

**VINÍCIUS SANT UNIONI ÂNGELO VARGAS**

**ESTUDO SOBRE INJEÇÃO DE CORRENTES DE SPIN EM INTERFACES  
MAGNÉTICAS/SUPERCONDUTORAS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Antônio Ribeiro de Moura

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2020**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

V297t  
2020  
Vargas, Vinícius Sant Unioni Ângelo, 1995-  
Estudo sobre injeção de correntes de spin em interfaces  
magnéticas/supercondutoras / Vinícius Sant Unioni Ângelo  
Vargas. – Viçosa, MG, 2020.  
90 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador: Antonio Ribeiro de Moura.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.  
Referências bibliográficas: f. 88-90.

1. Spintrônica. 2. Ferromagnetismo. 3. Supercondutividade.  
I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física.  
Programa de Pós-Graduação em Física. II. Título.

CDD 22. ed. 537.622

VINÍCIUS SANT UNIONI ÂNGELO VARGAS

ESTUDO SOBRE INJEÇÃO DE CORRENTES DE SPIN EM INTERFACES  
MAGNÉTICAS/SUPERCONDUTORAS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 04 de março de 2020.

Assentimento:



Vinícius Sant Unioni Ângelo Vargas  
Autor



Antônio Ribeiro de Moura  
Orientador

## **AGRADECIMENTOS**

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

## RESUMO

VARGAS, Vinicius Sant Unioni Ângelo, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, março de 2020.  
**Estudo sobre injeção de correntes de spin em interfaces magnéticas/supercondutoras.**  
Orientador: Antônio Ribeiro de Moura.

Nesse trabalho investigamos a injeção de corrente de spin na interface entre um isolante ferromagnético (FMI) e um supercondutor (SC) através da teoria de resposta linear. Uma vez que elétrons não podem penetrar no isolante ferromagnético (FMI), não há corrente elétrica na interface. No entanto, os elétrons do supercondutor invertem seu spin ao interagirem com os elétrons localizados do ferromagneto. Assumindo um desbalanço  $\delta\mu = \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$  entre os potenciais químicos dos elétrons de spin up e down no supercondutor, os elétrons do estado de spin mais populado são refletidos na interface com maior frequência, resultando na transmissão de corrente de spin via emissão/absorção de mágnons no ferromagneto. Ao fazer uso do formalismo de Schwinger para descrever o ferromagneto, estudamos a influência da transição de fase paramagnética na corrente de spin, assim como também estudamos a transição de fase supercondutora. Mostramos e discutimos resultados interessantes na fase paramagnética em que encontramos picos de coerência na corrente de spin mesmo quando as excitações magnéticas são térmicas, não se fazendo necessário a existência de mágnons coerentes gerados pela aplicação de campo magnético oscilante.

Palavras-chave: Spintrônica. Supercondutividade. Ferromagnetismo.

## ABSTRACT

VARGAS, Vinicius Sant Unioni Ângelo, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, March, 2020.  
**Spin current injection in magnets/superconductor interface: a case study.** Advisor:  
Antônio Ribeiro de Moura.

We used the Linear Response Theory to determine the injection of spin current at the interface between a ferromagnetic insulator (FMI) and a superconductor (SC). Since electrons can not penetrate in the FMI, there is no electric current across the interface. However, a spin-flip scattering allows to quasi-particles to exchange spin with localized electrons in the FMI. Assuming an imbalance  $\delta\mu = \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$  between the up and down-spin chemical potential in the SC, electrons in the most populated state flip their spin at the interface with higher probability than the least populated while magnons are absorbed or emitted at the interface. Within the Schwinger representation for the ferromagnet, we are able to study the paramagnet phase transition influence on the spin current, as well as the superconductor phase transition. We discuss interesting results in the paramagnet phase that show coherence factors peaks in the spin current due to superconductivity even when magnetic excitations are provided only by thermal fluctuations. It is worth to note that the oscillating magnetic field usually applied to produce coherent magnons is not needed in our proposal.

Keywords: Spintronics. Superconductivity. Ferromagnetism.

## SUMÁRIO

<b>I</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
<b>II</b>	<b>Magnetismo</b>	<b>11</b>
2.1	Mágnons	12
2.1.1	Representação de Holstein-Primakoff	14
2.2	Bósons de Schwinger	16
2.2.1	Bósons de Schwinger em um ferromagneto	17
2.3	Interação RKKY	25
	Apêndices	27
II.A	Modelo de Heisenberg	27
<b>III</b>	<b>Teoria BCS</b>	<b>30</b>
3.1	Interação atrativa entre elétrons	30
3.2	Teoria de campo médio da supercondutividade	33
3.2.1	Estado fundamental	37
3.2.2	Densidade de estados	38
3.2.3	Notação de semicondutores	40
	Apêndices	42
III.A	Fônons: descrição	42
III.B	Interação elétron-fônon	45
<b>IV</b>	<b>Resultados: modelagem e efeitos da Interface FM/SC</b>	<b>47</b>
4.1	O modelo	47
4.2	Cálculo da corrente de spin	50
4.2.1	Propagador eletrônico	52
4.2.2	Propagador magnético	53
4.2.3	Propagador de spin na interface	55
4.3	Convenção de sinal de semicondutores	57
4.3.1	Regime de espalhamento	59
4.3.2	Regime de absorção	61
4.3.3	Regime de emissão	62
	Apêndices	64
IV.A	Corrente de spin total	64
<b>V</b>	<b>Discussão e Conclusão</b>	<b>66</b>
5.1	Holstein-Primakoff	68
5.1.1	Curvas de absorbância	69
5.1.2	Dependência com a temperatura	71

5.2	Bósons de Schwinger . . . . .	75
5.2.1	Metal normal: $ \Delta  = 0$ . . . . .	77
5.2.2	Transição ferromagnética > supercondutora: $6JS\chi \gg  \Delta_0 $ . . . . .	80
5.2.3	Transição ferromagnética < supercondutora: $6JS\chi \ll  \Delta_0 $ . . . . .	82
5.2.4	Transição ferromagnética $\sim$ supercondutora: $6JS\chi =  \Delta_0 $ . . . . .	85
5.3	Conclusão . . . . .	86

# Capítulo I

## Introdução

Chips de computadores modernos possuem densidade de 20 milhões de transistores por milímetro quadrado. O número atual de transistores em chips modernos está em torno de 20 bilhões. Comparado com os mil transistores por chip da década de 70, o incrível aumento só foi possível devido ao avanço das técnicas de litografia, permitindo a criação de transistores cada vez menores. A distância entre os dois terminais de um transistor (chamados de fonte e o dreno) mede em torno de 10nm nos dispositivos utilizados pelos processadores mais modernos. Contudo, há uma limitação física para o transistor: Em numa distância de 10nm cabem aproximadamente de 10 átomos de silício. Nesse regime, efeitos quânticos começam a ditar o comportamento do dispositivo. Diminuindo mais em tamanho, efeitos de tunelamento eletrônico comprometem a operação do transistor como bloco de construção de circuitos lógicos<sup>[1]</sup>.

Nesse contexto a física básica tem o papel importante de descobrir novos fenômenos em materiais e junções entre materiais que podem ser utilizados na elaboração de novas tecnologias. O conhecimento produzido na investigação se mostrou útil, ao longo da história, para idealizar e construir dispositivos lógicos, sensores, memórias, etc.

O spin eletrônico não têm qualquer papel relevante no mecanismo de funcionamento de transistores convencionais. Na spintrônica, no entanto, investigamos formas de utilizar essa propriedade para manipular os sinais elétricos que medimos. Em uma junção ferromagneto/supercondutor/ferromagneto (FM/SC/FM), denominada válvula de spin supercondutora, a supercondutividade é suprimida quando os dois ferromagnetos tem orientação contrária devido ao acúmulo de quasi-partículas polarizadas em spin no supercondutor<sup>[2-4]</sup>, mudando a

resistência entre os canais fonte e dreno. A orientação relativa da magnetização dos ferromagnetos funciona como uma válvula, com resistência relativa entre os dois modos de até 100%. Dessa forma, a junção FM/SC/FM é apta de ser utilizada em circuitos lógicos.

Uma corrente elétrica em um ferromagneto condutor é naturalmente polarizada em spin, devido a polarização natural dos elétrons no material. Em metais não magnéticos, no entanto, corrente de spin é obtida quando elétrons de spins opostos se movem em direções opostas, denominada corrente de spin pura. É possível converter corrente elétrica em corrente de spin (e vice-versa) pelo efeito Hall de spin em materiais com acoplamento spin-órbita forte<sup>[5-8]</sup>. Além do mais, é natural que gradientes de temperatura criem corrente de partículas (efeito Seebeck) devido à segunda lei da termodinâmica, em que energia concentrada tende a se espalhar. Se as partículas são elétrons polarizados em spin (como em ferromagnetos condutores), ocorre o efeito spin Seebeck<sup>[9]</sup>, em que é transportado spin devido ao gradiente de temperatura. Ademais, mágnons em materiais magnéticos isolantes se comportam como partículas livres, obedecendo ao mesmo princípio entrópico. Como carregam spin, é natural que também exista efeito spin Seebeck em isolantes devido ao transporte de mágnons<sup>[10]</sup>. Correntes de spin magnônicas são observadas em isolantes ferromagnéticos<sup>[11; 12]</sup>, antiferromagnéticos<sup>[13-17]</sup> e paramagnéticos<sup>[14]</sup>. É possível criar corrente de spin pura em um condutor quando acoplado a um ferromagneto isolante através de ressonância ferromagnética, processo conhecido como spin pumping<sup>[12; 18]</sup>. O efeito Hall de spin inverso, em que uma corrente de spin induz a contraparte elétrica, provocando diferença de potencial transversa na amostra, é utilizado como mecanismo de detecção de correntes de spin em condutores<sup>[19; 20]</sup>. Esse mecanismo pode ser utilizado na criação de válvulas de spin magnônicas<sup>[21]</sup>.

Nesse trabalho consideramos o processo inverso do *spin pumping*. Um supercondutor inicialmente polarizado em spin, com diferença de potencial químico entre elétrons de spin up e down  $\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} > 0$ , injeta corrente de spin em um ferromagneto ao induzir criação de mágnons na interface, processo conhecido como *spin-transfer torque* (STT). Os dois sistemas (supercondutor e ferromagneto) estão acoplados via interação de troca entre elétrons livres (supercondutor) e ligados (ferromagneto) na interface. Esse mecanismo é conhecido como interação sd<sup>[22-24]</sup>. O processo direto (spin pumping em supercondutores) já é conhecido na literatura<sup>[25]</sup>. No entanto, nessa dissertação é utilizada a representação de Schwinger, ideal também para descrever a fase desordenada do ferromagneto, nos permitindo calcular a corrente

de spin também na fase paramagnética. Já existem na literatura resultados teóricos sobre a injeção de corrente de spin em um paramagneto acoplado a um metal comum<sup>[23]</sup>. No entanto, o autor Okamoto encontra o resultado  $j_s \propto T^3$  ao desconsiderar a contribuição do condensado dos bósons de Schwinger para a corrente de spin. Tal resultado é corrigido em nossa análise como caso limite da nossa teoria em que o parâmetro de ordem do supercondutor é nulo. Nos dois próximos capítulos desenvolvemos a base em magnetismo e supercondutividade necessária para realização do trabalho.

# Capítulo II

## Magnetismo

Embora o modelo de Heisenberg

$$\mathcal{H}_{\text{mag}} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} [S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z] , \quad (S_j^\pm = S_j^x \pm i S_j^y) \quad (2.1)$$

descreva interações fortes entre spins vizinhos em materiais<sup>1</sup>, soluções analíticas dos auto-estados e auto-energias são impossíveis de serem obtidas em três dimensões. A primeira dificuldade na descrição precisa de um material está no cálculo das constantes de troca  $J_{ij}$ , dependentes da geometria das ligações químicas entre átomos próximos. No entanto, buscamos efeitos gerais não específicos da geometria. Para isso, descrevendo um material tri-dimensional, escolhemos a geometria cúbica isotrópica, a mais simples possível:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, & \text{se } \boldsymbol{\delta} = \pm \hat{x}, \pm \hat{y} \text{ ou } \pm \hat{z}, \text{ em que } \mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \boldsymbol{\delta}. \\ 0, & \text{do contrário.} \end{cases}$$

Mesmo com a geometria simplificada, não existe solução analítica do modelo de Heisenberg em três dimensões. Para descrever um material 3D, precisamos utilizar soluções aproximadas. Nesse capítulo a teoria de um ferromagneto é desenvolvida em duas aproximações:

- Bósons de Holstein-Primakoff: mágnons.
- Teoria de campo médio dos bósons de Schwinger.

---

<sup>1</sup>Veja o apêndice II.A para entender a origem da interação de troca e do modelo de Heisenberg.

Terminamos o capítulo com uma formulação da interação entre elétrons de condução e elétrons localizados em átomos magnéticos, denominada RKKY. O trabalho descrito nessa dissertação faz uso dessa interação pra descrever a interface entre um ferromagneto isolante e um supercondutor.

## 2.1 Mágnons

O estado fundamental de um ferromagneto é caracterizado pelo spin de todos os átomos alinhados em uma direção preferencial (chamaremos de  $z$ ), com energia  $E_0 = -3N_m JS^2$ , em que  $N_m$  é a quantidade de átomos em um grão cristalino do material magnético (amostra cúbica isotrópica). Nesse estado, todos os átomos da rede cristalina estão em um auto-estado de spin  $S_i^z|0\rangle = S|0\rangle$ . O spin total é conservado no modelo de Heisenberg  $[S_{\text{tot}}^z, \mathcal{H}_{\text{mag}}] = 0$ , portanto todos os auto-estados de  $\mathcal{H}_{\text{mag}}$  são caracterizados por um auto-valor de  $S_{\text{tot}}^z = \sum_i S_i^z$ . O primeiro estado excitado deve ter projeção de spin  $SN_m - 1$ . Considere um desvio de spin em um único átomo, representado por

$$|\mathbf{R}_i\rangle = \frac{1}{2S} S_i^- |0\rangle ,$$

em que o estado é devidamente normalizado ( $\langle \mathbf{R}_i | \mathbf{R}_j \rangle = \delta_{ij}$ ). Podemos através da relação

$$\mathcal{H}_{\text{mag}} |\mathbf{R}_i\rangle = E_0 |\mathbf{R}_i\rangle + 6SJ |\mathbf{R}_i\rangle - SJ \sum_{\delta} |\mathbf{R}_i + \delta\rangle$$

ver que  $|\mathbf{R}_i\rangle$  não é auto-estado de  $\mathcal{H}_{\text{mag}}$ . Visando excitações com  $S_{\text{tot}}^z = SN_m - 1$  que mantêm a simetria de translação de  $\mathcal{H}_{\text{mag}}$ , construímos o estado

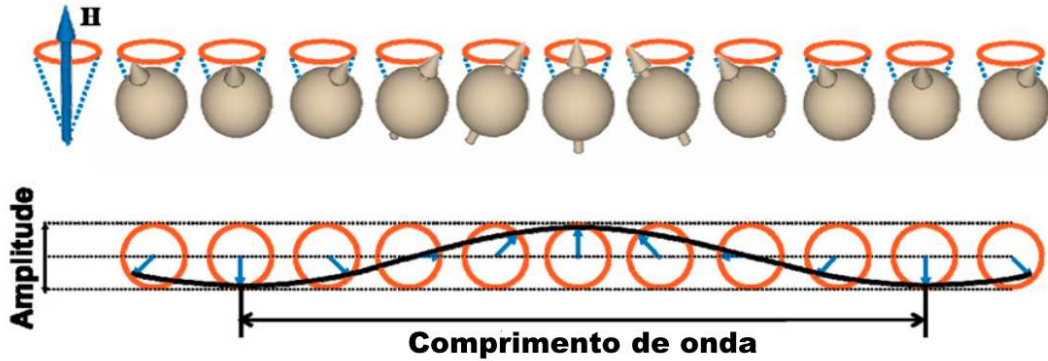
$$|\mathbf{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} |\mathbf{R}_i\rangle ,$$

que de fato diagonaliza  $\mathcal{H}_{\text{mag}}$  com energia  $E_0 + \hbar\omega_{\mathbf{q}}$ , em que

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}} = 6JS \left( 1 - \frac{\cos(q_x) + \cos(q_y) + \cos(q_z)}{3} \right) .$$

Os estados  $|\mathbf{q}\rangle$  são conhecidos como mágnons (ondas de spin, na formulação clássica),

Figura 2.1: Dinâmica coletiva dos spins acoplados com formato de onda plana. Imagem obtida de Kim [26].



excitações periódicas de spin down (em referência à direção de saturação) nos spins atômicos com vetor de onda  $\mathbf{q}$  bem definido (ondas planas). O limite de baixas energias tem relação de dispersão quadrática bem conhecida  $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \approx JSq^2$ , útil para derivar propriedades físicas, como magnetização e contribuição dos mágnons para o calor específico da rede magnética.

Como os estados  $|\mathbf{q}\rangle$  são auto-estados de  $\mathcal{H}_{\text{mag}}$ , este pode ser escrito de forma diagonal

$$\mathcal{H}_{\text{mag}} = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}},$$

em que  $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$  e  $a_{\mathbf{q}}$  são os operadores de criação e aniquilação de mágnons com momento  $\mathbf{q}$ . A identificação

$$a_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} a_i^{\dagger}; \quad a_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} a_i; \quad a_i^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_i^+; \quad a_i = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_i^- \quad (2.2)$$

é direta, cujo operador  $a_i^{\dagger}$  cria mágnons ( $a_i$  aniquila) localizados e

$$S_i^z = S - a_i^{\dagger} a_i = S - n_i$$

relaciona a projeção de spin com o número de mágnons. No entanto os operadores  $a_i^{\dagger}$  e  $a_i$  não descrevem bósons livres pois satisfazem a relação  $[a_i, a_j^{\dagger}] = \frac{1}{2S} [S_i^+, S_j^-] = \delta_{ij}(1 - n_i/S) \neq \delta_{ij}$ . Dessa forma, não é possível resolver o modelo de Heisenberg nessa representação. Na busca por excitações bosônicas livres, precisamos de alguma aproximação que considere  $n_i/S \rightarrow 0$ .

### 2.1.1 Representação de Holstein-Primakoff

Na fase em que a simetria de rotação do modelo de Heisenberg (2.1) é quebrada, o valor esperado de pelo menos uma das componentes de spin é não-nulo, sendo uma fase ordenada. É natural descrevê-la em termos de flutuações dos spins em torno de seu valor saturado. A representação de Holstein-Primakoff leva em conta a quebra de simetria do sistema, introduzindo um operador bosônico  $a_i$  a partir do qual os operadores de spin são descritos como:

$$S_i^+ = \left( \sqrt{2S - n_{ai}} \right) a_i, \quad (2.3a)$$

$$S_i^- = a_i^\dagger \left( \sqrt{2S - n_{ai}} \right), \quad (2.3b)$$

$$S_i^z = S - n_{ai}, \quad (2.3c)$$

sendo  $n_{ai} = a_i^\dagger a_i$ . Nessa formulação a regra de comutação para bósons  $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$  é compatível com a álgebra de momento angular  $[S^\alpha, S^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S^\gamma$ , da qual  $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$  é o símbolo de Levi-Civita. Diferente da representação exata, equações (2.2), os bósons de Holstein-Primakoff (de agora em diante denominados como mágnons) possuem estatística trivial bosônica. O espaço de Fock físico dos operadores  $a$  é gerado pelos estados  $\{|n_a\rangle\}_S = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2S\rangle\}$ . Podemos ver das equações (2.3) que as partículas criadas por  $a^\dagger$  carregam spin down (em referência a direção de saturação). Os estados  $n_a > 2S$  não são físicos por tornarem  $S^z < -S$ , sendo  $S$  a projeção spin máxima. Além do mais,  $n_a > 2S$  torna a hamiltoniana de Heisenberg um operador não hermitiano.

Considerando baixa densidade de ondas de spins,  $n_a \ll S$ , a raiz quadrada em (2.3) pode ser expandida em potências de  $n_a/S$ :

$$\sqrt{2S - n_a} = \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{n_a}{4S} - \frac{n_a^2}{32S^2} + \dots \right).$$

Substituindo (2.3) em (2.1) mantendo apenas termos quadráticos em operadores, obtemos uma hamiltoniana de ondas de spin não interagentes. Os termos de ordem quadrática ou maior no número de mágnons (ordem quártica ou maior em operadores) representam interações entre estes. Em particular, o termo quadrático no número de mágnons  $\mathcal{O}(n_a^2)$  pode ser contabilizado aproximadamente por uma teoria  $\phi^4$ . No entanto, a hamiltoniana quadrática é excelente

aproximação em baixas temperaturas.

O modelo de Heisenberg (2.1) na representação (2.3), ao considerarmos mágnons não interagentes, se torna:

$$\mathcal{H}_{\text{HP}} = E_0 - 2\gamma\mu_B H S N_m + 2\gamma\mu_B H \sum_i a_i^\dagger a_i + SJ \left[ 6 \sum_i a_i^\dagger a_i - \sum_{i,j=i+\delta} a_i^\dagger a_j \right]$$

em que foi considerado um campo magnético externo uniforme favorecendo a configuração  $S^z > 0$  através da energia Zeeman<sup>2</sup>  $-2\gamma\mu_B H \sum_i S_i^z$ . O hamiltoniano  $\mathcal{H}_{\text{HP}}$  é diagonalizado no espaço de Fourier:

$$\mathcal{H}_{\text{HP}} = E_0 - 2\gamma\mu_B H S N_m + \sum_{\mathbf{q}} (\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}} + 2\gamma\mu_B H) a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}}$$

em que

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}} = 6JS \left( 1 - \frac{\cos(q_x) + \cos(q_y) + \cos(q_z)}{3} \right) \quad (2.4a)$$

é a energia cinética e  $2\gamma\mu_B H$  faz o papel de um termo de massa dos mágnons (energia mínima necessária pra sua criação). A energia do estado fundamental na presença de campo magnético é  $E_0 - 2\gamma\mu_B H S N_m$ . A energia livre é calculada  $\mathcal{F}_{\text{HP}} = -\ln [\text{Tr} (e^{-\beta\mathcal{H}_{\text{HP}}})] / \beta$

$$\mathcal{F}_{\text{HP}} = E_0 - 2\gamma\mu_B H S N_m + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left( 1 - e^{-\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}} + 2\gamma\mu_B H)} \right). \quad (2.5)$$

A magnetização do ferromagneto é prevista como

$$M = S - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3q}{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}}} - 1} \stackrel{!}{=} S \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right], \quad (2.6)$$

em que  $T_c = 8.32JS$ . Na igualdade  $\stackrel{!}{=}$  foi utilizada a aproximação de baixas energias (baixa temperatura)  $\hbar\omega_{\mathbf{q}} = JSq^2$ . De fato, o comportamento  $(T/T_c)^{3/2}$  é verificado experimentalmente. A temperatura crítica  $T_c = 8.32JS$  descreve um fenômeno de temperaturas altas

<sup>2</sup>O fator giromagnético foi introduzido como  $2\gamma$  ao invés da notação comum na literatura  $\gamma$  apenas por conveniência da representação de Schwinger, discutida na próxima seção. Seguindo a notação padrão,  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$  é o magneton de Bohr.

$\mathcal{O}(100\text{K})$  (a interação de troca  $J$  é muito forte). Uma vez que a representação de Holstein-Primakoff negligencia termos de ordem quadrática ou superior em  $(n_a/2S)$ , o regime de validade está limitado a baixas temperaturas ( $T \ll T_c$ ), em que a aproximação  $\hbar\omega_q = JSq^2$  não comete erro considerável. A representação do ferromagneto por bósons de Schwinger, discutida na próxima seção, reproduz o resultado  $\Delta M \propto (T/JS)^{3/2}$ . Contudo, a representação de Schwinger também é útil na descrição da fase paramagnética (pós-transição de fase).

## 2.2 Bósons de Schwinger

Diferente da representação de Holstein-Primakoff, a representação de Schwinger mantém a simetria de rotação do modelo de Heisenberg, sendo ideal na descrição de fases simétricas. O modelo de Schwinger faz uso de dois bósons  $a_{i\uparrow}$  e  $a_{i\downarrow}$ , sendo os operadores de spin representados por:

$$S_i^+ = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}, \quad (2.7a)$$

$$S_i^- = a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow}, \quad (2.7b)$$

$$S_i^z = \frac{1}{2} \left( a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow} \right). \quad (2.7c)$$

A representação de Schwinger dos operadores  $S$  deve satisfazer as propriedades de momento angular:  $[S^x, S^y] = i\hbar S^z$ ,  $[S^2, S^z] = 0$  e  $[S^z, S^\pm] = \pm\hbar S^\pm$ . As relações são satisfeitas quando os bósons de Schwinger, além de satisfazerem a álgebra  $[a_{i\sigma}, a_{j\sigma'}^\dagger] = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$ , têm seu número fixo em cada átomo:  $n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} = 2S$ , dado a magnitude do spin atômico  $S$ . O desbalanço entre as populações de bósons de Schwinger  $n_\uparrow \neq n_\downarrow$  é responsável por criar magnetização no sistema. Vale ressaltar que no conhecimento do autor, os bósons de Schwinger são considerados partículas auxiliares (método útil para cálculo), diferente dos mágnons que podem existir isolados. Das equações (2.7) vemos que os bósons devem ter spin  $\hbar/2$ .

### 2.2.1 Bósons de Schwinger em um ferromagneto

Substituindo as transformações (2.7) no hamiltoniano de Heisenberg (2.1) em geometria cúbica de primeiros vizinhos, obtemos:

$$\mathcal{H}_{\text{Sb}} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \left( : \mathcal{F}_{ij}^\dagger \mathcal{F}_{ij} : - 2S^2 \right) - \gamma \mu_B H \sum_i \left( a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow} \right), \quad (2.8)$$

em que  $\mathcal{F}_{ij} = a_{i\uparrow}^\dagger a_{j\uparrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{j\downarrow}$  é chamado operador de ligação, sendo  $\mathcal{F}_{ii} = 2S$  o vínculo que define o espaço de Fock dos bósons  $a_\uparrow$  e  $a_\downarrow$  (número fixo por sítio). A operação  $::$  na equação (2.8) ordena os operadores de forma que os de criação fiquem à esquerda e os de aniquilação à direita. Foi introduzida a energia Zeeman em cada sítio  $2\gamma\mu_B S_z^i H$ , proveniente de um campo magnético externo uniforme que favorece a configuração *spin up*. O vínculo sobre o número de bósons é relaxado utilizando um campo auxiliar  $\lambda_i$  pra cada sítio, de forma que obtemos um hamiltoniano grande canônico:

$$\mathcal{K}_{\text{Sb}} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \left( : \mathcal{F}_{ij}^\dagger \mathcal{F}_{ij} : - 2S^2 \right) + \sum_i \lambda_i (\mathcal{F}_{ii} - 2S) - \gamma \mu_B H \sum_i \left( a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow} \right). \quad (2.9)$$

Seguindo a descrição de praxe na mecânica estatística,  $\lambda_i$  é visto como o potencial químico, inserido com finalidade de permitir flutuações no número de partículas que possibilitam resolvermos o problema analiticamente e calcularmos quantidades físicas. Quando necessário, o potencial químico é obtido ao fixar em média o número de partículas<sup>3</sup>.

Aplicando a transformação de Hubbard-Stratonovick<sup>4</sup>  $\mathcal{F}_{ij}^\dagger \mathcal{F}_{ij} \rightarrow F(\mathcal{F}_{ij}^\dagger + \mathcal{F}_{ij}) - F^2$ , a

<sup>3</sup>As flutuações no número de partículas são da ordem  $\frac{\delta N}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}$ , desprezível se o sistema tem muitas partículas. No texto, o número de bósons por sítio é fixo em  $2S$ . A flutuação dos bósons de Schwinger na amostra é da ordem  $\frac{\delta N_{\text{sb}}}{N_{\text{sb}}} = \frac{1}{\sqrt{2SN}}$ , em que  $N$  é o número de sítios.

