



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DOUTORADO EM FÍSICA

FLÁVIO JOSÉ ALEXANDRE LINARD

DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA E REFLEXÃO DE ANDREEV EM INTERFACES
NORMAL-SUPERCONDUTOR

FORTALEZA

2023

FLÁVIO JOSÉ ALEXANDRE LINARD

DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA E REFLEXÃO DE ANDREEV EM INTERFACES
NORMAL-SUPERCONDUTOR

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de doutor em Física.
Área de Concentração: Matéria Condensada

Orientador: Prof. Dr. Andrey Chaves

FORTALEZA

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

L716d Linard, Flávio José Alexandre.

Dinâmica de pacotes de onda e reflexão de Andreev em interfaces normal-supercondutor / Flávio José Alexandre Linard. – 2023.

81 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2023.

Orientação: Prof. Dr. Andrey Chaves.

1. Grafeno. 2. Reflexão de Andreev. 3. Pacotes de onda. 4. Supercondutores. I. Título.

CDD 530

FLÁVIO JOSÉ ALEXANDRE LINARD

DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA E REFLEXÃO DE ANDREEV EM INTERFACES
NORMAL-SUPERCONDUTOR

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de doutor em Física. Área de Concentração: Matéria Condensada

Aprovada em: 23 de Fevereiro de 2023

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Andrey Chaves (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Milton Pereira Jr.
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira
Universidade Federal do Mato Grosso (UFMT)

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
Universidade Federal Rural de Pernambuco
(UFRPE)

à minha esposa Gilda e meus filhos Benício e
Emílio.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Deus por ter tido saúde nesses anos complicados que todos nós passamos para que pudesse concluir esse trabalho.

Agradeço ao professor Andrey Chaves, pela paciência, compreensão e pela excelente orientação que tornou esse trabalho possível; e também pelos conhecimentos adquiridos durante as aulas e nas conversas no GTMC e por sempre estar disposto a ajudar.

Agradeço aos membros da banca Professores João Milton, Diego Rabelo, Anderson e Teldo Anderson por terem aceitado o convite para participar da minha defesa e pelos comentários e sugestões para a melhoria do trabalho.

Agradeço a minha esposa Gilda pelo amor, conselhos e dedicação para que fosse possível a conclusão de mais essa etapa.

Agradeço aos professores do departamento de Física pelos conhecimentos adquiridos durante as disciplinas; e aos colegas que fazem/fizeram parte do GTMC, em especial a Victor Nocrato que me ajudou no início do doutorado a entender um pouco sobre supercondutividade.

RESUMO

Um método de evolução temporal de pacotes de onda, baseado na técnica *split-operator*, é desenvolvido para investigar o espalhamento de quasi-partículas em uma interface normal/supercondutor de perfil e forma arbitrários. Como aplicação prática, considera-se um sistema onde elétrons de baixa energia podem ser descritos como partículas de Dirac, o que é o caso da maioria dos materiais bidimensionais, como grafeno e dicalcogenetos de metais de transição. No entanto, o método pode ser facilmente adaptado para outros casos, como elétrons em poucas camadas de fósforo negro, ou quaisquer quasi-partículas de Schrödinger dentro da aproximação de massa efetiva em semicondutores. Empregamos o método para revisitar a reflexão de Andreev em mono, bi e tricamada de grafeno, onde casos de reflexão especular e retrorreflexão são observados para elétrons espalhados por uma região supercondutora em degrau. O efeito da abertura de um canal de *gap* zero na região supercondutora no espalhamento de elétrons e buracos também é abordado, como exemplo da versatilidade da técnica aqui proposta. Em um segundo momento é realizado uma simulação da dinâmica de pacotes de ondas de um dispositivo baseado em grafeno, onde as trajetórias de propagação de elétrons são guiadas por um campo magnético aplicado em direção a uma interface normal/supercondutor. O campo magnético controla o ângulo de incidência do pacote de ondas eletrônico de entrada na interface, o que resulta na razão elétron-buraco sintonizável na função de onda refletida, devido à dependência angular da reflexão de Andreev. Aqui, o controle mapeado das trajetórias de quasi-partículas pelo campo magnético externo define uma sondagem experimental para estudos fundamentais da reflexão de Andreev no grafeno, mas também estabelece as bases para o desenvolvimento de dispositivos de focagem magnética baseados em nanoengenharia de materiais bidimensionais supercondutores.

Palavras-chave: grafeno; reflexão de Andreev; pacotes de onda; supercondutores.

ABSTRACT

A time evolution method for wave packets, based on the split-operator technique, has been developed to investigate the scattering of quasi-particles by a normal/superconducting interface with arbitrary profile and geometry. As a practical application, the method is generalized to any situation where low energy electrons can be described as Dirac particles, which is the case for most two-dimensional materials such as graphene and transition metal dichalcogenides. However, the method developed here can be easily adapted to other cases, such as electrons in few layer black phosphorus, or any Schrodinger quasi-particle within the effective mass approximation in semiconductors. We employ the method to revisit the study of Andreev's reflection in mono, bi, and trilayer graphene, where specular reflection and retroreflection cases are naturally expected for electrons scattered by a step-like normal/superconductor interface. As a second example, the method is also applied to simulate wave packet dynamics in a graphene based device where electron propagation trajectories are guided, by an applied magnetic field, towards a normal/superconductor interface. The magnetic field controls the incidence angle of the electronic wave packet at the interface, thus resulting in a tunable electron-hole ratio in the reflected wave function, due to the angular dependence of the Andreev reflection. In this case, the mapped control of quasi-particle trajectories via external magnetic fields defines an experimental probe for future fundamental studies of Andreev reflection in graphene, while also paving the way for the development of magnetic focusing devices based on nanoengineered superconducting two dimensional materials.

Keywords: graphene; Andreev reflection; wave packets; superconductors.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – (a) Nesse processo, um elétron com momento \mathbf{k}_1 emite um fônon com momento \mathbf{q} que é absorvido por um segundo elétron com momento \mathbf{k}_2 . (b) Um elétron com momento \mathbf{k}_2 emite um fônon com momento $-\mathbf{q}$ que é absorvido por outro elétron com momento \mathbf{k}_1	16
Figura 2 – Interação efetiva elétron-elétron próximo a superfície de Fermi. Os elétrons em \mathbf{k}_1, σ_1 e \mathbf{k}_2, σ_2 são espalhados para $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1$ e $\mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma_2$, respectivamente. A interação é atrativa desde que todos os vetores de onda \mathbf{k} estejam dentro da faixa $\pm \hbar \omega_D$ da energia de Fermi.	18
Figura 3 – Região onde se formam os pares de Cooper. A formação dos pares de Cooper é proporcional a área sombreada.	20
Figura 4 – Comparação entre as reflexões: (a) retroreflexão, (b) especular. Em (a) um elétron (preto) de um metal normal incide em um supercondutor e é refletido na forma de um buraco (branco). Já em (b) o elétron incide sobre um isolante e sofre uma reflexão especular.	27
Figura 5 – (a) Estrutura da rede cristalina do grafeno apresentando as duas sub-redes A e B indicando os vetores de rede, os primeiros vizinhos e (b) primeira zona de Brillouin onde são mostrados os vetores na rede recíproca.	28
Figura 6 – Relação de dispersão em uma rede do tipo favo-de-mel enfatizando o cone de Dirac, enfatizando a banda de energia próxima a um cone de Dirac.	31
Figura 7 – Vista lateral da estrutura cristalina de uma bicamada de grafeno. Os átomos A_1 e B_1 na camada inferior são mostrados como círculos brancos e pretos, A_2, B_2 na camada superior são pretos e cinzas, respectivamente.	32
Figura 8 – Estrutura de bandas para bicamada de grafeno com empilhamento AB (esquerda) e AA (direita).	33
Figura 9 – Esquema da rede de três camadas no empilhamento ABA contendo seis sítios na célula unitária, A (círculos brancos) e B (círculos pretos) em cada camada. (b) Esquema da rede de três camadas no empilhamento ABC contendo seis sítios na célula unitária, A (círculos brancos) e B (círculos pretos) em cada camada.	34
Figura 10 – Estrutura de bandas de baixa energia de tricamada de grafeno empilhamento (a) ABA (b) ABC, em torno do ponto K.	35

- Figura 11 – Comparação entre as reflexões. Em (a) um elétron (preto) incide sobre um material normal (grafeno) e sofre uma reflexão especular. Em (b) mostra um elétron de um material normal incidindo em um supercondutor e sendo refletido na forma de um buraco (branco). 36
- Figura 12 – Reflexão de Andreev em um dispositivo de grafeno com contatos supercondutores, onde e é a carga eletrônica e h é a carga do buraco. (a) Ilustração do foco magnético das órbitas dos elétrons para uma amostra de grafeno com contatos normais em um campo magnético perpendicular \mathbf{B} quando o diâmetro do ciclotron corresponde ao espaçamento dos contatos. (b) Para um contato central supercondutor, a reflexão de Andreev converte um elétron que entra em um buraco que sai com carga positiva que flui para o contato $S4$ e um par de Cooper passa para o supercondutor. (c) Micrografia eletrônica de varredura do dispositivo de grafeno encapsulado em com contatos supercondutores $S1, S2, S3, S4$ e $S5$ 39
- Figura 13 – Esboço dos dois sistemas baseados em grafeno considerados: (a) uma única interface entre as regiões normal (N) e supercondutor (SC), e (b) um canal inclinado (por 45°) de comprimento L e largura W em toda a região de SC. No primeiro caso, as retrorreflexões (cima) e reflexões especulares (baixo) de Andreev serão investigadas calculando as trajetórias do elétron (e , azul) e buracos (h , vermelho), assumindo um ângulo de incidência α e descrevendo as quasi-partículas como pacotes de onda gaussianos circulares. Quanto ao último, serão investigadas as probabilidades de transmissão/reflexão de um elétron de entrada descrito por uma frente de onda gaussiana (gradiente azul). 47

Figura 14 – Esboço do dispositivo (painéis à esquerda): os elétrons vêm do terminal 1 para a região de campo magnético (normal), onde suas trajetórias são desviadas em direção à região supercondutora, devido à força de Lorentz. As setas pretas indicam as direções x e y . Em (a), onde a energia de Fermi E_F é menor do que o gap SC Δ_0 (veja o painel direito), o buraco que sofre espalhamento de Andreev é então coletado no terminal 2. Em (b), onde $E_F > \Delta_0$ (ver painel direito), o buraco que sofre espalhamento de Andreev é coletado de volta no terminal 1. O campo magnético controla as trajetórias e, conseqüentemente, o ângulo de incidência na interface N/SC, alterando assim a razão elétron-buraco na função de onda de saída. A camada de grafeno é ilustrada com alguns átomos por uma questão de simplicidade, mas as amostras reais nos cálculos são grandes o suficiente para garantir a validade do modelo contínuo.	48
Figura 15 – Estruturas de banda nas regiões normal e SC (esquerda) e trajetórias dos pacotes de ondas (direita), considerando um ângulo de incidência $\alpha = 45^\circ$ e três valores de energia de Fermi: (a) $E_F = 10\Delta_0$, (b) $E_F = 2\Delta_0$ e (c) $E_F = 0,1\Delta_0$. As regiões SC são destacadas como áreas sombreadas nas Figs.. O mapa de cores nos painéis da direita é tal que vermelho (azul) representam pacotes de ondas de buracos (elétrons), enquanto cores mais escuras representam densidades de probabilidade mais altas.	52
Figura 16 – Registros instantâneos das projeções do pacote de ondas sobre os estados de elétron (azul) e buraco (vermelho), para um pacote de onda em grafeno sendo refletido por uma região supercondutora (área sombreada) em $y > 0$, assumindo $E_F = 10\Delta_0$. Os registros instantâneos são obtidos em três instantes diferentes no tempo, isto é, $t = 0, 110$ e 300 fs.	53
Figura 17 – Similar a Fig. 16, mas para $E_F = 0.1\Delta_0$	54
Figura 18 – Similar a Fig. 16, mas para um pacote de ondas com a mesma energia do nível de Fermi, $\varepsilon = E_F = 0.1\Delta_0$	55
Figura 19 – Núcleo de integração no modelo BTK de condutividade em função do ângulo de incidência do pacote de ondas, assumindo pacotes de ondas com energias diferentes ε e níveis de Fermi (a) $E_F = 10\Delta_0$ e (b) $E_F = 0,1\Delta_0$	57

- Figura 20 – Núcleo de integração do modelo de condutividade BTK em função do ângulo de incidência do pacote de onda, assumindo pacotes de onda com energia $\varepsilon = 0,7\Delta_0$ espalhados pelas interfaces N/SC baseadas em (a) bicamada (b) e tricamada de grafeno. Dois valores de nível de Fermi, $E_F = 0,1\Delta_0$ e $E_F = 10\Delta_0$, são considerados. 58
- Figura 21 – Densidades de probabilidade integradas em função do tempo de elétron (azul) e buraco (vermelho) na região normal além de um canal na região supercondutora com $W = 300 \text{ \AA}$, $L = 300 \text{ \AA}$, assumindo energias de Fermi $E_F = 10\Delta_0$ (sólido) e $E_F = 0,1\Delta_0$ (tracejado). As setas nos canais ilustram as trajetórias esperadas de elétrons e buracos que sofrem reflexões pelas interfaces normal-SC. 60
- Figura 22 – Probabilidade de transmissão integrada em função da energia da frente de onda de entrada de elétron (azul) e buraco (vermelho), assumindo um canal na região supercondutora com comprimento $L = 300 \text{ \AA}$, e assumindo larguras $W = 200 \text{ \AA}$ (pontilhado), 300 \AA (tracejada) e 400 \AA (sólido). As energias de Fermi são (a) $E_F = 0,1\Delta_0$ e (b) $E_F = 10\Delta_0$ 61
- Figura 23 – Probabilidade de transmissão integrada em função da energia da frente de onda de entrada de elétron (azul) e buraco (vermelho), assumindo um canal na região supercondutora com largura $W = 300 \text{ \AA}$, para comprimentos $L = 200 \text{ \AA}$ (pontilhado), 350 \AA (tracejada) e 400 \AA (sólido). As energias de Fermi são (a) $E_F = 0,1\Delta_0$ e (b) $E_F = 10\Delta_0$ 62
- Figura 24 – Trajetórias de elétrons (azul) e buracos (vermelho) com energia $\varepsilon = 0,8\Delta_0$, espalhados por uma interface N/SC com nível de Fermi $E_F = 0,1\Delta_0$ sob três valores diferentes de campo magnético B : (a) $1,75 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$, (b) $3,25 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$, e (c) $3,75 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$. As cores mais escuras (mais claras) nas trajetórias representam densidade de probabilidade mais alta (mais baixa) para o elétron ou buraco. As áreas sombreadas em amarelo representam os terminais, enquanto a área sombreada em azul claro à direita representa a região SC 64

- Figura 25 – As trajetórias de elétrons (azul) e buracos (vermelho) com energia $\varepsilon = 0,8\Delta_0$, espalhados por uma interface N/SC com nível de Fermi $E_F = 10\Delta_0$ sob três valores diferentes de campo magnético B : (a) $2,5 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$, (b) $3,25 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$, (c) $4,25 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$. As cores mais escuras (mais claras) das trajetórias representam uma densidade de probabilidade mais alta (mais baixa) para o elétron ou buraco. As áreas sombreadas em amarelo representam os terminais, enquanto a área sombreada em azul claro à direita representa a região SC. 65
- Figura 26 – Dependência do campo magnético das probabilidades de transporte T_{11} e T_{12} , assumindo um sistema com níveis de Fermi (a) $E_F = 0,1\Delta_0$ e (b) $E_F = 10\Delta_0$, respectivamente. Três valores diferentes da energia do elétron ε são considerados. 66
- Figura 27 – Evolução temporal das probabilidades P_e (preto) e P_h (vermelho) de encontrar elétrons e buracos, respectivamente, em (a) T_2 , para $E_F = 0,1\Delta_0$, e em (b) T_1 , para $E_F = 10\Delta_0$. Três valores diferentes de campo aplicado são considerados, para uma energia de pacote de ondas fixa $\varepsilon = 0,6\Delta_0$ 67

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Supercondutividade	14
1.1.1	<i>Interação elétron-elétron</i>	15
1.1.2	<i>Problema de Cooper</i>	18
1.1.3	<i>Função de onda BCS</i>	20
1.2	Equações de Bogoliubov-de Gennes (BdG)	22
1.3	Reflexão de Andreev	26
1.4	Grafeno	27
1.5	Bicamada e tricamada de grafeno	32
1.6	Reflexão de Andreev no grafeno	35
1.7	Objetivos e estrutura da tese	40
2	DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA	41
2.1	Hamiltonianos dependentes de spin	42
2.2	<i>Split-operator</i> para a interface grafeno/supercondutor	43
3	INTERFACE N/SC EM MATERIAIS DIRAC-WEYL (GRAFENO)	51
3.1	Monocamada de grafeno	52
3.2	Bicamada e tricamada de grafeno	56
3.3	Canal com <i>gap</i> nulo dentro da região SC	59
4	TRAJETÓRIA DO ELÉTRON INCIDENTE GUIADA POR CAMPO MAGNÉTICO	63
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	69
	REFERÊNCIAS	71
	APÊNDICE A – CÁLCULO PARÂMETROS VARIACIONAIS	75
	APÊNDICE B – ARTIGOS RELACIONADOS À TESE	81

1 INTRODUÇÃO

1.1 Supercondutividade

A supercondutividade foi descoberta em 1911 na Universidade de Leiden pelo físico holandês Heike Kamerlingh Onnes. Alguns anos antes, em 1908, Onnes foi o primeiro a desenvolver uma técnica para liquefazer hélio, o que tornou possível a realização de experimentos em temperaturas próximas a 4,2 Kelvin [1, 2]. Esse fenômeno só foi completamente entendido quase meio Século depois com o desenvolvimento de uma teoria microscópica por Bardeen *et al* [3] e independentemente por Bogoliubov [4], mas na literatura essa teoria ficou conhecida como teoria BCS em alusão aos nomes dos autores Bardeen, Cooper e Schrieffer.

No início do Século XX, várias teorias fenomenológicas foram desenvolvidas e a principal motivação para isso foi a teoria da superfluidez do Hélio líquido desenvolvida por Landau [5], em 1941, que trouxe um critério de superfluido à supercondutividade. Em um material supercondutor, uma fração finita de elétrons é condensada em um superfluido que se estende por todo o volume do sistema, onde na temperatura zero essa condensação é completa e todos os elétrons participam da formação desse superfluido, mas somente os elétrons próximos à superfície de Fermi têm seu movimento afetado pela condensação. Isso leva a uma suposição em que os elétrons se combinam em pares análogos aos átomos de Hélio na superfluidez. No entanto, uma causa para tal combinação não foi encontrada na época, pois de acordo com a lei de Coulomb, os elétrons devem se repelir. Isso causou uma parada no desenvolvimento de novas teorias para supercondutividade nesta época [6]. Somente na década de 1950 as forças responsáveis por essa condensação foram conhecidas.

