\omega_n(z)} \tanh \frac{\beta}{2} \omega_n(z), \quad (16)$$

$$L_{nr}(z) = \left[ 1 - (-1)^n \frac{m_r(z)}{F(z)} \right] \Delta_r^* - (-1)^n c_r V \omega_n(z) \Delta_r^*, \quad (17)$$

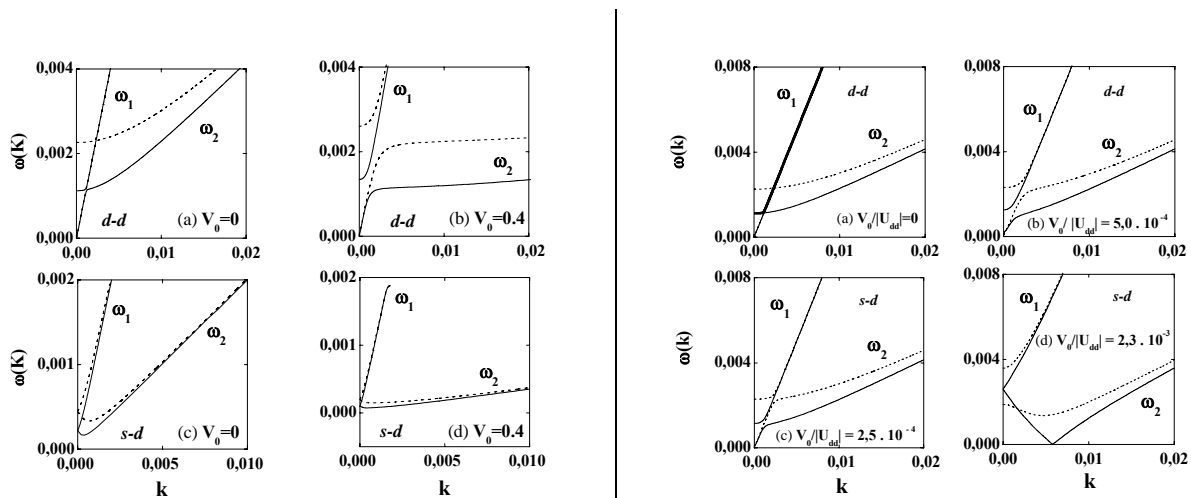
con  $\theta_D = \hbar\omega_D$  la frecuencia de corte de Debye,

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_n(z) = \left\{ \frac{1}{2} [A(z) - (-1)^n F(z)] \right\}, \\ A(z) = (\alpha^2 + 1)z^2 + 2(V^2 + \Delta_{sd}^{*2}) + \Delta_{dd}^{*2}, \\ F(z) = \{[(\alpha^2 - 1)z^2 + \Delta_{dd}^{*2}]^2 + 4V^2[(\alpha + 1)^2 z^2 + \Delta_{dd}^{*2}] \\ + 4\Delta_{sd}^{*2}[(\alpha - 1)^2 z^2 + \Delta_{dd}^{*2}]\}^{1/2} \end{array} \right. \quad (18)$$

En la ec. (16) cuando  $r=sd$   $r'=dd$  y viceversa. La temperatura crítica  $T_{c,r}$  se calcula desde (16) considerando  $\Delta_r(T_{c,r} = 0) = 0$  y representa la temperatura por debajo de la cual la resistividad eléctrica del metal es nula. La energía de las quasi-partículas esta dada por los polos de (18), i.e.,  $\omega_n(z) = \omega(k)$ .

### 3.2 Resultados

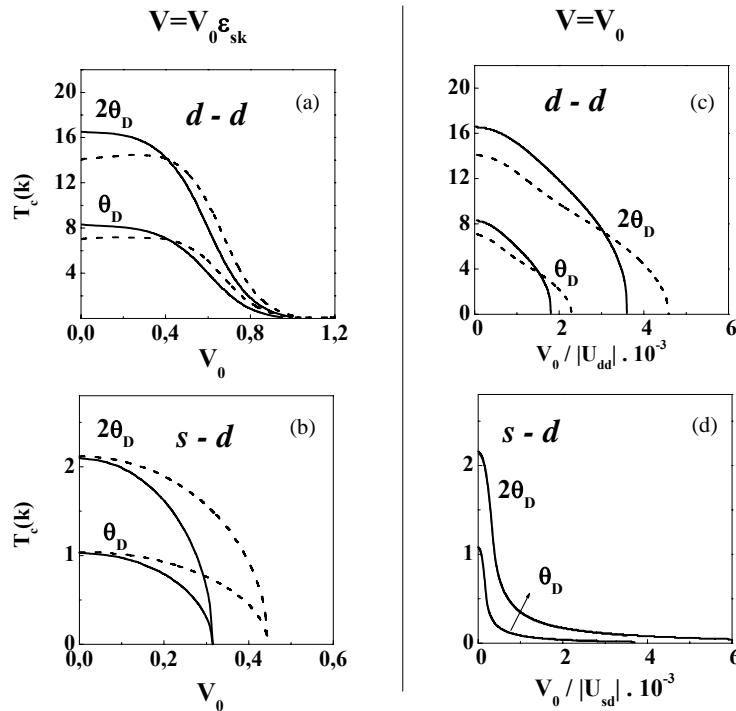
Estudiamos el efecto de la hibridización sobre la superconductividad para sistemas descritos por das bandas superpuestas junto al nivel de Fermi. Verificamos como el espectro de excitación, la temperatura crítica ( $T_c$ ), el parámetro de orden y el gap de las quasipartículas son modificados en presencia de la hibridización con respecto a la situación BCS usual. Presentamos un análisis numérico de estos resultados y etcuamos posibles conexiones con medidas disponibles de  $T_c$ .