<sup>4</sup>No contexto de integração funcional, desacoplamos o hamiltoniano de quarta ordem em operadores para que torná-lo quadrático e possua solução analítica. Utilizamos a identidade

$$\exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \bar{\mathcal{F}}_{ij}(\tau) \mathcal{F}_{ij}(\tau) \right\} = \int \mathcal{D}^2 \mathbf{Q} \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_{ij} \left[ \frac{2}{J} |Q_{ij}(\tau)|^2 - \bar{\mathcal{F}}_{ij}(\tau) Q_{ij}(\tau) - \mathcal{F}_{ij}(\tau) \bar{Q}_{ij}(\tau) \right] \right\},$$

a custo de introduzir um campo auxiliar  $Q_{ij}(\tau)$ . Sendo quadrática, a integração sobre os campos de Schwinger é realizada, gerando uma ação dos novos campos  $S[\bar{Q}_{ij}(\tau), Q_{ij}(\tau)]$ . A aproximação consiste em minimizar a ação  $\frac{\delta S[\bar{Q}, Q]}{\delta Q_{ij}(\tau)} = 0$ , obtendo uma solução de campo médio  $Q_{ij}(\tau) = Q_{\text{mf}}$ . No texto, denotamos  $F = \frac{2}{J} Q_{\text{mf}}$ , dependente de parâmetros externos (como temperatura e campo magnético).

equação (2.9) se torna:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{\text{Sb}} = & \frac{3NJ}{2}(F^2 + 2S^2) - \frac{JF}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \left( a_{j\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} \right) \\ & + \sum_i \lambda_i \left( \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} - 2S \right) - \gamma \mu_B H \sum_i \left( a_{i\uparrow}^{\dagger} a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

A soma  $\langle ij \rangle$  correlaciona flutuações de spin em sítios vizinhos, fazendo excitações se propagarem ao longo de toda a rede. Para descrever a propagação notamos que ondas planas diagonalizam o hamiltoniano (2.10), uma vez que este é invariante de translação. Utilizando as transformadas de Fourier

$$\begin{aligned} a_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}; & a_{i\sigma}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}; \\ a_{\mathbf{q}\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_{i\sigma} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}; & a_{\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_{i\sigma}^{\dagger} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}, \end{aligned}$$

para mudar a base do operador  $\mathcal{K}_{\text{Sb}}$ , podemos reescrevê-lo na forma diagonal:

$$\mathcal{K}_{\text{Sb}} = \mathcal{K}_0 + \sum_{\mathbf{q}} \left[ (\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \gamma\mu_B H - \mu) a_{\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{q}\uparrow} + (\hbar\omega_{\mathbf{q}} + \gamma\mu_B H - \mu) a_{\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} a_{\mathbf{q}\downarrow} \right], \quad (2.12a)$$

em que

$$\mathcal{K}_0 = \frac{3NJ(F^2 + 2S^2)}{2} - 2SN(3JF - \mu)$$

é a energia mínima do modelo,

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} = 6JS \left( 1 - \frac{\cos(q_x) + \cos(q_y) + \cos(q_z)}{3} \right) \left( \frac{F}{2S} \right) \quad (2.12b)$$

a energia cinética dos bósons de Schwinger e

$$\mu = (3JF - \lambda)$$

o potencial químico. O termo  $F/2S$  em (2.12b) foi evidenciado para melhor comparação com a energia dos mágnons (2.4a). Ao derivar as equações (2.12), o campo médio  $\lambda_i$  foi assumido

constante em todo o espaço  $\lambda_i = \lambda$ . Essa aproximação inclui estados não físicos no sistema, uma vez que permitimos flutuações no número de bósons de cada sítio, mantendo apenas o vínculo sob o número total  $2SN_m = \sum_{q\sigma} n_{q\sigma}$ . Lembramos que a restrição local  $2S = \sum_{\sigma} n_{i\sigma}$  é necessária para os bósons de Schwinger descreverem corretamente o spin. No entanto, correções podem ser feitas a essa aproximação considerando desvios do campo  $\lambda_i$  em torno do campo médio. As correções são trabalhosas de serem implementadas e não mudam em muito a solução de campo médio uniforme  $\lambda$  e, portanto, não serão priorizadas nessa dissertação. O campo  $\lambda$  foi substituído pelo potencial químico  $\mu$  com intuito de fazer o modelo assumir uma forma familiar de problemas sobre condensação de Bose-Einstein, discutidos em livros-texto de mecânica estatística.

Sendo o operador (2.12a) diagonal, é direto calcular a função de partição grande canônica:

$$\mathcal{Z}_{\text{Sb}} = e^{-\beta\mathcal{K}_0} \prod_{\mathbf{q}} \left\{ [1 + n_{\text{B}}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} - \gamma\mu_B H - \mu)] [1 + n_{\text{B}}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} + \gamma\mu_B H - \mu)] \right\},$$

em que  $n_{\text{B}}(E) = 1/(e^{\beta E} - 1)$  é a distribuição de Bose-Einstein. A energia livre<sup>5</sup> por sítio  $\mathcal{F}_{\text{Sb}} = -\ln \mathcal{Z}_{\text{Sb}}/\beta N_m$  é dada por:

$$\mathcal{F}_{\text{Sb}} = \frac{\mathcal{K}_0}{N_m} - \frac{1}{\beta N_m} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \ln [1 + n_{\text{B}}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} - \gamma\mu_B H - \mu)] + \ln [1 + n_{\text{B}}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} + \gamma\mu_B H - \mu)] \right\}. \quad (2.13)$$

O potencial químico é obtido em função dos parâmetros externos  $\mu(T, H)$  ao minimizar a energia livre  $\partial\mathcal{F}_{\text{Sb}}/\partial\mu = 0$ , isto é, recuperamos a equação de vínculo

$$2S = \frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} [n_{\text{B}}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} - \gamma\mu_B H - \mu) + n_{\text{B}}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} + \gamma\mu_B H - \mu)], \quad (2.14a)$$

resolvida de forma auto-consistente. O campo médio  $F(T, H)$  é obtido através de outra

<sup>5</sup>Não particular à representação de Schwinger, as vezes é visto na literatura  $\mathcal{F}$  ser chamada de energia livre de Helmholtz. A energia livre de Helmholtz é  $U - TS$ , quando na verdade estamos calculando  $U - TS - \mu N$  (energia livre de Landau). No entanto, abreviando a notação, chamamos de energia livre qualquer potencial termodinâmico da forma  $U - TS - fX$ , em que  $X$  é uma variável extensiva (deslocamento generalizado) e  $f$  sua conjugada intensiva (força generalizada).

equação auto-consistente

$$\frac{F}{2S} = 1 - \frac{1}{(2S)N_m} \sum_q \frac{\hbar\omega_q^{\text{Sb}}}{(6JS)F/2S} \left[ n_B(\hbar\omega_q^{\text{Sb}} - \gamma\mu_B H - \mu) + n_B(\hbar\omega_q^{\text{Sb}} + \gamma\mu_B H - \mu) \right], \quad (2.14b)$$

correspondente à  $\partial\mathcal{F}_{\text{Sb}}/\partial F = 0$ .

Extraímos da equação (2.14b) a relação  $F/2S \approx 1$  a baixas temperaturas, pois embora a população de bósons de Schwinger (termo em colchetes) seja máxima<sup>6</sup> em  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ , temos  $\hbar\omega_0 = 0$ . Os bósons se distribuem nos estados mais energéticos quando a temperatura é aumentada, mas a distribuição de Bose-Einstein garante uma dependência fraca<sup>7</sup> com a temperatura da razão:  $F/2S \approx 1 - \mathcal{O}(k_B T/6JS)$ . Sem cometer erros exagerados, vamos assumir<sup>8</sup>  $F/2S = \chi$ , uma constante fenomenológica de ordem  $\mathcal{O}(1)$ . Notamos que no limite  $T \rightarrow 0$  ( $\chi = 1$ ) a energia dos bósons de Schwinger (2.12b) se torna a mesma dos mágnons (2.4a) no formalismo de Holstein-Primakoff. Isso ocorre, pois nesse limite a densidade de mágnons é muito baixa, fazendo com que as formulações (2.7) e (2.3) sejam equivalentes ao identificarmos  $a_{\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{q}\uparrow}$  (Schwinger)  $\leftrightarrow a_{\mathbf{q}}^\dagger$  (Holstein – Primakoff).

### Condensado de Bose-Einstein

O modo  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  da equação (2.14a) possui um comportamento peculiar. Como  $\hbar\omega_0^{\text{Sb}} = 0$ , a princípio, a energia do bóson up pode ser negativa  $-(\gamma\mu_B H + \mu) < 0$ , invalidando a teoria. O problema é contornado observando a tendência dos bósons se acumularem no estado fundamental, caracterizado por  $\hbar\omega_0^{\text{Sb}} = 0$  e spin up<sup>9</sup>. Para que a equação de vínculo (2.14a) possa ser satisfeita, o potencial químico se ajusta  $\mu < -\gamma\mu_B H$ . Quando  $\mu$  atinge seu valor máximo  $-\gamma\mu_B H$ , o condensado se forma e uma quantidade macroscópica  $\sim \mathcal{O}(N)$  de bósons

<sup>6</sup>Em  $T=0$ , os bósons condensam no estado de menor energia, fenômeno conhecido como condensação de Bose-Einstein.

<sup>7</sup>Auerbach [27, pg. 188].

<sup>8</sup>Aproximação adotada na literatura para evitar um problema discutido no trabalho Silva et al. [28], em que a equação (2.14b) pode levar a transições de fase espúrias. O procedimento  $F/2S = \chi$  é adotado em Okamoto [23] (com notação diferente).

<sup>9</sup>Se o campo magnético for nulo  $H = 0$ , o estado fundamental haverá mesma quantidade de bósons de spin up e down. Porém, o limite físico ocorre em  $H = 0^+$  ( $H = 0^-$ ), em que apenas bósons up (down) condensam, fazendo com que o formalismo de Schwinger descreva a magnetização espontânea em ferromagnetos. Na prática, anisotropia de eixos fáceis nos domínios magnéticos fazem o papel do campo infinitesimal, provocando uma orientação preferencial da magnetização.

popula o estado fundamental  $\text{vect}q = 0$ .

Com as considerações do último parágrafo, separamos o termo  $q = 0$  da soma (2.14a). Os bósons que populam estados excitados são contabilizados pela aproximação contínua

$$\frac{1}{N} \sum_{q \neq 0} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3q \rightarrow \int d(\hbar\omega) D(\hbar\omega)$$

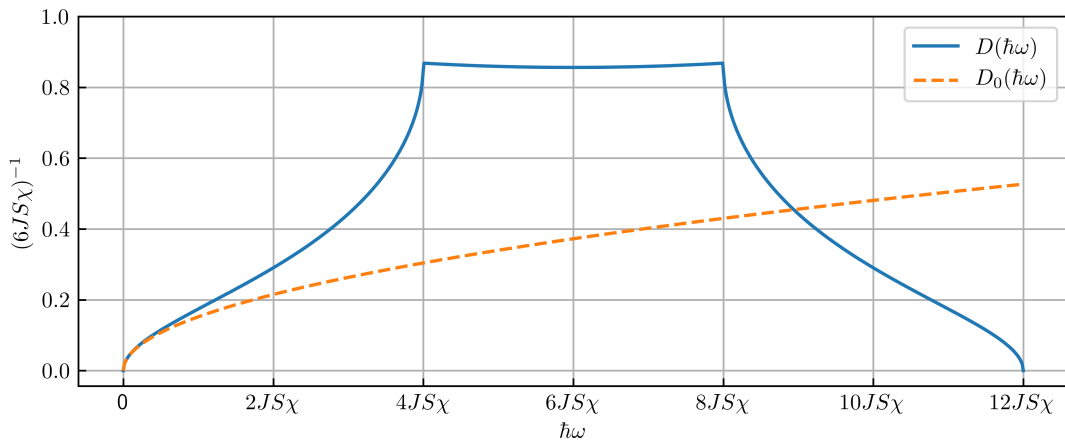
em que

$$D(\hbar\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{q \in BZ / \omega_q^{\text{sb}} = \omega} \frac{dS_\omega}{|\nabla(\hbar\omega_q^{\text{sb}})|}. \quad (2.15)$$

é a densidade de estados dos bósons de Schwinger por energia cinética<sup>10</sup>. A equação (2.14a) assume a forma

$$2S = \frac{N_0}{N_m} + \int d(\hbar\omega) D(\hbar\omega) [n_B(\hbar\omega - \gamma\mu_B H - \mu) + n_B(\hbar\omega + \gamma\mu_B H - \mu)]. \quad (2.16)$$

Figura 2.2: Densidade de estados por energia de uma rede quadrada com interação entre primeiros vizinhos. A não ser pela escala de energia, o resultado é idêntico à densidade de estados eletrônicos do modelo *tight-binding* com a mesma geometria, uma vez que os estados de Bloch também são limitados a primeira zona de Brioullin. A curva azul é exata, obtida numericamente através de (2.15) e (2.12b). A curva laranja tracejada  $D_0(\hbar\omega) \propto \sqrt{\hbar\omega}$  corresponde a aproximação de baixas temperaturas, em que os estados de menor energia (onde a aproximação  $\hbar\omega \approx JS\chi q^2$  é válida) são mais ocupados. A superfície  $\hbar\omega = \text{const.}$  é esferoide nas regiões  $\hbar\omega < 4JS\chi$  e  $\hbar\omega > 8JS\chi$  e muda de forma em  $4JS\chi < \hbar\omega < 8JS\chi$ .



Para resolver a equação (2.16) o primeiro passo é identificar a temperatura crítica do

<sup>10</sup>Kittel [29, pg. 118].

condensado. Sendo uma transição contínua, quando a temperatura chega ao valor crítico  $T = T_c$ , não há condensado ( $N_0 = 0$ ) e o potencial químico se torna máximo  $\mu = \mu_{\max} = -\gamma\mu_B H$ , permitindo encontrar o valor de  $T_c$ . Para temperaturas  $T < T_c$ , o potencial químico permanece constante  $\mu = \mu_{\max}$  e podemos calcular a fração de bósons condensados  $N_0(T)/N_m$ . Em altas temperaturas,  $T > T_c$ , o condensado deixa de existir ( $N_0 = 0$ ), permitindo calcular  $\mu(T)$ .

A aproximação de baixas temperaturas  $\hbar\omega_q = JS\chi q^2$  fornece o resultado

$$\frac{N_0}{N_m} \propto \left( \frac{T}{JS\chi} \right)^{3/2}.$$

Uma vez que os bósons condensados descrevem a magnetização espontânea (no limite  $H \rightarrow 0^+$ ), obtemos

$$\frac{\Delta M}{SN_m} \propto \left( \frac{T}{JS\chi} \right)^{3/2},$$

compatível com o resultado da representação de Holstein-Primakoff (2.6). O valor de  $\chi$  é calibrado com a medida da temperatura crítica no laboratório.

### Magnetização

Ao invés de usar a aproximação de baixas temperaturas  $\hbar\omega_q \approx JS\chi q^2$  descrita no fim da seção anterior, vamos calcular  $\mu(T, H)$  e  $M(T, H)$  numericamente utilizando as equações (2.12b) e (2.15), em que a densidade de estados é mostrada na figura 2.2. Encontrando  $\mu(H, T)$ , a magnetização do sistema é calculada facilmente conforme a definição (2.7c).

Ao expandir  $[\eta_B(\hbar\omega_q - \mu - \gamma\mu_B H) - \eta_B(\hbar\omega_q - \mu + \gamma\mu_B H)]$  em potências de  $(2\gamma\mu_B H)/k_B T$  a altas temperaturas ( $k_B T > k_B T_c > 2\gamma\mu_B H$ ), o termo dominante reproduz a lei de Curie  $M \propto H/T$ . Como mencionado antes, a representação de Schwinger também é útil na descrição da fase paramagnética.

É mostrado na figura 2.3 o comportamento  $\mu(T)$  em campo nulo, assim como a magnetização espontânea (no limite  $H = 0^+$ ). As figuras 2.4 evidenciam o comportamento das duas quantidades com o campo magnético externo. Conforme visto nas imagens, a temperatura crítica na escala  $6JS$  aumenta linearmente com  $S$  (acima de algum limite inferior), descrevendo o resultado conhecido na literatura  $T_c \propto S^2$  para  $S$  grande.

Como o campo magnético favorece o ordenamento do sistema (a energia Zeeman desequilibra as populações  $n_{\uparrow}$  e  $n_{\downarrow}$ ), o comportamento da temperatura crítica, crescente com o campo é aumentado, é esperado. O sistema fica mais resistente a flutuações térmicas.

Figura 2.3: A figura superior mostra o comportamento do potencial químico com a temperatura, constante para  $T < T_c$  e  $\mu \propto -\ln(T)$  para  $T \gg T_c$ . As linhas tracejadas marcam a temperatura crítica de cada curva:  $t_c^{(1/2)} = 0.57$ ,  $t_c^{(1)} = 0.93$  e  $t_c^{(3/2)} = 1.28$ , em que  $t = k_B T / (6JS\chi)$ . É observada magnetização espontânea devido a condensação dos bósons no estado  $q \uparrow$ . Em baixas temperaturas, o comportamento é idêntico ao da representação de Holstein-Primakoff (2.6), devido à equivalência dos modelos. No entanto, o modelo de Schwinger também é útil na descrição da região em torno da transição de fase.

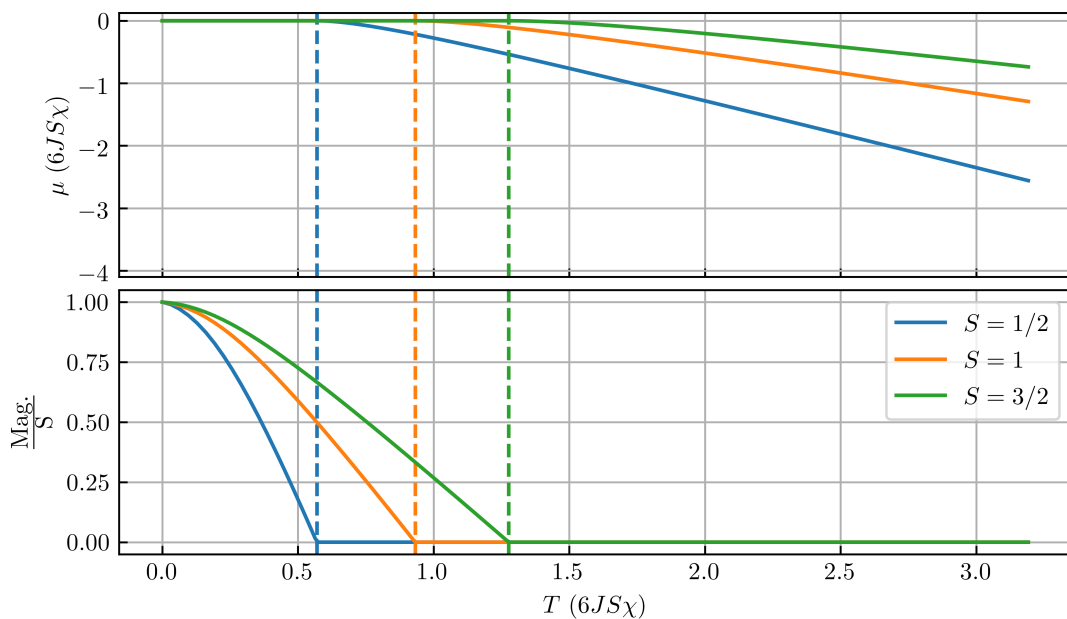
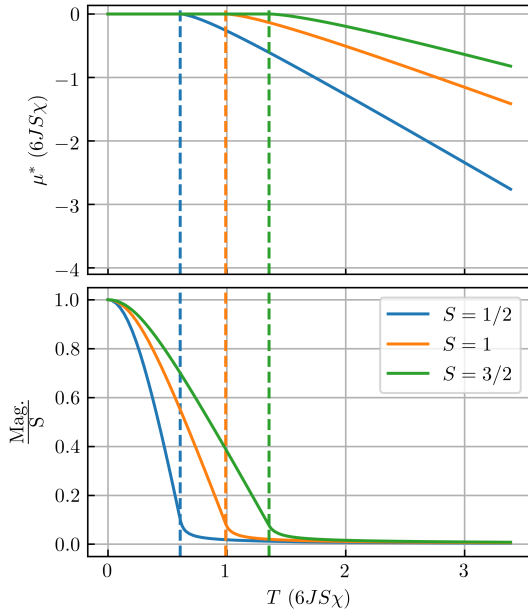


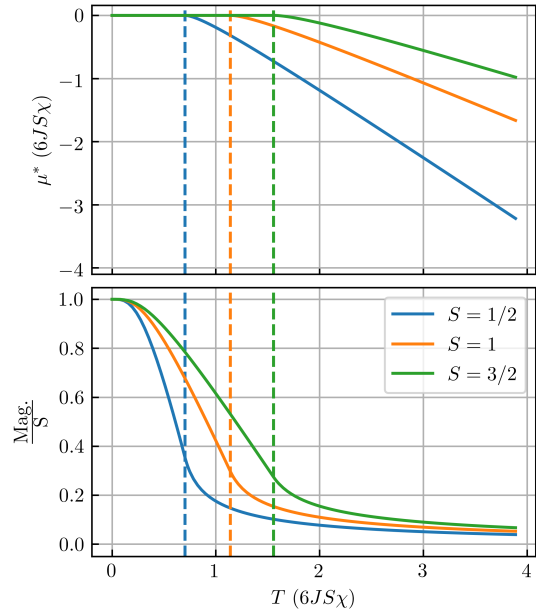
Figura 2.4: Definição:  $\mu^* = \mu + \gamma\mu_B H$ . Nas figuras 2.4a e 2.4b vemos o efeito de um campo magnético fraco ( $2\gamma\mu_B H \ll 6JS\chi$ ), evidenciando a Lei de Curie. Quando o campo magnético é da ordem da interação de troca  $2\gamma\mu_B H \sim 6JS\chi$  (figuras 2.4c e 2.4d), a magnetização da fase paramagnética se torna comparável a da fase ferromagnética. A lei de Curie só é obtida em altas temperaturas em relação a energia Zeeman ( $k_B T \gg \gamma\mu_B H$ ).

$$t_c^{(1/2)} = 0.61, t_c^{(1)} = 0.99 \text{ e } t_c^{(3/2)} = 1.36.$$

$$t_c^{(1/2)} = 0.70, t_c^{(1)} = 1.14 \text{ e } t_c^{(3/2)} = 1.56.$$



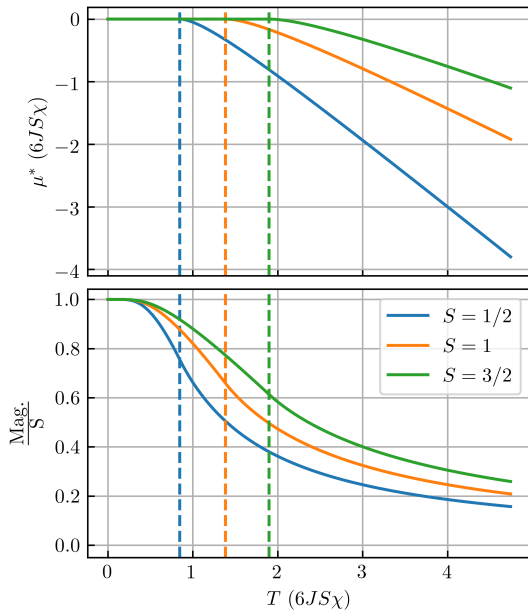
(a)  $\gamma\mu_B H = 0.06JS\chi$ .



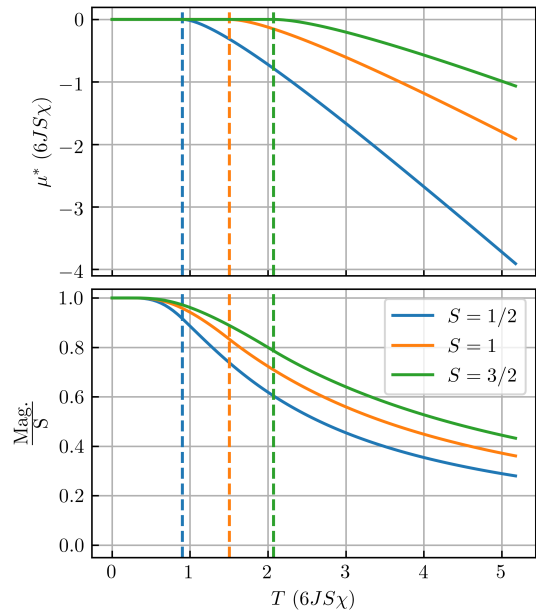
(b)  $\gamma\mu_B H = 0.6JS\chi$ .

$$t_c^{(1/2)} = 0.85, t_c^{(1)} = 1.384 \text{ e } t_c^{(3/2)} = 1.90.$$

$$t_c^{(1/2)} = 0.90, t_c^{(1)} = 1.50 \text{ e } t_c^{(3/2)} = 2.07.$$



(c)  $\gamma\mu_B H = 3JS\chi$ .



(d)  $\gamma\mu_B H = 6JS\chi$ .

## 2.3 Interação RKKY

Em alguns metais magnéticos terras raras, o hamiltoniano de Heisenberg desenvolvido no apêndice II.A não explica a ordem magnética (ferromagnetismo ou antiferromagnetismo). Isso ocorre porque as funções de onda  $\phi_\alpha$  e  $\phi_\beta$  dos elétrons ligados aos íons, que fornecem um valor para a constante de troca  $J$  pela equação (2.19a), têm um raio pequeno se comparado ao espaçamento entre átomos. Nesses metais, a ordem magnética surge pela interação de troca entre os elétrons de condução e os elétrons ligados (que constituem os íons). A propagação dos elétrons no cristal cria uma interação efetiva entre os íons, pois cada íon tende a se alinhar de acordo com a polarização de spin do elétron.

Considere o hamiltoniano de troca entre os íons, com spins representados por  $S_i$ , e um elétron de condução, de spin  $s$ :

$$\mathcal{H} = -2 \sum_i J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) S_i \cdot \mathbf{s} ,$$

que pode ser escrito em termo dos operadores de levantamento e abaixamento de spin como:

$$\mathcal{H} = -2 \sum_i J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[ \frac{S_i^+ s^- + S_i^- s^+}{2} + S_i^z s^z \right]. \quad (2.17)$$

Para escrever o hamiltoniano (2.17) em segunda quantização, fazemos a mudança de base:

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma\sigma'} \int c_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}) \langle \sigma' | \mathcal{H}(\mathbf{r}) | \sigma \rangle c_\sigma(\mathbf{r}) d^3r ,$$

em que  $|\sigma\rangle$  é o estado de spin do elétron, podendo assumir  $|\uparrow\rangle$  ou  $|\downarrow\rangle$ . Aplicando as transformações de Fourier

$$c_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad \text{e} \quad c_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} ,$$

em que  $v$  é o volume ocupado em média por cada átomo, a interação RKKY é escrita da

forma

$$\mathcal{H} = -\frac{2}{v} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} \sum_i c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left\langle \sigma' \left| \frac{(S_i^+ s^- + S_i^- s^+) + 2S_i^z s^z}{2} \right| \sigma \right\rangle \int J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d^3r ,$$

podendo ser simplificada ao considerarmos a interação de troca como pontual,  $J(\mathbf{x}) = J_0 v \delta^3(\mathbf{x})$ . Obtemos

$$H = -J_0 \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[ S_{-\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + S_{\mathbf{q}}^- c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} + S_{\mathbf{q}}^z (c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}) \right] \delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, \quad (2.18)$$

em que foram utilizadas as transformadas de Fourier simétricas para os operadores de spin dos sítios:

$$S_{\mathbf{q}}^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i S_i^- e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}; \quad S_{-\mathbf{q}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i S_i^+ e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}; \quad S_{\mathbf{q}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i S_i^z e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}.$$

O termo  $\delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$  na equação (2.18) restringe a interação à termos que conservam momento linear, de forma que as excitações criadas na rede de íons tenham o momento linear resultante do espalhamento de elétrons pelos sítios.

A interação RKKY<sup>11</sup> explica a ordem magnética em alguns metais terras raras. No entanto, neste trabalho o acoplamento entre elétrons de condução e sítios magnéticos (elétrons ligados) modelado em (2.18) é utilizado na descrição da interface entre um ferromagneto isolante e um supercondutor.