Desenvolvida em 1957, a teoria microscópica da supercondutividade, conhecida hoje como teoria BCS, explicou o fenômeno do efeito isótopo, o qual iremos descrever brevemente mais adiante neste capítulo, e também a existência de um *gap* de energia 2Δ no nível de Fermi do sistema. A teoria BCS é baseada em três principais intuições: na primeira, verifica-se que as forças efetivas entre os elétrons, às vezes, podem ser atrativas ao invés de repulsivas, como seria previsto pela lei de Coulomb; a segunda mostra o problema de Cooper, onde ele considerou um sistema simples de dois elétrons fora de uma superfície de Fermi ocupada; por último, Schrieffer construiu uma função de onda de muitas partículas na qual todos os elétrons próximos à superfície de Fermi estão emparelhados [7].

1.1.1 Interação elétron-elétron

Em 1950, foi descoberto um fenômeno que ficou conhecido como efeito isótopo, o qual mostrava, experimentalmente, que o estado supercondutor surge abaixo de uma temperatura crítica T_C que fica maior em sistemas isótopos com massa atômica maior. Isso indica que a supercondutividade precisa vir da interação entre elétrons e as vibrações na rede de átomos do sólido, levando com isso ao entendimento que a supercondutividade não era um fenômeno puramente eletrônico. [6, 8].

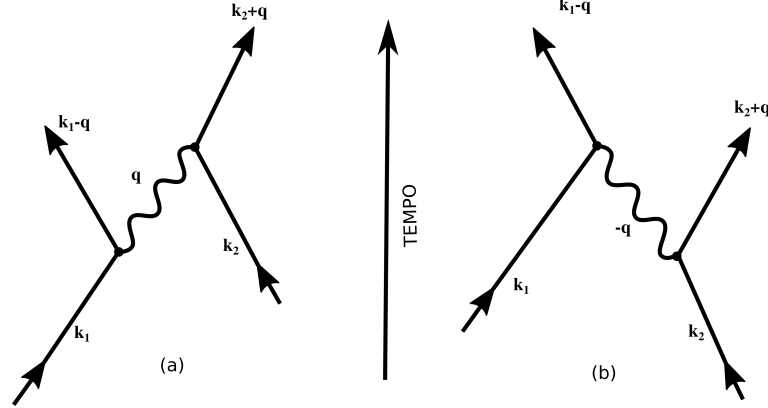
Na mesma época, Frölich [9] obteve resultados similares e também disse que para que o estado fundamental (identificado como estado supercondutor) seja alcançado, requer-se que a interação entre os elétrons e as vibrações da rede (fônons) exceda um determinado valor. Utilizando a teoria da perturbação de segunda ordem (assim como na teoria da condutividade eletrônica de Bloch), pode-se obter uma mudança de energia, onde esta pode ser atribuída à emissão e reabsorção dos quanta vibracionais pelos elétrons. A ligação atrativa entre elétrons resultante deste fenômeno é responsável pela formação de um *gap* de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Uma teoria semelhante foi desenvolvida por Bardeen [10, 11] onde foi concluído que este tipo de interação entre os elétrons ocorre para elétrons próximos à superfície de Fermi.

Inicialmente essa ideia aparentava ser surpreendente, pois dois elétrons deveriam ser repelidos um pelo outro devido à interação Coulombiana. Ocorre que para elétrons livres isso é verdadeiro, mas em um metal, deve-se levar em consideração o movimento de um elétron e de quasi-partículas, ou seja, excitações coletivas [7]. É isso que uma teoria envolvendo a interação elétron-elétron num ambiente mediado por fônons pretende resolver.

O diagrama de Feynman mostrado na Fig. 1 apresenta como essa interação se dá. Na Fig. 1(a), um elétron com momento \mathbf{k}_1 emite um fônon do cristal com momento \mathbf{q} , onde um segundo elétron, com momento \mathbf{k}_2 , absorve o fônon e capta o momento \mathbf{q} . Na Fig. 1(b), um elétron com momento \mathbf{k}_2 emite um fônon com momento $-\mathbf{q}$, onde depois um segundo elétron, com momento \mathbf{k}_1 , absorve o fônon com momento $-\mathbf{q}$.

Utilizando a teoria da perturbação de segunda ordem, a amplitude de espalhamento pode ser expressa como um produto de matrizes de interação elétron-fônon em cada vértice, $W_{\mathbf{q}}$, dividida pela diferença de energia entre o estado inicial e o estado intermediário (região onde encontram-se os vértices).

Figura 1 – (a) Nesse processo, um elétron com momento \mathbf{k}_1 emite um fônon com momento \mathbf{q} que é absorvido por um segundo elétron com momento \mathbf{k}_2 . (b) Um elétron com momento \mathbf{k}_2 emite um fônon com momento $-\mathbf{q}$ que é absorvido por outro elétron com momento \mathbf{k}_1 .



Fonte: Adaptada pelo autor de [6, 8].

Para o processo mostrado na Fig. 1(a), a amplitude de espalhamento é dada por

$$V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{q}}^{(a)} = \frac{|W_{\mathbf{q}}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}}, \quad (1.1)$$

onde $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ é a energia do fônon e ε é a energia do elétron. Para o processo na Fig. 1(b), tem-se

$$V_{\mathbf{k}_2, \mathbf{q}}^{(b)} = \frac{|W_{\mathbf{q}}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}}. \quad (1.2)$$

A frequência $\omega_{\mathbf{q}}$ e os elementos da matriz $W_{\mathbf{q}}$ são invariantes para a troca de \mathbf{q} por $-\mathbf{q}$. Então, sendo a energia conservada durante o processo de espalhamento, é dito que

$$\varepsilon_{\mathbf{k}_1} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} = \varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}},$$

logo, temos que a amplitude de espalhamento para os dois processos é dada por

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = -\frac{2\hbar\omega_{\mathbf{q}} |W_{\mathbf{q}}|^2}{(\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2 - (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k} - \mathbf{q}})^2}. \quad (1.3)$$

A utilização de uma constante empírica e a omissão da introdução explícita de termos de interação Coulombiana feitas por Frölich [9] e Bardeen [11] eram uma aproximação razoável e chegavam a bons resultados quando a mudança na frequência das interações elétron-fônon era pequena, mas não ocorria o mesmo quando a mudança de frequência era grande [12].

Sabe-se que a energia de interação eletrostática entre dois elétrons é e^2/r no espaço real e, escrita no (através de uma transformada de Fourier) espaço dos momentos é dada por $4\pi e^2/q^2$. Levando em conta o efeito de blindagem do campo eletrostático por outros elétrons

e pelos íons positivos na rede, sendo esse efeito descrito por uma função dielétrica $\varepsilon(q\omega)$ o potencial de interação [13], pode ser obtido como

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (1.4)$$

onde, utilizando a aproximação de Thomas-Fermi, ε é dado por $\varepsilon = 1 + k_S^2/q^2$, então a Eq. (1.4) se torna

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_S^2}. \quad (1.5)$$

Utilizando o modelo de Jellium, o potencial de interação Coulombiano foi incorporado a Eq. (1.3) [12] e a expressão para a interação efetiva elétron-elétron passa a ser dada por

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_S^2} \left[1 + \frac{\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2} \right], \quad (1.6)$$

onde o primeiro termo da Eq. (1.6) é devido à repulsão Coulombiana e o segundo termo é a interação mediada por fônons da rede cristalina. Fica então claro que para $\omega < \omega_q$ a interação entre elétrons é *atrativa*.

É importante mencionar que, para chegar neste resultado, Frölich [14] considerou um Hamiltoniano, hoje chamado de Hamiltoniano de Fröhlich, que consiste de três partes,

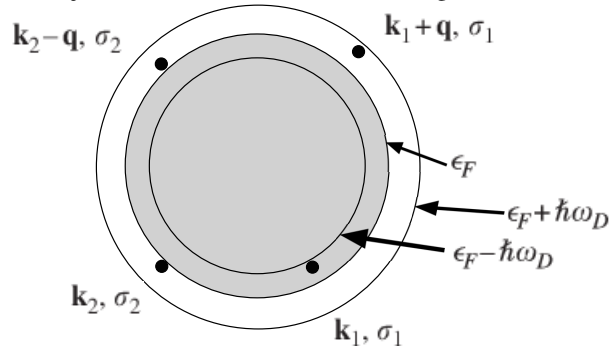
$$H = H_{el} + H_f + H_{int}, \quad (1.7)$$

a primeira, devido aos elétrons livres, a segunda, ao campo, e a última é devido à interação elétron-fônon. O Hamiltoniano de interação neste caso é dado por

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma_1, \sigma_2} V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}, \quad (1.8)$$

onde $c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}, \sigma}$ são os operadores de criação e destruição, respectivamente, de elétrons com momento \mathbf{k} e spin σ , e \mathbf{q} é o momento do fônon, com a restrição que a energia dos elétrons envolvidos estão todos dentro da faixa $\pm \hbar\omega_D$ da esfera de Fermi (ver Fig. 2). A restrição de energias para um intervalo de energias de Debye $\hbar\omega_D$ tem um papel na teoria que será discutido a seguir.

Figura 2 – Interação efetiva elétron-elétron próximo a superfície de Fermi. Os elétrons em \mathbf{k}_1, σ_1 e \mathbf{k}_2, σ_2 são espalhados para $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1$ e $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2$, respectivamente. A interação é atrativa desde que todos os vetores de onda \mathbf{k} estejam dentro da faixa $\pm \hbar\omega_D$ da energia de Fermi.



Fonte: Adaptada da Ref. [7].

1.1.2 Problema de Cooper

Um importante avanço em direção à teoria microscópica da supercondutividade foi feito por L. N. Cooper em 1956. Como dissemos anteriormente, ele descobriu que é necessária uma atração entre elétrons para o surgimento da supercondutividade. Foi observado que a interação atrativa ocorre apenas em energias próxima à superfície de Fermi, e esse par de elétrons interagentes foi chamado de par de Cooper [15, 16].

O modelo de Cooper supõe uma esfera de Fermi em temperatura zero, onde todos os estados com $k < k_F$ estão ocupados. Então, são adicionados dois elétrons no mar de Fermi, que interagem entre si, mas não com aqueles do mar, exceto pelo princípio da exclusão de Pauli. Logo, procura-se uma função de onda de duas partículas, onde pelos argumentos de Bloch, espera-se que os estados de mais baixa energia tenha momento total nulo, de modo que os dois elétrons tenham momentos com mesmo módulo, mas sentidos opostos [16]. Esta função de onda é dada então por

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}, \quad (1.9)$$

onde $g_{\mathbf{k}}$ são alguns coeficientes de expansão a serem encontrados. Pode-se escolher o autoestado de energia para ser um spin singleto ou tripleto correspondendo a uma função de onda antisimétrica e simétrica, respectivamente. Grande parte dos supercondutores conhecidos têm par de Cooper singleto [7], logo escolhe-se uma função de onda ($|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$), que é antissimétrica, onde a parte orbital tem que ser simétrica. Por fim a função de onda torna-se

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[\sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_F} g_{\mathbf{k}} \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \right]. \quad (1.10)$$

Inserindo a função de onda da Eq. (1.10) na equação de Schrödinger independente do tempo, pode-se mostrar que os coeficientes de ponderação e o autovalor da energia E podem ser obtidos resolvendo-se a equação de Schrödinger no espaço dos momentos, dada por:

$$(E - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}) g_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_F} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'}, \quad (1.11)$$

onde $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ são os elementos da matriz do potencial de interação

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{\Omega} \int V(\mathbf{r}) e^{(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{r}, \quad (1.12)$$

onde \mathbf{r} é a distância entre dois elétrons, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ descreve o espalhamento do par de elétrons com momento $(\mathbf{k}', -\mathbf{k}')$ para momento $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ e Ω é o volume do sistema. Se um conjunto $g_{\mathbf{k}}$ satisfaz a Eq. (1.11) com $E < 2E_F$, esta condição permite então existir um estado ligado. É difícil analisar esta situação para $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ geral [16], então Cooper introduziu uma aproximação $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V$ para os estados onde $\varepsilon_F \leq \varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \leq \varepsilon_F + \hbar\omega_D$ sendo $\hbar\omega_D$ a energia de Debye. Logo,

$$g_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\Omega} \frac{V \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (1.13)$$

Somando ambos os lados da Eq. (1.13) e cancelando $\sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}'}$, obtem-se

$$1 = \frac{1}{\Omega} \sum_{k > k_F} V(2\varepsilon_k - E)^{-1}. \quad (1.14)$$

Substituindo a soma sobre \mathbf{k} na Eq. (1.14) por uma integral sobre a energia, a soma é transformada em

$$\frac{1}{V} = N(\varepsilon_F) \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E} = \frac{1}{2} N(\varepsilon_F) \ln \left(\frac{2\varepsilon_F - E + 2\hbar\omega_D}{2\varepsilon_F - E} \right), \quad (1.15)$$

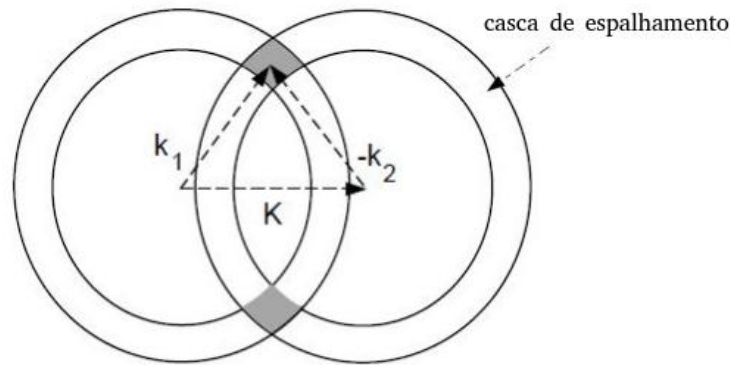
logo,

$$\frac{2}{N(\varepsilon_F)V} = \ln \left(\frac{2\varepsilon_F - E + 2\hbar\omega_D}{2\varepsilon_F - E} \right), \quad (1.16)$$

onde por fim a energia é dada por

$$E \approx 2\varepsilon_F - 2\hbar\omega_D e^{-2/N(\varepsilon_F)V}. \quad (1.17)$$

Figura 3 – Região onde se formam os pares de Cooper. A formação dos pares de Cooper é proporcional a área sombreada.



Fonte: Adaptada da Ref. [17].

A Eq. (1.17) mostra que existe um estado ligado com energia negativa em relação à superfície de Fermi composta por elétrons, sendo esta energia sempre menor que a energia do estado normal, não importa o quão fraca seja a interação V . O espalhamento no espaço de fase está restrito a uma casca de largura $\hbar\omega_D$. Nesse caso, o momento no processo de espalhamento é conservado e é dado por $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{K}$, conforme é mostrado na Fig. 3. A melhor escolha para \mathbf{K} para o emparelhamento no estado fundamental é $\mathbf{K} = 0$, logo $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$, o que garante que se \mathbf{k}_1 estiver desocupado \mathbf{k}_2 também estará [3]. Para essa situação foi considerado que o potencial de interação era constante. Logo, o Hamiltoniano reduzido é dado por

$$H_{red} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (1.18)$$

onde o primeiro termo da Eq. (1.18) representa a um contador de estados com energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$ e o segundo termo o potencial de interação.

1.1.3 Função de onda BCS

Sabendo-se agora que o mar de Fermi é instável contra a formação de um par de Cooper, os pares devem condensar até que o equilíbrio seja atingido, isso ocorrerá quando o estado do sistema estiver tão alterado que a energia de ligação para formar um par adicional for a zero [16]. O problema de Cooper não é adequado para descrever este estado de muitas partículas, pois como já mencionado, o modelo aborda dois elétrons em pares que são tratados de maneira diferente dos outros elétrons do mar de Fermi.

Então, supondo um metal no estado fundamental ($T = 0\text{K}$) no qual os elétrons em

estados próximos se atraem mutuamente formando vários pares de Cooper, encontra-se que o estado fundamental de um supercondutor será um estado coerente de pares de Cooper. Logo, essa situação pode ser descrita pela função de onda BCS. É possível construir operadores que criam ($c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger$) ou aniquilam ($c_{\mathbf{k}\uparrow}$) pares de elétrons com momento total nulo e spins opostos [7, 16]. Em termos do operador de criação, a função de onda BCS de muitos corpos é dada por

$$|\Psi_{BCS}\rangle = const.exp\left(\sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (1.19)$$

Esses operadores comutam entre si para diferentes valores de k , $k \neq k'$; logo utilizando esse fato a Eq. (1.19) pode ser reescrita como um produto de exponenciais um para cada ponto k , logo obtém-se

$$|\Psi_{BCS}\rangle = const. \prod_{\mathbf{k}} exp\left(\alpha_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (1.20)$$

então expandindo em série de Taylor a Eq. (1.20), obtém-se

$$|\Psi_{BCS}\rangle = const. \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \alpha_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle. \quad (1.21)$$

Logo, aplicando o produto da Eq. (1.21) pelo seu complexo conjugado obtém-se a função normalizada dada por

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (1.22)$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ é o operador de criação de uma partícula com momento \mathbf{k} e spin σ , $|0\rangle$ é o estado de vácuo, $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ são parâmetros variacionais. Argumentou-se que com tantas partículas envolvidas seria uma boa aproximação usar um campo auto-consistente de Hartree ou uma aproximação de campo médio, em que a ocupação de cada estado \mathbf{k} é considerada como dependente apenas da média de ocupação de outros estados, logo como há uma variação no número de partículas trabalha-se no ensemble grand-canônico [16].

Para determinar os parâmetros variacionais, podem ser utilizados os dois métodos, apresentados em detalhes no apêndice A. O primeiro é o método variacional e foi o originalmente utilizado por Schrieffer [18], e o segundo é um mais moderno que é obtido através das transformações de Bogoliubov-Valitin.

1.2 Equações de Bogoliubov-de Gennes (BdG)

Nessa seção será mostrado um método autoconsistente desenvolvimento por Bogoliubov e de Gennes [13] que é essencialmente uma generalização das equações de Hartree-Fock para o caso da supercondutividade. Esse método inclui os efeitos do potencial de emparelhamento supercondutor $\Delta(r)$, bem como o potencial escalar comum $U(r)$ [16]. As equações de Bogoliubov-de Gennes (BdG) fornecem uma descrição adequada para sistemas com interface Normal/Supercondutor (N/SC) e com base nesse formalismo Blonder *et al.* [19] formularam uma teoria que descreve a condutância nessas interfaces e é conhecido na literatura como modelo Blonder-Tinkham-Klapwijk (BTK). O desenvolvimento das equações seguiu as Refs. [13, 16].

O ponto de partida para obtenção das equações BdG é o Hamiltoniano reduzido, ou, também conhecido como Hamiltoniano de emparelhamento, apresentado na Seção 1.1 e dado pela Eq. (1.18). Esse Hamiltoniano pode ser reescrito em termos dos operadores de campo que são definidos como

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (1.23)$$

$$\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \quad (1.24)$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ são os operadores de criação e destruição, respectivamente, definidos no espaço dos momentos da teoria BCS e $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow é o índice do spin. Logo, $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ e $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ criam ou removem elétrons, respectivamente, com spin σ na posição \mathbf{r} [13].