**Figura 4:** Espectro de energía de las quasi-partículas  $\omega(k)$  vs  $k$  para  $V(k)=V_0 \varepsilon_{sk}$  (a la izquierda) y  $V=V_0$  (a la derecha). Las líneas sólida corresponde a una energía de corte  $\theta_D$  (frecuencia de Debye) y la de trazos a  $2\theta_D$ .  $\omega_i(k)$ ,  $i = 1,2$  corresponden a las dos ramas del espectro de energías. La línea vertical separa los dos casos de  $V$

En la Figura 4, para  $V(k)=V_0 \varepsilon_{sk}$ , podemos observar que los niveles de energía de las quasi-partículas evitan los cruzamientos, indicando una repulsión de niveles inherente a la quiebra de integrabilidad del Hamiltoniano original de "pairing". Las energías de excitación son llevadas de un estado inicial itinerante (a,c) para un estado que indica una progresiva localización de las quasi-partículas (b,d). Para  $V$  local, observamos la existencia de un

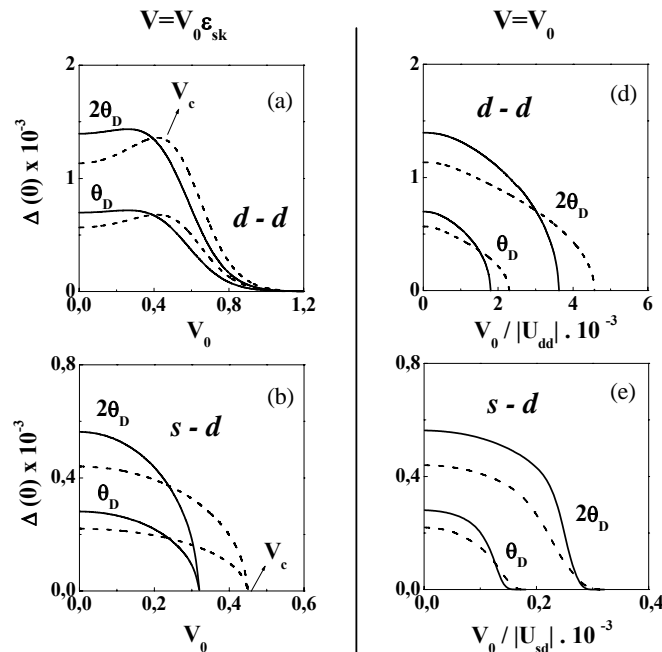
valor de  $k$  en el cual  $\omega(k) \sim 0$ , a medida que aumentamos  $V_0 / |U_r|$ . Aparece una condición de criticalidad para el acoplamiento  $s$ - $d$ , que establece un valor límite de la hibridización en función de las masas efectivas y de la frecuencia de corte  $\theta_D$ , sin ninguna dependencia del parámetro de orden BCS.



**Figura 5:** Temperatura crítica en función de la hibridización para dos frecuencias de corte  $\theta_D$ . A izquierda, son mostrados resultados de  $T_{c,r}$  para  $V_k$ . A la derecha los resultados para  $V_0$ . En líneas sólidas  $\alpha = 0.1$  y en puntilladas  $\alpha = 0.2$ . La línea vertical separa ambas situaciones. Las  $T_{c,r}$  son graficadas para dos frecuencias de corte diferentes. Comportamientos típicos BCS son observados en las figuras (a) y (d). En (b) y (c) existe claramente un valor de  $V$  en el cual  $T_c$  se anula para ambos acoplamientos y ambas  $V$ .