<sup>11</sup>Descoberta pelos autores Ruderman, Kittel, Kasuya e Yosida. Nesse trabalho a interação entre excitações magnéticas na rede de íons e spins dos elétrons de condução é chamada de interação RRKY. Na literatura é comum nos referirmos a RKKY como a interação efetiva entre íons mediada pelos elétrons de condução.

# Apêndices

## II.A Modelo de Heisenberg

Para explicar a ordem magnética dos materiais, é usado o hamiltoniano de Heisenberg, cuja origem está na interação coulombiana entre os elétrons do material. Ao considerar tal interação, surge um acoplamento efetivo entre os spins dos elétrons em cada sítio. Isso é mostrado calculando a perturbação em primeira ordem da energia dos elétrons ligados devida ao potencial coulombiano. Considere dois elétrons numa rede que interagem pelo potencial de Coulomb:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}},$$

em que  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  é a distância entre os elétrons.

Como a interação coulombiana não depende do estado de spin dos elétrons, podemos calcular a energia média da interação usando apenas a parte espacial da função de onda de dois corpos:

$$\langle V \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$$

Substituindo a função de onda  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_\alpha(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_2) \pm \phi_\alpha(\mathbf{r}_2)\phi_\beta(\mathbf{r}_1)]$ , em que  $\phi_\alpha$  e  $\phi_\beta$  são os estados de partícula única de cada elétron, obtemos:

$$\langle V \rangle = E \pm J,$$

em que

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\mathbf{r}_1)\phi_\beta^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$$

é a energia coulombiana média do sistema. O termo

$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\mathbf{r}_1)\phi_\beta^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\mathbf{r}_2)\phi_\beta(\mathbf{r}_1) d^3r_1 d^3r_2 \quad (2.19a)$$

é chamado de energia de troca e mede a superposição das funções de onda dos elétrons separados em meio à interação de Coulomb.

Pelo princípio da exclusão de Pauli, o estado total dos dois elétrons, dado pelo produto da parte espacial com o estado de spin, deve ser antissimétrico. Se os elétrons estão em um estado de spin singlete, em que o spin dos elétrons estão antiparalelos, a função de onda espacial deve ser simétrica<sup>12</sup> e portanto tem-se o sinal positivo na equação (2.19). Se o estado de spin é tripleto, descrevendo os elétrons com spins paralelos, teremos o sinal negativo. Logo, embora a interação coulombiana não dependa explicitamente do estado de spin, a energia média depende. Pode-se escrever a interação em termo das variáveis de spin:

$$\langle V \rangle = E - 4J \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2.$$

Se os spins forem paralelos, temos  $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{1}{4}$  e a expressão para  $\langle V \rangle$  é condizente com a função espacial ser antissimétrica. Se os spins forem antiparalelos,  $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = -\frac{1}{4}$ , condizente a função espacial ser simétrica.

A partir da energia média, pode-se definir o operador hamiltoniano de Heisenberg, que é base para os modelos de magnetismo dos sólidos:

$$\mathcal{H}_{\text{mag}} = - \sum_{i,j>i} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2.20)$$

Em átomos de muitos elétrons, o spin que é levado em conta no hamiltoniano de Heisenberg é o momento angular (*spin + orbital*) total dos elétrons de cada átomo, calculado segundo as regras de Hund. A equação (2.20) descreve um sistema ferromagnético se  $J_{ij} > 0$  e

<sup>12</sup>Se  $J > 0$  a energia aumenta devido a superposição eletrônica, característica de funções simétricas. A energia é diminuída se  $J < 0$  quando a carga positiva dos íons compensa o fato de os elétrons estarem próximos.

antiferromagnético se  $J_{ij} < 0$ .

O hamiltoniano de Heisenberg pode ser escrito em termo dos operadores de levantamento e abaixamento de spin (operadores escada):

$$\mathcal{H}_{mag} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} [S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z], \quad S_j^\pm = S_j^x \pm iS_j^y.$$

# Capítulo III

## Teoria BCS

A resistência de muitos metais e ligas é zero abaixo de alguma temperatura crítica. Esse fenômeno de supercondutividade foi observado pioneiramente por Kamerlingh Onnes no mercúrio em 1911, três anos após liquefazer o hélio pela primeira vez. Um supercondutor abaixo da temperatura crítica também blindava qualquer campo magnético de seu interior, fenômeno de grande importância física e tecnológica, conhecido como efeito Meissner. A explicação teórica da supercondutividade que deu o prêmio Nobel a Bardeen, Cooper e Schrieffer<sup>1</sup> é discutida nesse capítulo, com algumas consequências fenomenológicas expostas.

### 3.1 Interação atrativa entre elétrons

O fenômeno de supercondutividade ocorre devido a um ordenamento de elétrons em um metal em um estado quântico de muitos corpos macroscópico, causado por uma interação atrativa entre elétrons de momentos opostos próximas a superfície de Fermi. Em baixas temperaturas, uma atração entre pares pode guiar o sistema de elétrons para um novo estado em que são formadas superposições coerentes entre estados conectados por reversão temporal  $k_{\uparrow}$  e  $-k_{\downarrow}$ . Em supercondutores convencionais (descritos pela teoria BCS), interações atrativas entre elétrons são mediadas por fônons. O movimento de um elétron causa uma distorção na rede. Ao ser deslocado, um íon leva um tempo da ordem de  $\sim \omega_D^{-1}$ , período mínimo de oscilações de Debye, para retornar a sua posição original. Contudo, o tempo necessário para um elétron passar pela vizinhança do íon é da ordem de  $\sim \hbar E_F^{-1} \ll \omega_D^{-1}$ . Portanto, distorções

---

<sup>1</sup>Bardeen, Cooper, and Schrieffer [30]

causadas por elétrons na rede influenciam um segundo elétron, gerando um mecanismo de atração entre eles. Como o máximo de energia de excitações iônicas é  $\omega_D$ , a interação atrativa é limitada a energias  $\omega_D$  em torno da superfície de Fermi. Para descrever a interação, tomamos como ponto de partida as equações (3.11) e (3.12) demonstradas no apêndice III.B, que descrevem fônons interagindo com elétrons:

$$\mathcal{H}_{ph} + \mathcal{H}_{el-ph} = \sum_{q\mu} \hbar\omega_\mu(\mathbf{q}) \left[ a_{q\mu}^\dagger a_{q\mu} + \frac{1}{2} \right] + \sum_{q\mu} \Gamma_\mu(\mathbf{q}) \left( a_{q\mu} + a_{-q\mu}^\dagger \right) \sum_{k\sigma} c_{k+q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}.$$

Suponha que inicialmente não haja fônons na rede. A probabilidade de um elétron em um estado de momento  $\mathbf{k}$  e projeção de spin  $\sigma$  emitir um fônon com momento  $\mathbf{q}$  e polarização  $\mu$  está relacionada com o elemento de matriz

$$\langle 1_{q\mu} | c_{\mathbf{k}-q\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} a_{q\mu}^\dagger | 0 \rangle = c_{\mathbf{k}-q\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma},$$

sendo  $|0\rangle$  o vácuo de fônons,  $|1_{q\mu}\rangle$  o estado com apenas um fônon de momento  $\mathbf{q}$  e polarização  $\mu$  e  $\sigma$  o spin do elétron. A probabilidade de um segundo elétron de momento  $\mathbf{k}'$  absorver tal fônon é proporcional a

$$\langle 0 | c_{\mathbf{k}'+q\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} a_{q\mu} | 1_{q\mu} \rangle = c_{\mathbf{k}'+q\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}.$$

O sistema de elétrons livres descrito pelo hamiltoniano  $\mathcal{H}_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  é perturbado pela possibilidade de excitação de fônons no material. Vamos definir uma transformação

$$\tilde{\mathcal{H}} = e^{-\mathcal{S}} \mathcal{H} e^{\mathcal{S}},$$

em que  $\mathcal{S}$  deve ser anti-Hermitiano<sup>2</sup> para que seja unitária<sup>3</sup>. Vamos considerar  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ph} + \lambda \mathcal{H}_{el-ph}$ , sendo  $\lambda$  um parâmetro auxiliar que será eliminado no fim escolhendo  $\lambda = 1$ . Expandindo a transformação em série de potências:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ph} + \lambda \mathcal{H}_{el-ph} + [\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ph}, \mathcal{S}] + \lambda [\mathcal{H}_{el-ph}, \mathcal{S}] + \frac{1}{2} [[\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ph}, \mathcal{S}], \mathcal{S}] + \dots$$

<sup>2</sup> $\mathcal{S}^\dagger = -\mathcal{S}$

<sup>3</sup>Uma transformação desse tipo não altera os auto-estados e auto-energias do sistema.

Podemos escolher  $\mathcal{S}$  de modo a absorver o efeito de  $\mathcal{H}_{el-ph}$  zerando o termo de ordem linear  $\lambda\mathcal{H}_{el-ph} + [\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ph}, \mathcal{S}] = 0$ , obtendo

$$\langle m|\mathcal{S}|n\rangle = \frac{\langle m|\mathcal{H}_{el-ph}|n\rangle}{E_m - E_n},$$

em que assumimos conhecer os auto-estados e auto-energias de  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ph}$ . Os elementos de matriz correspondem a absorção/emissão de fônons por elétrons. Para que os elementos de matriz  $\langle m|\mathcal{H}_{el-ph}|n\rangle$  sejam não nulos, os estados  $|n\rangle$  e  $|m\rangle$  devem diferir apenas de um fônon ( $\pm 1$ ), mudando o momento linear do elétron após o espalhamento. Obtemos os elementos da matriz de transformação:

$$\mathcal{S} = \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{q} \\ \mu\sigma}} \Gamma_{\mu}(\mathbf{q}) \left[ \frac{a_{\mathbf{q}\mu}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mu}(\mathbf{q}))} + \frac{a_{-\mathbf{q}\mu}^{\dagger}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mu}(-\mathbf{q}))} \right] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

O termo de segunda ordem na interação elétron-fônon  $\Gamma$  da expansão de  $\tilde{\mathcal{H}}$ ,  $[\mathcal{H}_{el-ph}, \mathcal{S}]/2$ , resulta na interação atrativa entre elétrons:

$$\mathcal{H}_{el}^{ef} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \\ \mu\sigma\sigma'}} \frac{|\Gamma_{\mu}(\mathbf{q})|^2 \hbar\omega_{\mu}(\mathbf{q})}{(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2 - (\hbar\omega_{\mu}(\mathbf{q}))^2} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

Fenomenologicamente, estamos inserindo os elétrons em um banho de fônons à temperatura fixa, de onde podem absorver ou emitir energia e momento durante intervalo de tempo suficientemente curto para que haja interação efetiva entre os elétrons. A condição mais favorável pra que ocorra atração envolve fônons de alta energia  $\omega_{\mu}(\mathbf{q}) \sim \omega_D$  e elétrons em torno do nível de Fermi  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \sim \epsilon_{\mathbf{k}} \sim E_F$ . A frequência de Debye dita o máximo de energia dos fônons, cujo momento linear é da ordem do vetor de Fermi  $q \sim k_F$ , de forma que  $\mathbf{k}' \cong -\mathbf{k}$ . Para explorar a fenomenologia da supercondutividade de forma quantitativa, mas mantendo os cálculos simples, vamos adotar um modelo simplificado definido pelo hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (3.1)$$

em que  $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = g \sim |\Gamma_{q_D}|^2 / \hbar\omega_D$  se  $|\epsilon_{\mathbf{k}} - \bar{\mu}| \sim |\epsilon_{\mathbf{k}'} - \bar{\mu}| < \hbar\omega_D$ ,  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sim q_D$  e  $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 0$  caso contrário. O potencial químico  $\bar{\mu} = (\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow})/2$  é a média entre os potenciais químicos

de elétrons com spin  $\uparrow$  e  $\downarrow$  em sistemas com desbalanço de spin  $\mu_{\uparrow} \neq \mu_{\downarrow}$ . A fim de verificar que ocorre interação atrativa, é sugestivo calcular a energia de um par de elétrons  $|\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow\rangle$  sujeito ao hamiltoniano (3.1)

$$\langle \mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow | \mathcal{H}_{\text{BCS}} | \mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow \rangle = 2\epsilon_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}\mathbf{k}},$$

sendo de fato menor que a energia do mar de Fermi  $2\epsilon_{\mathbf{k}}$ , uma vez que  $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}} > 0$ . Sendo assim, o estado trivial de elétrons livres  $\prod_{|\mathbf{k}| < k_F} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} |0\rangle$  não é mais o estado fundamental. Ao abaixarmos a temperatura do sistema, uma transição de fase ocorre a certa temperatura crítica antes que os elétrons possam "congelar" no estado trivial.

## 3.2 Teoria de campo médio da supercondutividade

Na busca por um estado supercondutor em que elétrons  $|\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow\rangle$  estejam correlacionados, vamos assumir que na fase supercondutora  $\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \neq 0$ , definindo o campo médio

$$\Delta_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle, \quad \bar{\Delta}_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle, \quad (3.2)$$

em que  $\Delta$  é visto como o parâmetro de ordem da supercondutividade, uma vez que é não nulo apenas na fase supercondutora. Considerarmos  $\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \neq 0$  é equivalente a dizer que o estado quântico em questão não tem carga elétrica definida (não é um auto-estado do operador número de elétrons). No entanto, os desvios são pequenos em torno do valor correto, número total de elétrons no material, quando este número é alto. Quando necessário, em sistemas mesoscópicos, podemos projetar o estado supercondutor (que permite flutuações do número de partículas) em um subespaço que mantém o número fixo<sup>[31]</sup>.

Prosseguindo com a descrição de campo médio, assumimos que os desvios quânticos da

interação elétron-elétron são pequenos em torno do valor médio<sup>4</sup>

$$\sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} = \Delta_{\mathbf{k}'} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}}_{\text{pequeno}} - \Delta_{\mathbf{k}'}$$

e substituímos no hamiltoniano (3.1). Introduzindo o potencial químico  $\mu_\sigma$  com desbalanço entre os níveis up e down ( $\mu_\uparrow \neq \mu_\downarrow$ ) e um campo magnético externo na forma de energia Zeeman  $\mu_B H$ , o hamiltoniano na aproximação de campo médio se torna

$$\mathcal{K}_{\text{BCS}} = \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\bar{\xi}_{\mathbf{k}} - h_{\text{ef}}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + (\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + h_{\text{ef}}) c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \bar{\Delta}_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right], \quad (3.3)$$

conhecido na literatura ocidental como hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes. As definições  $\bar{\xi}_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \bar{\mu}$  e  $h_{\text{ef}} = \delta\mu/2 + \mu_B H$  foram adotadas em (3.3), sendo  $\delta\mu = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow$  e  $\mu_\uparrow + \mu_\downarrow = 2\bar{\mu}$ . Sendo quadrático nos operadores eletrônicos, a diagonalização de (3.3) segue um procedimento padrão conhecido como transformação de Bogoliubov. Escrever na forma

$$\mathcal{K}_{\text{BCS}} = \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + h_{\text{ef}}) + \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \left[ \begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\bar{\Delta}_{\mathbf{k}} & -\bar{\xi}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} - h_{\text{ef}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \Psi_{\mathbf{k}},$$

em que

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \text{ e } \Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

são os espinores de Nambu do elétron, facilita o processo de diagonalização. Procuramos por

<sup>4</sup>Na formulação da mecânica quântica através das integrais de caminho de Feynmann, o desacoplamento é feito a partir da identidade

$$\exp \left\{ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d\tau g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \psi_{-\mathbf{k}'\downarrow} \psi_{\mathbf{k}'\uparrow} \right\} = \int \mathcal{D}(\bar{\Delta}, \Delta) \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d\tau \left[ \frac{|\Delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2}{g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} - \bar{\Delta}_{\mathbf{k}} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \psi_{\mathbf{k}'\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right] \right\}$$

conhecida como transformação de Hubbard-Stratonovich, em que  $\psi$  e  $\bar{\psi}$  são variáveis de Grassmann que representam os operadores eletrônicos  $c$  e  $c^\dagger$ . O campo médio do texto é obtido após realizar a integração das variáveis fermiônicas (cuja ação se torna quadrática) e minimizar a nova ação com respeito ao campo  $\Delta_{\mathbf{k}}$ ,  $\frac{\delta S[\bar{\Delta}, \Delta]}{\delta \Delta_{\mathbf{k}}} = 0$ . Flutuações do campo são contabilizadas realizando a integração  $\int \mathcal{D}(\bar{\Delta}, \Delta) e^{-S[\bar{\Delta}, \Delta]}$  dos desvios de segunda ordem do campo em relação a solução de campo médio. Uma formulação completa da teoria BCS pelas integrais de caminho é feita em Altland and Simons [32, capítulo 6].

uma transformação unitária  $U$  que diagonaliza a matriz de energias, de onde relacionamos o espinor de Nambu das excitações com o de elétrons  $\Phi_{\mathbf{k}} = U^\dagger \Psi_{\mathbf{k}}$ . Realizando o processo de diagonalização, obtemos

$$\begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\bar{\Delta}_{\mathbf{k}} & -\bar{\xi}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} U^\dagger,$$

em que  $E_{\mathbf{k}} = (\bar{\xi}_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2)^{1/2}$  é a energia das excitações de um supercondutor. A transformação unitária possui um fator de fase arbitrário (o mesmo fator de fase do campo médio  $\Delta = |\Delta| e^{i2\phi}$ ) que, embora não discutido nesse capítulo, possui importantes consequências para a fenomenologia do supercondutor<sup>5</sup>. Nesse trabalho estamos considerando supercondutores muito finos comparado ao comprimento de penetração de London  $\lambda_L$ , de forma que a resposta diamagnética (responsável pelo efeito Meissner) é desprezível em relação ao acoplamento Zeeman dos elétrons. A transformação que diagonaliza o hamiltoniano assume a forma

$$U = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ \bar{v}_{\mathbf{k}} & \bar{u}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad v_{\mathbf{k}} = e^{i\phi} \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \quad \text{e} \quad u_{\mathbf{k}} = e^{-i\phi} \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}.$$

Tendo em vista que  $\Delta_{\mathbf{k}}$  é não-nulo apenas se  $|\bar{\xi}_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D$ , os elétrons com energia cinética  $|\bar{\xi}_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_D$  não participam do mecanismo de interação elétron-elétron. Os níveis eletrônicos (espaço  $\mathbf{k}\sigma$ ) que satisfazem a condição  $\Delta_{\mathbf{k}} \neq 0$  são protegidos com um gap no espectro de excitações. O hamiltoniano é escrito de forma diagonal

$$\mathcal{K}_{\text{BCS}} = \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\xi}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} \left[ (E_{\mathbf{k}} - h_{\text{ef}}) b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\uparrow} + (E_{\mathbf{k}} + h_{\text{ef}}) b_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\downarrow} \right], \quad (3.4)$$

em que as quasi-partículas sentem o efeito Zeeman da mesma forma que elétrons. Conhecidas como bogoliubons, são relacionadas com operadores eletrônicos por

$$\begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}\uparrow} \\ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{u}_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -\bar{v}_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \iff \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ \bar{v}_{\mathbf{k}} & \bar{u}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}\uparrow} \\ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

<sup>5</sup>A fase  $\phi$  acopla com o campo eletromagnético, produzindo o mecanismo de Anderson-Higgs. No supercondutor, o fóton se torna massivo, fazendo com que o campo eletromagnético não consiga penetrar distâncias longas, decaindo exponencialmente com o comprimento de penetração de London  $\lambda_L$  (a blindagem de um campo magnético externo é conhecido como efeito Meissner).

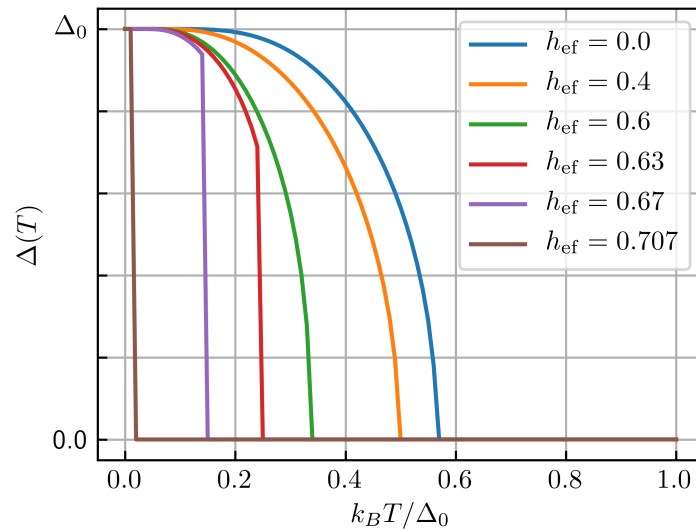
obedecendo as mesmas regras de anticomutação dos operadores eletrônicos  $\{b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, b_{\mathbf{k}'\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$ , uma vez que são relacionados por uma transformação unitária. Bogoliubons são férmions que descrevem as excitações de menor energia em um supercondutor. Possuindo um gap  $|\Delta|$  em seu espectro, o estado supercondutor é protegido contra flutuações térmicas de baixa temperatura quando o fator de Boltzmann  $e^{-|\Delta|/k_B T}$  é desprezível. É possível adiantar que a temperatura crítica  $T_c$  deve ser da ordem do gap  $T_c \sim |\Delta|$ , uma vez que são necessárias excitações de energia  $|\Delta|$  pra que o supercondutor saia do estado fundamental.

Até o momento, o campo médio  $\Delta_{\mathbf{k}}$  (por sua vez, o gap de energia das excitações) foi introduzido apenas como o parâmetro de ordem do supercondutor. O gap é relacionado com os parâmetros microscópicos do modelo  $g$  e  $\hbar\omega_D$  através da equação (3.2), em que utilizamos os bogoliubons para calcular a média estatística, obtendo a equação auto-consistente

$$\Delta = \frac{g\Delta}{2} \sum_{|\tilde{\xi}_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D} \frac{\operatorname{tgh}\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}\uparrow}}{2}\right) + \operatorname{tgh}\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}\downarrow}}{2}\right)}{2E_{\mathbf{k}}}, \quad (3.6)$$

em que  $E_{\mathbf{k}\uparrow} = E_{\mathbf{k}} - h_{\text{ef}}$  e  $E_{\mathbf{k}\downarrow} = E_{\mathbf{k}} + h_{\text{ef}}$ . O efeito Zeeman faz a transição de segunda ordem prevista pela equação (3.6) (ao aumentar a temperatura, obtemos  $\Delta = 0$  de forma contínua) se tornar de primeira ordem (transição descontínua) a campos altos, conforme mostra a figura 3.1. Para uma explicação completa a transição de fase supercondutora em supercondutores finos, veja a referência: Sarma [33].

Figura 3.1: O estado normal tem sua energia diminuída pelo mecanismo do paramagnetismo de Pauli, enquanto o supercondutor é protegido pelo gap  $|\Delta|$  a baixas temperaturas. No limite  $h_{\text{ef}} > 0.6$  o estado normal se torna mais estável (de menor energia) e a transição de fase passa a ser de primeira ordem (transição abrupta a gap não nulo). O campo crítico que elimina completamente a supercondutividade é  $h_{\text{ef}}^c = 1/\sqrt{2} \approx 0.707$ . A temperatura crítica a campo nulo (curva azul) é  $k_B T_c = 0.567\Delta_0$ .



O gap a  $T = 0$  e  $h_{\text{ef}} = 0$  é obtido da equação (3.6):  $|\Delta_0| = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh(1/g\nu)} \approx 2\hbar\omega_D \exp(-1/g\nu)$ , geralmente da ordem de meV  $\sim k_b \times 10\text{K}$  em materiais típicos como alumínio, sendo  $\nu$  a densidade de estados eletrônicos no nível de Fermi. Como de costume na literatura,  $|\Delta_0|$  servirá como escala de energia utilizada nas figuras ao longo dessa dissertação.

### 3.2.1 Estado fundamental

Uma vez identificadas as excitações de um supercondutor, o estado fundamental  $|0_{sc}\rangle$  é identificado através da exigência que nele não devem haver excitações, isto é,  $b_{\mathbf{k}\sigma}|0_{sc}\rangle = 0$ . Essa condição é unicamente satisfeita pelo estado

$$|0_{sc}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle,$$

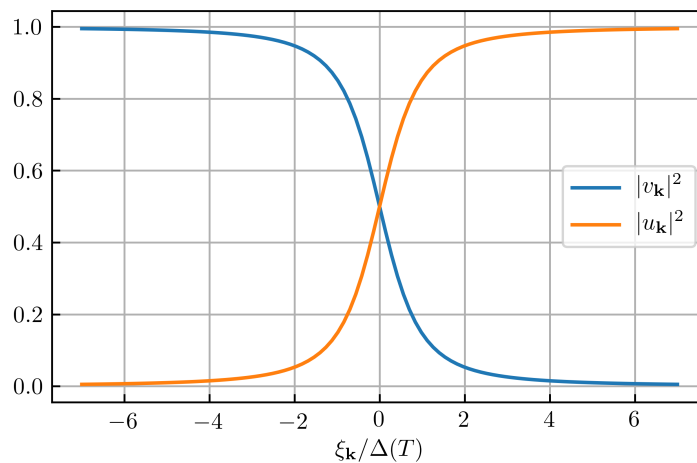
tornando possível identificar  $|v_{\mathbf{k}}|^2$  como a probabilidade de um par de Cooper ( $\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$ ) estar ocupado e  $|u_{\mathbf{k}}|^2$  de estar desocupado. Quando um bogoliubon é criado no estado fundamental  $b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger|0_{sc}\rangle$ , o par de Cooper ( $\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$ ) é desfeito (esteja ocupado ou não), criando um elétron

livre:

$$b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0_{sc}\rangle = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle.$$

Dessa forma, interpretamos  $|u_{\mathbf{k}}|^2$  como a probabilidade de um bogoliubon criar um elétron e  $|v_{\mathbf{k}}|^2$  de aniquilar<sup>6</sup> (criar um buraco). Por esse motivo, bogoliubons em supercondutores isolados só existem em pares<sup>7</sup>, sendo o gap de energia de excitações termodinâmicas  $2|\Delta|$ .

Figura 3.2: A curva azul mostra a ocupação de pares de Cooper (probabilidade que um bogoliubon retire um elétron). Em laranja,  $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |v_{\mathbf{k}}|^2$  é a curva de desocupação de pares de Cooper (probabilidade que um bogoliubon crie um elétron).



### 3.2.2 Densidade de estados

Transformamos as somas de estados eletrônicos em integrais ao utilizarmos a aproximação contínua

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int_0^{\infty} dE_{\mathbf{k}} \mathcal{D}(E_{\mathbf{k}}),$$

<sup>6</sup>Identificamos a mesma interpretação através da definição:  $b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + \bar{v}_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}$ . Um bogoliubon é uma superposição entre um elétron  $\mathbf{k} \uparrow$  (com amplitude  $u_{\mathbf{k}}$ ) e buraco  $-\mathbf{k} \downarrow$  (com amplitude  $\bar{v}_{\mathbf{k}}$ ). A subtração  $|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = \bar{\xi}_{\mathbf{k}}/E_{\mathbf{k}}$  é a probabilidade de uma partícula ser adicionada ao criar um bogoliubon (negativa se uma partícula for aniquilada).

<sup>7</sup>Quando dois bogoliubons são criados nos estados em que os elétrons, caso livres, têm energias  $\bar{\xi}_{\mathbf{k}}$  e  $-\bar{\xi}_{\mathbf{k}}$ , não há probabilidade de uma partícula ter sido adicionada ao sistema.