Dessa forma, o Hamiltoniano escrito em termos dos operadores de campo resulta em

$$H = H_1 + H_2,$$

sendo

$$H_1 = \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + U_0 \right] \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (1.25)$$

$$H_2 = -\frac{1}{2}V \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (1.26)$$

onde H_1 é a soma da energia cinética e potencial da partícula livre e H_2 é a interação efetiva elétron-elétron entre pares de Cooper.

Agora o potencial de interação H_2 deve ser substituído por um potencial médio que age apenas em uma partícula por vez [13]. Para obtenção da aproximação de campo médio aplica-se procedimento similar ao usado no caso de Hartree-Fock e é obtido

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &\approx \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ &+ \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) - \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.27)$$

com a diferença que são introduzidos contrações anômalas que não estão presentes no formalismo de Hartree-Fock - essas contrações anormais ocorrem por causa da superposição de estados com diferentes números de partículas [20].

Aplicando o teorema de Wick, é obtida a chamada aproximação de Hartree-Fock-Bogoliubov dada por

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &\approx \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} \rangle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} + \langle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} - \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} \rangle \langle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} \rangle \\ &+ \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \rangle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} + \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} - \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \rangle \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle \\ &- \left(\langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} + \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} - \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \rangle \right). \end{aligned} \quad (1.28)$$

Os termos $\langle \rangle \langle \rangle$ são constantes do Hamiltoniano. Nos campos de Fock $\langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle = \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \rangle = 0$. Logo, a Eq. (1.28) torna-se

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &\approx \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} \rangle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} + \langle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} + \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \rangle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \\ &+ \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} + C(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.29)$$

onde os dois primeiros termos são conhecidos como campos de emparelhamento, o terceiro e quarto termos são chamados de campos de Hartree e $C(\mathbf{r})$ é uma constante.

Substituindo a aproximação de Hartree-Fock-Bogoliubov dada pela Eq. (1.29) no Hamiltoniano H_2 tem-se

$$H_2 = -\frac{1}{2}V \int d\mathbf{r} \left[\langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} \rangle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} + \langle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} + \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} \rangle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} + \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\uparrow} + C(\mathbf{r}) \right]. \quad (1.30)$$

Os termos de campo de emparelhamento juntamente com o potencial possibilita a obtenção do parâmetro de ordem da teoria BCS na posição \mathbf{r} , que representa o espalhamento do par de Cooper e são dados por

$$\Delta(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}V \langle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} \rangle,$$

$$\Delta^*(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}V\langle\psi_{\uparrow}^{\dagger}\psi_{\downarrow}^{\dagger}\rangle.$$

Os termos de campo de Hartree podem ser escritos como o operador número

$$n_{\sigma} = \sum_{\sigma} \langle\psi_{\sigma}^{\dagger}\psi_{\sigma}\rangle,$$

onde juntamente com o potencial e o termo constante obtém-se o chamado potencial de Hartree dado por

$$U_{HF}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}Vn_{\sigma}.$$

Por fim, chega-se ao Hamiltoniano efetivo que é dado por

$$H_{EF} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \left[\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})H_e\psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + U_{HF}(\mathbf{r})\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})\psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r})\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r})\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r})\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})\psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) + C(\mathbf{r}) \right], \quad (1.31)$$

onde

$$H_e = \frac{p^2}{2m_e} + U_0(\mathbf{r}) - E_F.$$

O termo E_F representa a energia de Fermi como na teoria BCS. O potencial de Hartree, $U_{HF}(\mathbf{r})$, destrói e cria elétrons, com isso conserva o número de partículas.

Sendo o Hamiltoniano efetivo conhecido e sabendo que ele é quadrático em Ψ e Ψ^{\dagger} , ele pode então ser diagonalizado. Para isso, pode-se diagonalizá-lo utilizando as transformações de Bogoliubov que é linear e mistura operadores de criação e destruição, definindo operadores de criação e destruição de quasi-partículas Eqs. (1.32 - 1.35), forma análoga a obtida na Seção ?? [13, 16]:

$$\psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) = \sum_n \left[u_n(\mathbf{r}) \gamma_{n\uparrow} - v_n^*(\mathbf{r}) \gamma_{n\downarrow}^{\dagger} \right], \quad (1.32)$$

$$\psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \sum_n \left[u_n(\mathbf{r}) \gamma_{n\downarrow} + v_n^*(\mathbf{r}) \gamma_{n\uparrow}^{\dagger} \right], \quad (1.33)$$

$$\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_n \left[u_n^*(\mathbf{r}) \gamma_{n\uparrow}^{\dagger} - v_n(\mathbf{r}) \gamma_{n\downarrow} \right], \quad (1.34)$$

$$\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_n \left[u_n^*(\mathbf{r}) \gamma_{n\downarrow}^{\dagger} + v_n(\mathbf{r}) \gamma_{n\uparrow} \right]. \quad (1.35)$$

O Hamiltoniano efetivo diagonalizado é dado por

$$H_{EF} = E_0 + \sum_{n\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}. \quad (1.36)$$

Para mostrar as equações para u e v , são necessários calcular os comutadores para $[H_{EF}, \gamma_{m\sigma}]$ e $[H_{EF}, \gamma_{n\sigma}^\dagger]$, onde H_{EF} é dado pela Eq. (1.36):

$$\begin{aligned} [H_{EF}, \gamma_{m\sigma}] &= H_{EF} \gamma_{m\sigma} - \gamma_{m\sigma} H_{EF} \\ &= \left(E_g + \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \right) \gamma_{m\sigma} - \gamma_{m\sigma} \left(E_g + \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \right) \\ &= \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \left(\gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \gamma_{m\sigma} - \gamma_{m\sigma} \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \right) \\ &= - \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \{ \gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{m\sigma} \} \gamma_{n\sigma} \\ &= - \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'} \gamma_{n\sigma} = - \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}, \end{aligned} \quad (1.37)$$

$$\begin{aligned} [H_{EF}, \gamma_{n\sigma}^\dagger] &= H_{EF} \gamma_{n\sigma}^\dagger - \gamma_{n\sigma}^\dagger H_{EF} \\ &= \left(E_g + \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \right) \gamma_{n\sigma}^\dagger - \gamma_{n\sigma}^\dagger \left(E_g + \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \right) \\ &= \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \left(\gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \gamma_{n\sigma}^\dagger - \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \right) \\ &= \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \{ \gamma_{n\sigma}, \gamma_{n\sigma} \} \\ &= \sum_{n\sigma} \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'} = \varepsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Como também os comutadores de $[\Psi_\uparrow(\mathbf{r}), H_{EF}]$ e $[\Psi_\downarrow(\mathbf{r}), H_{EF}]$ que são dados por

$$[\Psi_\uparrow(\mathbf{r}), H_{EF}] = [H_e + U(\mathbf{r})] \Psi_\uparrow(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}), \quad (1.39)$$

$$[\Psi_\downarrow(\mathbf{r}), H_{EF}] = [H_e + U(\mathbf{r})] \Psi_\downarrow(\mathbf{r}) - \Delta^*(\mathbf{r}) \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}), \quad (1.40)$$

onde para obtê-los foi utilizado o Hamiltoniano dado pela Eq. (1.31). Por fim, utilizando-se das Eqs. (1.32 - 1.40) é possível obter as equações de BdG

$$\varepsilon_n u(\mathbf{r}) = [H_e + U(\mathbf{r})] u(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}),$$

$$\varepsilon_n v(\mathbf{r}) = -[H_e^* + U(\mathbf{r})] v(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}),$$

que escritas na forma matricial são expressas como

$$\begin{bmatrix} H_e + U(\mathbf{r}) & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -[H_e + U(\mathbf{r})] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_n(\mathbf{r}) \\ v_n(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \varepsilon_n \begin{bmatrix} u_n(\mathbf{r}) \\ v_n(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (1.41)$$

onde a primeira matriz mostra o Hamiltoniano H_{BdG} .

1.3 Reflexão de Andreev

Quando um metal normal (N) está em contato com um metal supercondutor (SC), ocorre a passagem de elétrons do metal normal para o supercondutor e de pares de Cooper do supercondutor para o metal normal, ocorrendo o chamado efeito de proximidade, onde N passa a ter propriedades supercondutoras [21].

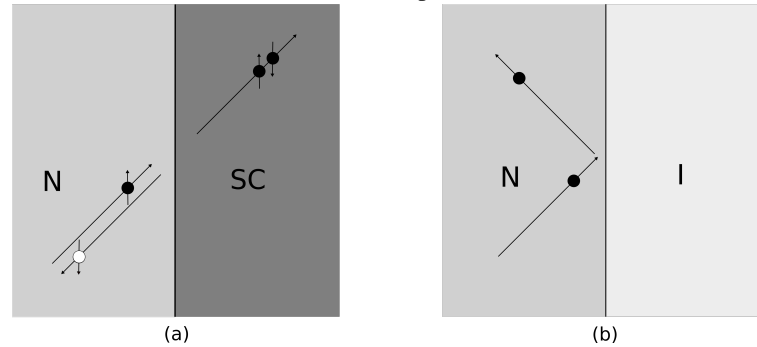
As propriedades supercondutoras podem ser medidas em um ponto de contato na junção N/SC que pode ou não possuir uma barreira (microconstrução) [22]. Através dessa junção ocorre a presença de uma supercorrente devido ao efeito de proximidade [23].

O efeito de proximidade supercondutor pode ser entendido através do fenômeno chamado de reflexão de Andreev. A natureza da reflexão dos elétrons na fronteira entre a fase normal e supercondutora, que ocorriam pela alta resistência térmica no estado intermediário supercondutor quando comparados ao estado supercondutor foi explicada por Andreev [24]. Essa condução térmica foi descoberta por Medelssohn [25] que fez medições do fluxo de calor para os estados normal e supercondutor em chumbo puro e chumbo contendo uma pequena quantidade de bismuto. A condução de calor foi medida em dependência do campo magnético e da temperatura, onde a liga mostrou uma condução de calor menor no estado intermediário do que no estado supercondutor ou normal. Este comportamento anômalo levou a indicar a existência em supercondutores de um tipo de transporte de calor semelhante ao observado no Hélio líquido.

Um elétron com energia acima do nível de Fermi incide no supercondutor e é condensado no estado fundamental como um dos componentes do par de Cooper. Para formar esse par é necessário um segundo elétron retirado do metal normal, esse elétron extra é então refletido de volta como um buraco (com energia abaixo do nível de Fermi) pelo mesmo caminho do elétron incidente. Essa forma de reflexão é conhecida como retrorreflexão de Andreev [22].

Essa forma incomum de reflexão apresenta algumas diferenças quando comparadas com a reflexão normal, as quais podem ser vistas na Fig. 4. A comparação entre as duas reflexões podem ser feitas quanto a conservação da carga, momento, energia e spin. A carga é

Figura 4 – Comparação entre as reflexões: (a) retroreflexão, (b) especular. Em (a) um elétron (preto) de um metal normal incide em um supercondutor e é refletido na forma de um buraco (branco). Já em (b) o elétron incide sobre um isolante e sofre uma reflexão especular.



Fonte: Adaptada de [26].

conservada apenas na reflexão normal, pois na reflexão de Andreev a partícula refletida (buraco) tem carga oposta a da partícula incidente (elétron). Mas a carga ausente entra no supercondutor como componente do par de Cooper, o que não viola a lei de conservação da carga. Quanto ao momento, ele é conservado apenas na reflexão de Andreev, isso devido a uma inversão do vetor velocidade, o que não ocorre na reflexão normal. Em ambas as reflexões há conservação da energia. A reflexão de Andreev é considerada um processo de espalhamento elástico, pois ambas as partículas, elétron e buraco, possuem a mesma energia de excitação. Por último, a conservação do spin ocorre nas duas reflexões. No caso da reflexão de Andreev o buraco tem spin oposto ao do elétron.

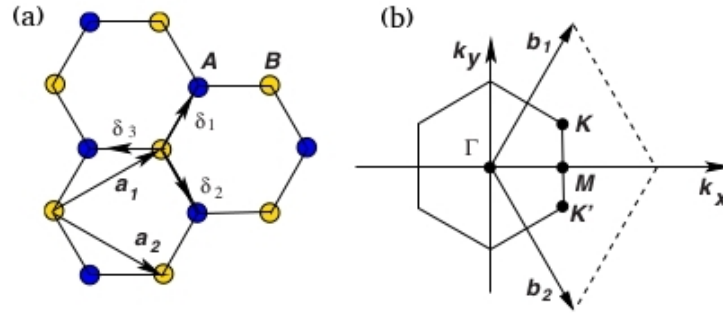
1.4 Grafeno

O grafite, um alótropo tridimensional (3D) do carbono, tornou-se amplamente conhecido após a invenção do lápis em 1564. O grafite é uma rede hexagonal 3D de átomos de carbono, onde uma única camada de grafite forma um material bidimensional (2D), chamado grafite 2D ou grafeno. A utilidade do lápis como instrumento para escrita vem do fato de que o grafite é constituído de pilhas de camadas de grafeno fracamente acopladas pelas forças de van der Waals [27, 28]. Os primeiros estudos sobre a estrutura de bandas do grafeno foram apresentados por Wallace [29] e mostrou o comportamento semimetálico incomum neste material.

O grafeno foi primeiramente isolado por Novoselov *et al.* [30] pelo método de clivagem micromecânica do grafite. Esse material possui átomos de carbono densamente compactados, separados por uma distância $a = 1,42$ Angstroms (parâmetro de rede), dispostos em uma rede do tipo favo-de-mel. Este tipo de rede não é uma rede de Bravais, ou seja, não é possível transladar entre quaisquer dois pontos da rede apenas partir de uma combinação de

múltiplos inteiros de dois vetores de rede. Porém, a rede pode ser representada como duas sub-redes triangulares (estas, sim, são redes de Bravais) A e B superpostas [28].

Figura 5 – (a) Estrutura da rede cristalina do grafeno apresentando as duas sub-redes A e B indicando os vetores de rede, os primeiros vizinhos e (b) primeira zona de Brillouin onde são mostrados os vetores na rede recíproca.



Fonte: Adaptada da Ref. [28]

Na Fig. 5 é mostrada (a) a célula unitária e (b) a zona de Brillouin do grafeno como um losango pontilhado e um hexágono sombreado, respectivamente, onde os vetores de rede \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 no espaço real são dados por

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}) \quad e \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}). \quad (1.42)$$

A Fig. 5(a) mostra que cada átomo da sub-rede A possui três primeiros vizinhos da sub-rede B (vice-versa), onde os vetores que os conectam são expressos por

$$\delta_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}), \quad \delta_2 = \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}) \quad e \quad \delta_3 = a(-1, 0). \quad (1.43)$$

Correspondentemente, na Fig. 5 (b) são mostrados os vetores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 que definem a rede recíproca e são expressos por

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}) \quad e \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}). \quad (1.44)$$

O Hamiltoniano *tight-binding*, que descreve algumas propriedades eletrônicas do grafeno, considerando somente o *hopping* entre os primeiros vizinhos, escrito no formalismo de segunda quantização (ver Ref. [28]) é expresso por:

$$H_{TB} = \sum_{\langle i,j \rangle} \tau (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i), \quad (1.45)$$

onde $\tau \approx 2,8$ eV é o parâmetro de *hopping* entre os primeiros vizinhos (*hopping* entre diferentes sub-redes), os operadores a_i (a_i^\dagger) destroem (criam) um elétron no i -ésimo sítio da sub-rede A e b_i (b_i^\dagger) aniquilam (criam) um elétron no j -ésimo sítio da sub-rede B.

Para uma rede ideal infinita, as transformadas de Fourier para os operadores de criação são

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_k, \quad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_k^\dagger, \quad (1.46)$$

e

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} b_{k'} \quad e b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} b_{k'}^\dagger, \quad (1.47)$$

onde N é o número de células unitárias. Logo, substituindo as Eqs. (1.46) e (1.47) na Eq. (1.45), obtém-se

$$H_{TB} = -\tau \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_k^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} b_{k'} \right) + \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} b_{k'}^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_k \right) \right], \quad (1.48)$$

de forma que

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\sum_{\langle k,k' \rangle} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} a_k^\dagger b_{k'} + \sum_{\langle k,k' \rangle} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{k'}^\dagger a_k \right]. \quad (1.49)$$

A Eq. (1.49) pode ser reescrita como

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle k,k' \rangle} \left[e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} a_k^\dagger b_{k'} + e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} b_{k'}^\dagger a_k \right]. \quad (1.50)$$

Cada átomo possui três primeiros vizinhos, logo considerando a origem do sistema situada no sítio j e variando i ao longo dos três primeiros vizinhos, localizados pela Eq. (1.43), obtém-se

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_j \sum_{\langle k,k' \rangle} \left[e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} \left(e^{-ik_x \frac{a}{2}} e^{iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{-ik_x \frac{a}{2}} e^{-iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{ik_x a} \right) a_k^\dagger b_{k'} \right. \\ \left. + e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} \left(e^{ik_x \frac{a}{2}} e^{-iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{ik_x \frac{a}{2}} e^{iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{-ik_x a} \right) b_{k'}^\dagger a_k \right], \quad (1.51)$$

sabendo que

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \quad (1.52)$$

obtém-se

$$H_{TB} = -\tau \sum_k \left[\left(e^{-ik_x \frac{a}{2}} e^{iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{-ik_x \frac{a}{2}} e^{-iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{ik_x a} \right) a_k^\dagger b_{k'} \right. \\ \left. + \left(e^{ik_x \frac{a}{2}} e^{-iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{ik_x \frac{a}{2}} e^{iky \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{-ik_x a} \right) b_{k'}^\dagger a_k \right], \quad (1.53)$$

que pode ser reescrito como

$$H_{TB} = -\tau \sum_k \left[\left(2\cos\left(k_y a\sqrt{3}/2\right) e^{-ik_x \frac{a}{2}} + e^{ik_x a} \right) a_k^\dagger b_{k'} + \left(2\cos\left(k_y a\sqrt{3}/2\right) e^{ik_x \frac{a}{2}} + e^{-ik_x a} \right) b_{k'}^\dagger a_k \right], \quad (1.54)$$

e por fim

$$H_{TB} = -\tau \sum_k \left[g(\mathbf{k}) a_k^\dagger b_k + g^*(\mathbf{k}) b_{k'}^\dagger a_k \right], \quad (1.55)$$

onde $g(\mathbf{k})$ é o fator de estrutura expresso por

$$g(\mathbf{k}) = 2\cos\left(k_y a\sqrt{3}/2\right) e^{-ik_x \frac{a}{2}} + e^{ik_x a}. \quad (1.56)$$

O Hamiltoniano mostrado na Eq. (1.55) pode ser reescrito na forma matricial como

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} 0 & -\tau g(\mathbf{k}) \\ -\tau g^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.57)$$

Diagonalizando a matriz da Eq. (1.57), obtém-se um espectro de energia dada por

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}, \quad (1.58)$$

onde

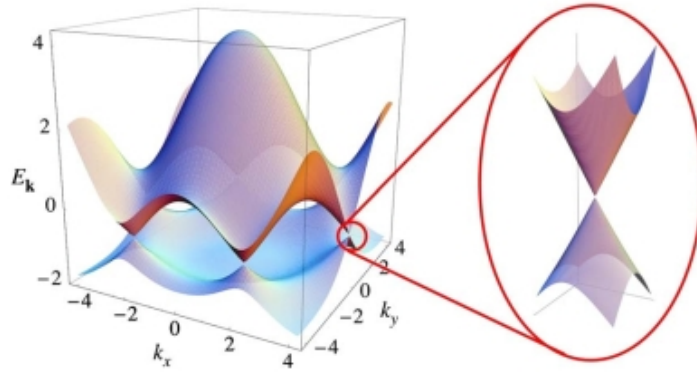
$$f(\mathbf{k}) = 2\cos\left(k_y a\sqrt{3}\right) + 4\cos\left(k_x \frac{3a}{2}\right) \cos\left(k_y \frac{a\sqrt{3}}{2}\right). \quad (1.59)$$

O espectro de energia no nível de Fermi é formado pelos estados π^* (banda de condução) e estados π (banda de valência). Esses dois estados se tocam em seis pontos equivalentes na chamada zona de Brillouin, quando $E = 0$, e são denominados pontos de Dirac ou de Fermi. A Fig. 6 mostra a relação de dispersão eletrônica para uma monocamada de grafeno, apresentado os seis pontos onde o gap é nulo. Apenas dois desses pontos, chamados \mathbf{K} e \mathbf{K}' , não são equivalentes e suas posições no espaço recíproco são dadas por

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3a\sqrt{3}} \right) \text{ e } \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3a\sqrt{3}} \right). \quad (1.60)$$

Estes pontos são importantes para o estudo das propriedades eletrônicas do grafeno, pois a estrutura de bandas não convencional, apresentando gap nulo nos pontos de Dirac e excitações de baixas energias ao redor do nível de Fermi, faz com que os elétrons comportem-se como partículas relativísticas seguindo a física da eletrodinâmica quântica, exceto pelo fato de no grafeno os férmions se movem com uma velocidade de Fermi cerca de 300 vezes menor que a velocidade da luz [28, 31].