Cuando comparamos los resultados según el tipo de hibridización, verificamos que la temperatura crítica del sistema cambia el comportamiento. En la Figura 5, para el caso de  $V_k$ ,  $T_{c,dd}$  decae a cero conforme  $V_0$  aumenta, siguiendo un comportamiento típicamente BCS, mientras que para  $V$  constante  $T_{c,dd}$  se anula en un determinado valor crítico  $V_c / |U_{dd}|$  que depende de los parámetros  $\alpha$  y  $\theta_D$  (c). Para el acoplamiento  $s$ - $d$ , observamos el comportamiento contrario. Existe un valor crítico de hibridización que depende únicamente del parámetro  $\alpha$ ,  $V_c = \sqrt{\alpha}$ , en el cual  $T_{c,sd}$  es nula (c) y decae a cero para  $V_0$  local (d). Notar que  $T_{c,sd}$  para  $V_0$  es independiente del parámetro  $\alpha$ . De forma cruzada  $T_{c,dd}$  decae a cero independientemente de  $\alpha$  y de la frecuencia de corte (a). En (b) existe un potencial crítico para  $T_{c,sd}$  que depende únicamente de  $\alpha$  e independe de  $\theta_D$ . En todos los

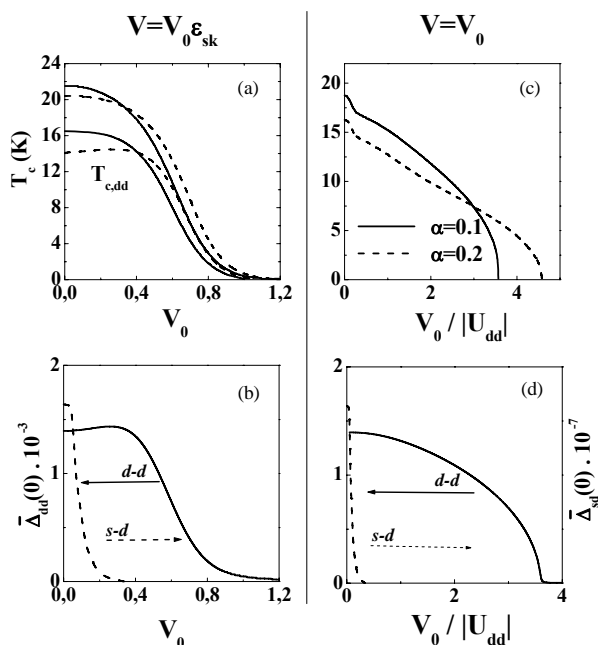
casos (a-d) al duplicar la región donde asumimos tener formación de pares se duplica  $T_{c,r}$  ( $r=sd,dd$ ) cuando  $V=0$ , siendo que en (d) podríamos definir una ley de escala.



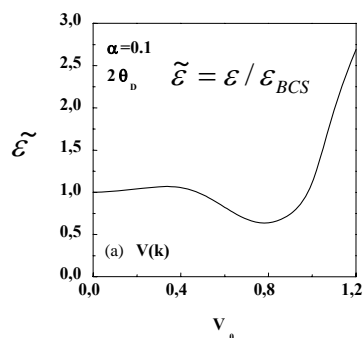
**Figura 6:** Parámetro de orden para los acoplamientos s-d y d-d a  $T=0K$  en función de  $V$  (local y no-local). Son consideradas dos frecuencias de corte  $\theta_D$  y  $2\theta_D$  como también dos valores para el parámetro  $\alpha$ ,  $\alpha=0.1$  (líneas sólidas) y  $\alpha=0.2$  (en trazos).

En la Figura 6 son mostrados los resultados para el parámetro de orden del sistema desacoplado. Consistentemente con la  $T_c$ , el gap tiende a cero de la forma usual (BCS) o existe un potencial crítico en el cual esta magnitud se anula. Las expresiones de  $V_c$  son idéntica para ambos parámetros ( $T_c$  y  $\Delta$ ). Encontramos la misma ley de escala para la cual al duplicar la frecuencia de corte  $\theta_D$  se duplica  $\Delta$  cuando  $V=0$ . Una diferencia observada para  $\Delta$  con respecto al comportamiento de  $T_c$  es el máximo que aparece en el parámetro de orden para el acoplamiento d-d y  $V_k$  en (a). El valor de  $V$  al cual este máximo aparece es el valor  $V_c$  en el cual el gap del acoplamiento s-d se anula (b). Para finalizar, se puede ver que  $\Delta_{dd} \gg \Delta_{sd}$  para los dos casos de hibridización considerados, consistentemente con  $T_c$ .