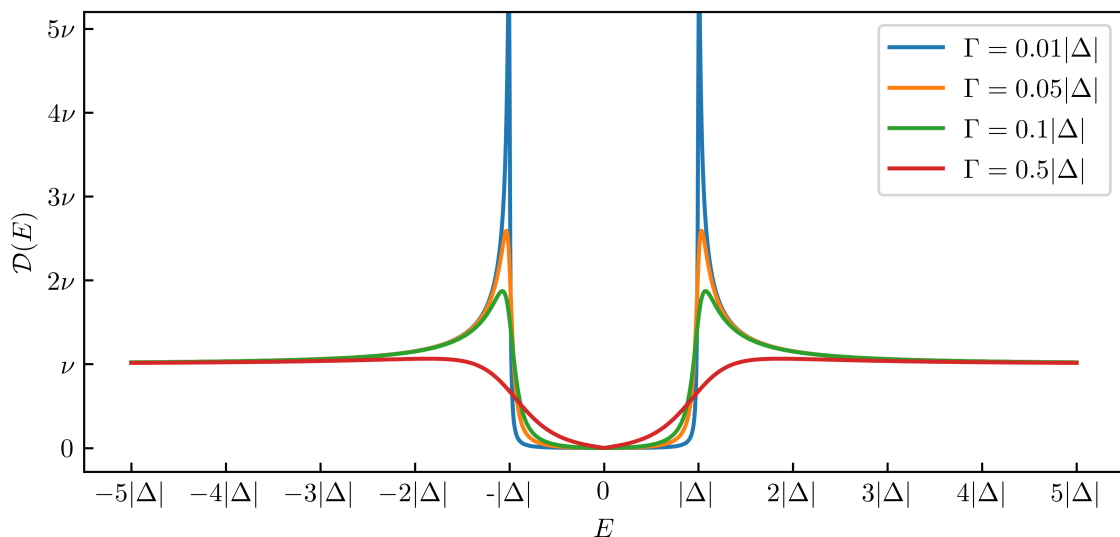
em que  $\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}})$  é a densidade de estados do supercondutor. No contexto da teoria de campo médio desenvolvida, a densidade de estados é dada por<sup>8</sup>

$$\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}}) = \begin{cases} \nu \frac{|E_{\mathbf{k}}|}{\sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta|^2}} & , \text{ se } |E_{\mathbf{k}}| > |\Delta|. \\ 0 & , \text{ se } |E_{\mathbf{k}}| < |\Delta|. \end{cases} \quad (3.7)$$

Definimos  $\nu$  como a densidade de estados do gás de elétrons no nível de Fermi.

Nota-se na definição da densidade de estados que tiramos o índice  $\mathbf{k}$  do gap  $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ . Na equação auto-consistente (3.6) fizemos a mesma aproximação para que seja simplificada. Ao fazermos isso, junto com o modelo simplificado (3.1) que adotamos<sup>9</sup>, a densidade de estados se torna divergente em  $E_{\mathbf{k}} = |\Delta|$ . No entanto, inserimos o parâmetro fenomenológico de Dynes  $\Gamma$  para controlar a divergência nos resultados, modificando a densidade de estados de  $\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}})$  para  $|\Re[\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}} + i\Gamma)]|$ . Em problemas de tunelamento em supercondutores, onde o parâmetro de Dynes é comumente utilizado na literatura, é comum valores da ordem  $\Gamma \sim 0.1|\Delta_0|$  calibrarem bem os resultados experimentais. A partir de agora denotaremos por  $\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}})$  a densidade de estados modificada pelo parâmetro de Dynes.

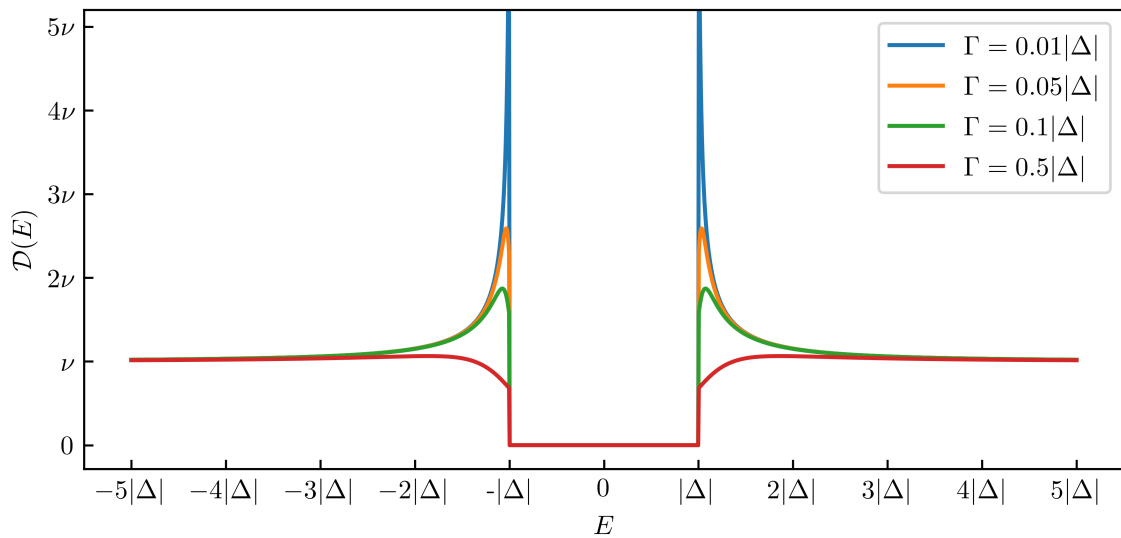
Figura 3.3: Densidade de estados do supercondutor ao inserir o parâmetro fenomenológico de Dynes. O supercondutor adquire estados sub-gap  $|E| < |\Delta|$  ao retirarmos o cut-off da densidade de estados calculada pelo modelo simplista, eq. (3.7).



<sup>8</sup>Tinkham [34, pg. 70]

<sup>9</sup>Tinkham [34, pg. 86]

Figura 3.4: Densidade de estados do supercondutor com parâmetro de Dynes, em que o cut-off de estados sub-gap calculado em eq. (3.7) foi mantido.



Ao inserir o parâmetro de Dynes, temos a opção de manter ou retirar o limite de energia  $E > |\Delta|$  que calculamos na densidade de estados original, equação (3.7). Caso retirássemos, o supercondutor adota estados sub-gap mostrados na figura 3.3. A densidade de estados em que o limite foi mantido é mostrada na figura 3.4. Vamos adotar a densidade de estados que mantém o limite, referindo à discussão sobre absorção em supercondutores em Tinkham [34, pg. 86]. Para que seja possível criar gráficos dos resultados obtidos na dissertação, o parâmetro de Dynes adotado será de  $\Gamma = 0.05|\Delta_0|$ , podendo ser ajustado para corroborar possíveis medidas experimentais dos nossos resultados. Para justificar a escolha nos referimos ao trabalho De Simoni et al. [35], em que um supercondutor entre dois ferromagnetos isolantes, formando uma válvula de spin, foi modelado com o mesmo valor do parâmetro de Dynes.

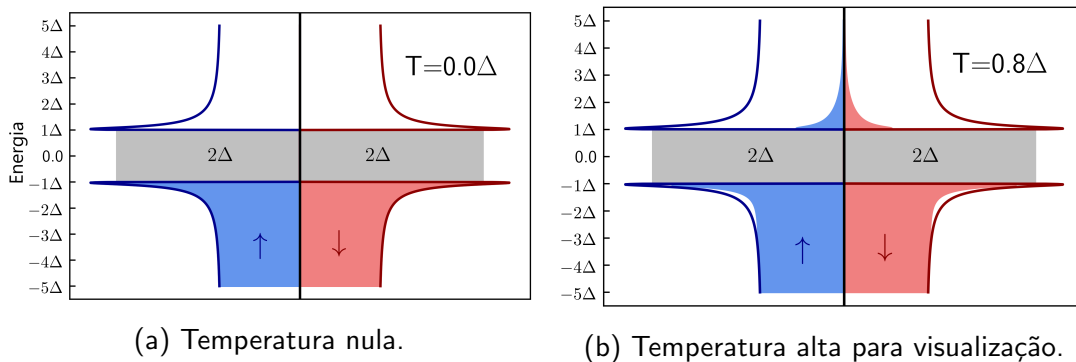
### 3.2.3 Notação de semicondutores

Até o momento nos referimos a bogoliubons como excitações (excitações têm necessariamente energia positiva) em um supercondutor. Não fizemos distinção entre quasi-partículas e excitações. No entanto, uma interpretação diferente consiste em diferenciar quasi-partículas (que a partir de agora serão referidas como bogoliubons) de excitações, pensando que quasi-partículas de energia negativa estão presentes no supercondutor em seu estado fundamental (pares de Cooper, estados de elétrons correlacionados).

Uma excitação consiste em fazer com que um bogoliubon de energia negativa seja levado a um estado de energia positiva, desocupados a baixas temperaturas. Nesse caso fazemos a redefinição:

$$E_{\mathbf{k}} = \text{sgn}(\bar{\xi}_{\mathbf{k}}) \sqrt{\bar{\xi}_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}.$$

Figura 3.5: Ocupação de bogoliubons em um supercondutor. A densidade de estados dos bogoliubons de spin up (azul) e spin down (vermelho) está plotada verticalmente com o eixo de energia. A área sombreada se refere a estados ocupados, em que a ocupação é  $\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}}) n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\sigma})$ , sendo  $\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}})$  a densidade de estados e  $n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\sigma})$  a distribuição de Fermi-Dirac. A área cinza se refere ao gap  $2\Delta(T)$  necessário pra criar excitações em um supercondutor. Na linguagem de semicondutores, uma excitação consiste em fazer o bogoliubon subir na escala de energia.



A notação de semicondutores é conveniente para descrever problemas de tunelamento e espalhamento. Em uma junção de tunelamento supercondutor/isolante/supercondutor, um bogoliubon “pula” de um estado na região sombreada do primeiro supercondutor (com probabilidade proporcional a  $\mathcal{D}(E_{\mathbf{k}}) n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\sigma})$ ) pra um estado vazio no segundo supercondutor (probabilidade  $\sim \mathcal{D}(E_{\mathbf{k}} + eV)(1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\sigma} + eV))$ ) quando é mantida uma diferença de potencial  $eV$  entre eles.

A figura 3.5a mostra a configuração do estado fundamental do supercondutor, em que bogoliubons ocupam a região de energia negativa. A região vazia é vista como um mar de buracos (anti-bogoliubons). Na figura 3.5b, a temperatura é suficiente pra excitar alguns bogoliubons, fazendo com que passem a ter energia positiva.

# Apêndices

## III.A Fônons: descrição

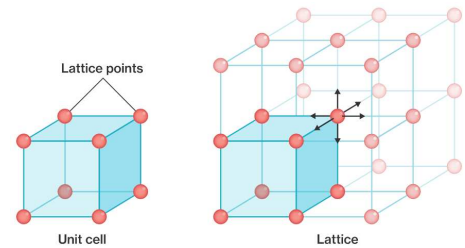
Um cristal é caracterizado por células unitárias que se repetem no espaço. Por serem células idênticas, o material possui simetria de translação, se mantendo idêntico quando transladado por um vetor  $\mathbf{T} = \sum_{i=1,d} n_i \mathbf{a}_i$ , em que  $\mathbf{a}_i$  são os vetores que geram a célula unitária. Um átomo estático na posição  $\mathbf{R}_i$  pertencente a célula  $i$  é idêntico a qualquer outro átomo também estático na posição  $\mathbf{R}_i + \mathbf{T}$  pertencente a célula transladada em  $\mathbf{T}$ . A aproximação de rede rígida (átomos estáticos) é amplamente validada por medição do espectro de difração de raios X, por serem verificados picos altos e finos (difração ocorre apenas nos limites das zonas de Brioullin).

Se os átomos das células unitárias interagem entre si pela energia potencial  $\phi(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$ , a estrutura cristalina é formada no mínimo da energia potencial total  $\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$ . No entanto, se os íons sofrem uma pequena perturbação em torno do equilíbrio, isto é,  $\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i + \mathbf{u}_i$ , a energia potencial total deve mudar apenas no mínimo em segunda ordem no deslocamento:

$$\Phi(\{\mathbf{R} + \mathbf{u}\}) \simeq \Phi(\{\mathbf{R}\}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} u_i^\alpha \left( \frac{\partial^2 \Phi(\{\mathbf{R} + \mathbf{u}\})}{\partial u_i^\alpha \partial u_j^\beta} \right)_0 u_j^\beta,$$

em que os índices  $\alpha$  e  $\beta$  são as componentes do deslocamento em alguma base (a soma do lado direito da equação não depende da escolha da base). Considerando que os átomos têm

Figura 3.6: Representação de um cristal construído por células unitárias cúbicas. Fonte da imagem desconhecida.



massas idênticas, a lagrangiana do sistema pode ser inferida:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}M \sum_i |\dot{\mathbf{u}}_i|^2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} u_i^\alpha \Phi_{ij}^{\alpha\beta} u_j^\beta - \Phi, \quad (3.8)$$

ao ser feita uma compactação de notação óbvia. As coordenadas em (3.8) estarem acopladas sugere que não é possível que certo átomo se movimente sozinho na rede cristalina sem provocar uma reação em seus vizinhos. O movimento na rede é coletivo: devemos analisar as vibrações via modos normais do sistema inteiro. O deslocamento de certo átomo  $i$  é descrito como uma superposição de ondas planas (transf. de Fourier):

$$u_i^\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^\alpha u_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}; \quad \mathbf{k} = 2\pi \left( \frac{n_1}{L_1}, \frac{n_2}{L_2}, \frac{n_3}{L_3} \right).$$

As constantes  $\epsilon_{\mathbf{k}}^\alpha$  são as componentes do vetor de polarização  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  (direção do deslocamento em relação ao vetor de onda  $\mathbf{k}$ ). Os possíveis modos normais são limitados pelas variáveis  $n_i$  que podem assumir valores inteiros do intervalo  $[0, N_i]$ . Qualquer vetor de onda maior que o limite imposto pela primeira zona de Brioullin produz a mesma vibração que seu equivalente na primeira zona. No ponto de vista físico, não podem ocorrer ondas planas com comprimento de onda menor que o espaçamento da rede, uma vez que as ondas são vibrações periódicas da própria rede.

Uma vez descrita pelas coordenadas normais, a lagrangiana do sistema se torna:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}M \sum_{\mathbf{k}} \dot{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}}^* \cdot \dot{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* \cdot u_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}^\alpha D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \epsilon_{\mathbf{k}}^\beta - \Phi,$$

em que  $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} \Phi_{\delta}^{\alpha\beta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta}$  é a transformada de Fourier do tensor de elasticidade. Podemos identificar a frequência de cada modo de vibração como  $M\omega^2(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}^\alpha D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \epsilon_{\mathbf{k}}^\beta$  dependente da polarização da onda plana descrita pelas componentes  $\epsilon_{\mathbf{k}}^\beta$ . Existem três polarizações que diagonalizam  $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  (propagação nas direções principais do cristal), sendo possível desacoplar o movimento em cada uma delas:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}M \sum_{\mathbf{k}\mu} (|\dot{u}_{\mathbf{k}\mu}|^2 - \omega_\mu^2(\mathbf{k})|u_{\mathbf{k}\mu}|^2) - \Phi, \quad (3.9)$$

de onde obtemos as frequências e polarizações pela equação de autovalor

$$M\omega^2(\mathbf{k})\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \mathbf{D}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}. \quad (3.10)$$

A solução clássica do modelo (3.9) é obtida pelas equações de Euler-Lagrange (minimização da ação): são vibrações independentes na rede de cada modo  $\mathbf{k}\mu$  com frequência  $\omega_{\mu}(\mathbf{k})$ . O momento canônico  $\mathbf{p}_{\mathbf{k}}^* = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}}}$  é introduzido para tornar direto o procedimento de quantização do nosso modelo. Pela transformação de Legendre  $\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{p}_{\mathbf{k}}^* \cdot \dot{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}} - \mathcal{L}$  obtemos:

$$\mathcal{H} = \Phi + \sum_{\mathbf{k}\mu} \left( \frac{|p_{\mathbf{k}\mu}^*|^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega_{\mu}^2(\mathbf{k})|u_{\mathbf{k}\mu}|^2 \right).$$

Para considerarmos flutuações quânticas em um problema descrito por variáveis canônicas clássicas basta promovermos-as a operadores ( $u_{\mathbf{k}\mu} \rightarrow \hat{u}_{\mathbf{k}\mu}$ ,  $p_{\mathbf{k}\mu}^* \rightarrow \hat{p}_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger}$ ) com propriedade de comutação:  $[\hat{u}_{\mathbf{k}\mu}, \hat{p}_{\mathbf{k}'\mu'}] = i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\mu\mu'}$ .

Introduzindo as coordenadas de fônons

$$a_{\mathbf{k}\mu} = \sqrt{\frac{M\omega_{\mu}(\mathbf{k})}{2\hbar}} \left[ \hat{u}_{\mathbf{k}\mu} + \frac{i}{M\omega_{\mu}(\mathbf{k})} \hat{p}_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger} \right]; \quad a_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger} = \sqrt{\frac{M\omega_{\mu}(\mathbf{k})}{2\hbar}} \left[ \hat{u}_{\mathbf{k}\mu} - \frac{i}{M\omega_{\mu}(\mathbf{k})} \hat{p}_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger} \right]$$

com regras de comutação

$$[a_{\mathbf{k}\mu}, a_{\mathbf{k}'\mu'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\mu\mu'}; \quad [a_{\mathbf{k}\mu}, a_{\mathbf{k}'\mu'}] = [a_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger}, a_{\mathbf{k}'\mu'}^{\dagger}] = 0;$$

O hamiltoniano é escrito como

$$\mathcal{H} = \Phi + \sum_{\mathbf{k}\mu} \left[ a_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\mu} + \frac{1}{2} \right] \hbar\omega_{\mu}(\mathbf{k}). \quad (3.11)$$

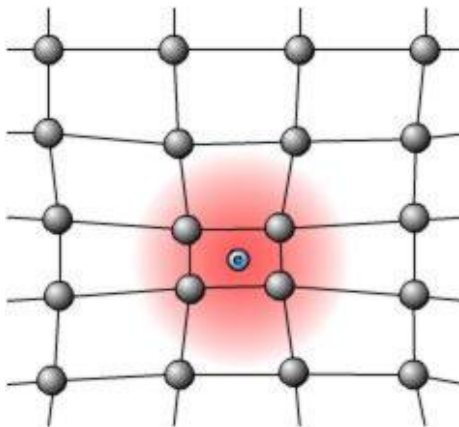
Acima da energia de ponto-zero  $\Phi + \sum_{\mathbf{k}\mu} \hbar\omega_{\mu}(\mathbf{k})/2$ , as vibrações no cristal podem ser vistas como um gás de bósons, cada bóson carregando energia  $\hbar\omega_{\mu}(\mathbf{k})$  correspondente a uma vibração na rede de vetor de onda  $\mathbf{k}$ , polarização  $\mu$  com amplitude quantizada, conhecidos como fônons.

É conveniente escrever o hamiltoniano  $\mathcal{H}$  da forma (3.11) devido à estatística bem conhecida de um gás de bósons não interagentes, permitindo prever o resultado bem conhecido  $c_v \propto T^3$  do calor específico a baixas temperaturas de sistema tridimensionais. A escala de

temperatura do modelo é a temperatura de Debye  $\theta_D$ , que embora definida apenas pelo modelo de Debye (modelo simplista, em que o cristal é considerado isotrópico:  $\omega_\mu(\mathbf{k}) = \nu|\mathbf{k}|$ ), é comparável com a frequência máxima de um modelo mais realista. A temperatura de Debye  $\theta_D$  é geralmente duas ordens de magnitude menor que a temperatura de Fermi dos metais  $T_F$ . Analogamente, a energia de Debye  $\hbar\omega_D$  é duas ordens de grandeza menor que a energia dos elétrons no nível de Fermi  $\epsilon_F$ .

### III.B Interação elétron-fônon

Figura 3.7: Distorção da rede iônica provocada por um elétron. Fonte da imagem desconhecida.



Elétrons presentes em um material cristalino não são independentes dos modos de vibração da rede. Uma distorção na estrutura provoca acúmulo de carga elétrica (seja excitada termicamente ou por outros elétrons), por sua vez interagindo com elétrons em sua vizinhança. Esse tipo de interação por polarização da rede é bem ilustrado na figura 3.7.

As interações entre elétrons e íons são descritas por uma energia potencial elétrica  $U(\mathbf{r}) = -e \sum_i V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ , em que  $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  é o potencial elétrico produzido pelo íon  $i$  na posição  $\mathbf{r}$ . O deslocamento dos íons  $\mathbf{R}_i \rightarrow \mathbf{R}_i(t) = \mathbf{R}_i + \mathbf{u}_i(t)$  muda o potencial  $U(\mathbf{r})$  sentido pelos elétrons. Expandindo em primeira ordem no

deslocamento, obtemos:

$$U(\mathbf{r}) \simeq -e \sum_i \left[ V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) - \mathbf{u}_i \cdot \left( \frac{\partial V(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} \right)_{\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{R}_i} \right].$$

O primeiro termo do lado direito é o potencial periódico que os elétrons estão submetidos, podendo ser absorvido na energia da banda eletrônica  $\epsilon(\mathbf{k})$ , em um procedimento bem conhecido no estudo de bandas eletrônicas. O segundo termo descreve o campo elétrico criado pelo momento de dipolo elétrico gerado pelo deslocamento iônico interagindo com a carga elétrica.

$$\mathcal{H}_{el-phon} = \int d^d r \sum_i \mathbf{u}_i \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \sum_{\sigma} en_{\sigma}(\mathbf{r}).$$

Os deslocamentos  $\{\mathbf{u}_i\}$  são transformados em operadores  $\mathbf{u}_i \rightarrow \hat{\mathbf{u}}_i$  e descritos quanticamente por fônons, sendo a interação interpretada como entre elétrons e fônons. A densidade eletrônica  $\sum_{\sigma} en_{\sigma}(\mathbf{r})$  é também promovida ao operador  $\sum_{\sigma} ec_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})c_{\sigma}(\mathbf{r})$ . Levando a interação para o espaço de Fourier e usando as coordenadas de fônons

$$\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mu} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mu}(\mathbf{q})}} (a_{\mathbf{q}\mu} + a_{\mathbf{q}\mu}^{\dagger}) \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{q}\mu},$$

em que  $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{q}\mu}$  são os vetores de polarização que diagonalizam (3.10), obtemos:

$$\mathcal{H}_{el-phon} = \sum_{\mathbf{q}\mu} \Gamma_{\mu}(\mathbf{q}) (a_{\mathbf{q}\mu} + a_{-\mathbf{q}\mu}^{\dagger}) \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.12)$$

sendo  $\Gamma_{\mu}(\mathbf{q}) = ieV(\mathbf{q}) \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mu}(\mathbf{q})}} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{q}\mu}$ .

A interação (3.12) é ponto de partida pra investigação dos efeitos na estrutura eletrônica relacionados aos fônons. Em altas temperaturas, fônons contribuem para a resistividade elétrica de forma  $\rho \approx T^5$  proporcional a população de fônons (fator  $T^3$ ) e a população de elétrons em torno do nível de Fermi que pode ser espalhada por fônons (fator  $T^2$ ). No entanto, a baixas temperaturas, fônons fornecem um mecanismo de acoplamento entre elétrons responsável pela supercondutividade.

## Capítulo IV

# Resultados: modelagem e efeitos da Interface FM/SC

Uma junção de dois materiais permite interação entre estes na interface, se fazendo necessário um modelo para tal interação. Junções eletrônicas de tunelamento são um exemplo importante de interação na interface entre materiais. No entanto, quando um deles é isolante, o mecanismo de tunelamento é suprimido por não haver estados acessíveis para um elétron incidente ocupar nesse material. Neste capítulo exploraremos os efeitos da interação em uma junção entre um supercondutor e um magneto isolante. O magneto que analisaremos é ferromagnético quando no seu estado ordenado. Utilizando a representação de Schwinger discutida no capítulo II, seremos capazes de descrever a interação na interface mesmo na fase desordenada (paramagnética) do magneto. Isto posto, investigaremos a corrente de spin na interface da junção FMI/SC sob influência da transição de fase ferro/paramagnética. A teoria BCS que descreve o supercondutor isolado foi desenvolvida no capítulo III.

### 4.1 O modelo

O ferromagneto isolante não tem estados acessíveis aos elétrons incidentes que poderiam penetrar em seu interior. Os estados eletrônicos de condução do supercondutor decaem exponencialmente na parte magnética da junção. Por isso, não há tunelamento entre o supercondutor e o ferromagneto. Contudo, os átomos da interface do ferromagneto interagem com os elétrons do supercondutor via troca de spins (transferência de momento angular). Para

modelar a interação usamos o modelo desenvolvido na seção 2.3:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = J_{\text{sd}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[ \hat{T}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{T} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} + \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}}^z \left( c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \right) \right], \quad (4.1a)$$

em que

$$\hat{T} = \begin{cases} \sqrt{2S} \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger & \text{(Holstein-Primakoff),} \\ \frac{1}{\sqrt{N_{\text{m}}}} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{q}'\uparrow} & \text{(Schwinger).} \end{cases}$$

O vínculo que impunha conservação de momento linear foi relaxado ao considerarmos a interface uma superfície rugosa. Devido a rugosidade, a constante de troca  $J_{\text{sd}}$  não pode ser calculada via primeiros princípios, sendo considerada um parâmetro fenomenológico. A constante  $J_{\text{sd}}$  é afetada por diversos fatores da interface, entre eles: a magnitude da interação; a rugosidade da superfície e a razão entre a área de contato e o volume dos materiais (quanto menor a razão, menor  $J_{\text{sd}}$ ).

Os termos da equação (4.1a) são simples de interpretar. Os dois primeiros termos descrevem transferência de momento angular do supercondutor para o ferromagneto (e vice-versa). Em particular, o primeiro termo destrói um elétron de spin up, cria um de spin down transferindo a diferença ( $\hbar$ ) para o ferromagneto. O último termo é a interação de troca na direção de quantização também presente no modelo de Heisenberg (2.1). Utilizando teoria de perturbação em primeira ordem a energia livre do sistema interagente é calculada:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{BCS}} + \mathcal{F}_{\text{mag}} + \underbrace{J_{\text{sd}} \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q}}^z \rangle \sum_{\mathbf{k}} [\Omega_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\uparrow}) - \Omega_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\downarrow})]}_{\text{interação}}.$$

A energia livre do ferromagneto, conforme calculado nas equações (2.13) e (2.5), é

$$\mathcal{F}_{\text{mag}} = \begin{cases} \mathcal{F}_{\text{HP}}^0 + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[ 1 - e^{-\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}} + 2\gamma\mu_B H)} \right] & \text{(Holstein-Primakoff),} \\ \mathcal{F}_{\text{Sb}}^0 + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[ \left( 1 - e^{-\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} - \mu - \gamma\mu_B H)} \right) \left( 1 - e^{-\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}} - \mu + \gamma\mu_B H)} \right) \right] & \text{(Schwinger).} \end{cases}$$

As relações de dispersão  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}}$  e  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Sb}}$ , são mostradas, respectivamente, nas equações (2.4a)

e (2.12b). O termo  $\mathcal{F}_{\text{HP}}^0 = -3JS^2N_m - 2\gamma\mu_B SHN_m$  é a energia do estado fundamental do ferromagneto e  $\mathcal{F}_{\text{Sb}}^0 = -3[2\chi(2-\chi) - 1]JS^2N_m + 2S\mu N_m$  a energia mínima do modelo de Schwinger. No limite  $T \rightarrow 0$ , onde as representações são equivalentes, temos  $\mathcal{F}_{\text{Sb}}^0 \rightarrow \mathcal{F}_{\text{HP}}^0$ . O volume do ferromagneto é contabilizado pelo número de sítios  $N_m$  (dado um espaçamento de rede).

A energia livre do supercondutor isolado

$$\mathcal{F}_{\text{BCS}} = \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\xi}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} [\ln(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}\uparrow}}) + \ln(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}\downarrow}})]$$

é calculada através da equação (3.4). A equação auto-consistente do gap (3.6) foi obtida diferenciando  $\mathcal{F}_{\text{BCS}}$ . No sistema interagente, no entanto, devemos diferenciar  $\mathcal{F}$ , obtendo:

$$\Delta = \frac{g\Delta}{2} \sum_{|\bar{\xi}_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D} \frac{\text{tgh} \left[ \frac{\beta}{2} \left( E_{\mathbf{k}\uparrow} + \frac{J_{\text{sd}} \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q}}^z \rangle}{2} \right) \right] + \text{tgh} \left[ \frac{\beta}{2} \left( E_{\mathbf{k}\downarrow} - \frac{J_{\text{sd}} \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q}}^z \rangle}{2} \right) \right]}{2E_{\mathbf{k}}}. \quad (4.3)$$

Quando a superfície é pouco rugosa, o termo de troca atua no supercondutor como uma energia Zeeman, sendo responsável pela quebra da supercondutividade quando o material magnético está em sua fase ordenada. No entanto, devido a complexidade de resolver (4.3) mesmo numericamente, vamos negligenciar<sup>1</sup>  $J_{\text{sd}}$  em relação ao gap  $\Delta_0$ . Estamos adotando uma aproximação de superfície rugosa, tornando  $J_{\text{sd}}$  ordens de grandeza menor que valores padrão de constantes de troca entre átomos no interior de ferromagnetos. Sendo assim, o gap é obtido pela equação auto-consistente do supercondutor isolado: equação (3.6).