Figura 6 – Relação de dispersão em uma rede do tipo favo-de-mel enfatizando o cone de Dirac, enfatizando a banda de energia próxima a um cone de Dirac.



Fonte: Adaptada da Ref. [28].

Em estudo realizado por Novoselov *et al.* [32] relatou-se que o transporte dessas excitações são essencialmente governadas pela equação de onda (relativística) de Dirac.

Para demonstrar o comportamento desses elétrons é realizada uma expansão em série de Taylor do fator de estrutura, $g(\mathbf{k})$, em torno dos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' . Considerando apenas os termos até a primeira ordem, obtém-se para o ponto \mathbf{K}

$$g(\mathbf{k}) \approx \frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) = \frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) e^{i\frac{5\pi}{6}}, \quad (1.61)$$

e para \mathbf{K}'

$$g(\mathbf{k}) \approx \frac{3a}{2} (-k'_x - ik'_y) \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) = \frac{3a}{2} (-k'_x - ik'_y) e^{i\frac{5\pi}{6}}. \quad (1.62)$$

Substituindo as Eqs. (1.61) e (1.62) no Hamiltoniano da Eq. (1.57), obtém-se o Hamiltoniano aproximado para o sistema

$$H_D^\pm = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \pm k_x - ik_y \\ \pm k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.63)$$

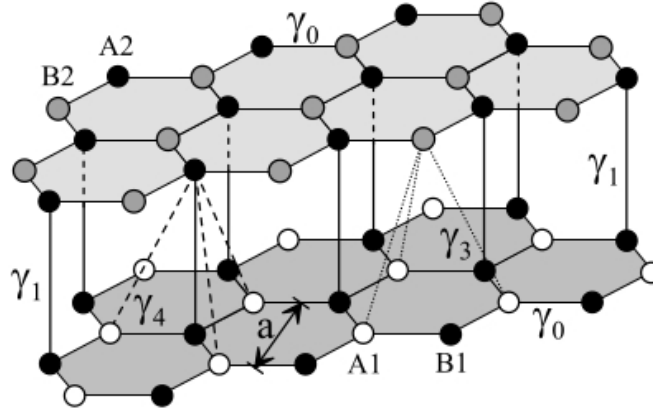
onde $v_F = 3\tau/2\hbar$ é a velocidade de Fermi e os sinais $+$ e $-$ referem-se aos elétrons de baixa energia em torno dos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' , respectivamente.

A Eq. (1.63) pode ser reescrita de uma outra forma dada por

$$H_D^\pm = \hbar v_F (\pm k_x \sigma_x + k_y \sigma_y), \quad (1.64)$$

onde σ_x e σ_y são as matrizes de Pauli.

Figura 7 – Vista lateral da estrutura cristalina de uma bicamada de grafeno. Os átomos $A1$ e $B1$ na camada inferior são mostrados como círculos brancos e pretos, $A2$, $B2$ na camada superior são pretos e cinzas, respectivamente.



Fonte: Adaptada da Ref. [34].

1.5 Bicamada e tricamada de grafeno

Uma bicamada de grafeno consiste em duas monocamadas de átomos de carbono empilhadas, cada uma com uma estrutura cristalina em forma de favo de mel, onde esse empilhamento é disposto de duas formas, AB e AA. O tipo de empilhamento AB, ou Bernal, consiste de átomos da sub-rede A_2 (camada superior) coincidentes com os átomos da sub-rede B_1 , (camada inferior) [33, 34]. A estrutura cristalina de uma bicamada de grafeno do tipo AB apresentando os hoppings entre as duas camadas ($\gamma_1, \gamma_3, \gamma_4$) e entre os átomos da mesma rede (γ_0) pode ser vista na Fig. 7.

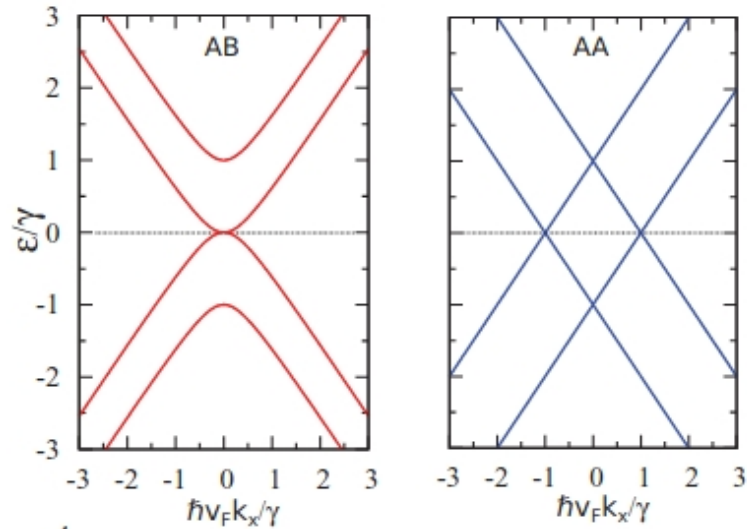
O Hamiltoniano *tight-binding* descrito por Castro Neto *et al.* [28] para esse problema pode ser escrito como

$$H_{TB} = -\gamma_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{m=1}^2 \left(a_{m,i}^\dagger b_{m,j} + b_{m,j}^\dagger a_{m,i} \right) - \gamma_1 \left(a_{1,i}^\dagger b_{2,j} + b_{2,j}^\dagger a_{1,i} \right) - \gamma_3 \left(a_{2,i}^\dagger b_{1,j} + b_{1,j}^\dagger a_{2,i} \right) - \gamma_4 \sum_{\langle i,j \rangle} \left(a_{1,i}^\dagger a_{2,j} + a_{2,j}^\dagger a_{1,i} + b_{1,i}^\dagger b_{2,j} + b_{2,j}^\dagger b_{1,i} \right), \quad (1.65)$$

onde $a_{m,i}$ ($b_{m,j}$) destrõem um elétron na sub-rede A (B), no plano $m = 1, 2$, no sítio δ_i . O fator $\gamma_0 = \tau$ representa a energia de *hopping* numa mesma camada e $\gamma_1 = \tau_\perp \approx 0.4$ eV é a energia de *hopping* entre os átomos sobrepostos A_1 e B_2 . Já $\gamma_3 \approx 0.3$ eV e $\gamma_4 \approx 0.04$ eV representam a energia de *hopping* entre (A_2B_1) e (A_1A_2 e B_1B_2), respectivamente.

O Hamiltoniano da Eq.(1.65) pode ser reescrito na forma matricial (ver Ref. [34])

Figura 8 – Estrutura de bandas para bicamada de grafeno com empilhamento AB (esquerda) e AA (direita).



Fonte: Adaptada da Ref. [35].

da seguinte forma

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{A1} & -\gamma_0 g(\mathbf{k}) & \gamma_1 & \gamma_4 g(\mathbf{k}) \\ -\gamma_0 g^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_{B1} & \gamma_4 g(\mathbf{k}) & -\gamma_3 g^*(\mathbf{k}) \\ \gamma_1 & \gamma_4 g^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_{A2} & -\gamma_0 g(\mathbf{k}) \\ \gamma_4 g^*(\mathbf{k}) & -\gamma_3 g(\mathbf{k}) & -\gamma_0 g^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_{B2} \end{pmatrix}, \quad (1.66)$$

onde fazendo as energias na diagonal principal e os parâmetros γ_3 e γ_4 iguais a zero, obtém-se

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma_0 g(\mathbf{k}) & \tau_{\perp} & 0 \\ -\gamma_0 g^*(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \\ \tau_{\perp} & 0 & 0 & -\gamma_0 g^*(\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & -\gamma_0 g(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.67)$$

Usando o modelo contínuo para aproximação de baixa energia para H_{TB} da mesma forma que feito para monocamada, obtém-se

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F (\tau p_x + i p_y) & \tau_{\perp} & 0 \\ \hbar v_F (\tau p_x - i p_y) & 0 & 0 & 0 \\ \tau_{\perp} & 0 & 0 & \hbar v_F (\tau p_x - i p_y) \\ 0 & 0 & \hbar v_F (\tau p_x + i p_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.68)$$

A Fig. 8 mostra a estrutura de bandas de uma bicamada de grafeno para o tipo de empilhamento AA e AB.

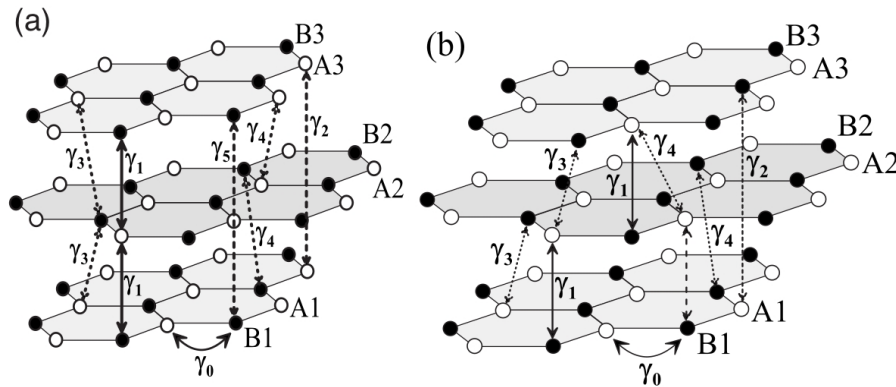
Uma tricamada de grafeno consiste em três monocamadas de átomos de carbono empilhadas. São esperados que dois tipos diferentes de empilhamento, ABA (ou Bernal) e

ABC (ou romboédrica) apareçam na natureza, sendo que as propriedades eletrônicas dependem fortemente do tipo de empilhamento [36].

As redes de grafeno de três camadas incluem pares de locais não equivalentes $A1, B1, A2, B2$ e $A3, B3$ na parte inferior, centro e camadas superiores, respectivamente.

As camadas são dispostas de acordo com o empilhamento de Bernal (ver Fig. 9 (a)), de modo que os locais $B1, A2$ e $B3$ fiquem diretamente acima ou abaixo um do outro [37]. Já as camadas dispostas no empilhamento ABC (ver Fig. 9 (b)) se apresentam de modo que os pares de sítios $B1$ e $A2$, e $B2$ e $A3$, fiquem diretamente acima ou abaixo [36].

Figura 9 – Esquema da rede de três camadas no empilhamento ABA contendo seis sítios na célula unitária, A (círculos brancos) e B (círculos pretos) em cada camada. (b) Esquema da rede de três camadas no empilhamento ABC contendo seis sítios na célula unitária, A (círculos brancos) e B (círculos pretos) em cada camada.



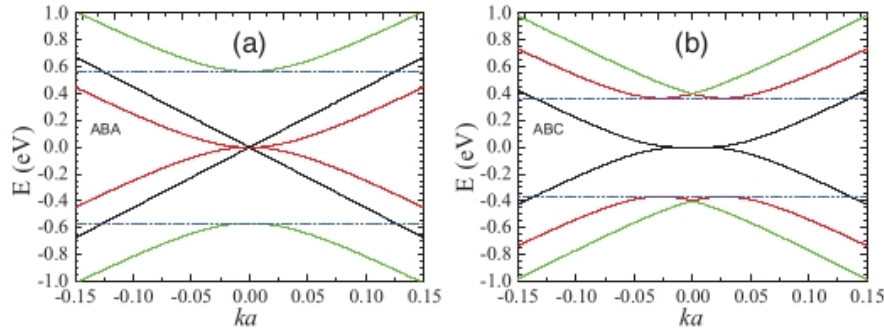
Fonte: Adaptada das Refs. [36, 37].

Utilizando o modelo *tight-binding* similar ao utilizado para a bicamda, pode-se obter o Hamiltoniano para a tricamada de grafeno. O Hamiltoniano para tricamada com empilhamento ABC [38] em torno do ponto K é

$$\begin{pmatrix} 0 & v_F p_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_F p_+ & 0 & \gamma_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & v_F p_- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_F p_+ & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_1 & 0 & v_F p_- \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v_F p_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.69)$$

Os autovalores da Eq. (1.69) leva, a uma estrutura de bandas de baixa energia que consiste em um conjunto de seis bandas cúbicas, duas delas se tocando no ponto K e as outras quatro se cruzando em uma energia $E = \pm \gamma_1$ acima (abaixo) do ponto K [38].

Figura 10 – Estrutura de bandas de baixa energia de tricamada de grafeno empilhamento (a) ABA (b) ABC, em torno do ponto K.



Fonte: Adaptada da Ref. [38].

Já o hamiltoniano efetivo de baixa energia para o empilhamento ABA também em torno do ponto K é

$$\begin{pmatrix} 0 & v_F p_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_F p_+ & 0 & \gamma_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & v_F p_- & 0 & \gamma_1 \\ 0 & 0 & v_F p_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_F p_- \\ 0 & 0 & \gamma_1 & 0 & v_F p_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.70)$$

onde $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$, com $p = (p_x, p_y)$ o operador de momento bidimensional e $v_F = 3at/2$ a velocidade Fermi do grafeno monocamada, em termos do *hopping* do primeiro vizinho no plano $t \approx 3$ eV e a distância carbono-carbono $a \approx 1,42$ angstroms. [38]. A Fig. 10 mostra a estrutura de bandas para os empilhamentos ABA e ABC, respectivamente.

Para baixas energias, foi demonstrado que este Hamiltoniano pode ser simplificado para uma forma 2×2 , que considera apenas as duas bandas mais próximas do nível de Fermi $E_F = 0$ (ver Ref. [39]), como

$$H_N = \frac{(\hbar v_F)^N}{\gamma^{N-1}} \begin{bmatrix} 0 & (k_x - ik_y)^N \\ (k_x + ik_y)^N & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.71)$$

onde $N = 2$ representa o Hamiltoniano para a bicamada de grafeno, podendo ser generalizado para a tricamada de grafeno fazendo $N = 3$.

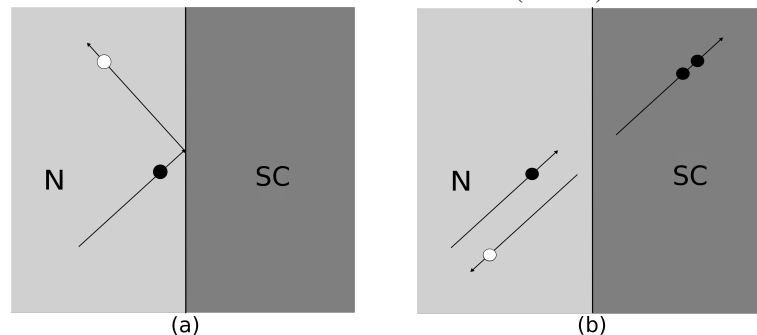
1.6 Reflexão de Andreev no grafeno

Na Seção 1.3 foi dito que um elétron que incide em uma interface entre um metal normal e um metal supercondutor, se a incidência for normal, é totalmente convertido em um

buraco, o qual segue uma trajetória paralela à do elétron incidente. Caso a incidência seja oblíqua, parte da função de onda retorna para a região normal como um estado de um elétron. No caso de um sistema contendo um material semiconductor, o qual possui um *gap* de energia entre as bandas de condução e valência, o momento do buraco, juntamente com sua dispersão de energia, também traz uma trajetória paralela ao elétron incidente, ocorrendo a retrorreflexão de Andreev.

A estrutura de bandas não convencional do grafeno proporciona a possibilidade de observar fenômenos quasi-relativísticos em laboratório, como o tunelamento de Klein, que seria o tunelamento dos férmions de Dirac através de barreiras de potencial, e o *zitterbewegung*, um movimento trêmulo de pacotes de onda. Na monocamada de grafeno, dependendo das condições do sistema, a função de onda do buraco pode voltar para a região normal em uma trajetória paralela àquela do elétron *refletido* (não do incidente), gerando o fenômeno chamado na literatura de reflexão especular de Andreev [40].

Figura 11 – Comparação entre as reflexões. Em (a) um elétron (preto) incide sobre um material normal (grafeno) e sofre uma reflexão especular. Em (b) mostra um elétron de um material normal incidindo em um supercondutor e sendo refletido na forma de um buraco (branco).



Fonte: Adaptada da Ref. [40].

Através do estudo de reflexão de elétrons relativísticos em supercondutores, Beenakker [40] previu uma maneira não convencional de conversão elétron-buraco em monocamada de grafeno. Enquanto normalmente o elétron refletido volta ao longo da trajetória do elétron incidente (retrorreflexão), a reflexão de Andreev é especular no grafeno não dopado (ver Fig. 11).

Para confirmar essa previsão, Beenakker [40] considerou uma folha de grafeno em um plano x-y com um eletrodo supercondutor cobrindo apenas uma parte da folha sendo essa a região SC. Foram construídas bases de estados nas regiões SC ($x < 0$) e N ($x > 0$) e utilizou as equações de Dirac-Bogoliubov-de Gennes (DBdG) para descrever as excitações elétron-buraco.