### 3.3 Sistema acoplado: Posibles conexiones con datos experimentales



**Figura 7:** Resultados para el sistema acoplado vs  $V$ . En (a) y (c) mostramos la  $T_c$ , en (b) y (d) el parámetro de orden  $\Delta$ . Desde estos gráficos calculamos  $\varepsilon = 2\Delta/k_B T_c$  y observamos que en las vecindades de  $V_c$ ,  $\varepsilon/\varepsilon_{BCS} > 1$ . Por ejemplo para  $V_k$



A continuación la tabla I resume la aplicación de nuestro modelo, a dos bandas acopladas, a los datos experimentales obtenidos de la literatura. En la Figura 7, mostramos los resultados para el sistema acoplado (SA). En este caso podemos observar que los resultados son consistentes con los ya mostrados para el sistema desacoplado.

**Tabla I**

Temperaturas críticas Superconductores Tipo I (BCS) y Tipo II (HTSC).  
 $T_c$  es la temperatura crítica calculada con el presente modelo

$\alpha$	$\hbar\omega_D$ (eV)	$T_c$ (K)	$T_c$ (K)exp.	Material	Estructura Electrónica
0.1	0.01	8.3	7.7	Tc	[Kr]4d <sup>6</sup> 5s <sup>1</sup>
	0.02	16.5	16.9	V <sub>3</sub> Si	.....
0.2	0.01	7.0	7.19	Pb	[Kr]4d <sup>10</sup>
	0.02	14.1	14.4	PbMo	.....
0.1	0.01	1.04	1.08	Ga	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>
0.2	0.02	2.12	2.31	Tl	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>

HTSC (son superconductores tipo II y poseen  $T_c > 22K$ )

#### 4. Conclusiones

En presencia de  $V$ , el cociente  $\varepsilon = 2\Delta / K_B T_c$  alcanza valores superiores al BCS(3.55), por lo tanto, no excluimos un tratamiento tipo BCS para la explicación de materiales con alta temperatura crítica (HTCS). De este modo, verificamos que, cuando tenemos la posibilidad de formar simultáneamente ambos tipos de pares d-d y s-d para  $|U_{sd}| / |U_{dd}| = 1/2$ , conduce a la inestabilidad del s-d ( $T \approx T_{c,dd}$  y  $\Delta \approx \Delta_{dd}$ )<sup>3</sup>. Para el caso desacoplado, verificamos  $T_{c,dd} \gg T_{c,sd}$   $\Delta_{dd} \gg \Delta_{sd}$ .

#### Referencias

1. P. G. De Gennes De Gennes, J. Friedel, Phys. Chem. Solids, 4, 71 (1958).
2. J.A. Blackman, R.J. Elliot, J. Phys. C, 2, 1670 (1969); A. Troper, A. A. Gomes, Phys. Stat. Sol. (b) 68, 99 (1975).
3. N. A. de Oliveira, A. A. Gomes e A. Troper, Phys. Rev B, 52, 13, 9137 (1995).
4. V.P. Ramunni, N.A. de Oliveira, A. Troper, Modern Physics Letter B, 18(4), 149-152 (2004).
5. V.P. Ramunni, N.A. de Oliveira, A. Troper, Physica B, 354, 345-348 (2004).
6. D. A. Papaconstantopoulos, "Handbook of the band structure of elemental solids", Plenum Press, New York (1986) J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, A 276, 238(1963).
7. F. J. Blatt, Phys.Rev., 108, 285(1957).
8. W. Speier, J. F. van Acker e R. Zeller, Phys. Rev. B, 41, 2753 (1990) / 43, 13916 (1991).
9. I. Mertig, E. Mrosan, R. Zeller, P.H. Dederichs, Phys. Stat. Sol. (b), 117, 619 (1983). W. Speier, J. F. van Acker e R. Zeller, Phys. Rev. B, 41, 2753 (1990) / 43, 13916 (1991).
10. V.P. Ramunni, G.M. Japiassú, A. Troper, Physica C, 408-410 (2004) 355-357.
11. V.P. Ramunni, G.M. Japiassú, A. Troper, Physica C, 408-410 (2004) 358-360.
12. V.P. Ramunni, G.M. Japiassú, A. Troper, Physica C, 364-365 (2001) 190-198.
13. V.P. Ramunni, G.M. Japiassú, A. Troper, Physica C, 341-348 (2000) 137-138.
14. V.P. Ramunni, G.M. Japiassú, A. Troper, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 226-230, (2001) 376.

<sup>3</sup> En cuanto a la superconductividad, el estudio del coeficiente isotópico,  $\gamma = d \ln T_c / dM$  ( $M$  la masa isotópica), como del salto del calor específico,  $\Delta C$ , fue omitido en el presente trabajo. Las publicaciones de las propiedades termodinámica de los sistemas superconductores a dos bandas hibridizadas se encuentran en las Refs. [10] a [14].