Analogamente, a polarização de spin do supercondutor influencia o ferromagneto. Desprezamos  $J_{\text{sd}}$  em relação a energia dos modos  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ , mantendo a equação auto-consistente (2.14a) que determina o potencial químico dos bósons de Schwinger  $\mu$ .

Vimos que o efeito da interface no estado dos materiais, no limite  $J_{\text{sd}} \ll \min(\Delta_0, JS)$ , pode ser desprezado. No entanto, a possibilidade de transferência de momento angular na interface (corrente de spin) só existe em primeira ordem do termo  $J_{\text{sd}}$ , uma vez que os ha-

<sup>1</sup>Vimos no capítulo III que um supercondutor fino interage com campo externo apenas por energia Zeeman, aturando um campo magnético em seu plano da ordem  $\mu_B H \sim \Delta_0$ . Como  $\Delta_0$  é geralmente da ordem  $10^{-3} \text{eV}$  e  $\mu_B \approx 5.79 \cdot 10^{-5} \text{eV/T}$ , o campo magnético aturado é da ordem de 20T. Uma superfície rugosa não permite que a interação de troca  $J_{\text{sd}}$  seja forte o suficiente pra que o campo magnético efetivo sentido pelo supercondutor chegue nessa ordem de magnitude.

miltonianos isolados  $\mathcal{H}_{\text{mag}}$  e  $\mathcal{H}_{\text{BCS}}$  não conectam estados de spin opostos. Veremos nesse capítulo que apenas os dois primeiros termos da equação (4.1a) serão relevantes pra corrente de spin.

## 4.2 Cálculo da corrente de spin

Vamos definir o operador que determina a corrente de spin na interface (positiva se spin up estiver entrando no ferromagneto) através da relação de conservação de momento angular na junção:

$$\underbrace{\hat{J}_s}_{\text{corrente de spin}} + \underbrace{\frac{\hbar}{2}}_{\text{spin do elétron}} \underbrace{\frac{d}{dt} (N_{\uparrow}^e - N_{\downarrow}^e)}_{\text{taxa em que elétrons refletem spin na superfície}} = 0 \implies \hat{J}_s = \frac{\hbar}{2} \frac{d}{dt} (N_{\downarrow}^e - N_{\uparrow}^e).$$

Notamos que a corrente de spin possui unidade de energia ao ser a multiplicação de  $\hbar/2$  (momento angular) por  $d(N_{\downarrow}^e - N_{\uparrow}^e)/dt$  (frequência). No entanto, sabemos que se trata de corrente de spin (transferência de momento angular) pelo contexto. Ao utilizar a equação de Heisenberg

$$\frac{d}{dt} (N_{\downarrow}^e - N_{\uparrow}^e) = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_{\text{tot}}, N_{\downarrow}^e - N_{\uparrow}^e],$$

em que  $\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_{\text{mag}} + \mathcal{H}_{\text{BCS}} + \mathcal{H}_{\text{int}}$ , nota-se que apenas os dois primeiros termos de  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  definidos na equação (4.1a) contribuem para a corrente de spin. Todos os outros termos comutam com o número de elétrons<sup>2</sup>  $N_{\sigma}^e = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}$ . Apenas os dois primeiros termos de  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  dão possibilidade de destruir um elétron de spin  $\sigma$  e criar outro de spin oposto. Obtemos:

$$\hat{J}_s = i J_{\text{sd}} (A - A^{\dagger}), \text{ em que } A = \hat{T} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\downarrow} \text{ e } A^{\dagger} = \hat{T}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\uparrow}$$

<sup>2</sup>Utilizamos na equação de Heisenberg o hamiltoniano adotado no capítulo III:  $\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}$ . Não utilizamos sua aproximação de campo-médio, equação (3.3), por conservar o número de partículas apenas em média, gerando termos espúrios para a corrente de spin.

são operadores que invertem o spin dos elétrons na interface. Uma vez que o supercondutor isolado não possui mecanismo de inversão de spin (estamos desconsiderando influência de interação spin-órbita nos estados eletrônicos) temos  $\langle \hat{J}_s \rangle_0 = 0$ , sendo a média  $\langle \dots \rangle_0$  calculada para o sistema isolado. No entanto, ao perturbar o sistema com  $\mathcal{H}_{\text{int}}$ , obtemos via teoria de resposta linear:

$$J_s \stackrel{\text{def.}}{=} \langle \hat{J}_s \rangle = -2J_{\text{sd}}^2 \text{Im} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\delta\mu t'} \left( -i\Theta(t') \langle [A(t'), A^\dagger(0)] \rangle_0 \right) \right], \quad (4.4)$$

com evolução temporal dos operadores  $A(t) = e^{i(\mathcal{K}_{\text{mag}} + \mathcal{K}_{\text{BCS}})t} A(0) e^{-i(\mathcal{K}_{\text{mag}} + \mathcal{K}_{\text{BCS}})t}$ , apenas com o hamiltoniano dos dois sistemas isolados<sup>3</sup>. O termo  $e^{i\delta\mu t'}$  é consequência de trocarmos  $\mathcal{H}_{\text{BCS}}$  por  $\mathcal{K}_{\text{BCS}}$  na evolução temporal. O resultado é escrito como ( $-2J_{\text{sd}}^2$  vezes) a transformada de Fourier da função de Green:

$$G_{\text{ret}}(t) = \underbrace{-i\Theta(t) \langle [A(t'), A^\dagger(0)] \rangle_0}_{\text{propagador de spin na interface}}. \quad (4.5)$$

Conforme descrito em Altland and Simons [32, seção 7.2], calculamos a corrente de spin, equação (4.4), através da função de Green de Matsubara ( $\tau = it$ ):

$$g(\tau > 0) = -\langle A(\tau)A^\dagger(0) \rangle_0 = - \underbrace{\left[ -\langle \hat{T}(\tau)\hat{T}^\dagger \rangle_0 \right]}_{\text{propagador de excitações de spin magnéticas}} \underbrace{\left[ -\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{p}\mathbf{p}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau)c_{\mathbf{k}'\downarrow}(\tau)c_{\mathbf{p}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}'\uparrow} \rangle_0 \right]}_{\text{propagador eletrônico}}. \quad (4.6)$$

O primeiro termo é o propagador de mágnons quando utilizado o formalismo de Holstein-Primakoff. Na representação de Schwinger, o propagador transfere os bósons entre estados de spin  $\uparrow$  e  $\downarrow$ . A frequência em que elétrons do supercondutor flipam seu spin na interface da junção é modelada pelo segundo termo.

<sup>3</sup>Em algumas expressões foi adotado  $\hbar = 1$  para simplificá-las. A constante  $\hbar$  pode ser restaurada a qualquer momento via análise dimensional.

### 4.2.1 Propagador eletrônico

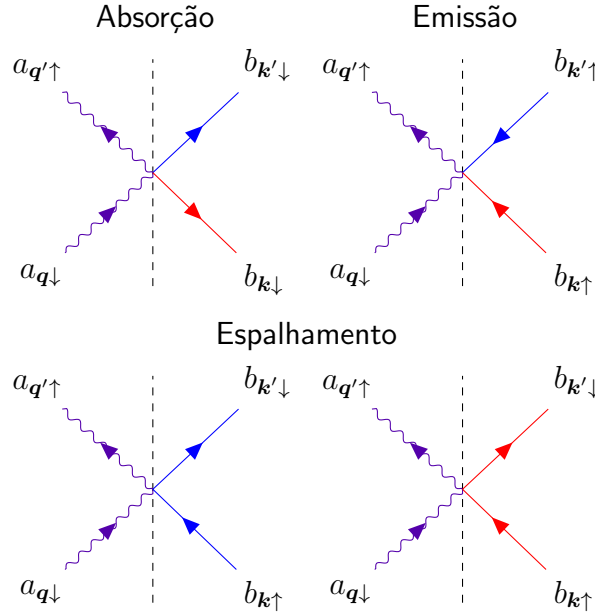
O propagador eletrônico é calculado sobre os estados de  $\mathcal{K}_{\text{BCS}}$  utilizando a transformação descrita na equação (3.5), em que escrevemos os operadores eletrônicos em termo das excitações do supercondutor:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{p}\mathbf{p}'} \left\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}'\downarrow}(\tau) c_{\mathbf{p}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}'\uparrow} \right\rangle_0 = \\
& - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[ \left( |v_{\mathbf{k}}|^2 |u_{\mathbf{k}'}|^2 - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \right) \underbrace{e^{-(E_{\mathbf{k}\downarrow} + E_{\mathbf{k}'\downarrow})\tau} \langle b_{\mathbf{k}'\downarrow} b_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \langle b_{\mathbf{k}\downarrow} b_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle}_{\text{absorção de energia}} \right. \\
& + \left. \left( |v_{\mathbf{k}}|^2 |u_{\mathbf{k}'}|^2 - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \right) \underbrace{e^{(E_{\mathbf{k}\uparrow} + E_{\mathbf{k}'\uparrow})\tau} \langle b_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \langle b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle}_{\text{emissão de energia}} \right. \\
& \left. + \left( |u_{\mathbf{k}}|^2 |u_{\mathbf{k}'}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}^* \right) \underbrace{e^{(E_{\mathbf{k}\uparrow} - E_{\mathbf{k}'\downarrow})\tau} \langle b_{\mathbf{k}'\downarrow} b_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \langle b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle}_{\text{espalhamento}} \right]. \tag{4.7}
\end{aligned}$$

O propagador eletrônico é resultado de diferentes canais que transmitem corrente de spin. O primeiro termo (absorção de energia) descreve a criação de duas quasipartículas no supercondutor quando este absorve energia  $\hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H \geq 2|\Delta| + 2\mu_B H$  do ferromagneto (lembramos do capítulo III que excitações só podem ocorrer aos pares), pesado por  $\langle b_{\mathbf{k}'\downarrow} b_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle$  e  $\langle b_{\mathbf{k}\downarrow} b_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle$ , a vacância dos estados de quasipartículas  $|\mathbf{k}'\downarrow\rangle$  e  $|\mathbf{k}\downarrow\rangle$ . O gasto de energia para criar cada quasipartícula no processo de interação é no mínimo  $|\Delta| - \mu_B H \sigma$ , em que  $\sigma = \pm 1$  representa seu spin  $\uparrow$  ou  $\downarrow$  ( $\uparrow$ :  $\sigma = 1$  e  $\downarrow$ :  $\sigma = -1$ ). Nos diagramas mostrados na figura 4.1, as linhas onduladas descrevem a emissão de spin down  $-\hbar$  do ferromagneto para o supercondutor ao aniquilar um bóson de Schwinger com spin  $-\hbar/2$  e criar outro com spin  $\hbar/2$ . Os elétrons do supercondutor absorvem o spin transferido ao inverterem seu spin na interface. Na seção 3.2.1 do capítulo III interpretamos  $|v_{\mathbf{k}}|^2$  como a probabilidade de uma excitação  $b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger$  destruir um elétron no estado  $|\mathbf{k}\downarrow\rangle$  e  $|u_{\mathbf{k}}|^2$  de criar em  $|\mathbf{k}\uparrow\rangle$ . Portanto, sendo multiplicado por  $|v_{\mathbf{k}}|^2 |u_{\mathbf{k}'}|^2$ , o termo de absorção consiste da destruição de um elétron no estado  $|\mathbf{k}\uparrow\rangle$  (linha vermelha no diagrama) e a criação de outro mais energético no estado  $|\mathbf{k}'\downarrow\rangle$  (linha azul), absorvendo a diferença de spin  $-\hbar$  do ferromagneto. Em geral, os termos em parênteses são denominados fatores de coerência. Estão presentes pelo fato de estados de spin e momento opostos não serem independentes em um supercondutor. Sempre que um estado eletrônico está ocupado, o estado obtido por reversão temporal (momento e spin opostos) também está,

h

Figura 4.1: Representação diagramática dos propagadores de spin na interface. Linhas roxas representam os modos de spin no ferromagneto (paramagneto na fase desordenada) isolante. As linhas azuis são as componentes de elétrons das quasi-partículas no supercondutor. As linhas vermelhas são as componentes de buracos.



conforme vimos na seção 3.2.1. Mais detalhes sobre fatores de coerência em supercondutores são encontrados em Tinkham [34, pg. 79]. Os termos de emissão e espalhamento tem interpretação análoga, dedutível a partir dos diagramas. Em particular, o termo de absorção é o único não nulo no limite  $T \rightarrow 0$ .

## 4.2.2 Propagador magnético

O propagador magnético é calculado utilizando as representações desenvolvidas no capítulo II.

- Na representação de Holstein-Primakoff, o propagador

$$\begin{aligned}
 -\langle \hat{T}(\tau) \hat{T}^\dagger \rangle_0 &= -2S \sum_{\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{q}}^\dagger(\tau) a_{\mathbf{q}} \rangle \\
 &= -2S \sum_{\mathbf{q}} \text{nB} (\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}} + 2\gamma\mu_B H) e^{\tau(\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}} + 2\gamma\mu_B H)}
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

representa a absorção ou emissão de mágnons na superfície. A relação de dispersão  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{HP}}$  é dada pela equação (2.4a).

- Utilizando a representação de Schwinger, obtemos

$$\begin{aligned}
-\langle \hat{T}(\tau) \hat{T}^\dagger \rangle_0 &= -\frac{1}{N_m} \sum_{qq'} \langle a_{q\downarrow}^\dagger(\tau) a_{q'\uparrow}(\tau) a_{q'\uparrow}^\dagger a_{q\downarrow} \rangle \\
&= -\frac{1}{N_m} \sum_{qq'} \left\{ \underbrace{n_B(\hbar\omega_q^{\text{Sb}} - \mu + \gamma\mu_B H)}_{\text{bóson de spin } \downarrow} \times \right. \\
&\quad \left. \underbrace{n_B(\hbar\omega_{q'}^{\text{Sb}} - \mu - \gamma\mu_B H)}_{\text{bóson de spin } \uparrow} e^{\beta(\hbar\omega_{q'}^{\text{Sb}} - \mu - \gamma\mu_B H)} e^{\tau(\hbar\omega_q^{\text{Sb}} - \hbar\omega_{q'}^{\text{Sb}} + 2\gamma\mu_B H)} \right\}, \tag{4.9}
\end{aligned}$$

com relação de dispersão mostrada na equação (2.12b). Foi discutido no capítulo II que o número de bósons de Schwinger é fixo. Quando estes condensam no estado  $|\mathbf{q}=\mathbf{0}, \uparrow\rangle$  (no limite  $H \rightarrow 0^+$ ), o magneto possui magnetização espontânea. No limite  $T \rightarrow 0$  as duas representações coincidem. Nesse limite temos  $\mu = -\gamma\mu_B H$  e  $n_B(\hbar\omega_q^{\text{Sb}}) \rightarrow 2SN_m\delta_{q'\mathbf{0}}$ , tornando as expressões (4.8) e (4.9) equivalentes.

Para desenvolver os cálculos em paralelo nas duas representações, escrevemos o propagador magnético como:

$$-\langle \hat{T}(\tau) \hat{T}^\dagger \rangle_0 = -\frac{1}{N_m} \sum_{qq'} \Lambda_{qq'} e^{\tau(\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H)},$$

sendo

$$\Lambda_{qq'} = \begin{cases} \delta_{qq'} N_m 2S n_B(\hbar\omega_q^{\text{HP}} + 2\gamma\mu_B H) & \text{(Holstein-Primakoff).} \\ n_B(\hbar\omega_q^{\text{Sb}} - \mu + \gamma\mu_B H) n_B(\hbar\omega_{q'}^{\text{Sb}} - \mu - \gamma\mu_B H) e^{\beta(\hbar\omega_{q'}^{\text{Sb}} - \mu - \gamma\mu_B H)} & \text{(Schwinger).} \end{cases}$$

A energia fornecida para os elétrons ao absorverem spin  $-\hbar$  é

$$\hbar\omega_{qq'} = \begin{cases} \hbar\omega_q^{\text{HP}} & \text{(Holstein-Primakoff).} \\ \hbar\omega_q^{\text{Sb}} - \hbar\omega_{q'}^{\text{Sb}} & \text{(Schwinger).} \end{cases}$$

Na formulação de mágnons (Holstein-Primakoff), os elétrons do supercondutor podem apenas emitir energia quando spin down  $-\hbar$  é transferido para o ferromagneto. Isso ocorre porque mágnons, as excitações (energia positiva) do ferromagneto, possuem spin  $-\hbar$ . Contudo, na formulação de Schwinger é possível que os elétrons, emitindo spin  $-\hbar$ , absorvam energia do

ferromagneto ao promoverem um bóson de spin  $\uparrow$  a um estado de spin  $\downarrow$  menos energético ( $\hbar\omega_q^{\text{sb}} + \gamma\mu_B H < \hbar\omega_{q'}^{\text{sb}} - \gamma\mu_B H$ ). Esse processo é pouco provável na fase condensada, uma vez que os bósons de spin  $\uparrow$  estão no estado de menor energia possível. Há de se esperar que na fase paramagnética tal processo passe a ser relevante no cálculo da corrente de spin.

### 4.2.3 Propagador de spin na interface

De posse dos propagadores de elétrons e excitações magnéticas vamos construir o propagador de spin definido na equação (4.6), obtendo a partir dele a corrente de spin na interface. Vamos separar o calculo em três partes, uma pra cada termo da equação (4.7). Para cada termo usaremos o processo descrito em Altland and Simons [32, seção 7.2].

#### Termo de absorção

O propagador de spin devido a absorção de energia é

$$g_{\text{abs}}(\tau) = - \sum_{qq'} \Lambda_{qq'} \sum_{\substack{\bar{\xi}_k, \bar{\xi}_{k'} > 0 \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} \left[ 1 - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\downarrow})] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}'\downarrow})] \\ \times e^{\tau(\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H - E_{\mathbf{k}\downarrow} - E_{\mathbf{k}'\downarrow})}$$

Ao fazermos a transformada de Fourier

$$g_{\text{abs}}(i\Omega_l) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^{\beta} g_{\text{abs}}(\tau) e^{i\Omega_l \tau}$$

obtemos:

$$g_{\text{abs}}(i\Omega_l) = - \sum_{qq'} \Lambda_{qq'} \sum_{\substack{\bar{\xi}_k, \bar{\xi}_{k'} > 0 \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} \left[ 1 - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\downarrow})] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}'\downarrow})] \\ \times \left[ \frac{e^{\beta(\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H - E_{\mathbf{k}\downarrow} - E_{\mathbf{k}'\downarrow})} - 1}{i\Omega_l + \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H - E_{\mathbf{k}\downarrow} - E_{\mathbf{k}'\downarrow}} \right]$$

A transformada de Fourier  $g_{\text{abs}}(\delta\mu)$  da componente de absorção da função de Green escrita na equação (4.5) é obtida através da continuação analítica  $i\Omega_l \rightarrow \delta\mu + i0^+$ :

$$g_{\text{abs}}(\delta\mu) = - \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \Lambda_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\bar{\xi}_{\mathbf{k}}, \bar{\xi}_{\mathbf{k}'} > 0} \left[ 1 - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\downarrow})] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}'\downarrow})] \\ \times \left[ \frac{e^{\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H - E_{\mathbf{k}\downarrow} - E_{\mathbf{k}'\downarrow})} - 1}{\delta\mu + \hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H - E_{\mathbf{k}\downarrow} - E_{\mathbf{k}'\downarrow} + i0^+} \right]$$

em que  $J_s^{\text{abs}} = -2J_{\text{sd}}^2 \text{Im} [g_{\text{abs}}(\delta\mu)]$ . Ao usar a fórmula de Sokhotski-Plemelj

$$\frac{1}{x + i0^+} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{x} \right) - i\pi\delta(x),$$

sendo  $\mathcal{P}$  a parte principal de Cauchy, obtemos a componente de absorção da corrente de spin:

$$J_s^{\text{abs}} = 2\pi J_{\text{sd}}^2 [1 - e^{-\beta\delta\mu}] \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \Lambda_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\bar{\xi}_{\mathbf{k}}, \bar{\xi}_{\mathbf{k}'} > 0} \left[ 1 - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}\downarrow})] [1 - n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}'\downarrow})] \\ \times \delta(\delta\mu + \hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H - E_{\mathbf{k}\downarrow} - E_{\mathbf{k}'\downarrow}).$$

A corrente de spin é linear no desbalanço entre os potenciais químicos de elétrons com spin up e down  $J_s \propto \delta\mu$  quando este é pequeno  $\delta\mu \ll |\Delta|$ . Nesse limite obtemos

$$j_s^{\text{abs}} \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\delta\mu \rightarrow 0} \frac{J_s^{\text{abs}}}{2\pi[\nu J_{\text{sd}}]^2 N_{\text{m}}^2 \delta\mu} \\ = \frac{\beta}{N_{\text{m}}^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \Lambda_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \int_0^\infty \int_0^\infty dE dE' \mathcal{D}(E) \mathcal{D}(E') \left[ 1 - \frac{|\Delta|^2}{EE'} \right] [1 - n_{\text{F}}(E_{\downarrow})] [1 - n_{\text{F}}(E'_{\downarrow})] \quad (4.12) \\ \times \delta(\hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H - E_{\downarrow} - E'_{\downarrow}),$$

em que utilizamos a aproximação contínua dos estados eletrônicos descrita na seção 3.2.2.

### Termo de emissão

Os termos de emissão e espalhamento são obtidos de forma análoga ao de absorção. No entanto, pra evitar o desgaste do leitor, apenas será mostrado o resultado:

$$\begin{aligned}
 j_s^{\text{em}} &\stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\delta\mu \rightarrow 0} \frac{J_s^{\text{em}}}{2\pi[\nu J_{\text{sd}}]^2 N_m^2 \delta\mu} \\
 &= \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \Lambda_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \int_0^\infty \int_0^\infty dE dE' \mathcal{D}(E) \mathcal{D}(E') \left[ 1 - \frac{|\Delta|^2}{EE'} \right] n_{\text{F}}(E_\uparrow) n_{\text{F}}(E'_\uparrow) \\
 &\quad \times \delta(\hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H + E_\uparrow + E'_\uparrow)
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Vemos que o termo de emissão é nulo se  $\hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} > 0$ , como sempre ocorre na representação de Holstein-Primakoff. Na representação de Schwinger, no entanto, podemos ter corrente de spin na interface junto com emissão de energia pelo supercondutor.

### Termo de espalhamento

O termo de espalhamento é dado por:

$$\begin{aligned}
 j_s^{\text{sct}} &\stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\delta\mu \rightarrow 0} \frac{J_s^{\text{sct}}}{2\pi[\nu J_{\text{sd}}]^2 N_m^2 \delta\mu} \\
 &= \frac{2\beta}{N_m^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \Lambda_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \int_0^\infty \int_0^\infty dE dE' \mathcal{D}(E) \mathcal{D}(E') \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{EE'} \right] n_{\text{F}}(E_\uparrow) [1 - n_{\text{F}}(E'_\downarrow)] \\
 &\quad \times \delta(\hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H + E_\uparrow - E'_\downarrow).
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Diferente do fator de coerência dos termos de absorção e emissão, o fator de coerência do termo de espalhamento possui sinal positivo, aumentando a chance de ocorrer inversão de spin das excitações com energia próxima ao gap  $|\Delta|$ .

## 4.3 Convenção de sinal de semicondutores

Como comentado na seção 3.2.3, a convenção de sinais de semicondutores simplifica as expressões em problemas de tunelamento entre supercondutores. Pensando na corrente de spin como “tunelamento” de elétrons entre bandas de energia com spins diferentes, há de se

esperar que a convenção será útil para escrevermos o resultado. Vamos definir

$$E = \text{sgn}(\bar{\xi}) \sqrt{\bar{\xi}^2 + |\Delta|^2},$$

$$E_{\uparrow} = E - h_{\text{ef}},$$

$$E_{\downarrow} = E + h_{\text{ef}},$$

em que agora a energia pode assumir valores negativos, sendo  $\bar{\xi} = \epsilon - \bar{\mu}$ . O campo efetivo  $h_{\text{ef}} = \delta\mu/2 + \mu_B H$  sentido pelos elétrons foi definido na página 34. No entanto, na nossa aproximação de resposta linear em  $\delta\mu$ , o campo efetivo é apenas a energia Zeeman  $h_{\text{ef}} = \mu_B H$ . A corrente de spin total é escrita em única integral<sup>4</sup>:

$$\begin{aligned} j_s &= j_s^{\text{abs}} + j_s^{\text{em}} + j_s^{\text{sct}} \\ &= \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \Lambda_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{(E + \mu_B H)(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H)} \right] \\ &\quad \times \underbrace{\mathcal{D}(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H)]}_{\text{Vacância de estados eletrônicos com energia } E + \hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H \text{ e spin } \downarrow} \\ &\quad \times \underbrace{\mathcal{D}(E + \mu_B H) n_F(E)}_{\text{População de elétrons com energia } E \text{ e spin } \uparrow}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Embora o campo magnético desloque as densidades de estados eletrônicos de spin up e down em  $2\mu_B H$ , a energia absorvida/emitada pelos elétrons do supercondutor ao mudar entre esses estados possui um termo  $2\gamma\mu_B H$ . Lembramos que  $2\gamma$  foi adotado como fator de Landé  $g_L$  do ferromagneto. Nesse trabalho mostraremos resultados para  $g_L = 1$  e  $g_L = 2$ . O integrando da equação (4.15) possui três regimes dependendo do valor de  $\hbar\omega_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H$ : espalhamento, absorção e emissão. Para facilitar a interpretação dos resultados no próximo capítulo, nas próximas subseções discutiremos cada um desses processos através de ilustrações. Para melhor visualização, a dependência do gap com a temperatura é ignorada:  $\Delta(T) = \Delta_0$ .

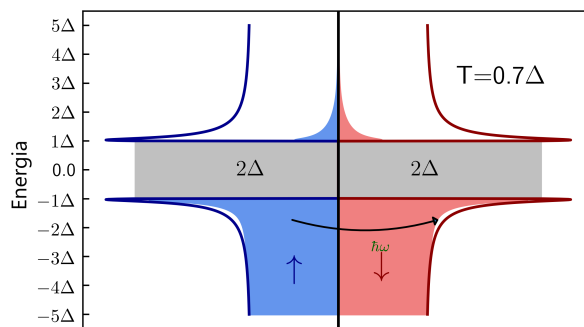
<sup>4</sup>A dedução da identidade  $j_{\text{abs}} + j_{\text{em}} + j_{\text{sct}}$  está detalhada no apêndice IV.A.

### 4.3.1 Regime de espalhamento

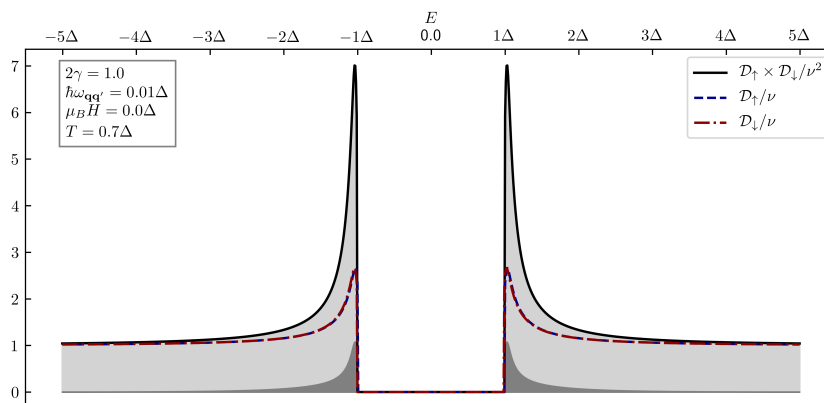
Uma condição necessária para ocorrer espalhamento entre bogoliubons no supercondutor é a existência de estados disponíveis que estes possam ocupar após inverterem seu spin. Devido ao gap, a temperatura deve ser suficiente para gerar estados disponíveis. Por esse motivo não ocorre corrente de spin devida à espalhamento em  $T = 0$ .