As soluções foram obtidas a partir da equação DBdG, dada por

$$\begin{pmatrix} H_{\pm} - E_F & \Delta \\ \Delta^* & E_F - H_{\pm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (1.72)$$

onde para a região N, $\Delta = \Delta^* = U = 0$ e $H^{\pm} = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -i\hbar(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y)$. Já para a região SC, $\Delta = \Delta_0 e^{i\phi}$ ($\Delta^* = \Delta_0 e^{-i\phi}$) e $H^{\pm} = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} - U_0$.

Em uma dada energia ε e vetor de onda transversal q foram consideradas até quatro bases de estados dados por

$$\Psi^{e\pm} = \frac{\exp(iqy \pm ikx)}{\sqrt{\cos\alpha}} \begin{pmatrix} \exp(\mp i\alpha/2) \\ \exp(\pm i\alpha/2) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \Psi^{h\pm} = \frac{\exp(iqy \pm ik'x)}{\sqrt{\cos\alpha'}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \exp(\mp i\alpha'/2) \\ \mp \exp(\pm i\alpha'/2) \end{pmatrix}, \quad (1.73)$$

onde $\alpha = \arcsen[\hbar vq / (\varepsilon + E_F)]$, $\alpha' = \arcsen[\hbar vq / (\varepsilon - E_F)]$, $k = (\hbar v^{-1})(\varepsilon + E_F) \cos\alpha$ e $k' = (\hbar v^{-1})(\varepsilon - E_F) \cos\alpha'$. Os sinais são definidos tal que para retroreflexão α' e k' tem sinais opostos a α e k (para $\varepsilon < E_F$), enquanto para a reflexão especular α' e k' e α e k tem os mesmos sinais.

No regime relevante $U_0 + E_F \gg \Delta_0$ as soluções são

$$\Psi^{S\pm} = \exp(iqy \pm ik_0x + \kappa x) \begin{pmatrix} \exp(\mp i\beta) \\ \pm \exp(\pm i\gamma \mp i\beta) \\ \exp(-i\phi) \\ \pm \exp(\pm i\gamma - i\phi) \end{pmatrix}. \quad (1.74)$$

Para completar a construção do estado de espalhamento, precisa-se combinar os estados na fronteira das regiões N e SC exigindo continuidade em $x = 0$. A amplitude de reflexão para um elétron incidente é obtida resolvendo a equação dada por

$$\Psi^{e-} + r\Psi^{e+} + r_A\Psi^{h+} = a\Psi^{S+} + b\Psi^{S-}, \quad (1.75)$$

já a amplitude de reflexão para um buraco incidente é obtida resolvendo a equação dada por

$$\Psi^{h-} + r'\Psi^{h+} + r'_A\Psi^{e+} = a'\Psi^{S+} + b'\Psi^{S-}, \quad (1.76)$$

onde

$$r_A = \begin{cases} e^{-i\phi} X^{-1} \sqrt{\cos\alpha \cos\alpha'} \\ 0 \end{cases},$$

$$r = X^{-1} \left(-\cos\beta \operatorname{sen} \left[(\alpha' + \alpha) / 2 \right] + i \operatorname{sen} \left[(\alpha' - \alpha) / 2 \right] \right),$$

$$r'_A = e^{2i\phi r_A},$$

$$r' = X^{-1} \left(\cos\beta \operatorname{sen} \left[(\alpha' + \alpha) / 2 \right] + i \operatorname{sen} \left[(\alpha' - \alpha) / 2 \right] \right),$$

$$X = \cos\beta \cos \left[(\alpha' - \alpha) / 2 \right] + i \operatorname{sen}\beta \cos \left[(\alpha' - \alpha) / 2 \right].$$

Uma proposta semelhante utilizando as equações DBdG para investigar a reflexão de Andreev em uma bicamada de grafeno foi apresentada por Ludwig [41]. A verificação experimental desse fenômeno em bicamada de grafeno, onde a reflexão de Andreev foi observada em uma interface de Van der Waals formada entre a bicamada de grafeno e o supercondutor $NbSe_2$ foi realizada por Efetov *et al.* [42].

Uma característica única do espalhamento de Andreev em interfaces N/SC com base em materiais Dirac-Weyl, como o grafeno, é a possibilidade de observar a retrorreflexão ou reflexão especular de Andreev do buraco espalhado apenas ajustando o nível de Fermi do sistema [40, 43], ao contrário do que ocorre em interfaces N/SC usuais, onde apenas o primeiro é observado.

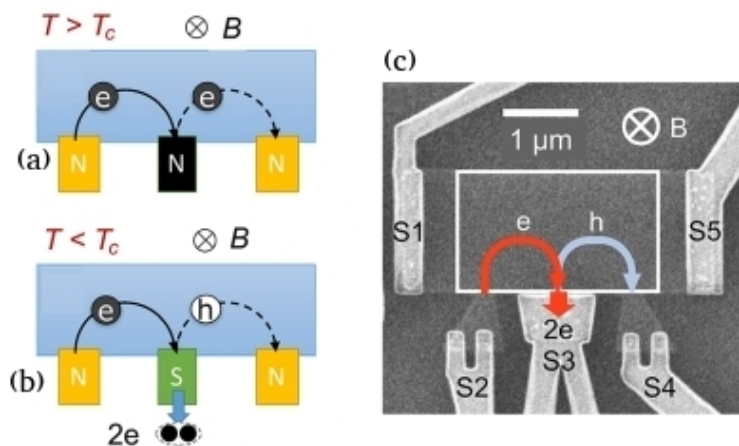
De uma forma bastante indireta a transição da retrorreflexão para reflexão especular em bicamada de grafeno, ou seja, pela supressão da condutância através da interface N/SC quando o nível de Fermi atinge o valor do *gap* SC foi observada por Efetov *et al.* [42]. Uma observação direta dessa transição exigiria uma técnica experimental onde trajetórias de elétrons e buracos espalhados poderiam ser controladas.

Uma forma de controlar as trajetórias dos elétrons é através do uso de campos magnéticos, foi proposto, por exemplo, no contexto da eletro-ótica, na busca de refração negativa de elétrons em monocamada de grafeno. A força de Lorentz induzida por campo foi usada para desviar as trajetórias de elétrons em direção a uma junção p-n, onde elétrons sofrem tunelamento de Klein e devem obedecer a um análogo eletro-ótico da lei de refração de Snell. A investigação do acúmulo de elétrons em diferentes lados do dispositivo fornece, portanto, informações sobre a natureza positiva ou negativa da refração do elétron [44].

Um dispositivo baseado em grafeno sugerido por Bhandari *et al.* [45] utiliza um campo magnético aplicado para guiar elétrons de uma região normal (grafeno) em direção a uma região supercondutora. A Fig. 12 (a) mostra o elétron sendo guiado pelo campo magnético para

um contato central Normal e sendo refletido com um elétron. Já na Fig. 12 (b) o elétron é guiado para o centro SC, onde na interface N/SC, os elétrons são convertidos em buracos, e o eventual acúmulo de cargas positivas no terminal de saída do dispositivo permite detectar o processo de reflexão de Andreev. A Fig. 12 (c) mostra as órbitas do elétron e do buraco fotografadas por microscopia de varredura em um dispositivo de grafeno encapsulado em nitreto de boro hexagonal (hBN) com contatos supercondutores S1, S2, S3, S4 e S5, onde os semicírculos vermelho e azul ilustram, respectivamente, as órbitas do ciclotron de um elétron e um buraco refletidos em um campo magnético perpendicular \mathbf{B} . Para registrar o fluxo balístico dos portadores, uma corrente I é passada de S2 para os contatos S1 e S3, que são aterrados. Os portadores balísticos fluem para o lado oposto da amostra, onde são coletados pelos contatos S4 e S5, que são flutuantes. A mudança de sinal na tensão detectada permite determinar se os portadores coletados pelo contato S4 são elétrons ou buracos que sofreram reflexão de Andreev.

Figura 12 – Reflexão de Andreev em um dispositivo de grafeno com contatos supercondutores, onde e é a carga eletrônica e h é a carga do buraco. (a) Ilustração do foco magnético das órbitas dos elétrons para uma amostra de grafeno com contatos normais em um campo magnético perpendicular \mathbf{B} quando o diâmetro do ciclotron corresponde ao espaçamento dos contatos. (b) Para um contato central supercondutor, a reflexão de Andreev converte um elétron que entra em um buraco que sai com carga positiva que flui para o contato S4 e um par de Cooper passa para o supercondutor. (c) Micrografia eletrônica de varredura do dispositivo de grafeno encapsulado em com contatos supercondutores S1, S2, S3, S4 e S5.



Fonte: Adaptada da Ref. [45].

Múltiplos processos de conversão elétron-buraco em interfaces N/SC baseado em grafeno sob a ação de um campo magnético aplicado também foram demonstrados experimentalmente para produzir estados de borda do efeito Hall quântico envolvendo espalhamento de Andreev de elétrons e buracos [46].

1.7 Objetivos e estrutura da tese

Nesta tese é desenvolvida uma técnica numérica para investigar a dinâmica de pacotes de onda em uma interface N/SC, baseada em uma extensão do chamado método do *split-operator*, a qual considera um Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes que descreve um supercondutor e um Hamiltoniano de Dirac-Weyl que descreve o comportamento dos portadores de carga no sistema. O método permite uma investigação numérica do espalhamento do pacotes de onda na interface e a conversão entre os estados do elétron e do buraco, permitindo assumir uma forma arbitrária para a interface e para os perfis de potencial e alterar convenientemente o Hamiltoniano do sistema para qualquer material bidimensional.

No Capítulo 2 são apresentados o método *split-operator* e o Hamiltoniano que servirá como entrada no código desenvolvido. No Capítulo 3, aplicou-se o método para calcular as probabilidades de transmissão em interfaces N/SC baseadas em mono, bi e tricamada de grafeno, bem como na Seção 3.3 aplica-se em um sistema que consiste em um guia de onda normal baseado em monocamada grafeno definido por regiões supercondutoras adjacentes. O primeiro demonstra a versatilidade do método aqui proposto no que diz respeito à sua flexibilidade para ser adaptado a outros Hamiltonianos do sistema, enquanto os resultados do segundo ilustram como a largura e o comprimento de um canal podem ser usados para ajustar os componentes de elétrons e buracos do pacotes de onda que sai da região do canal. No Capítulo 4 é aplicada a técnica para uma trajetória de um elétron incidente guiado por um campo magnético. No Capítulo 5 são apresentadas as conclusões e as perspectivas de trabalhos futuros.

2 DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA

A maioria das técnicas propostas na literatura para o estudo do espalhamento de Andreev recorre a métodos baseados em ondas planas que, embora forneçam soluções analíticas para o problema de espalhamento, são mais difíceis de serem adaptadas a situações físicas envolvendo potenciais e interface N/SC de geometria arbitrária, bem como a presença de campos aplicados. Então, essa tese objetiva o desenvolvimento de um método que seja facilmente adaptado para qualquer configuração dos potenciais e interface N/SC, como também para qualquer forma de Hamiltoniano que descreva os materiais envolvidos.

Nesse capítulo será desenvolvida uma técnica numérica para investigar a dinâmica de pacote de ondas em uma interface N/SC, tendo como base uma extensão do chamado método *split-operator* [47, 48], que considera o Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes (BdG) para descrever um supercondutor. O método permite a investigação do espalhamento do pacote de ondas na interface e a interação entre os estados do elétron e do buraco, permitindo assumir uma forma arbitrária para a interface e para os perfis de potencial e alterar convenientemente o Hamiltoniano do sistema para qualquer material bidimensional.

Partículas quânticas exibem conjuntamente características de partículas e ondas. Na Física Clássica uma partícula é bem localizada no espaço, pois podem ser obtidas ao mesmo tempo e com precisão sua posição e velocidade. Na Mecânica Quântica, segundo a hipótese de de Broglie, uma partícula é descrita por uma função de onda que corresponde à matéria associada a um comprimento de onda. Mas as funções de onda podem se espalhar por todo o espaço. Uma partícula localizada dentro de uma determinada região do espaço pode ser descrita por uma onda de matéria cuja amplitude é grande nessa região e zero fora dela. Logo, uma função de onda localizada é chamada pacote de onda [49]. Um pacote de onda consiste em uma superposição de ondas planas de comprimentos de onda diferentes, com fases e amplitudes que interagem construtivamente em pequenas regiões do espaço e destrutivamente nos demais espaços.

O espalhamento de quasi-partículas em uma interface N/SC pode ser investigado utilizando o método de evolução temporal de pacotes de onda. O ponto de partida para a discussão é a equação de Schrödinger dependente do tempo dada por

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle}{\partial t} = H |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle, \quad (2.1)$$

onde H é o operador Hamiltoniano e $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$ é a função de onda dependente do tempo. A função de onda que satisfaz a Eq. (2.1), na representação de Schrödinger, apresenta a seguinte

forma

$$|\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)\rangle = e^{-\frac{iH\Delta t}{\hbar}} |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle, \quad (2.2)$$

onde o termo exponencial representa o operador evolução temporal e é unitário desde que H seja hermitiano [17].

A solução para a equação de Schrödinger dependente do tempo é baseada na representação aproximada do operador evolução temporal (*split-operator*). A técnica consiste em separar o operador de evolução temporal: o Hamiltoniano é dividido em duas partes, uma primeira envolvendo o termo de energia potencial, $V(\mathbf{r})$, e outra apenas contendo a energia cinética $T(\mathbf{k})$ escritas nos espaços real e recíproco, respectivamente [47]. Havendo comutação entre os operadores, temos $e^{x+y} = e^x e^y$. Mas o operador Hamiltoniano presente no argumento da exponencial que compõe o operador evolução temporal não pode ser dividido dessa forma, pois energia cinética e energia potencial não comutam. Podemos usar a fórmula de Zassenhaus [50]

$$e^{x+y} = e^x e^y e^{-\frac{[x,y]}{2}} e^{\frac{[y,[x,y]]}{3} + \frac{[x,[x,y]]}{6}}. \quad (2.3)$$

Utilizando a Eq. (2.3) o operador evolução temporal torna-se $e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} = e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}V\Delta t} + O(\Delta t^2)$, aproximação referenciada na literatura como expansão de Suzuki-Trotter [51], onde sua forma mais simétrica é dada por

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} + O(\Delta t^3). \quad (2.4)$$

2.1 Hamiltonianos dependentes de spin

Existe uma classe de Hamiltonianos que podem ser tratados de uma forma simples com a técnica *split-operator*: quando o Hamiltoniano pode ser escrito como $H = \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, isto é, em termos das matrizes de Pauli $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k}$, sendo

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

O operador de evolução temporal, neste caso, torna-se

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t(\mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma})} = e^{-i(\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma})}, \quad (2.6)$$

onde chamou-se $\mathbf{S} = \frac{\Delta t}{\hbar} \mathbf{W}$.

O operador evolução temporal escrito na forma da Eq. (2.6) expandido em série de Taylor torna-se

$$e^{-i\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos(\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}) - i\text{sen}(\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \frac{(-1)^k (\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})^{2k}}{(2k)!} - i \frac{(-1)^k (\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})^{2k+1}}{(2k+1)!}. \quad (2.7)$$

Utilizando-se as propriedades das matrizes de Pauli $\sigma_i\sigma_i = I$ e a relação de comutação $[\sigma_i, \sigma_j] = 0$, onde I é a matriz identidade, tem-se

$$(\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})^{2k} = S^{2k}I, (\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})^{2k+1} = S^{2k}(\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}), \quad (2.8)$$

logo, a Eq. (2.7) torna-se

$$e^{-i\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \frac{(-1)^k S^{2k}I}{(2k)!} - i \frac{(-1)^k S^{2k}(\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})}{(2k+1)!}. \quad (2.9)$$

Pode ser observado que o primeiro termo da Eq. (2.8) pode ser escrito como

$$e^{-i\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos(S)I - i \frac{(-1)^k S^{2k}(\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})}{(2k+1)!}. \quad (2.10)$$

Multiplicando o numerador e o denominador do segundo termo por S e sabendo que

$$(\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = S_x\sigma_x + S_y\sigma_y + S_z\sigma_z = \begin{pmatrix} S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & -S_z \end{pmatrix},$$

a Eq. (2.10) pode ser escrita como

$$e^{-i\vec{S}\cdot\vec{\sigma}} = \begin{pmatrix} \cos(S) - i\text{sen}(S)\frac{S_z}{S} & -i\text{sen}(S)\frac{S_x - iS_y}{S} \\ -i\text{sen}(S)\frac{S_x + iS_y}{S} & \cos(S) + i\text{sen}(S)\frac{S_z}{S} \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

O operador evolução temporal pode, então, ser representado por matrizes onde S é o módulo do vetor \mathbf{S} e é dependente do vetor \mathbf{k} .

2.2 *Split-operator* para a interface grafeno/supercondutor

Considerando uma base $(u_A \ u_B \ v_A \ v_B)^T$, onde u_i e v_i ($i = A, B$) representam a i -ésima componente do spinor de duas componentes que descreve elétrons e buracos, respectivamente. O Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes (BdG) que descreve a interface NS é dado pela Eq. (2.70)

$$H_{BdG} = \begin{pmatrix} H - E_F + U & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -[H - E_F + U] \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

onde H é Hamiltoniano que no caso é uma matriz 2×2 que descreve partículas carregadas de baixa energia na fase normal, $U(\mathbf{r})$ é o potencial externo, E_F é a energia do nível de Fermi e $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0(\mathbf{r})e^{i\phi}$ é o *gap* superconductor dependente da posição, o qual, como foi mostrado na Seção 2.1, é diferente de zero somente na região supercondutora. Todos os elementos da matriz dada pela Eq. (2.12) são multiplicados por uma matriz identidade \mathbb{I} , de modo que H_{BdG} é uma matriz 4×4 .

A evolução temporal de um pacote de onda arbitrário inicial dado por

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \\ v_A \\ v_B \end{pmatrix} \times \psi(\mathbf{r}, 0), \quad (2.13)$$

é calculada como

$$|\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)\rangle = e^{-i\frac{H_{BdG}}{\hbar}\Delta t} |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (2.14)$$

O Hamiltoniano H_{BdG} pode convenientemente ser dividido em partes que dependem exclusivamente das coordenadas espaciais reais ou recíprocas, onde o primeiro termo apresenta apenas os termos que dependem das coordenadas do espaço recíproco \vec{k} e $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli, logo H_{BdG} torna-se

$$H_{BdG} = (H - E_F) \otimes \sigma_z + U(\mathbf{r}) \otimes \sigma_z + \Delta_0(\mathbf{r})(\cos\phi\mathbb{I} \otimes \sigma_x + \sin\phi\mathbb{I} \otimes \sigma_y). \quad (2.15)$$

A aplicação da expansão de Suzuki-Trotter na exponencial do operador de evolução temporal da Eq. (2.14) produz

$$e^{-i\frac{H_{BdG}}{\hbar}\Delta t} = e^{-i\mathbf{W}_r \otimes \sigma} e^{-i\mathbf{W}_k \otimes \sigma} e^{-i\mathbf{W}_r \otimes \sigma} + O(\Delta t^3), \quad (2.16)$$

onde $\mathbf{W}_r = (\Delta_0 \cos\phi, \Delta_0 \sin\phi, U) \frac{\Delta t}{2\hbar}$, $\mathbf{W}_k = (0, 0, H - E_F) \frac{\Delta t}{\hbar}$ e $O(\Delta t^3)$ é um erro de ordem Δt^3 , que vem da não comutatividade entre os operadores \mathbf{W}_r e \mathbf{W}_k . Cada uma das exponenciais da Eq. (2.16) é expandida de forma exata utilizando a expansão dada pela Eq. (2.11), logo, para o termo $e^{-i\mathbf{W}_r \otimes \sigma}$ tem-se:

$$e^{-i\mathbf{W}_r \otimes \sigma} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\sqrt{\Delta_0^2+U^2}\right) - i\sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\sqrt{\Delta_0^2+U^2}\right) \frac{U}{\sqrt{\Delta_0^2+U^2}} & -i\sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\sqrt{\Delta_0^2+U^2}\right) \frac{\Delta_0 e^{-i\phi}}{\sqrt{\Delta_0^2+U^2}} \\ -i\sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\sqrt{\Delta_0^2+U^2}\right) \frac{\Delta_0 e^{i\phi}}{\sqrt{\Delta_0^2+U^2}} & \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\sqrt{\Delta_0^2+U^2}\right) + i\sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\sqrt{\Delta_0^2+U^2}\right) \frac{U}{\sqrt{\Delta_0^2+U^2}} \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Cada elemento da matriz 2×2 também é uma matriz 2×2 , logo, a Eq. (2.17)

torna-se

$$e^{-i\mathbf{W}_r \otimes \sigma} = \mathbb{M}_r = \begin{pmatrix} A_- & 0 & B_- & 0 \\ 0 & A_- & 0 & B_- \\ B_+ & 0 & A_+ & 0 \\ 0 & B_+ & 0 & A_+ \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

onde $A_{\pm} = \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \sqrt{\Delta_0^2 + U^2}\right) \pm isen\left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \sqrt{\Delta_0^2 + U^2}\right) \frac{U}{\sqrt{\Delta_0^2 + U^2}}$ e $B_{\pm} = -isen\left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \sqrt{\Delta_0^2 + U^2}\right) \frac{\Delta_0 e^{\pm i\phi}}{\sqrt{\Delta_0^2 + U^2}}$.

Aplicando-se a expansão de Suzuki-Trotter para o primeiro termo de (2.15), tem-se

$$e^{-i\mathbf{W}_k \cdot \sigma} = \begin{pmatrix} \cos(W_k) - isen(W_k) \frac{W_k^{(z)}}{W_k} & -isen(W_k) \frac{W_k^{(x)} + iW_k^{(y)}}{W_k} \\ -isen(W_k) \frac{W_k^{(x)} - iW_k^{(y)}}{W_k} & \cos(W_k) + isen(W_k) \frac{W_k^{(z)}}{W_k} \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

onde $\mathbf{W}_k = (0, 0, H - E_F) \frac{\Delta t}{\hbar}$. Logo, a Eq. (2.19) torna-se

$$e^{-i\mathbf{W}_k \cdot \sigma} = \begin{pmatrix} e^{-i(H-E_F) \frac{\Delta t}{\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{i(H-E_F) \frac{\Delta t}{\hbar}} \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

onde o primeiro termo da diagonal principal da Eq. (2.20) pode ser reescrito como

$$e^{-i(H-E_F) \frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-iH \frac{\Delta t}{\hbar}} e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}}. \quad (2.21)$$

Sendo $H = \mathbf{h} \cdot \sigma$ e definindo $\boldsymbol{\omega} = (h_x, h_y, h_z) \frac{\Delta t}{\hbar}$, a Eq. (2.21) torna-se

$$e^{-i(H-E_F) \frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-i\boldsymbol{\omega} \cdot \sigma} e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}}. \quad (2.22)$$

Aplicando-se novamente a expansão de Suzuki-Trotter na primeira exponencial da Eq. (2.22), obtém-se:

$$e^{-i\boldsymbol{\omega} \cdot \sigma} = \begin{pmatrix} \cos(\boldsymbol{\omega}) - isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_z}{\omega} & -isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_x - i\omega_y}{\omega} \\ -isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_x + i\omega_y}{\omega} & \cos(\boldsymbol{\omega}) + isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_z}{\omega} \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

O procedimento é repetido para a segunda exponencial de (2.22) e tem-se

$$e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} = \begin{pmatrix} e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Logo, realizando o produto entre as Eqs. (2.23) e (2.24), obtém-se

$$e^{-i\boldsymbol{\omega} \cdot \sigma} e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} = \begin{pmatrix} (\cos(\boldsymbol{\omega}) - isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_z}{\omega}) e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} & -isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_x - i\omega_y}{\omega} e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} \\ -isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_x + i\omega_y}{\omega} e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} & (\cos(\boldsymbol{\omega}) + isen(\boldsymbol{\omega}) \frac{\omega_z}{\omega}) e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}} \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

De forma análoga, o segundo termo da diagonal principal da matriz (2.20) pode ser reescrito como

$$e^{i(H-E_F)\frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-i(-H)\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-i\boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}} e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}}, \quad (2.26)$$

onde $\boldsymbol{\omega}' = (-h_x, -h_y, -h_z)\frac{\Delta t}{\hbar}$, logo, a Eq. (2.26) torna-se

$$e^{-i\boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}} e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}} = \begin{pmatrix} \left(\cos(\boldsymbol{\omega}') - isen(\boldsymbol{\omega}')\frac{\omega'_z}{\omega'} \right) e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}} & -isen(\boldsymbol{\omega}')\frac{\omega'_x - i\omega'_y}{\omega'} e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}} \\ -isen(\boldsymbol{\omega}')\frac{\omega'_x + i\omega'_y}{\omega'} e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}} & \left(\cos(\boldsymbol{\omega}') + isen(\boldsymbol{\omega}')\frac{\omega'_z}{\omega'} \right) e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}} \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Por fim, substituindo as Eqs. (2.25) e (2.27) na Eq. (2.20), tem-se

$$e^{-i\mathbf{W}_k\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{M}_k = \begin{pmatrix} C_- & D_- & 0 & 0 \\ D_+ & C_+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C'_- & D'_- \\ 0 & 0 & D'_+ & C'_+ \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

onde $C_{\pm} = \left(\cos(\boldsymbol{\omega}) \pm isen(\boldsymbol{\omega})\frac{\omega_z}{\omega} \right) e^{iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}}$, $D_{\pm} = -isen(\boldsymbol{\omega})\frac{\omega_x \pm i\omega_y}{\omega} e^{iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}}$, $C'_{\pm} = \left(\cos(\boldsymbol{\omega}') \pm isen(\boldsymbol{\omega}')\frac{\omega'_z}{\omega'} \right) e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}}$, $D'_{\pm} = -isen(\boldsymbol{\omega}')\frac{\omega'_x \pm i\omega'_y}{\omega'} e^{-iE_F\frac{\Delta t}{\hbar}}$, $\boldsymbol{\omega} = (h_x, h_y, h_z)\frac{\Delta t}{\hbar}$ e $\boldsymbol{\omega}' = (-h_x, -h_y, -h_z)\frac{\Delta t}{\hbar}$.

A evolução de um pacote de ondas em um instante t , $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$, para $|\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)\rangle$ é dado como

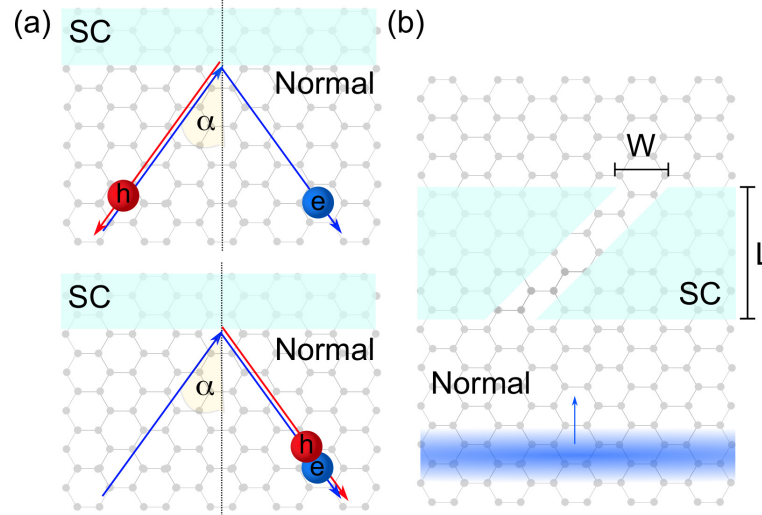
$$|\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)\rangle = \mathbb{M}_r \mathbb{M}_k \mathbb{M}_r |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle, \quad (2.29)$$

esse processo é realizado em três etapas: (i) multiplicando $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$ por \mathbb{M}_r , (ii) tomando a transformada de Fourier do spinor resultante e multiplicando por \mathbb{M}_k no espaço recíproco, e então (iii) levando o spinor resultante de volta ao espaço real, realizando uma transformação inversa de Fourier nele e multiplicando-o por \mathbb{M}_r novamente. O processo é repetido até que a propagação seja realizada por um determinado intervalo de tempo. O único erro envolvido neste procedimento é o erro $O(\Delta t^3)$ resultante da expansão de Suzuki-Trotter da exponencial do operador de evolução temporal, mas como é considerado um pequeno intervalo de tempo $\Delta t = 0.1$ fs, esse termo pode ser desprezado de agora em diante.

As densidades de probabilidade do elétron e buraco são calculadas a partir do pseudo-spinor elétron-buraco propagado dado por

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_{uA}(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_{uB}(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_{vA}(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_{vB}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

Figura 13 – Esboço dos dois sistemas baseados em grafeno considerados: (a) uma única interface entre as regiões normal (N) e supercondutor (SC), e (b) um canal inclinado (por 45°) de comprimento L e largura W em toda a região de SC. No primeiro caso, as retroreflexões (cima) e reflexões especulares (baixo) de Andreev serão investigadas calculando as trajetórias do elétron (e, azul) e buracos (h, vermelho), assumindo um ângulo de incidência α e descrevendo as quasi-partículas como pacotes de onda gaussianos circulares. Quanto ao último, serão investigadas as probabilidades de transmissão/reflexão de um elétron de entrada descrito por uma frente de onda gaussiana (gradiente azul).



Fonte: [52].

utilizando-se as integrais

$$P_e(t) = \int_{r_1}^{r_2} [|\psi_{uA}(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_{uB}(\mathbf{r}, t)|^2] d\mathbf{r} \quad (2.31)$$

$$P_h(t) = \int_{r_1}^{r_2} [|\psi_{vA}(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_{vB}(\mathbf{r}, t)|^2] d\mathbf{r}, \quad (2.32)$$

onde o intervalo $[r_1, r_2]$ limita a região de interesse no espaço. As probabilidades de reflexão (transmissão) são obtidas como os valores convergentes das Eqs. (2.31) e (2.32), integrados apenas dentro do espaço antes (depois) da região supercondutora, como $t \rightarrow \infty$.

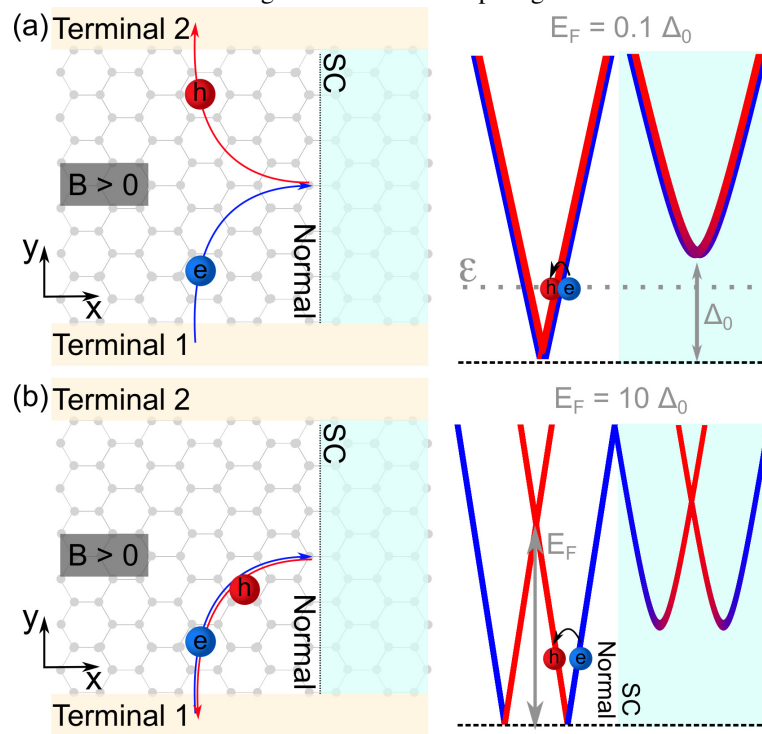
Utilizando a dinâmica de pacotes de onda pode-se revisitar o problema da reflexão de Andreev em interfaces N/SC onde utiliza-se materiais Dirac-Weyl. A Fig. 13(a) mostra um esboço da situação proposta, onde um elétron na região normal (grafeno) se propaga em direção à região supercondutora (sombreada) através de uma trajetória que forma um ângulo α com a direção normal à interface.

Também será investigado a propagação de uma frente de onda através de um canal aberto na região supercondutora, conforme ilustrado na Fig. 13 (b). Todo o procedimento realizado até aqui foi para uma interface entre uma monocamada de grafeno e um supercondutor, mas esse cálculo pode ser adaptado, por exemplo, para grafenos de duas e três camadas (na sequência de empilhamento ABC), apenas alterando o Hamiltoniano para o caso desejado.

O espalhamento de Andreev através de pacotes de onda estudados até aqui foram

realizados na ausência de campos externos, no entanto o método utilizado pode ser adaptado para a utilização de campos magnéticos que ajudam a controlar as trajetórias de elétrons, situação similar a estudada experimentalmente por Bhandari *et al.* [45].

Figura 14 – Esboço do dispositivo (painéis à esquerda): os elétrons vêm do terminal 1 para a região de campo magnético (normal), onde suas trajetórias são desviadas em direção à região supercondutora, devido à força de Lorentz. As setas pretas indicam as direções x e y . Em (a), onde a energia de Fermi E_F é menor do que o gap SC Δ_0 (veja o painel direito), o buraco que sofre espalhamento de Andreev é então coletado no terminal 2. Em (b), onde $E_F > \Delta_0$ (ver painel direito), o buraco que sofre espalhamento de Andreev é coletado de volta no terminal 1. O campo magnético controla as trajetórias e, conseqüentemente, o ângulo de incidência na interface N/SC, alterando assim a razão elétron-buraco na função de onda de saída. A camada de grafeno é ilustrada com alguns átomos por uma questão de simplicidade, mas as amostras reais nos cálculos são grandes o suficiente para garantir a validade do modelo contínuo.



Fonte: [53].

Um esboço do sistema proposto onde há a presença de campo magnético é mostrado na Fig. 14. Um pacote de ondas eletrônico vindo do terminal 1 (T_1) entra na região de campo magnético, onde sua trajetória é desviada em uma órbita de Lorentz. Os pacotes de onda é espalhado por uma interface N/SC, onde há a conversão elétron-buraco por reflexão de Andreev. Os pacotes de onda do buraco na saída é, portanto, analisado em T_1 ou no terminal 2 (T_2), dependendo do nível de Fermi E_F : se E_F é menor do que o gap SC Δ_0 , o buraco que preenche a banda de condução é refletido specularmente e se move em direção a T_2 , como mostrado na Fig. 14 (a). Inversamente, se $E_F > \Delta_0$, o buraco da banda de valência é retro-refletido de volta para T_1 , como pode ser visto na Fig. 14 (b). Em qualquer caso, a razão elétron/buraco na função de onda refletida depende fortemente do ângulo de incidência de entrada do elétron, algo que é

facilmente controlado neste sistema, uma vez que diferentes campos levam a diferentes raios da órbita de Lorentz e o elétron entra sempre na mesma distância da área de SC [40]. O método de propagação do pacotes de onda proposto aqui e o dispositivo de foco magnético sugerido esboçado na Fig. 14 podem ser facilmente adaptados para o estudo do espalhamento de Andreev em outros materiais bidimensionais [54, 55]. A dependência da probabilidade de transmissão (reflexão) $T_{12(11)}$ entre os terminais no campo externo, bem como no nível de Fermi do sistema, podem ser investigadas em detalhes, exibindo assinaturas reflexão especular de Andreev ou retro-reflexão controladas por campo magnético no grafeno, apenas adaptando a técnica utilizada para o caso onde não há a presença de campo.

O Hamiltoniano BdG dado pela Eq. (2.15), para elétrons de baixa energia no grafeno, agora reescrito levando em conta a presença de um campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, é dividido como

$$H_{BdG} = (H - E_F) \otimes \sigma_z - e\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \otimes \sigma_z + \Delta_0(\mathbf{r})(\cos\phi \mathcal{I} \otimes \sigma_x + \sin\phi \mathcal{I} \otimes \sigma_y), \quad (2.33)$$

onde o primeiro termo depende de coordenadas recíprocas, enquanto os termos restantes dependem apenas de coordenadas espaciais reais. Aplicar a expansão de Suzuki-Trotter no operador de evolução temporal leva à Eq. (2.16), onde agora $\mathbf{W}_r = (\Delta_0 \cos\phi, \Delta_0 \sin\phi, -e\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})\Delta t/2\hbar$, $\mathbf{W}_k = (0, 0, H - E_F)\frac{\Delta t}{\hbar}$, e $O(\Delta t^3)$ é um erro de ordem Δt^3 , vindo da não comutatividade entre os operadores $\mathbf{W}_r \otimes \boldsymbol{\sigma}$ e $\mathbf{W}_k \otimes \boldsymbol{\sigma}$. Finalmente, a identidade dada pela Eq. (2.11) é usada para resolver a exponencial de cada parte do Hamiltoniano BdG, com a presença de campo magnético, de forma exata.

Usando a Eq. (2.11), os termos exponenciais no operador de evolução temporal na Eq. (2.16) são reescritos como

$$e^{-i\mathbf{W}_r \otimes \boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} W & P^- & Z^- & 0 \\ R^- & W & 0 & Z^- \\ Z^+ & 0 & W & P^+ \\ 0 & Z^+ & R^+ & W \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

onde

$$\begin{aligned}
W &= \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\Delta_0\right) \cos\left(|\vec{A}|\frac{\Delta t}{2\hbar}\right), \\
R^\pm &= \text{sen}\left(|\vec{A}|\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\Delta_0\right) \frac{(\pm iA_x - A_y)}{|\vec{A}|}, \\
P^\pm &= \text{sen}\left(|\vec{A}|\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\Delta_0\right) \frac{(\pm iA_x + A_y)}{|\vec{A}|}, \\
Z^\pm &= -i\text{sen}\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\Delta_0\right) e^{\pm i\phi},
\end{aligned} \tag{2.35}$$

$$e^{-i\mathbf{W}_k \otimes \boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} C^+ & D_- & 0 & 0 \\ D_+ & C^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C^- & D'_- \\ 0 & 0 & D'_+ & C^- \end{pmatrix}, \tag{2.36}$$

onde $C^\pm = \cos(\omega)e^{\pm iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}}$, $D_\pm = -i\text{sen}(\omega)\frac{\omega_x \pm i\omega_y}{\omega}e^{iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}}$, $D'_\pm = -i\text{sen}(\omega)\frac{\omega_x \pm i\omega_y}{\omega}e^{-iE_F \frac{\Delta t}{\hbar}}$, e $\omega = v_F \Delta t \mathbf{k}$.