Nas figuras 4.2a e 4.3a um elétron de spin  $\uparrow$  inverte seu spin e sobe na escala de energia ao absorver um “mágnon” (o termo mágnon refere-se à representação de Holstein-Primakoff) de energia  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H$ . As densidades de estados eletrônicos de spin  $\uparrow$  e  $\downarrow$  são deslocadas devido à energia Zeeman.

Figura 4.2: Na ausência de campo magnético um elétron  $\uparrow$  absorve energia  $\hbar\omega_{qq'}$  e passa para um estado  $\downarrow$ . Em altas temperaturas,  $T \sim |\Delta|$ , a possibilidade de espalhamento torna possível transmitir spin mesmo transferindo/absorvendo energia muito baixa  $\hbar\omega_{qq'} \approx 0$ .



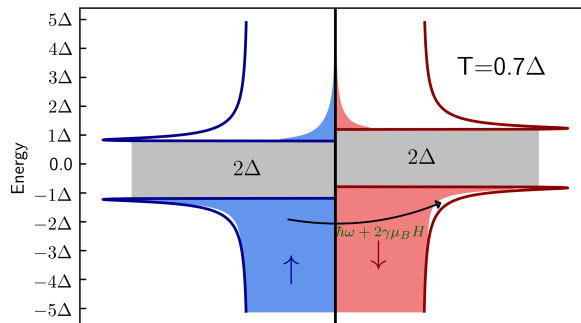
(a)  $\mu_B H = 0$ . As transições eletrônicas ocorrem absorvendo ou emitindo energia  $\hbar\omega_{qq'} \approx 0$ .



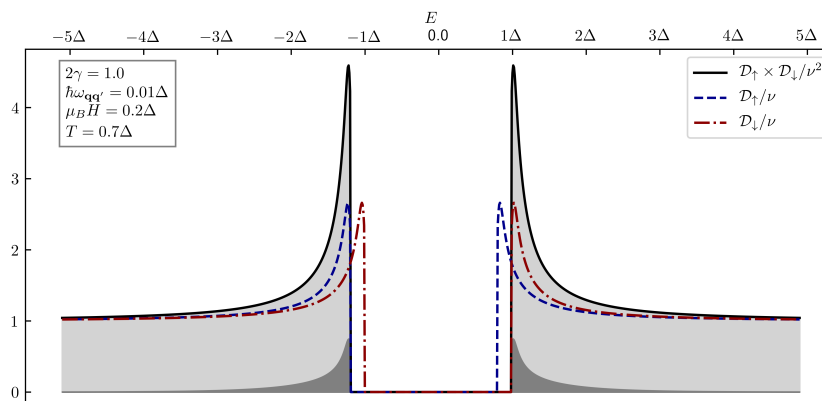
(b) Integrando da equação (4.15): Na região cinza escuro é possível transmitir corrente de spin por espalhamento. Nesse esquema as transições ocorrem em energia constante e as densidades de estados estão deslocadas em  $\hbar\omega_{qq'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H \approx 0$ .

A não ser pelo termo de coerência presente na equação (4.15), o integrando é representado nas figuras 4.2b, 4.3b e 4.3c. As densidades de estados são deslocadas em  $\hbar\omega_{qq'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H$  devido à energia absorvida/emita pelos elétrons ao inverterem seu spin. A região escura na figura representa as distribuições de Fermi-Dirac que contabilizam os estados eletrônicos disponíveis para haver espalhamento de elétrons ou absorção e emissão de energia.

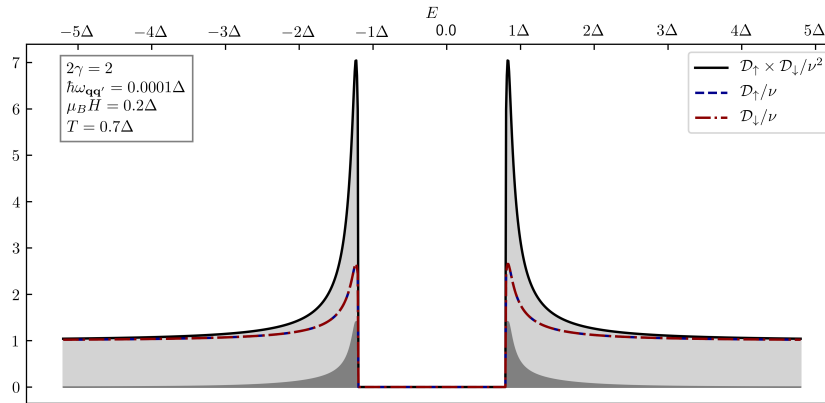
Figura 4.3: O campo magnético externo desloca as densidades de estados dos elétrons  $\uparrow$  e  $\downarrow$ , criando diferença de energia potencial entre as bandas. No entanto, o mesmo ocorre no ferromagneto. Para ir de um estado  $\uparrow$  para  $\downarrow$  o elétron absorve energia  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H$ . Se  $\gamma = 1$ , toda a energia  $\hbar\omega_{qq'}$  é transformada em cinética dos elétrons, mantendo os diversos termos do integrando da equação (4.15) com picos alinhados.



(a) Esquema de espalhamento eletrônico transmitindo corrente de spin. As densidades de estados são deslocadas relativamente em  $2\mu_B H$  pelo campo magnético. No entanto, o deslocamento é compensado pela energia absorvida  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H$  se  $\gamma = 1$ .



(b) Integrando da equação (4.15): As densidades de estados estão deslocadas em  $\hbar\omega_{qq'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H$ . A não ser pelo termo de coerência, a área cinza escuro indica o valor da integral. Nesse caso a transmissão de corrente de spin por espalhamento é alta.

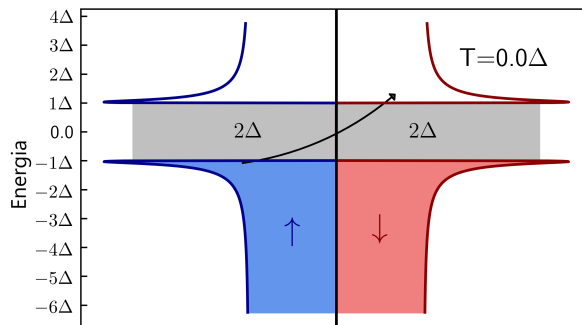


(c) As densidade de estados permanecem alinhadas quando  $\gamma = 1$  e  $\hbar\omega_{qq'} \ll |\Delta_0|$ .

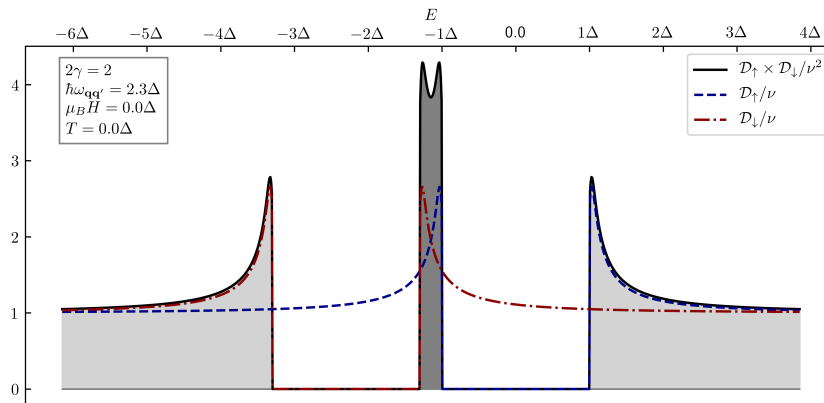
### 4.3.2 Regime de absorção

Quando o bogoliubon absorve energia  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H > 2|\Delta| + 2\mu_B H$  suficiente para vencer o gap e o deslocamento das densidades de estados, seu spin é invertido, indo para estados de alta energia. O regime de absorção geralmente é responsável por funções-resposta não nulas mesmo em  $T = 0$  em supercondutores.

Figura 4.4: A região cinza escuro indica que é possível transmitir corrente de spin por absorção de energia em  $T = 0$ . Nesse esquema a transição de estados eletrônicos acontece em energia constante. O deslocamento das densidades de estados leva em conta a absorção de energia  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H$ .



(a) Esquema de absorção de energia transmitindo corrente de spin. A energia fornecida pelo ferromagneto  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H$  é suficiente pra vencer o gap e o deslocamento das densidades de estados  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H > 2|\Delta| + 2\mu_B H$  (nessa figura  $H = 0$ ), transmitindo corrente de spin em  $T = 0$ .

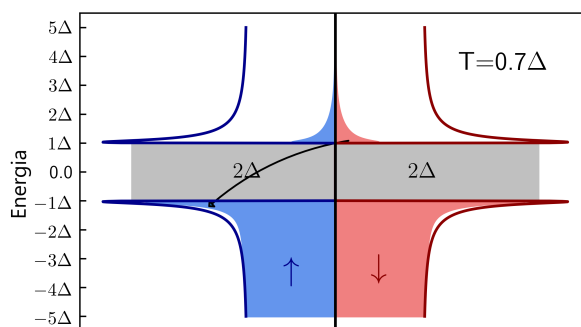


(b) Integrando da equação (4.15): A densidade de estados estão deslocadas relativamente em  $\hbar\omega_{qq'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H > 2|\Delta|$ .

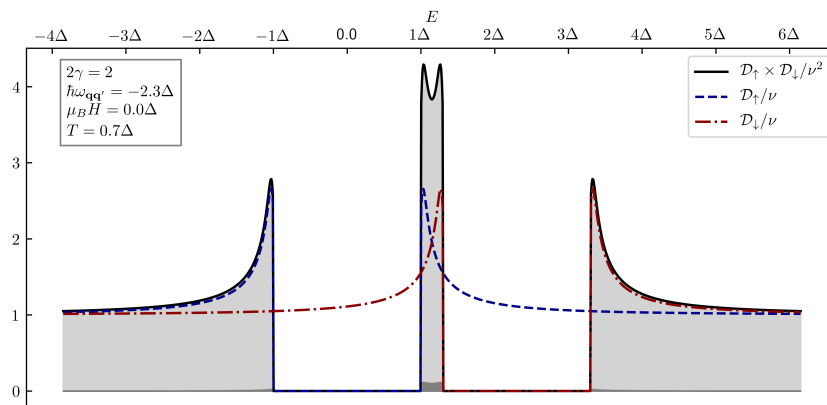
### 4.3.3 Regime de emissão.

Em altas temperaturas também existe o regime de emissão. Um bogoliubon excitado ( $E > |\Delta|$ ) inverte seu spin emitindo energia  $|\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H| > 2(|\Delta| + \mu_B H)$  para o ferromagneto (absorvendo energia  $\hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H < -2(|\Delta| + \mu_B H)$  do ferromagneto) ao ir para um estado menos energético ( $E < -|\Delta|$ ). No entanto, para que a corrente de spin devida a esse processo seja considerável, deve-se ter temperaturas muito altas, de forma que o metal já saiu da fase supercondutora.

Figura 4.5: Na segunda figura a pequena região sombreada indica onde o integrando da equação (4.15) é não nulo. Devido a baixa quantidade de bogoliubons excitados em  $T = 0.7\Delta$ , a corrente de spin por esse mecanismo é desprezível em comparação aos regimes de absorção e espalhamento.



(a) Corrente de spin transmitida por emissão de energia.



(b) Integrando da equação (4.15): A densidade de estados  $\uparrow$  está deslocada em  $\hbar\omega_{qq'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H < -2|\Delta|$  em relação a  $\downarrow$ .

# Apêndices

## IV.A Corrente de spin total

De posse do resultado mostrado na equação (4.15),

$$j_s = \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{qq'} \Lambda_{qq'} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{(E + \mu_B H)(E - \mu_B H + \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H)} \right] \\ \times \mathcal{D}(E + \mu_B H) n_F(E) \mathcal{D}(E - \mu_B H + \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H)]$$

fazemos a substituição de variável  $E \rightarrow E - \mu_B H$ , obtendo:

$$j_s = \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{qq'} \Lambda_{qq'} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{E(E + \hbar\omega_{qq'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H)} \right] \\ \times \mathcal{D}(E) n_F(E_{\uparrow}) \mathcal{D}(E + \hbar\omega_{qq'} + 2(\gamma - 1)\mu_B H) [1 - n_F(E_{\uparrow} + \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H)],$$

em que  $E_{\uparrow} = E - \mu_B H$ . Inserindo a delta de Dirac  $\delta(E_{\uparrow} - E'_{\downarrow} + \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H)$ , podemos reescrever o resultado como:

$$j_s = \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{qq'} \Lambda_{qq'} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dE dE' \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{EE'} \right] \mathcal{D}(E) n_F(E_{\uparrow}) \\ \times \mathcal{D}(E') [1 - n_F(E'_{\downarrow})] \delta(E_{\uparrow} + \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H - E'_{\downarrow}).$$

O integrando da última equação possui quatro regiões, responsáveis por:

- $E > 0$  e  $E' > 0$ : metade do termo de espalhamento mostrado na equação (4.14).
- $E < 0$  e  $E' < 0$ : a segunda metade do termo de espalhamento.
- $E > 0$  e  $E' < 0$ : termo de absorção, equação (4.12).

- $E < 0$  e  $E' > 0$ : termo de emissão, equação (4.13).

# Capítulo V

## Discussão e Conclusão

Obtemos no capítulo anterior uma expressão que relaciona a corrente de spin com os parâmetros: temperatura, campo magnético, gap do supercondutor  $|\Delta_0|$  (a escala de energia do supercondutor),  $6JS$  (escala de energia do ferromagneto) e fator  $g_L = 2\gamma$  de Landé dos átomos do ferromagneto. De posse da expressão, nesse capítulo iremos plotar os gráficos e analisar os comportamentos. A escala do ferromagneto  $6JS$  é ajustada em relação a escala do supercondutor  $|\Delta_0|$  pra verificarmos os casos:

- $6JS \ll |\Delta_0|$ : A transição de fase magnética ocorre em temperaturas mais baixas que a supercondutora. Nesse caso podemos analisar a influência da supercondutividade na transição de fase magnética em temperaturas da ordem  $k_B T \sim 6JS$ .

Ao considerarmos temperaturas intermediárias  $6JS < T < |\Delta_0|$  analisamos a corrente de spin entre um paramagneto e um supercondutor.

Ao ultrapassar a temperatura crítica da fase supercondutora, analisamos a corrente de spin entre um paramagneto e um metal comum. No entanto, esse resultado já existe na literatura, publicado em Okamoto [23].

- $|\Delta_0| \ll 6JS$ : A transição de fase supercondutora ocorre em temperaturas mais baixas que a magnética. Ao considerarmos temperaturas da ordem  $k_B T \sim |\Delta_0|$  analisamos a corrente de spin entre um ferromagneto em sua fase ordenada e um supercondutor. Nesse caso, a representação de Holstein-Primakoff é suficiente. Os resultados dessa análise foram publicados em Vargas and Moura [36]. No entanto, quando o artigo foi

escrito adotamos  $\hbar\omega = |\Delta_0|$ , não identificando a importância de dois comportamentos característicos de supercondutores:

- No regime de espalhamento, em que a energia absorvida/emitada é muito baixa  $\hbar\omega \ll |\Delta_0|$ , na ausência de campo magnético, a taxa com que elétrons invertem seu spin aumenta significativamente devido ao alinhamento dos picos das duas densidades de estados, conforme mostrado na figura 4.2. Na presença de campo magnético, mas com  $\gamma = 1$ , a taxa continua alta, uma vez que as excitações absorvidas do ferromagneto fornecem energia  $2\gamma\mu_B H$  pra vencer o desalinhamento das duas densidades de estados no supercondutor. Tal comportamento é mostrado na figura 4.3. Já existem resultados teórico/experimentais publicados na literatura: Umeda et al. [25], não conhecidos por nós antes de publicarmos nosso trabalho.
- Em frequências mais altas  $\hbar\omega > 2|\Delta|$ , no regime de absorção, os picos opostos das densidades de estados se alinham, provocando um aumento significativo na corrente de spin, conforme mostrado na figura 4.4b. Na figura 4.4a não há campo magnético aplicado (densidade de estados alinhadas). A região escura mostra que a corrente de spin sofre um aumento significativo.

Em temperaturas intermediárias  $|\Delta_0| < k_B T$  (pós transição supercondutora) o resultado modela a corrente de spin entre um metal comum e um ferromagneto, resultado conhecido na literatura: Takahashi et al. [22].

Ao aumentar mais a temperatura,  $6JS < k_B T$ , modelamos a influência da transição de fase ferro/paramagnética na corrente de spin em uma junção com metal em estado normal. Esse resultado também está publicado em Okamoto [23]. No entanto, o autor desconsidera a contribuição do condensado dos bósons de Schwinger para a corrente de spin, resultado considerado por nós.

- $6JS \sim |\Delta_0|$ : Investigaremos se algum efeito interessante ocorre quando as temperaturas críticas das transições de fase magnética e supercondutora coincidem.

Devemos lembrar que estamos analisando o limite linear da corrente de spin com o desbalanço químico dos elétrons  $J_s \propto \delta\mu$  através da definição da corrente de spin normalizada

$$j_s \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\delta\mu \rightarrow 0} \frac{J_s}{2\pi[\nu J_{sd}]^2 N_m^2 \delta\mu}.$$

Adiante, cada formalismo é analisado em uma seção diferente. A representação de Holstein-Primakoff será utilizada apenas para acrescentar o regime de absorção no nosso resultado já publicado. Darei maior importância à representação de Schwinger, com o intuito de analisar a corrente de spin entre um paramagneto e supercondutor. Além do mais, a representação de Schwinger se reduz a de Holstein-Primakoff em baixas temperaturas  $k_B T \ll JS$ .

## 5.1 Holstein-Primakoff

Escrevemos o resultado mostrado na equação (4.15) na representação de Holstein-Primakoff:

$$j_s = \frac{2S\beta}{N_m} \sum_q n_B(\hbar\omega_q + 2\gamma\mu_B H) \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{(E + \mu_B H)(E - \mu_B H + \hbar\omega_q + 2\gamma\mu_B H)} \right] \mathcal{D}(E + \mu_B H) n_F(E) \right. \\ \left. \times \mathcal{D}(E - \mu_B H + \hbar\omega_q + 2\gamma\mu_B H) [1 - n_F(E + \hbar\omega_q + 2\gamma\mu_B H)] \right\}. \quad (5.1)$$

Trabalhando no regime ferromagnético  $k_B T \sim |\Delta_0| \ll 6JS$ , é costume na literatura adotar a aproximação de modo único para mágnons  $n_B(\hbar\omega_q + 2\gamma\mu_B H) \rightarrow \delta_{q0} N_m n_B(\hbar\omega_0)$ :

$$j_s = 2S\beta n_B(\hbar\omega_0) \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{(E + \mu_B H)(E - \mu_B H + \hbar\omega_0)} \right] \\ \times \mathcal{D}(E + \mu_B H) n_F(E) \mathcal{D}(E - \mu_B H + \hbar\omega_0) [1 - n_F(E + \hbar\omega_0)]. \quad (5.2)$$

Em experimentos de absorção de ondas de spin é aplicado um campo magnético oscilante de frequência  $\omega_0$  no material magnético, favorecendo a geração de mágnons com energia  $\hbar\omega_0$  devido a efeitos de ressonância. Sendo a energia dos mágnons fixa, o papel do campo magnético uniforme na nossa junção é deslocar as densidades de estados  $\uparrow$  e  $\downarrow$  do supercondutor. Nor-

malizaremos a corrente de spin na equação (5.2) pelo seu valor quando o supercondutor está no estado metálico normal,  $j_n$ , obtido no limite  $\Delta \rightarrow 0$

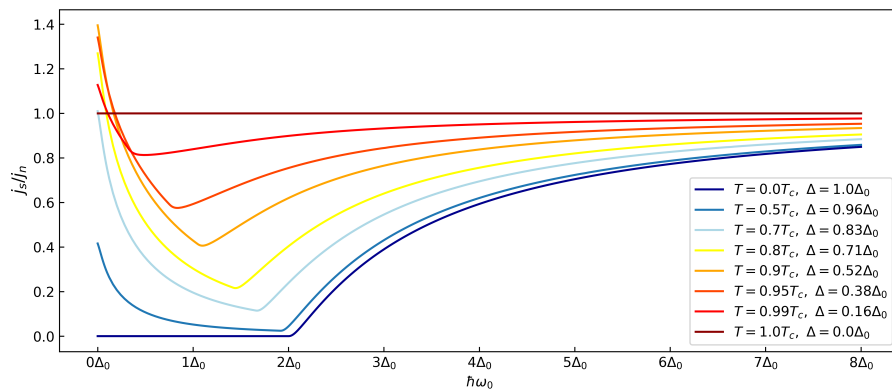
$$j_n = 2S\beta n_B(\hbar\omega_0) \int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E) [1 - n_F(E + \hbar\omega_0)]$$

para evidenciar a influência da transição supercondutora no resultado.

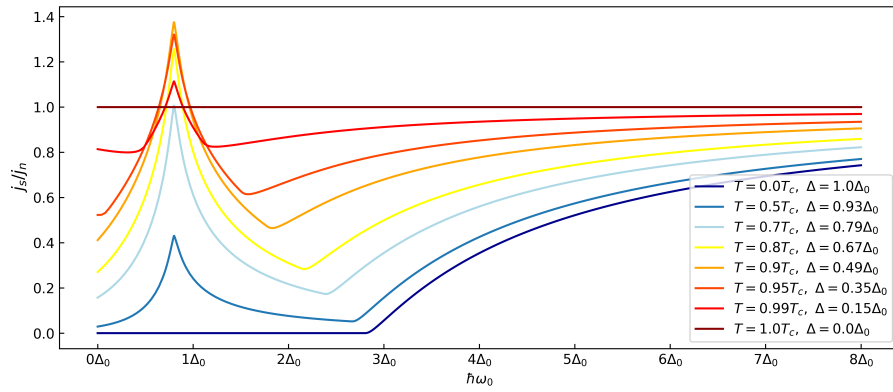
### 5.1.1 Curvas de absorbância

Observamos nas figuras 5.1 comportamentos peculiares: O pico em  $\hbar\omega_0 = 2\mu_B H$  ocorre devido ao alinhamento dos picos das densidades de estados no regime de espalhamento (na abordagem de modo único  $\hbar\omega_0 \leftrightarrow \hbar\omega_{qq'} + 2\gamma\mu_B H$ ), como discutido na seção 4.3.1. Quando a energia  $\hbar\omega_0$  é suficiente para vencer o gap e o deslocamento das densidades de estados,  $\hbar\omega_0 > 2|\Delta_0| + 2\mu_B H$ , a curva entra no regime de absorção, único presente em  $T = 0$  devido ao peso de Boltzmann  $e^{-|\Delta|}/k_B T$  que impede bogoliubons de serem excitados para que haja espalhamento. Quando a energia é muito alta  $\hbar\omega_0 \gg |\Delta|$  todas as curvas tem o mesmo comportamento assintótico, se aproximando da curva do metal normal, uma vez que o gap  $|\Delta|$  (parâmetro de ordem do supercondutor) passa a ser desprezível.

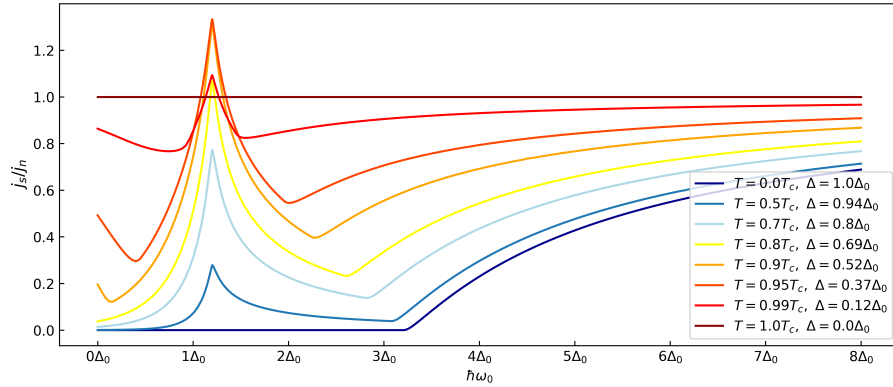
Figura 5.1: Dependência da corrente de spin com a frequência  $\hbar\omega_0$  para vários valores de temperatura e campo magnético.



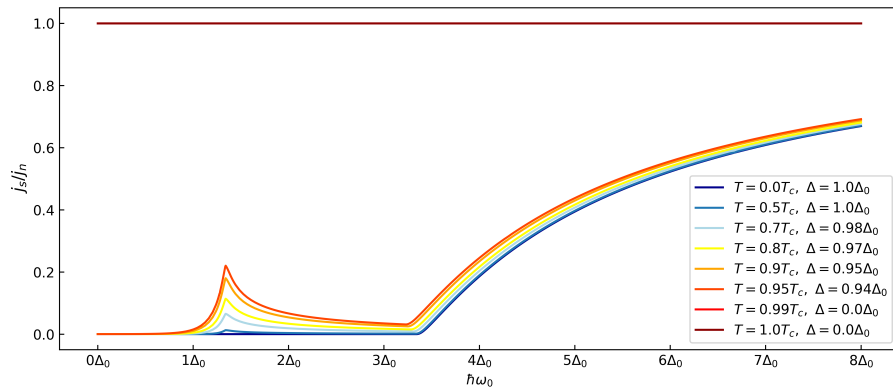
(a)  $\mu_B H = 0.0$  e  $T_c(H) = 0.567|\Delta_0|$ : Ao aumentar a temperatura o início do regime de absorção se desloca pra esquerda devido a dependência do gap com a temperatura  $\Delta(T)$ .



(b)  $\mu_B H = 0.4|\Delta_0|$  e  $T_c(H) = 0.498|\Delta_0|$ : Conforme a temperatura aumenta até a temperatura crítica do supercondutor o gap decresce. As curvas de alta temperatura se aproximam da curva do metal no estado normal ( $T = T_c$ ).



(c)  $\mu_B H = 0.6|\Delta_0|$  e  $T_c(H) = 0.340|\Delta_0|$ : Não há diferença qualitativa em relação a curva anterior. Para  $H > 0.6|\Delta_0|$ , no entanto, a transição de fase supercondutora passa a ser de primeira ordem.



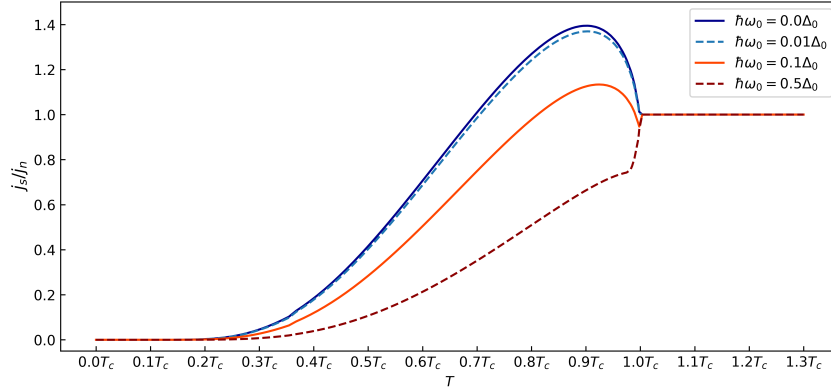
(d)  $\mu_B H = 0.67|\Delta_0|$  e  $T_c(H) = 0.145|\Delta_0|$ : No intervalo  $0.6|\Delta_0| < \mu_B H < |\Delta_0|/\sqrt{2}$  a transição de fase supercondutora é descontínua. Abaixo da temperatura crítica o gap  $|\Delta|$  é finito, com valores próximos a  $|\Delta_0|$ . Por isso, existe um hiato entre as curvas de corrente de spin para diferentes temperaturas entre  $T < T_c$  e  $T > T_c$ .

## 5.1.2 Dependência com a temperatura

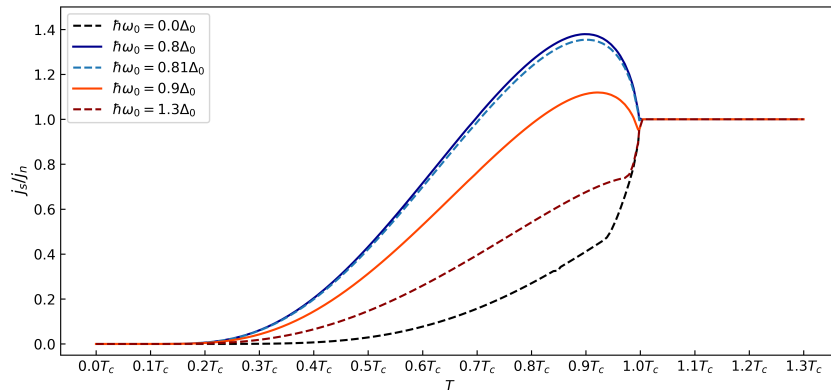
### Pico de espalhamento

Os resultados dessa seção são encontrados na literatura no trabalho teórico/experimental Umeda et al. [25]. Existem dois pontos de inflexão nas curvas mostradas nas figuras 5.2. O ponto de temperatura mais alta ocorre em  $T_c$ , a temperatura crítica do supercondutor. O outro ponto se encontra na temperatura  $T^*(H)$  que soluciona a equação  $\hbar\omega_0 = 2\Delta(T^*, H) + 2\mu_B H$ , condição mínima para transmissão por absorção. No intervalo  $T > T_c$  o comportamento é trivial de metal em seu estado normal. Quando a temperatura é diminuída  $T < T_c$  o gap surge, tornando o material supercondutor. No entanto, em campo magnético baixo a transição de fase é contínua, com gap pequeno  $\hbar\omega_0 > 2\Delta(T > T^*, H) + 2\mu_B H$ , tornando a corrente de spin no intervalo  $T^* < T < T_c$  gerada majoritariamente por absorção de energia pelos elétrons do supercondutor, caracterizado por corrente de spin baixa. Quando diminuimos a temperatura ainda mais  $T < T^*$  a corrente por espalhamento é maximizada devido aumento do gap ( $\hbar\omega_0 < 2\Delta(T < T^*, H) + 2\mu_B H$ ), gerando um pico no resultado com o alinhamento das densidades de estados de spin up e down. Quando a energia dos mágnons satisfaz a condição de máximo de espalhamento  $\hbar\omega_0 = 2\mu_B H$  as equações  $\hbar\omega_0 = 2\Delta(T^*, H) + 2\mu_B H$  e  $\Delta(T^*, H) = 0$  são resolvidas simultaneamente, logo  $T^* = T_c$ . Portanto, quando a condição  $\hbar\omega_0 = 2\mu_B H$  é satisfeita vemos apenas o aumento da corrente de spin na fase supercondutora. Ao diminuir mais a temperatura o fator de Boltzmann  $e^{-|\Delta|/k_B T}$  impede as flutuações térmicas no supercondutor, zerando a corrente de spin.

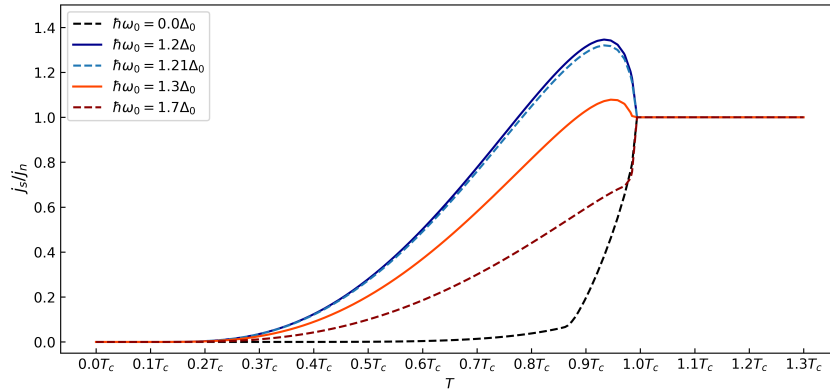
Figura 5.2: Dependência da corrente de spin com a temperatura para vários valores de frequência e campo magnético. Os picos ocorrem quando o espalhamento entre bogoliubons é maximizado ao alinhar as densidades de estados  $\hbar\omega_0 = 2\mu_B H$ .



(a)  $\mu_B H = 0.0$  e  $T_c(H) = 0.567|\Delta_0|$ : Quando  $\hbar\omega_0 = 0.0$  estamos analisando uma seção reta do pico na figura 5.1a. O segundo ponto de inflexão  $T^*$  em frequências mais altas ocorre nos vales da figura citada, quando a corrente de spin deixa de ser transmitida apenas por absorção e passa a ser transmitida também por espalhamento. A condição  $\hbar\omega_0 = 0$  maximiza a corrente por espalhamento.



(b)  $\mu_B H = 0.4|\Delta_0|$  e  $T_c(H) = 0.498|\Delta_0|$ : Quando  $\hbar\omega_0 = 0.8|\Delta_0|$  analisamos uma seção reta do pico na figura 5.1a. O segundo ponto de inflexão  $T^*$  em outras frequências ocorre nos vales da figura citada, quando a corrente de spin deixa de ser transmitida apenas por absorção e passa a ser transmitida também por espalhamento. A condição  $\hbar\omega_0 = 0.8|\Delta_0|$  maximiza a corrente por espalhamento. Geralmente o gap é da ordem  $|\Delta| \sim 10^{-3}\text{eV}$  e mágnons têm energia da ordem  $\hbar\omega_0 \sim 10^{-6}\text{eV}$ , tornando o pico da imagem fácil de ser verificado experimentalmente.

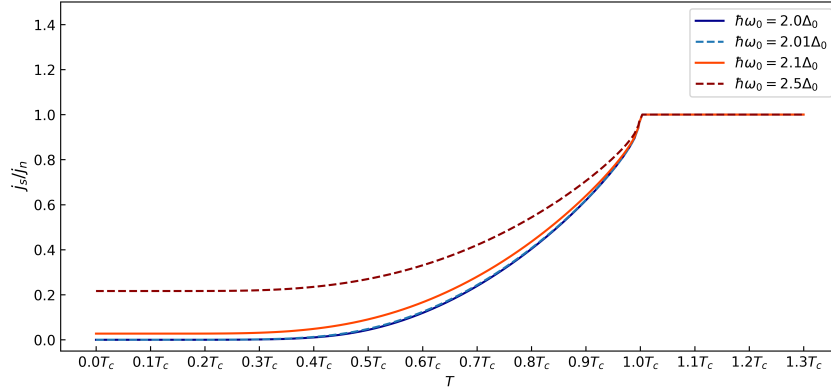


(c)  $\mu_B H = 0.6|\Delta_0|$  e  $T_c(H) = 0.340|\Delta_0|$ : Quando  $\hbar\omega_0 = 1.2|\Delta_0|$  analisamos uma seção reta do pico na figura 5.1a. O segundo ponto de inflexão  $T^*$  em frequências diferentes ocorre nos vales da figura citada, quando a corrente de spin deixa de ser transmitida apenas por absorção e passa a ser transmitida também por espalhamento. A condição  $\hbar\omega_0 = 1.2|\Delta_0|$  maximiza a corrente por espalhamento.

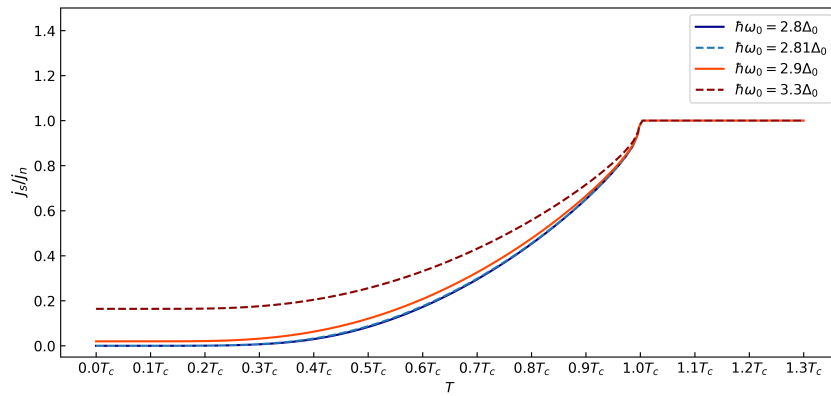
### Limite de apenas absorção

Diferentemente da última subseção, em que  $\hbar\omega_0 \simeq 2\mu_B H$  levava a um pico causado por espalhamento de bogoliubons, nessa seção consideraremos o caso  $\hbar\omega_0 \geq 2\Delta_0 + 2\mu_B H$ . Nesse regime não é possível transmitir corrente de spin por espalhamento, fazendo o resultado diminuir em relação ao estado normal. Isso ocorre pois uma vez que  $\Delta(T, H)$  é no máximo  $\Delta_0$ , a equação  $\hbar\omega_0 > 2\Delta(T, H) + 2\mu_B H$  é sempre satisfeita, forçando os processos de spin flip a acontecerem apenas por absorção (energia maior que o gap). No entanto, processos de absorção podem acontecer mesmo em  $T = 0$ , fazendo a corrente de spin normalizada permanecer finita com a temperatura decrescente.

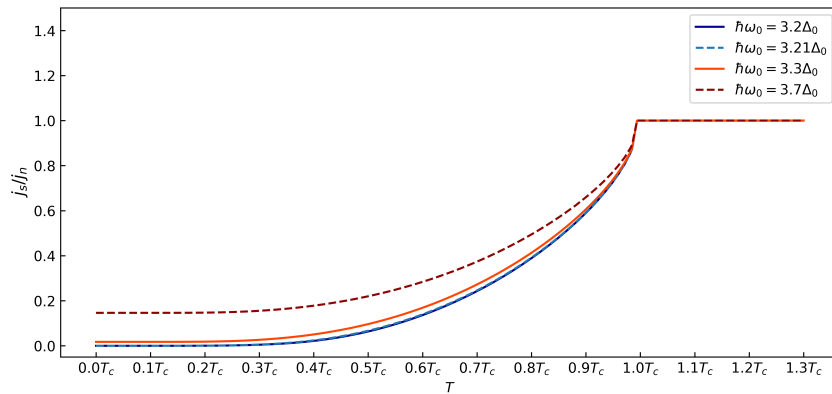
Figura 5.3: Dependência da corrente de spin com a temperatura para vários valores de frequência e campo magnético. No limite de apenas absorção  $\hbar\omega_0 > 2\Delta_0 + 2\mu_B H$  não temos o pico de espalhamento de bogoliubons no resultado.



(a)  $\mu_B H = 0.0$  e  $T_c(H) = 0.567|\Delta_0|$



(b)  $\mu_B H = 0.4|\Delta_0|$  e  $T_c(H) = 0.498|\Delta_0|$



(c)  $\mu_B H = 0.6|\Delta_0|$  e  $T_c(H) = 0.340|\Delta_0|$

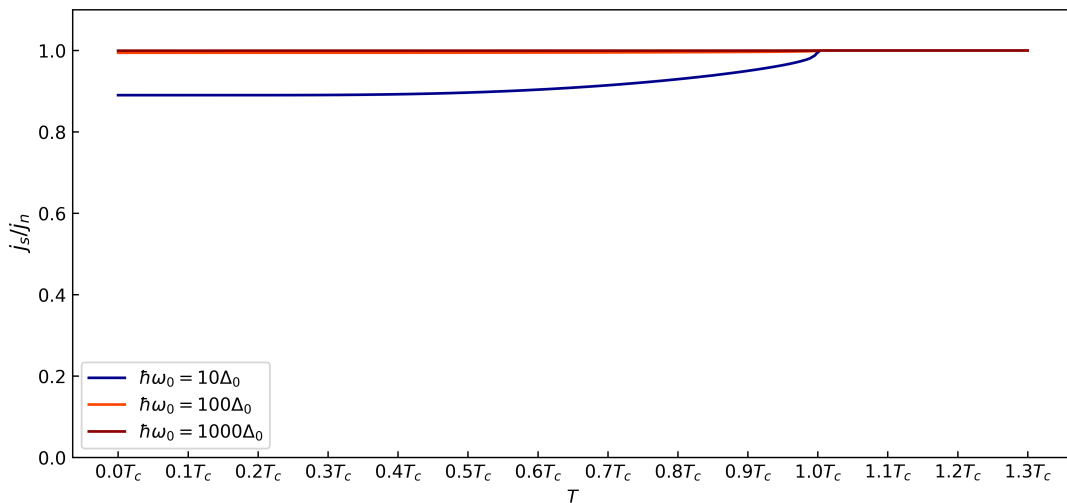
Vimos que um campo magnético uniforme da ordem do gap  $\mu_B H \simeq |\Delta_0| \simeq 10^{-3} \text{eV}$  (isto é,  $H \sim 20 \text{T}$ ) desloca o pico de corrente de spin por espalhamento em função da frequência

do campo oscilante  $\omega_0$ . A condição de resposta máxima é  $\hbar\omega_0 = 2\mu_B H$  (isto é,  $\omega_0 = 439.7\text{GHz/T}$ ). Variar o campo estático em 1Gauss desloca o máximo de resposta em  $\delta\omega = 43.97\text{MHz}$ .

### Altas frequências

É possível verificar que no limite  $\hbar\omega_0 \gg \Delta_0$  as respostas supercondutora e normal são iguais.

Figura 5.4: Dependência da corrente de spin com a temperatura em altas frequências  $\hbar\omega_0 \gg |\Delta|$ .



## 5.2 Bósons de Schwinger

Nessa seção analisaremos a transmissão de corrente de spin entre um magneto nos regimes paramagnético e ferromagnético e um metal nas fases condutora ou supercondutora. Começaremos adotando  $|\Delta_0| = 0$  para descrever o metal em sua fase condutora normal. Em seguida verificaremos a influência da transição de fase supercondutora quando o magneto está em sua fase paramagnética  $|\Delta_0| > 6JSX$  na corrente de spin. Ao considerar esse regime, também conseguimos analisar a transição de fase para/ferromagnética quando o metal está em sua fase supercondutora. Na subseção seguinte faremos o oposto: analisaremos a influência da transição de fase ferro-paramagnética em uma fase de condução normal do metal  $JSX > |\Delta_0|$ . Com os mesmos resultados conseguimos analisar a transição de fase supercondutora quando o

magneto está em sua fase ferromagnética. Será útil para essa seção escrevermos o resultado, equação (4.15), na representação de Schwinger:

$$\begin{aligned}
 j_s &= \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \mu + \gamma\mu_B H) n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H) e^{\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H)} \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{(E + \mu_B H)(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H)} \right] \mathcal{D}(E + \mu_B H) n_F(E) \\
 &\times \mathcal{D}(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H)].
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Para considerar a fase condensada dos bósons de spin  $\uparrow$ , adotamos o procedimento descrito na página 20 da seção 2.2.1: Fazemos a substituição:

$$n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H) \longrightarrow \delta_{\mathbf{q}\mathbf{0}} N_0(T) + n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H)$$

e identificamos que as condições

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}'} = 0 \quad \text{e} \quad \mu = -\gamma\mu_B H.$$

acompanham o termo  $N_0(T)$ , a população de bósons com spin  $\uparrow$  condensados. Dessa forma, a corrente de spin é separada em dois termos  $j_s = j_f + j_p$ , em que

$$\begin{aligned}
 j_f &= \frac{N_0(T)}{N_m} \frac{\beta}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}} + 2\gamma\mu_B H) \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{(E + \mu_B H)(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}} + 2\gamma\mu_B H)} \right] \\
 &\times \mathcal{D}(E + \mu_B H) n_F(E) \mathcal{D}(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}} + 2\gamma\mu_B H) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}} + 2\gamma\mu_B H)]
 \end{aligned} \tag{5.5a}$$

denominaremos de corrente ferromagnética e

$$\begin{aligned}
 j_p &= \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}' \neq \mathbf{0}} n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \mu + \gamma\mu_B H) n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H) e^{\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H)} \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ 1 + \frac{|\Delta|^2}{(E + \mu_B H)(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H)} \right] \mathcal{D}(E + \mu_B H) n_F(E) \\
 &\times \mathcal{D}(E - \mu_B H + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H)].
 \end{aligned} \tag{5.5b}$$

de corrente paramagnética. A primeira se refere a bósons de spin  $\downarrow$  inverterem seu spin e se juntarem ao condensado, caracterizado por spin  $\uparrow$  e energia  $\hbar\omega_{\mathbf{0}} - \mu - \gamma\mu_B H = 0$ . A última, corrente paramagnética, se referem a bósons de spin  $\downarrow$  que passam a ocupar estados de spin  $\uparrow$  com energia  $\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H > 0$  ao inverterem seu spin. O processo reverso dos dois casos também ocorre.

Em baixas temperaturas  $k_B T \ll 6JS$  a corrente paramagnética  $j_p$  é desprezível em relação a ferromagnética  $j_f$  devido à distribuição de Bose-Einstein extra. Notamos que a equação (5.5a) se reduz à representação de Holstein-Primakoff, equação (5.1), nesse limite, uma vez que  $N_0(T \rightarrow 0) \rightarrow 2SN_m$ .

### 5.2.1 Metal normal: $|\Delta| = 0$

Ao adotar  $|\Delta| = 0$  modelamos o metal em sua fase normal, reproduzindo em parte os resultados da literatura Okamoto [23]. No artigo citado, o autor desconsidera a corrente de spin causada pelo condensado dos bósons de Schwinger  $j_f$  (corrente ferromagnética, como definimos), considerando apenas a contribuição paramagnética, não corroborando os resultados da representação de Holstein-Primakoff em baixas temperaturas  $J_s \propto T^{3/2}$  citados por ele: [22]. Uma vez que as representações coincidem em  $T \rightarrow 0$ , os resultados devem ser idênticos nesse limite.

Começamos adotando  $\Delta = 0$  nas equações (5.5a) e (5.5b), resultando em:

$$j_f = \frac{N_0(T)}{N_m} \frac{\beta}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}} + 2\gamma\mu_B H) \int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}} + 2\gamma\mu_B H)]$$

(5.6a)

e

$$\begin{aligned}
j_p = & \frac{\beta}{N_m^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}' \neq \mathbf{0}} n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \mu + \gamma\mu_B H) n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H) e^{\beta(\hbar\omega_{\mathbf{q}'} - \mu - \gamma\mu_B H)} \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} + 2\gamma\mu_B H)].
\end{aligned}
\tag{5.6b}$$

Uma vez separado o ponto singular  $\mathbf{q}' = \mathbf{0}$ , cada soma é transformada em integral através da aproximação contínua  $1/N_m \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \int_{\text{B.Z}} d^3q / (2\pi)^3$ . Os resultados são plotados na figura 5.5.

Em campo magnético nulo, a corrente de spin satura em altas temperaturas. Isso ocorre pois após a transição de fase, com o ferromagneto em sua fase paramagnética, a corrente não depende da temperatura devido a dois fatores:

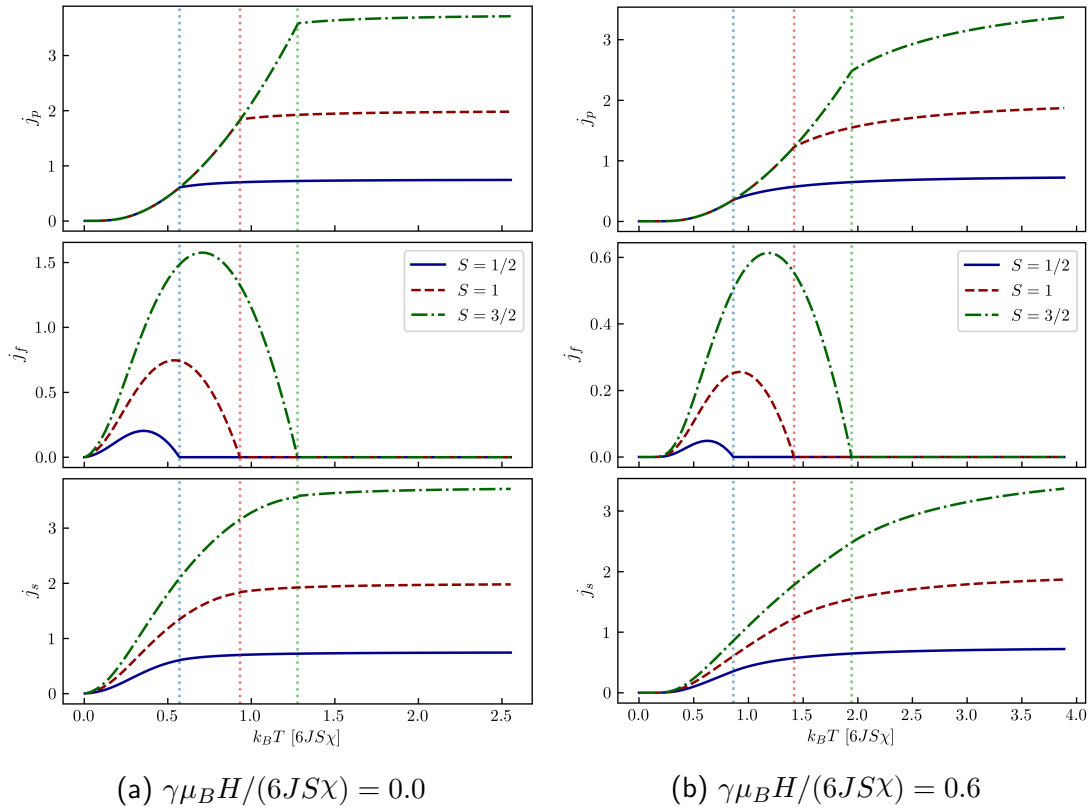
- O argumento  $\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'}$  do integrando de (5.5b) permanece limitado ao intervalo de energia dos bósons de Schwinger  $-12JS\chi < \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} < 12JS\chi$ . Surge da integração um fator  $k_B T$  que é cancelado com o fator  $\beta$  presente na equação ao aproximarmos  $(\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'})/k_B T \ll 1$ , aproximação válida para  $k_B T \gg 6JS\chi$ .
- Devido ao número de bósons de Schwinger ser fixo, após a transição de fase as distribuições  $n_{B\uparrow}$  e  $n_{B\downarrow}$  se igualam, fazendo que incrementos de temperatura não interfiram mais no sistema.

Ao aplicar um campo magnético alto,  $\gamma\mu_B H \sim 6JS\chi$ , incrementos de temperatura passam a interferir no sistema até que a energia Zeeman seja termalizada,  $k_B T \gg 6JS\chi + 2\gamma\mu_B H$ . Dessa forma, a presença do campo magnético faz a corrente saturar apenas em temperaturas mais altas. Antes da transição, uma vez que há uma diferença mínima de energia  $2\gamma\mu_B H$  entre os estados de bósons  $\uparrow$  e  $\downarrow$ , o campo magnético diminui consideravelmente a corrente  $j_f$ . Na representação de Holstein-Primakoff é necessário o mínimo de energia  $2\gamma\mu_B H$  para criar mágnons.

Em seu trabalho Okamoto desconsiderou a corrente  $j_f$  gerada quando bósons, inicialmente com spin up (down), deixam a (vão para a) fase condensada ao inverterm seu spin (lembramos que na representação de Schwinger deve-se adotar o limite  $H = 0^+$  para descrever a fase

ordenada). A corrente  $j_f$  corrobora o resultado do trabalho Takahashi et al. [22], deduzido pela representação de Holstein-Primakoff, em que  $j_s \propto T^{3/2}$  em baixas temperaturas. Obteríamos o resultado  $j_s \propto T^3$  obtido por Okamoto se considerássemos apenas a corrente  $j_p$ . No entanto, em baixas temperaturas temos  $j_f \gg j_p$ , de forma que  $j_s \sim j_f$ , mostrando que as representações de Schwinger e Holstein-Primakoff são de fato equivalentes no cálculo de correntes de spin nesse regime.

Figura 5.5: Dependência da corrente de spin com a temperatura quando o metal é um condutor comum. A curva  $j_p$  é obtida na referência Okamoto [23] como a corrente de spin. No entanto, a contribuição  $j_f$  proveniente do condensado de bósons de Schwinger deixa o resultado  $j_s$  diferente do trabalho citado na fase ferromagnética. As linhas verticais marcam as temperaturas críticas da transição de fase ferro/paramagnética.



**Cálculo da lei de potência:**  $j_s \propto T^{3/2}$

Em baixíssimas temperaturas, na ausência de campo magnético, podemos aproximar a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E) [1 - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}})] = \frac{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}}}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}} - 1} \int_{-\infty}^{\infty} dE [n_F(E) - n_F(E + \hbar\omega_{\mathbf{q}})] \simeq \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}} e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}}}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}} - 1},$$

uma vez que os estados bosônicos mais populados são de baixíssima energia. Substituindo a aproximação na equação (5.6a) vemos que a corrente  $j_f$  se torna:

$$j_f \simeq \frac{N_0(T)}{N_m} \left( -\beta \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \underbrace{\frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})}_{\sim S(T/T_c)^{3/2}} \sim \frac{3S}{2} \frac{N_0(T)}{N_m} \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2}.$$

No entanto, em baixas temperaturas a fração de bósons condensados é  $N_0(T)/N \simeq 2S(1 - (T/T_c)^{3/2}) \simeq 2S$ , o que fornece o resultado  $j_f \sim 3S^2(T/T_c)^{3/2}$  devido ao fator proveniente da distribuição de Bose-Einstein. De forma análoga podemos calcular o resultado do Okamoto com a corrente paramagnética  $j_p \sim (T/T_c)^3$ , em que cada fator  $3/2$  vem de uma das duas distribuições de Bose-Einstein presentes na equação (5.6b). Em baixas temperaturas ( $T/T_c \ll 1$ ) a maior potência é desprezível  $(T/T_c)^3 \ll (T/T_c)^{3/2}$ , de forma que  $j_s \sim 3S^2(T/T_c)^{3/2}$ , recuperando o resultado obtido pela representação de Holstein-Primakoff<sup>[22]</sup>.

Lembrando da nossa liberdade em calibrar as temperaturas críticas do ferromagneto e supercondutor escolhendo valores pra fração  $6JS\chi/|\Delta_0|$ , começaremos na próxima seção a análise do limite  $6JS\chi \gg |\Delta_0|$ .

### 5.2.2 Transição ferromagnética > supercondutora: $6JS\chi \gg |\Delta_0|$ .

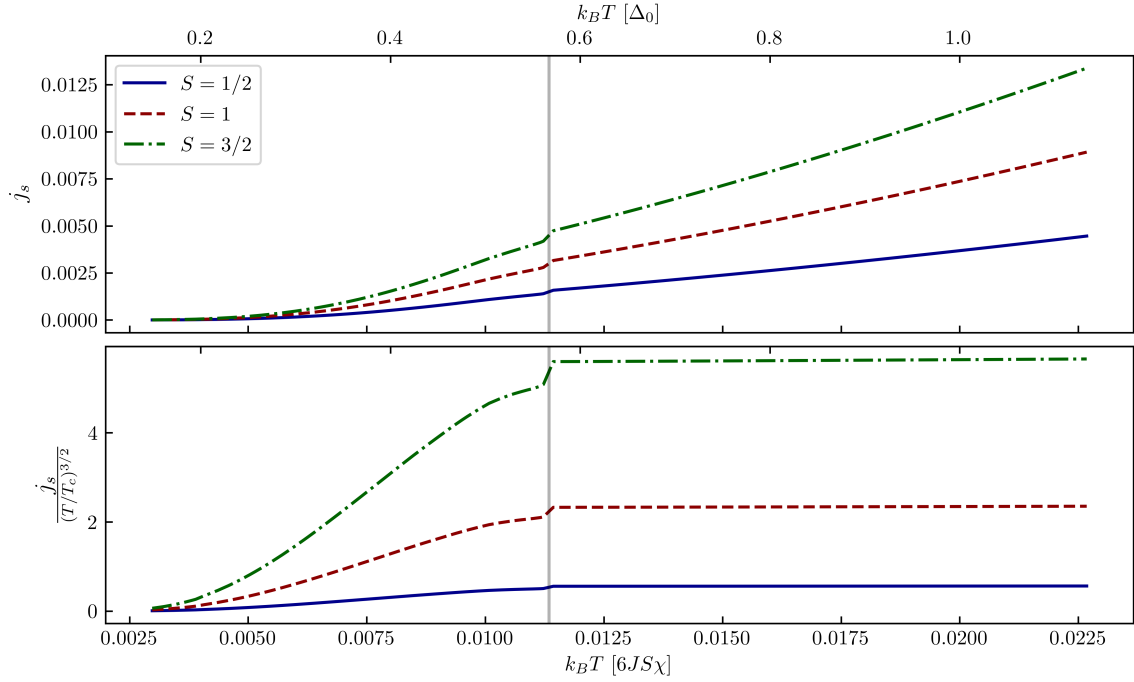
Adotamos nessa seção a relação entre escalas  $6JS\chi = 50|\Delta_0|$ . Em temperaturas da ordem  $k_B T \sim 6JS\chi$  o metal já deixou de ser supercondutor, retomando os resultados da seção anterior. Ao analisar temperaturas da ordem  $k_B T \sim |\Delta_0|$ , estamos verificando a influência da transição de fase supercondutora na corrente de spin.