Uma vez que o operador de evolução temporal é definido, a propagação de um pacote de onda é obtida simplesmente (i) multiplicando $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$ pela matriz na Eq. (2.34) no espaço real, (ii) tomando a transformada de Fourier do spinor resultante e multiplicando-a pela matriz na Eq. (2.36) no espaço recíproco, e então (iii) tomando a transformada inversa de Fourier do spinor resultante para multiplicá-lo novamente pela matriz na Eq. (2.34), nas coordenadas do espaço real. Isso leva a $|\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)\rangle$ e o processo é repetido até que a propagação seja realizada por um determinado intervalo de tempo.

Da mesma forma que no caso onde há ausência de campo magnético, essa abordagem é exata, exceto pelos erros numéricos envolvidos nas transformadas de Fourier e o erro $O(\Delta t^3)$ que é, a partir de agora, desprezado, pois será considerado um pequeno intervalo de tempo, $\Delta t = 0.1$ fs.

A trajetória do elétron (buraco) é obtida pelos valores esperados das coordenadas x e y calculados com os componentes $\Psi_{u(v)A}$ e $\Psi_{u(v)B}$ dos pacotes de onda. As probabilidades de transmissão (reflexão) $T_{12(11)}$ são obtidas a partir dos valores de convergência das Eqs. (2.31) e (2.32), integrados apenas dentro do espaço após (antes) da região do campo magnético na Fig.14, ou seja, em $T_{2(1)}$. Serão consideradas as probabilidades de elétron e buraco como $T_{12(11)} = P_e - P_h$, de modo que os valores de $T_{12(11)}$ na seção seguinte variam entre -1 (função de onda de buraco completo) para +1 (função de onda eletrônica completa).

3 INTERFACE N/SC EM MATERIAIS DIRAC-WEYL (GRAFENO)

Neste capítulo, serão considerados os resultados obtidos pelo método proposto no Capítulo 2 em relação à reflexão na interface N/SC em grafeno revisitando os resultados obtidos por Beenakker [40].

Para a função envelope multiplicando o pseudo-spin na Eq. (2.13), é assumido um pacote de ondas gaussiano dado por

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{d\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2d^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} \right], \quad (3.1)$$

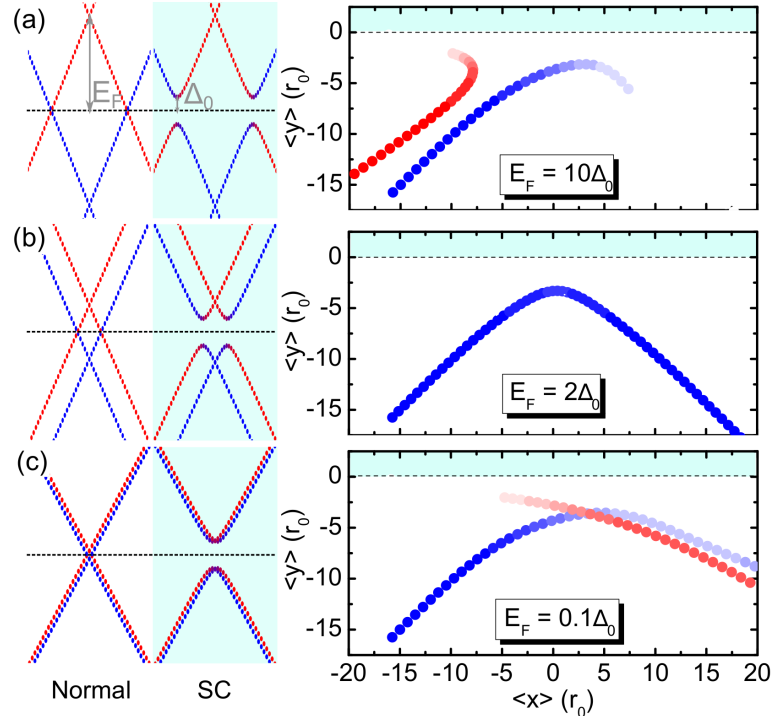
que descreve a propagação de um elétron de baixa energia no grafeno. A estrutura de banda de materiais do tipo Dirac-Weyl (por exemplo, grafeno) em torno dos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' da primeira zona de Brillouin pode ser aproximada por funções lineares que seguem da diagonalização do Hamiltoniano efetivo dada pela Eq. (1.64)

$$H_D^\pm = \hbar v_F (\pm k_x \sigma_x + k_y \sigma_y), \quad (3.2)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi e \pm referem-se aos cones $\mathbf{K}(+)$ e $\mathbf{K}'(-)$, de modo que os elétrons de baixa energia neste material se comportam como férmions de Dirac sem massa como já dito anteriormente. Esses cones são relacionados por simetria de reversão temporal, portanto, aqui será considerado apenas o caso dos elétrons em torno de K , enquanto o comportamento dos elétrons em K' são previstos a partir dos resultados obtidos para K apenas aplicando transformações diretas devido à mudança de sinal na Eq. (3.2). Este Hamiltoniano entra na Eq. (2.36) através de $\omega = \mathbf{h}\Delta t/\hbar$ e $\omega' = -\mathbf{h}\Delta t/\hbar$, neste caso, construídos reescrevendo $H_\pm = (\pm h_x, h_y, 0) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ com $\mathbf{h} = \hbar v_F \mathbf{k}$.

O potencial externo é considerado como $U(\mathbf{r}) \equiv 0$ e o *gap* supercondutor $\Delta(\mathbf{r})$ é assumido como uma função degrau que é zero para $y \leq 0$ e Δ_0 caso contrário. Também é assumido uma fase supercondutora nula, $\phi = 0$. A partir de agora, as energias serão escritas em unidades do *gap* SC, Δ_0 , e as coordenadas espaciais em unidades de $r_0 = \hbar v_F/\Delta_0$. A energia do pacote de ondas é fixada como $\varepsilon = 0.7\Delta_0$, entrando na Eq. (3.1) através do módulo do vetor de onda, dado por $k_0 = (\varepsilon + E_F)/\Delta_0 r_0$ em no caso da monocamada de grafeno. A largura do pacote de ondas é fixada como $d = 6.67r_0$, o que representa uma largura $\Delta E \approx 0.15\Delta_0$ no espaço de energia no caso da monocamada.

Figura 15 – Estruturas de banda nas regiões normal e SC (esquerda) e trajetórias dos pacotes de ondas (direita), considerando um ângulo de incidência $\alpha = 45^\circ$ e três valores de energia de Fermi: (a) $E_F = 10\Delta_0$, (b) $E_F = 2\Delta_0$ e (c) $E_F = 0,1\Delta_0$. As regiões SC são destacadas como áreas sombreadas nas Figs.. O mapa de cores nos painéis da direita é tal que vermelho (azul) representam pacotes de ondas de buracos (elétrons), enquanto cores mais escuras representam densidades de probabilidade mais altas.



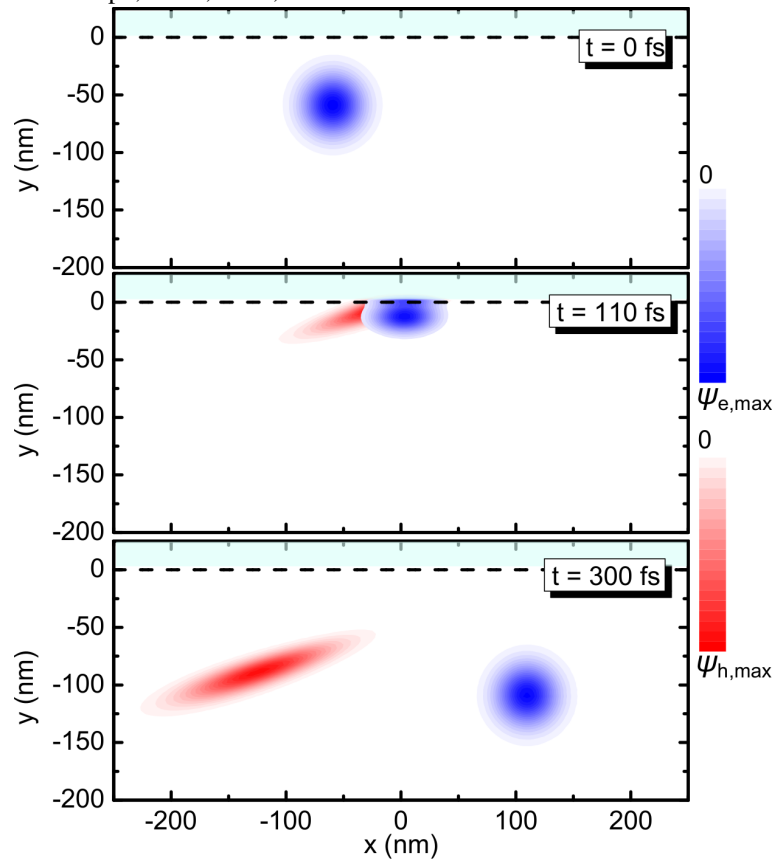
Fonte: [52].

3.1 Monocamada de grafeno

Os resultados discutidos aqui para monocamada de grafeno, assim como os que estudaremos em breve na Seção (3.2) para bicamada de grafeno, revisitam os estudos teóricos de Beenakker e Ludwig [40, 41], respectivamente. Já para o caso de tricamada de grafeno não foram encontrados estudos na literatura. Os cálculos apresentados aqui também podem ser facilmente adaptados, por exemplo para interfaces N/SC para poucas camadas de fosforeno, onde os elétrons de baixa energia também são descritos por um Hamiltoniano 2×2 que pode ser facilmente reescrito em termos do vetor \mathbf{h} previamente definido [56].

A Fig. 15 mostra os diagramas de banda nas regiões normal (branco) e supercondutora (sombreado), para diferentes valores do nível de Fermi. Quando o nível de Fermi é muito maior que o *gap* supercondutor, $E_F \gg \Delta_0$, os elétrons com energia $\varepsilon < \Delta_0$ incidentes na região supercondutora são refletidos parcialmente como buracos. Se a incidência for normal, a conversão elétron-buraco ocorre com probabilidade unitária. Por outro lado, se a trajetória do elétron incidente faz com com o eixo vertical um ângulo α diferente de zero (ver trajetórias na Fig. 15 para $\alpha = 45^\circ$), uma reflexão normal (elétron) também é esperada. Além disso, espera-se

Figura 16 – Registros instantâneos das projeções do pacote de ondas sobre os estados de elétron (azul) e buraco (vermelho), para um pacote de onda em grafeno sendo refletido por uma região supercondutora (área sombreada) em $y > 0$, assumindo $E_F = 10\Delta_0$. Os registros instantâneos são obtidos em três instantes diferentes no tempo, isto é, $t = 0, 110$ e 300 fs.



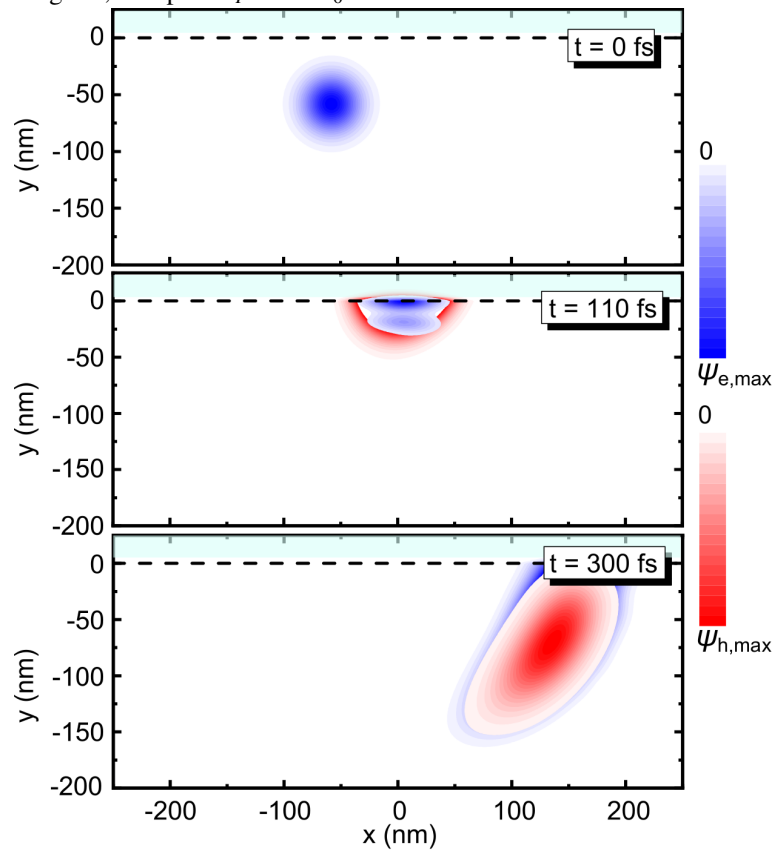
Fonte: [52].

que o buraco refletido se propague ao longo da mesma trajetória do elétron incidente, mas com direção de propagação oposta, que é conhecida como retrorreflexão de Andreev. Isso é verificado na trajetória dos elétrons (símbolos azuis) e buracos (símbolos vermelhos) na Fig. 15 (a), onde cores mais escuras (mais brilhantes) representam maior (menor) densidade de probabilidade. Um pequeno deslocamento Goos-Hänchen também é observado entre as trajetórias do elétron e do buraco [57]. O comportamento é, no entanto, diferente se E_F estiver na mesma ordem de magnitude que Δ_0 , como na Fig. 15 (b), onde quase nenhuma conversão elétron-buraco é observada. Além disso, se $E_F \ll \Delta_0$, a função de onda convertida em buraco se propaga na mesma direção que o elétron refletido, conforme se verifica em 15 (c), que é conhecido como reflexão especular de Andreev.

As Figs. 16 e 17 ilustram as retrorreflexões e reflexões especulares de Andreev, respectivamente, mostrando os registros instantâneos das distribuições de densidade de probabilidade de elétron (azul) e buraco (vermelho) em três instantes de tempo diferentes. No primeiro (último), os pacotes de onda de buracos e elétrons dispersos se propagam claramente em direções

opostas (iguais). Embora não seja fácil observar experimentalmente registros instantâneos da propagação do pacote de ondas como os mostrados nas Figs. 16 e 17, ainda é possível rastrear as trajetórias e densidades de probabilidade de elétrons e buracos ao longo do sistema via microscopia de varredura [58], uma técnica que tem sido considerada como uma das ferramentas mais convenientes para verificar experimentalmente funções de onda e propriedades de transporte em sistemas de baixa dimensão, que foi recentemente empregada com sucesso no contexto específico de reflexões de Andreev em interfaces N/SC baseadas em monocamada de grafeno [45].

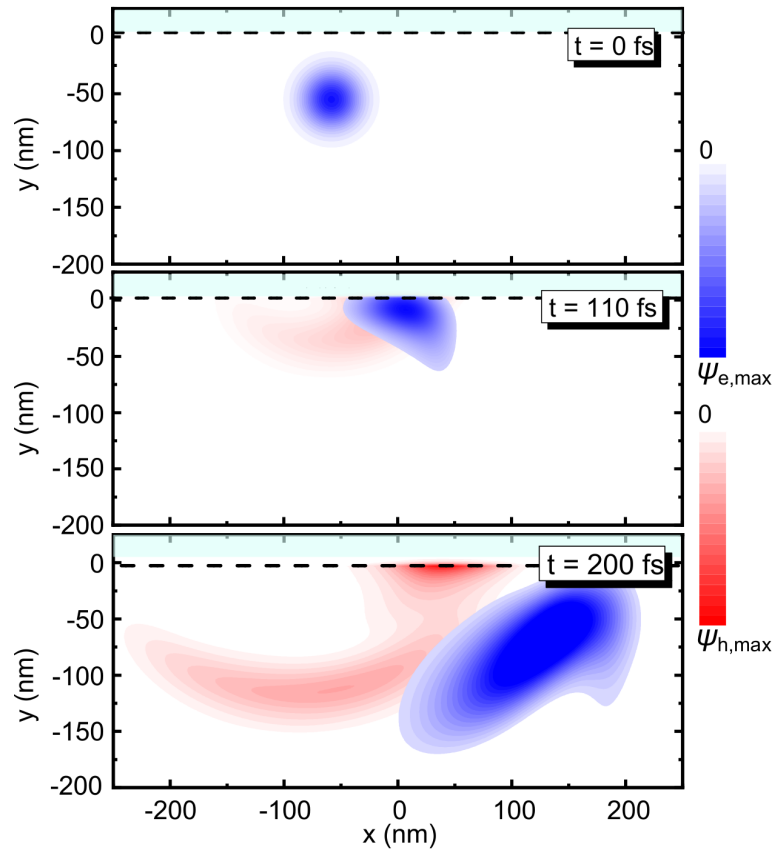
Figura 17 – Similar a Fig. 16, mas para $E_F = 0.1\Delta_0$.



Fonte: [52].

Considerando a conservação do momento ao longo da direção x do sistema, pode-se entender a direção de propagação da reflexão de Andreev do buraco da seguinte forma: no caso da monocamada de grafeno, o elétron incidente tem um momento $k_0 = (E_F + \varepsilon)/\hbar v_F$, enquanto o buraco que sofreu espalhamento de Andreev tem momento $k_h = (E_F - \varepsilon)/\hbar v_F$. A conservação do momento ao longo da direção horizontal requer $k_0 \sin \alpha = k_h \sin \alpha_h$, onde α_h é o ângulo de reflexão do buraco. Isso sugere a existência de um ângulo de incidência crítico além do qual o buraco espalhado se propaga com $\alpha_h = \pi/2$. Um caso interessante acontece quando $\varepsilon = E_F$, onde este ângulo de incidência crítica é zero e qualquer buraco que venha do

Figura 18 – Similar a Fig. 16, mas para um pacote de ondas com a mesma energia do nível de Fermi, $\varepsilon = E_F = 0.1\Delta_0$.



Fonte: [52].

espalhamento de Andreev tem que se propagar lateralmente ao longo do eixo x , com momento zero, independentemente do ângulo de incidência α . Esta situação é ilustrada na Fig. 18, que é semelhante à Fig. 17, mas para um elétron incidente com energia $\varepsilon = 0.1\Delta_0 = E_F$. Na condição de pacote de ondas em monocamada de grafeno, um pacote de ondas de buraco de momento zero exibiria de fato uma evolução temporal na forma de um anel circular, ver ref. [[59, 60, 61]], assim como o observado na Fig. 18. Fica claro que, enquanto o elétron refletido se propaga para trás, o buraco se propaga para os lados, o que garante que buracos não possam ser coletados na região de onde os elétrons vieram.