**Transição supercondutora: temperaturas da ordem  $k_B T \sim |\Delta_0|$**

Nesse caso o magneto está praticamente no estado fundamental, em sua fase ferromagnética. Lembrando da equivalência das representações de Holstein-Primakoff e Schwinger nesse limite, poderíamos usar a primeira para descrever esse resultado. No entanto, na seção 5.1 utilizamos representação de Holstein-Primakoff na aproximação de modo único  $\hbar\omega_{\mathbf{q}} + 2\gamma\mu_B H \rightarrow \hbar\omega_0$ , representando experimentos em que um campo magnético oscilante de frequência  $\omega_0$  é aplicado no plano perpendicular à magnetização. Nessa seção analisaremos a corrente de spin difusiva (gerada apenas por mágnons excitados termicamente) pela representação de Schwinger. Conhecendo que o campo magnético uniforme suprime a corrente de spin por deslocar os níveis de energia entre os bósons  $\uparrow$  e  $\downarrow$ , vamos nos limitar ao caso  $H = 0$ .

Notamos na figura 5.6 os dois pontos de inflexão discutidos na seção 5.1. Um deles ocorre na transição de fase supercondutora e o outro em menor temperatura (em maior valor do gap  $\Delta(T)$ ), quando a corrente passa a ser transmitida por espalhamento de bogoliubons. O pico característico da figura 5.2a não foi encontrado nesse regime, uma vez que a energia dos bósons de Schwinger é dispersa no intervalo  $-12JS\chi < \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} < 12JS\chi$ . Em relação ao gap  $|\Delta_0|$ , os bósons têm energia dispersa no intervalo  $-100|\Delta_0| < \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} < 100|\Delta_0|$ . Dessa forma a população de bósons em torno do pico de espalhamento  $\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}'} \simeq 0$  da figura 5.1a é irrisória.

Figura 5.6: Dependência da corrente de spin com a temperatura sob influência da transição de fase supercondutora. Ao considerarmos  $k_B T \ll 6JS\chi$  modelamos um ferromagneto em sua fase ordenada. Na figura inferior a corrente de spin foi normalizada pela dependência com a temperatura prevista na seção anterior  $(T/T_c)^{3/2}$ . A linha vertical escura marca a temperatura crítica do supercondutor.



### 5.2.3 Transição ferromagnética < supercondutora: $6JS\chi \ll |\Delta_0|$ .

**Transição ferromagnética: temperaturas da ordem  $k_B T \sim 6JS\chi$**

Na figura 5.7 verificamos uma dependência com a temperatura na fase magnética mais forte que  $e^{-|\Delta|/k_B T}$ . Vemos na figura 5.8, no entanto, que a dependência à baixíssimas temperaturas ( $0.2 \times (6JS\chi) \lesssim k_B T \lesssim 6JS\chi$ ) se torna  $e^{-|\Delta|/k_B T} (T/T_c)^{3/2}$ , sendo o termo  $(T/T_c)^{3/2}$  previsto na seção 5.2.1 para um metal na fase normal. Em temperaturas mais baixas  $k_B T \lesssim 0.2 \times (6JS\chi)$  há uma queda repentina da corrente. Aparentemente tal queda ocorre no ponto de inflexão  $T^*$  discutido nas seções anteriores. Porém, não é possível dizer se esse aspecto do resultado é confiável ou fruto do método de integração numérico da expressão (5.3).

Figura 5.7: Dependência da corrente de spin com a temperatura quando a temperatura de Curie  $\tau_C$  da transição de fase ferro/paramagnetismo está muito abaixo da temperatura crítica  $T_c$  da supercondutividade. Ao considerarmos  $k_B T \ll |\Delta_0|$  modelamos um supercondutor em seu estado fundamental com gap  $|\Delta(T)| = |\Delta_0|$ . Na figura inferior a corrente de spin foi normalizada pelo fator de Boltzmann  $e^{-|\Delta|/k_B T}$ . As linhas verticais marcam a temperatura crítica dos magnetos com diferentes spins, não havendo influência perceptível da transição nos resultados.

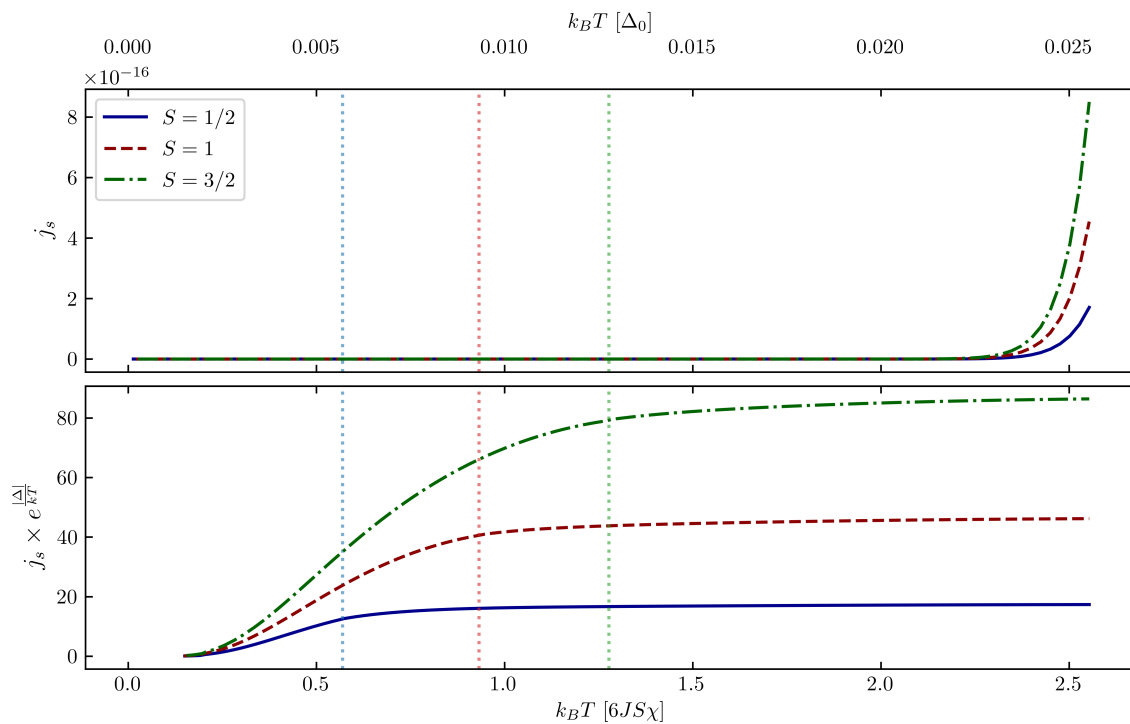
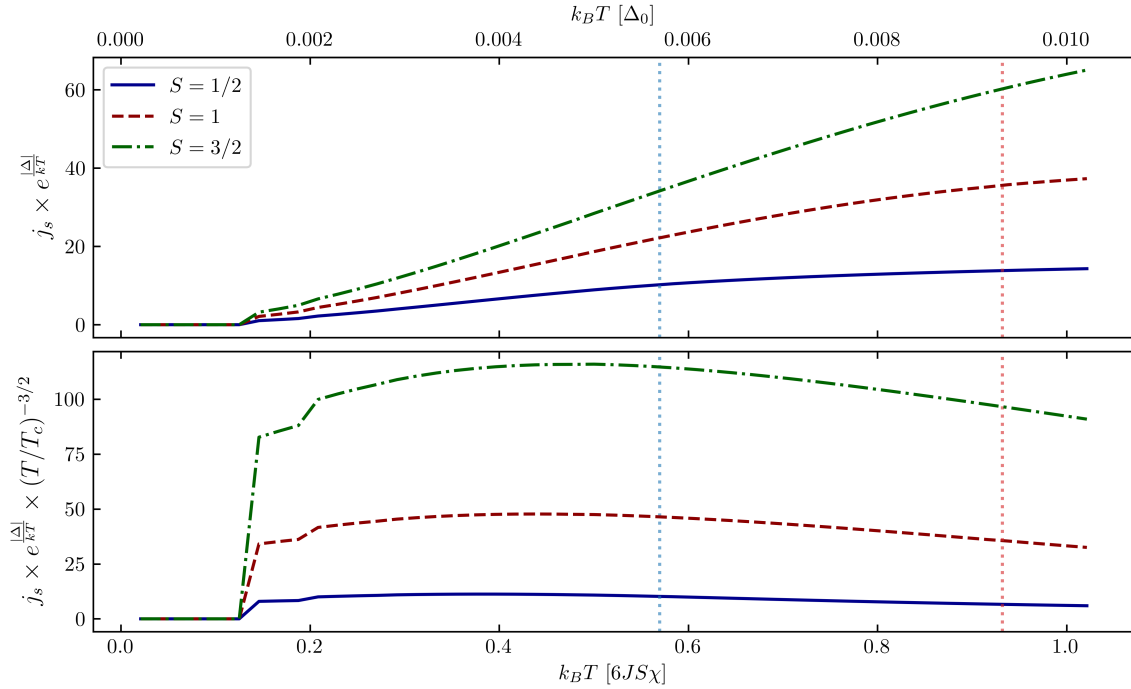


Figura 5.8: Dependência da corrente de spin com a temperatura sob influência da transição de fase magnética. Ao considerarmos  $k_B T \ll |\Delta_0|$  modelamos um supercondutor em seu estado fundamental com gap  $|\Delta(T)| = |\Delta_0|$ . Na figura inferior a corrente de spin foi normalizada pelo fator  $e^{-|\Delta_0|/k_B T} (T/T_c)^{3/2}$ , em que  $T_c$  é a temperatura crítica do ferromagneto. Não há influência perceptível da transição de fase ferromagnética no resultado próximo à temperatura crítica.



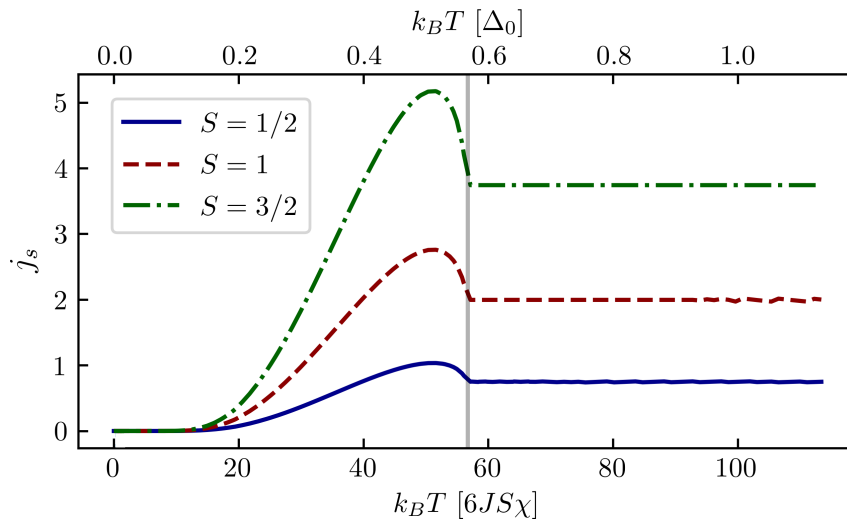
**Transição supercondutora: temperaturas da ordem  $k_B T \sim |\Delta_0|$**

Comparada com a representação de Holstein-Primakoff, a principal vantagem da representação de Schwinger é a capacidade de descrever a fase desordenada do material magnético. Na seção 5.2.1 descrevemos a corrente de spin na interface entre um paramagneto e um condutor. Vimos que pós transição de fase surgem platôs na dependência da corrente de spin.

Nessa subseção se encontra o principal resultado desse trabalho: a corrente de spin entre um supercondutor e um paramagneto em torno da transição de fase supercondutora. Ao descrever a fase ferromagnética em contato com o supercondutor vimos que a energia dos mágnons térmicos era bastante dispersa, desfavorecendo a existência dos picos de espalhamento de bogoliubons encontrados na seção (5.1.2). Ao considerarmos  $6JS\chi \ll |\Delta_0|$ , no entanto, limitamos a energia dos bósons de Schwinger ao intervalo  $-0.02|\Delta_0| < \hbar\omega_q - \hbar\omega_{q'} < 0.02|\Delta_0|$  (foi considerado  $6JS\chi = 0.01|\Delta_0|$  para mostrar os resultados), fazendo com que satisfaçam

a condição de espalhamento máximo  $|\hbar\omega_q - \hbar\omega_{q'}| \ll |\Delta_0|$ . Como consequência, encontramos picos na corrente de spin quando o metal se torna supercondutor, conforme mostrado na figura 5.9. Vimos que na fase ferromagnética é necessário aplicar um campo magnético rf de frequência  $\omega_0$  que satisfaz  $\hbar\omega_0 \ll |\Delta|$  para encontrar tais picos. Na fase paramagnética, no entanto, não é necessário. Quando a temperatura crítica do ferromagneto  $T_C$  é um décimo da temperatura crítica do supercondutor  $T_c$  já é possível perceber o pico de espalhamento. Para magnetos com átomos de mesmo spin  $S$ , quanto menor a razão  $T_c^{\text{mag}}/T_c^{\text{sup}}$  maior a intensidade do pico.

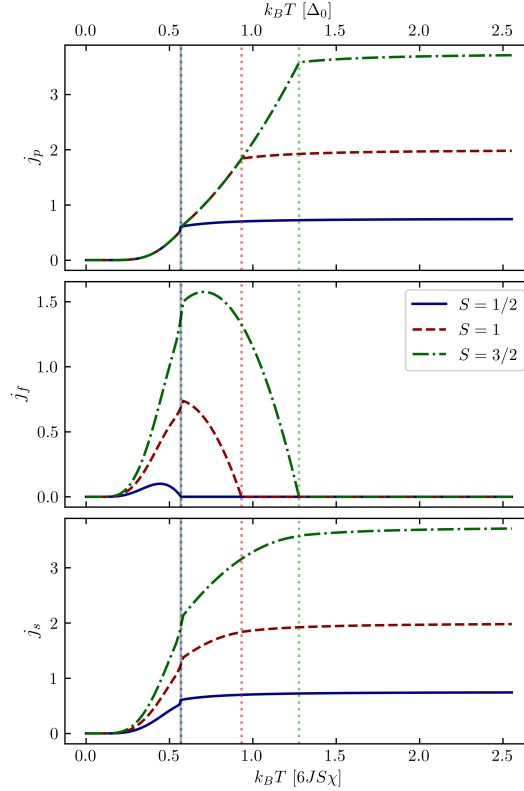
Figura 5.9: Dependência com a temperatura da corrente de spin na interface entre um paramagneto e um supercondutor. Foi considerado que a transição de fase paramagnética ocorre em temperatura muito baixa comparada à escala de energia do supercondutor  $|\Delta_0|$ . Acima da temperatura crítica do supercondutor (linha escura) recuperamos o resultado da seção 5.2.1.



#### 5.2.4 Transição ferromagnética $\sim$ supercondutora: $6JS\chi = |\Delta_0|$ .

Ao superpor as duas transições de fase, vemos que a transição supercondutora desempenha o papel mais importante. Os gráficos são parecidos com os gráficos da seção 5.2.2, em que é considerado apenas a transição supercondutora em um ferromagneto no estado ordenado.

Figura 5.10: Transições de fase supercondutora e ferromagnética superpostas para  $S = 1/2$ . A transição de fase supercondutora é responsável pelo comportamento predominante, caracterizado por degraus na corrente de spin na temperatura de transição.



### 5.3 Conclusão

Ao considerar a interação entre um ferromagneto e um supercondutor em uma interface rugosa, os picos na densidade de estados eletrônicos do supercondutor em  $\pm|\Delta|$  fazem a corrente de spin na interface adquirir picos quando a condição de espalhamento é satisfeita (alinhamento das densidades de estados dos elétrons  $\uparrow$  e  $\downarrow$ ). Ao aplicar um campo oscilante na amostra magnética, essa condição é facilmente satisfeita. Reproduzimos esses resultados utilizando a representação de Holstein-Primakoff na descrição do ferromagneto.

No limite  $|\Delta| = 0$  modelamos o metal em sua fase condutora normal e corrigimos um aspecto do trabalho apresentado por Okamoto [23], em que o resultado  $j_s \propto (T/T_c)^3$  foi previsto erroneamente utilizando a representação de Schwinger. Nesse mesmo trabalho, Okamoto calcula a condutância de spin no interior de um magneto (ferromagneto e antiferromagneto), sendo máxima em torno da temperatura crítica. Entretanto, esse resultado deveria ser ana-

lisado novamente considerando a condensação dos bósons de Schwinger. Contudo, existem evidências experimentais de picos na condutância de spin em amostras antiferromagnéticas em torno da temperatura de transição<sup>[37]</sup> que mostram a relevância da fase desordenada dos materiais magnéticos na transmissão de corrente de spin pura.

Quando o ferromagneto está em sua fase ordenada, no regime  $T_c^{\text{sc}} < T_c^{\text{mag}}$ , a fase supercondutora atua como supressora da corrente de spin. Excitações térmicas no ferromagneto são dispersas em energia, não podendo ser concentradas na energia  $\hbar\omega = 0$  necessária para verificar o pico na corrente de spin característico da fase supercondutora. Fomos capazes de verificar o peso de Boltzmann  $e^{-|\Delta|/k_B T}$  como causa da supressão em baixas temperaturas, devido ao princípio da exclusão de Pauli e o gap na densidade de estados. Para que um elétron possa inverter seu spin, transmitindo corrente de spin na interface, é necessário que existam estados disponíveis para ocupar pós-inversão. No entanto, a energia que ele precisa para alcançar um estado desocupado é  $2|\Delta|$ , explicando a origem do peso de Boltzmann.

Ao considerar a temperatura crítica do ferromagneto menor que a do supercondutor, estudamos a corrente de spin na região da transição supercondutora enquanto o ferromagneto está na fase paramagnética. Os picos de espalhamento voltam a aparecer nesse caso. A interação de troca no ferromagneto dita a magnitude da sua temperatura crítica. A existência de ferromagnetos com temperaturas críticas baixas está vinculada a interações de troca mais fracas. O espectro de energia dos bósons de Schwinger de um material que satisfaz essa condição é limitado. Ao criar uma junção desse material com um supercondutor, satisfazendo a condição  $T_c^{\text{mag}} < T_c^{\text{sc}}$ , a corrente de spin é amplificada na fase supercondutora do metal.

Como perspectiva, pretendemos utilizar o formalismo de Schwinger para estudar a transmissão de corrente de spin entre um antiferromagneto e um supercondutor. No que diz respeito a condutância de spin em isolantes, pretendemos refazer os cálculos feitos na referência [23] considerando a contribuição do condensado dos bósons de Schwinger, na procura por mudanças significativas nos resultados.

# Referências Bibliográficas

- [1] Rachel. Courtland. Transistors could stop shrinking in 2021. <https://spectrum.ieee.org/semiconductors/devices/transistors-could-stop-shrinking-in-2021>, 2016.
- [2] S. Takahashi, H. Imamura, and S. Maekawa. Spin imbalance and magnetoresistance in ferromagnet/superconductor/ferromagnet double tunnel junctions. *Phys. Rev. Lett.*, 82: 3911–3914, May 1999. doi: 10.1103/PhysRevLett.82.3911.
- [3] S. Takahashi, H. Imamura, and S. Maekawa. Spin injection in ferromagnet/superconductor/ferromagnet tunnel junctions. *Physica C: Superconductivity*, 341-348:1515 – 1518, 2000. ISSN 0921-4534. doi: 10.1016/S0921-4534(00)01317-4.
- [4] S. Takahashi, H. Imamura, and S. Maekawa. Spin injection and magnetoresistance in ferromagnet–superconductor–ferromagnet tunnel junctions. *Journal of Applied Physics*, 87(9):5227–5229, 2000. doi: 10.1063/1.373303.
- [5] J. E. Hirsch. Spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1834–1837, Aug 1999. doi: 10.1103/PhysRevLett.83.1834.
- [6] Jairo Sinova, Sergio O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth. Spin hall effects. *Rev. Mod. Phys.*, 87:1213–1260, Oct 2015. doi: 10.1103/RevModPhys.87.1213.
- [7] V. P. Amin and M. D. Stiles. Spin transport at interfaces with spin-orbit coupling: Formalism. *Phys. Rev. B*, 94:104419, Sep 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.94.104419.
- [8] V. P. Amin and M. D. Stiles. Spin transport at interfaces with spin-orbit coupling: Phenomenology. *Phys. Rev. B*, 94:104420, Sep 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.94.104420.
- [9] Satoru Takahashi, K Harii, Jun’ichi Ieda, W Koshibae, K Ando, S Maekawa, and E Saitoh. Observation of the spin seebeck effect. *Nature*, 455:778–81, 11 2008. doi: 10.1038/nature07321.
- [10] Sergio M Rezende, Antonio Azevedo, and Roberto L Rodríguez-Suárez. Magnon diffusion theory for the spin seebeck effect in ferromagnetic and antiferromagnetic insulators. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51(17):174004, apr 2018. doi: 10.1088/1361-6463/aab5f8.
- [11] Yaroslav Tserkovnyak, Arne Brataas, and Gerrit E. W. Bauer. Enhanced gilbert damping in thin ferromagnetic films. *Phys. Rev. Lett.*, 88:117601, Feb 2002. doi: 10.1103/PhysRevLett.88.117601.

- [12] A. Azevedo, L. H. Vilela-Leão, R. L. Rodríguez-Suárez, A. F. Lacerda Santos, and S. M. Rezende. Spin pumping and anisotropic magnetoresistance voltages in magnetic bilayers: Theory and experiment. *Phys. Rev. B*, 83:144402, Apr 2011. doi: 10.1103/PhysRevB.83.144402.
- [13] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak. Antiferromagnetic spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 90:015005, Feb 2018. doi: 10.1103/RevModPhys.90.015005.
- [14] J. B. S. Mendes, R. O. Cunha, O. Alves Santos, P. R. T. Ribeiro, F. L. A. Machado, R. L. Rodríguez-Suárez, A. Azevedo, and S. M. Rezende. Large inverse spin hall effect in the antiferromagnetic metal  $\text{Ir}_{20}\text{Mn}_{80}$ . *Phys. Rev. B*, 89:140406, Apr 2014. doi: 10.1103/PhysRevB.89.140406.
- [15] So Takei, Bertrand I. Halperin, Amir Yacoby, and Yaroslav Tserkovnyak. Superfluid spin transport through antiferromagnetic insulators. *Phys. Rev. B*, 90:094408, Sep 2014. doi: 10.1103/PhysRevB.90.094408.
- [16] S. M. Rezende, R. L. Rodríguez-Suárez, and A. Azevedo. Diffusive magnonic spin transport in antiferromagnetic insulators. *Phys. Rev. B*, 93:054412, Feb 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.93.054412.
- [17] L. J. Cornelissen, K. J. H. Peters, G. E. W. Bauer, R. A. Duine, and B. J. van Wees. Magnon spin transport driven by the magnon chemical potential in a magnetic insulator. *Phys. Rev. B*, 94:014412, Jul 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.94.014412.
- [18] S. M. Rezende, R. L. Rodríguez-Suárez, M. M. Soares, L. H. Vilela-Leão, D. Ley Domínguez, and A. Azevedo. Enhanced spin pumping damping in yttrium iron garnet/pt bilayers. *Applied Physics Letters*, 102(1):012402, 2013. doi: 10.1063/1.4773993.
- [19] E. Saitoh, M. Ueda, H. Miyajima, and G. Tatara. Conversion of spin current into charge current at room temperature: Inverse spin-hall effect. *Applied Physics Letters*, 88(18):182509, 2006. doi: 10.1063/1.2199473.
- [20] S. O. Valenzuela and M. Tinkham. Direct electronic measurement of the spin hall effect. *Nature*, 442(7099):176–179, 2006. doi: 10.1038/nature04937.
- [21] Joel Cramer, Felix Fuhrmann, Ulrike Ritzmann, Vanessa Gall, Tomohiko Niizeki, Rafael Ramos, Zhiyong Qiu, Dazhi Hou, Takashi Kikkawa, Jairo Sinova, Ulrich Nowak, Eiji Saitoh, and Mathias Kläui. Magnon detection using a ferroic collinear multilayer spin valve. *Nature Communications*, 9(1):1089, 2018. doi: 10.1038/s41467-018-03485-5.
- [22] S Takahashi, E Saitoh, and S Maekawa. Spin current through a normal-metal/insulating-ferromagnet junction. *Journal of Physics: Conference Series*, 200(6):062030, jan 2010. doi: 10.1088/1742-6596/200/6/062030.
- [23] Satoshi Okamoto. Spin injection and spin transport in paramagnetic insulators. *Phys. Rev. B*, 93:064421, Feb 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.93.064421.
- [24] G.D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Physics of Solids and Liquids. Springer US, 2013. ISBN 9781475757149.

- [25] Maki Umeda, Yuki Shiomi, Takashi Kikkawa, Tomohiko Niizeki, Jana Lustikova, Saburo Takahashi, and Eiji Saitoh. Spin-current coherence peak in superconductor/magnet junctions. *Applied Physics Letters*, 112(23):232601, 2018. doi: 10.1063/1.5027456.
- [26] Sang-Koog Kim. Micromagnetic computer simulations of spin waves in nanometre-scale patterned magnetic elements. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43(26):264004, jun 2010. doi: 10.1088/0022-3727/43/26/264004.
- [27] A. Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Graduate texts in contemporary physics. Springer-Verlag, 1994. ISBN 9783540942863.
- [28] Theja Silva, Michael Ma, and Fu-Chun Zhang. Pathology of schwinger boson mean field theory for heisenberg spin models. *Physical Review B*, 66, 05 2002. doi: 10.1103/PhysRevB.66.104417.
- [29] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004. ISBN 9780471415268.
- [30] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, Dec 1957. doi: 10.1103/PhysRev.108.1175.
- [31] P.W. Anderson. *Chapter I The Josephson Effect and Quantum Coherence Measurements in Superconductors and Superfluids*, volume 5 of *Progress in Low Temperature Physics*. Elsevier, 1967. doi: 10.1016/S0079-6417(08)60119-5.
- [32] A. Altland and B.D. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge books online. Cambridge University Press, 2010. ISBN 9780521769754.
- [33] G. Sarma. On the influence of a uniform exchange field acting on the spins of the conduction electrons in a superconductor. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 24(8):1029 – 1032, 1963. ISSN 0022-3697. doi: 10.1016/0022-3697(63)90007-6.
- [34] M. Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. International series in pure and applied physics. McGraw Hill, 1996. ISBN 9780070648784.
- [35] Giorgio De Simoni, Elia Strambini, Jagadeesh S. Moodera, F. Sebastian Bergeret, and Francesco Giazotto. Toward the absolute spin-valve effect in superconducting tunnel junctions. *Nano Letters*, 18(10):6369–6374, Sep 2018. ISSN 1530-6992. doi: 10.1021/acs.nanolett.8b02723.
- [36] V.S.U.A. Vargas and A.R. Moura. Injection of spin current at the superconductor/ferromagnetic insulator interface. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 494:165813, 2020. ISSN 0304-8853. doi: 10.1016/j.jmmm.2019.165813.
- [37] Zhiyong Qiu, Jia Li, Dazhi Hou, Elke Arenholz, Alpha N/'Diaye, Ali Tan, Ken-ichi Uchida, Koji Sato, Satoshi Okamoto, Yaroslav Tserkovnyak, Z. Qiu, and Eiji Saitoh. Spin-current probe for phase transition in an insulator. *Nat Commun*, 7, 08 2016. doi: 10.1038/ncomms12670.