Este efeito está intimamente relacionado ao conceito básico por trás da chamada "*crossed andreev reflection*" (CAR), em português conhecida como reflexão cruzada de Andreev, onde uma junção *pnp* é configurada de forma que os elétrons que chegam tenham a mesma energia que E_F , evitando assim buracos espalhados na região de origem, enquanto o nível de Fermi na região de escoamento é definido de forma a garantir que apenas buracos sejam coletados nessa região [62, 63, 64]. Isso sugere que, ajustando adequadamente o potencial e os níveis de Fermi, pode-se usar convenientemente o método proposto aqui também no estudo de CAR e

fenômenos de co-tunelamento em materiais de Dirac-Weyl.

Dentro do modelo Blonder-Tinkham-Klapwijk (BTK), a condutividade é proporcional a

$$\int_0^{\pi/2} [1 - r(\varepsilon, \alpha) + r_A(\varepsilon, \alpha)] \cos \alpha d\alpha, \quad (3.3)$$

onde r e r_A representam probabilidades de observar um elétron e um buraco refletido, respectivamente, após o espalhamento do elétron incidente pela interface SC. Na interface N/SC do grafeno, sabe-se que no caso de retro-reflexão (especular), ou seja, para $E_F > \Delta_0$ ($E_F < \Delta_0$), aumentar a tensão V leva a um aumento (diminuição) na condutividade [40]. Não está no objetivo desta tese calcular o valor exato da condutividade. No entanto, pode-se usar o método aqui proposto para verificar esse resultado. O núcleo de integração $I(\varepsilon, \alpha) = [1 - r(\varepsilon, \alpha) + r_A(\varepsilon, \alpha)]$ na expressão BTK é plotado como uma função do ângulo de incidência na Fig. 19, assumindo dois valores para o nível de Fermi. O aumento da energia do pacote de ondas incidente, que desempenha o papel da tensão V no modelo BTK, leva a curvas $I \times \alpha$ com área consistentemente menor quando $E_F > \Delta_0$, como na Fig. 19 (a). Conseqüentemente, a integral de I em relação ao ângulo α diminui com ε , sugerindo assim uma condutividade que diminui com V . O oposto é verdadeiro para $E_F < \Delta_0$, como mostrado na Fig. 19 (b), onde aumentando a energia do pacote de ondas ocorre aumento da área de $I \times \alpha$ e, conseqüentemente, da condutividade.

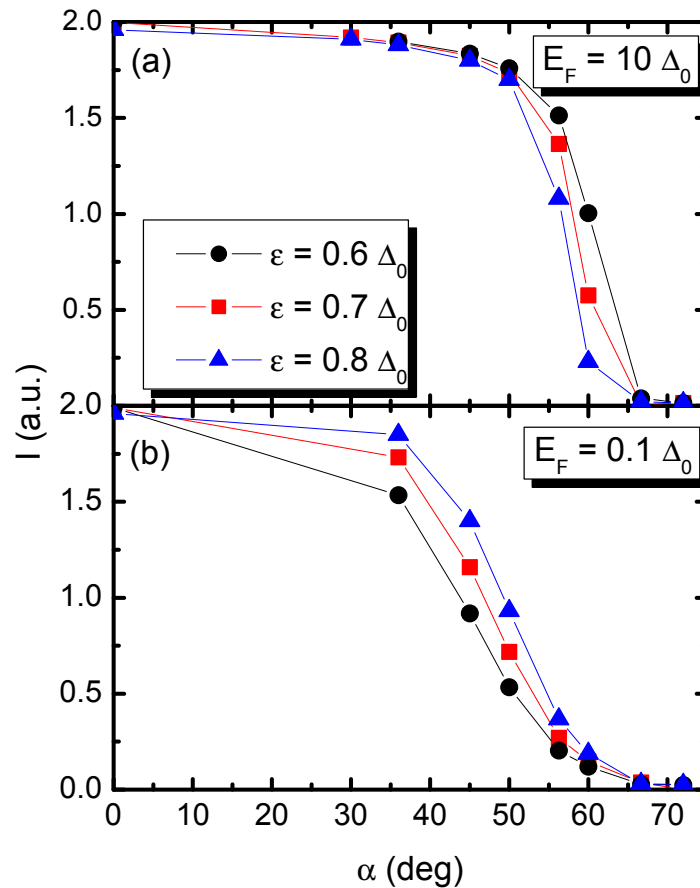
3.2 Bicamada e tricamada de grafeno

O cálculo realizado para a monocamada de grafeno pode ser facilmente adaptado, por exemplo para uma bicamada ou tricamada (na ordem de empilhamento ABC) de grafeno usando a Eq. (1.71), onde escolhe-se N igual a dois (três) para bicamada (tricamada), onde γ é o parâmetro de hopping entre as camadas.

Como já mencionado anteriormente, uma vantagem do método aqui proposto é sua flexibilidade para ser facilmente adaptado a outros materiais onde os portadores de carga também podem ser descritos como quasi-partículas de Dirac-Weyl. Como exemplo, calculamos a evolução temporal e a dispersão de pacotes de ondas em interfaces N/SC baseadas em bicamada e tricamada de grafeno. As Figs. 20(a) e 20(b) mostram o núcleo de integração no modelo BTK plotado em função do ângulo incidente α , assumindo dois valores de nível de Fermi, nos casos de bicamada e tricamada, respectivamente.

Para $E_F > \Delta_0$, o integrando I diminui monotonicamente com α em todos os casos,

Figura 19 – Núcleo de integração no modelo BTK de condutividade em função do ângulo de incidência do pacote de ondas, assumindo pacotes de ondas com energias diferentes ε e níveis de Fermi (a) $E_F = 10\Delta_0$ e (b) $E_F = 0,1\Delta_0$.

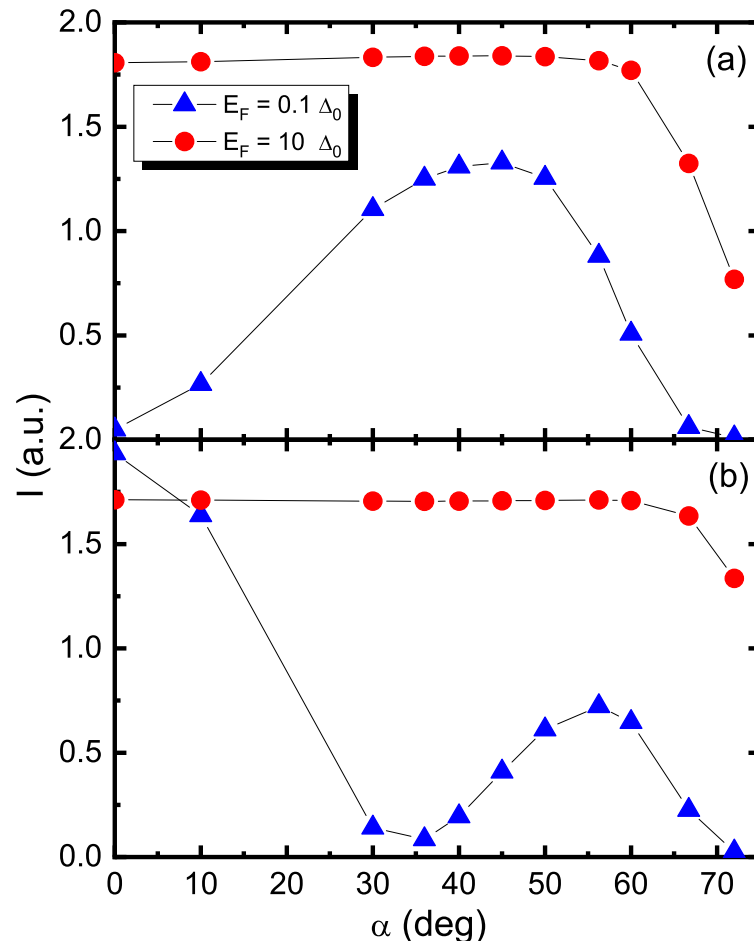


Fonte: [52].

embora com área maior (menor) para o caso do grafeno tricamada (monocamada), levando assim a maiores (menores) condutividade. É observado que os resultados na Fig. 20 para $E_F > \Delta_0$ não convergem para 2 com $\alpha \rightarrow 0^\circ$, como seria de esperar (ver, por exemplo, Fig. 19) por exemplo a partir de um cálculo de onda plana. Isso se deve à largura finita dos pacotes de ondas no espaço recíproco considerados aqui, o que resulta em uma distribuição de energia para o pacote de ondas relevante no caso de $E_F > \Delta_0$. Esta questão é menos relevante para a monocamada de grafeno, onde sua dispersão linear de energia garante que a largura do pacote de onda em energia seja proporcional à sua largura em momento. A dispersão de energia na bicamada (tricamada) de grafeno, por outro lado, exibe uma dependência de segunda (terceira) ordem em \vec{k} , que produz distribuições mais amplas em energia para o pacote de ondas, em comparação com o caso monocamada [34]. Como consequência, os casos de grafeno bicamada e tricamada requerem cálculos com distribuições de momento mais estreitas, ou seja, pacotes de ondas mais amplos no espaço real, a fim de manter toda a distribuição de energia do pacote

de ondas abaixo do *gap* supercondutor. De fato, foi verificado que aumentando a largura do pacote de onda (assim, estreitando a distribuição de energia) leva a I em $\alpha = 0^\circ$ consistentemente mais próximo de 2. No entanto, lidar com pacotes de onda tão largos em uma simulação de propagação temporal torna o sistema computacionalmente mais custoso, devido à necessidade de um esforço computacional muito maior, o que torna inviável a reprodução da Fig. 20 com grandes pacotes de onda. Portanto, por uma questão de consistência, foi decidido manter esses resultados na Fig. 20, assumindo um pacote de ondas com a mesma largura das outras Figs., e discuti-los apenas de forma qualitativa.

Figura 20 – Núcleo de integração do modelo de condutividade BTK em função do ângulo de incidência do pacote de onda, assumindo pacotes de onda com energia $\varepsilon = 0,7\Delta_0$ espalhados pelas interfaces N/SC baseadas em (a) bicamada (b) e tricamada de grafeno. Dois valores de nível de Fermi, $E_F = 0,1\Delta_0$ e $E_F = 10\Delta_0$, são considerados.



Fonte: [52].

Por outro lado, para $E_F < \Delta_0$, observa-se que o valor do integrando I para $\alpha = 0^\circ$ no caso da bicamada é nulo, o que significa que, em incidência normal, o elétron é totalmente refletido pela barreira e nenhum buraco se propaga através da região normal. Isso contrasta fortemente com os resultados observados para o grafeno monocamada e tricamada, onde o

integrando converge para 2 com $\alpha \rightarrow 0^\circ$, e se origina da estrutura de bandas quadrática de elétrons de baixa energia na bicamada de grafeno, que difere dos casos de mono e tri camada de grafeno. O núcleo de integração I na bi e tricamada de grafeno exibem dependência não monotônica do ângulo de incidência α , o que também difere dos resultados observados para o caso da monocamada de grafeno.

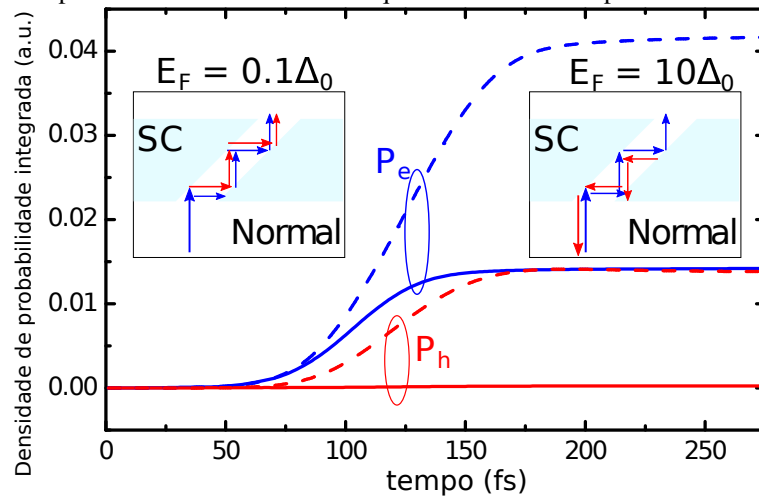
O comportamento do integrando I em função de α observado nas Figs. 19 e 20(a) são consistentes com estudos anteriores sobre monocamada e bicamada de grafeno realizados por Beenakker [40] e Ludwig [41], respectivamente, onde esta quantidade foi calculada combinando modos quânticos na interface N/SC para alguns casos específicos. Isso ajuda a validar o modelo aqui proposto, que, como mencionado anteriormente, também nos permitiu investigar interfaces N/SC de tricamada de grafeno, um caso que ainda não é discutido na literatura em detalhes, até onde sabemos.

3.3 Canal com *gap* nulo dentro da região SC

Com o objetivo de ilustrar o método aqui proposto para o estudo de interfaces N/SC com forma e perfil arbitrários, serão mostrados nessa seção, como um exemplo de caso, os resultados da propagação de uma frente de onda através de um canal aberto na região SC, conforme mostrado na Fig. 13(b). O canal dentro do supercondutor é inclinado em 45° em relação ao eixo vertical, de modo que a primeira reflexão pela interface N/SC faz o elétron se propagar horizontalmente.

A evolução temporal de P_e (azul) e P_h (vermelho), integrados na região após o supercondutor ($[y_1, y_2] = [L/2, \infty]$ e $[x_1, x_2] = [-\infty, \infty]$, ver Fig. 13 (b)) é mostrada na Fig. 21, assumindo $E_F = 10\Delta_0$ (sólido) e $E_F = 0, 1\Delta_0$ (tracejada). Em geral, todos os valores de P_e e P_h são pequenos, devido ao fato de que a maior parte da frente de onda de entrada dos elétrons atingem a região SC ao lado da entrada do canal, e apenas uma pequena fração dela é realmente capaz de entrar no região do canal. A probabilidade de encontrar um elétron após a região SC é sempre diferente de zero e é maior para $E_F = 0.1\Delta_0$. No entanto, a probabilidade de buracos cruzarem o canal é diferente de zero apenas para $E_F = 0.1\Delta_0$. As trajetórias de elétrons (azul) e buracos (vermelho) ilustradas nos canais ajudam a entender essa característica. Como o elétron é refletido horizontalmente (verticalmente) pela primeira (segunda) interface N/SC no canal, os buracos resultantes se propagam em uma direção que depende de E_F . Para $E_F > \Delta_0$, os buracos retrorefletidos que surgem em cada reflexão N/SC se propagam para trás ao longo da mesma

Figura 21 – Densidades de probabilidade integradas em função do tempo de elétron (azul) e buraco (vermelho) na região normal além de um canal na região supercondutora com $W = 300 \text{ \AA}$, $L = 300 \text{ \AA}$, assumindo energias de Fermi $E_F = 10\Delta_0$ (sólido) e $E_F = 0,1\Delta_0$ (tracejado). As setas nos canais ilustram as trajetórias esperadas de elétrons e buracos que sofrem reflexões pelas interfaces normal-SC.



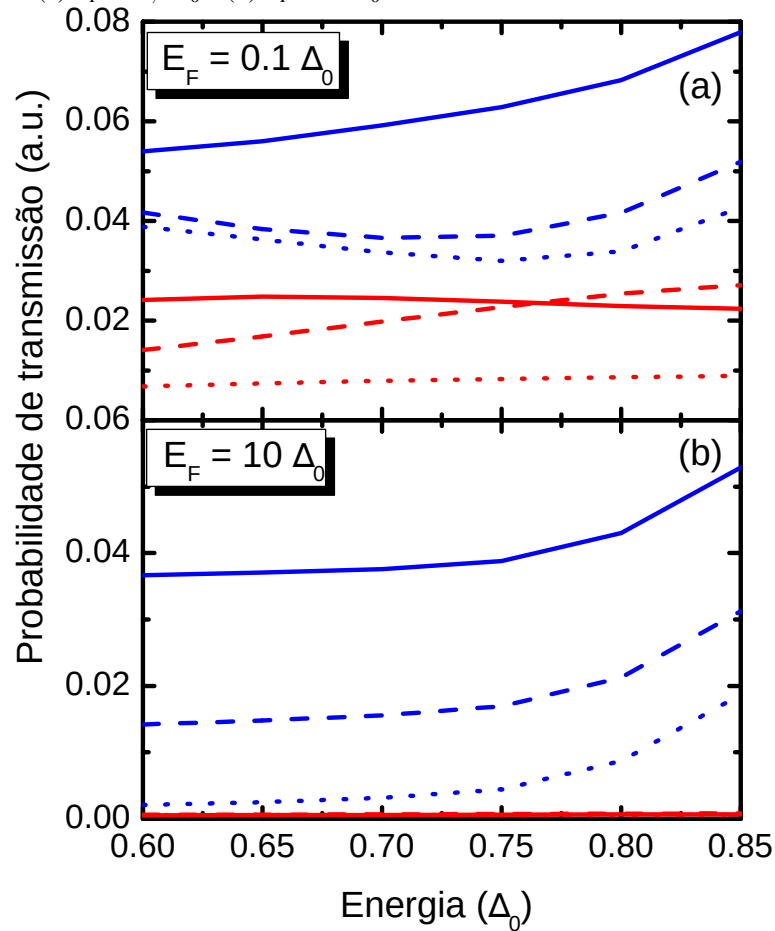
Fonte: [52].

trajetória do elétron em andamento, portanto, nenhum buraco é capaz de atravessar o canal. Por outro lado, para $E_F < \Delta_0$, buracos refletidos especularmente que surgem em cada reflexão N/SC se propagam junto com o elétron através do canal e, eventualmente, fazem seu caminho através dele, resultando em probabilidade diferente de zero de se observar buracos além do canal.

A dependência das probabilidades de transmissão de elétrons e buracos em um canal de largura W e comprimento L são mostradas nas Figs. 22 e 23, respectivamente. Para $E_F = 0.1\Delta_0$ e um comprimento fixo $L = 300 \text{ \AA}$, os resultados na Fig. 22 (a) mostram que aumentando a largura W do canal de 200 \AA para 400 \AA melhora a probabilidade de transmissão de buraco para pacotes de ondas de energias inferiores a $\approx 0.775\Delta_0$. Para energias mais altas, a probabilidade de transmissão do buraco para $W = 300 \text{ \AA}$ é apenas ligeiramente menor do que para $W = 400 \text{ \AA}$. No entanto uma probabilidade significativa de transmissão de buraco é observada apenas para $E_F = 0.1\Delta_0$. Para $E_F = 10\Delta_0$, a Fig. 22 (b) mostra uma probabilidade de transmissão de elétrons que aumenta monotonicamente com a energia do pacote de ondas, enquanto as probabilidades de buraco sempre são muito pequenas. Qualitativamente, esse resultado persiste para toda a faixa de energia considerada, isto é, de $\varepsilon = 0.6 \Delta_0$ a $\varepsilon = 0.85 \Delta_0$. Conclusões semelhantes também são tiradas dos resultados na Fig. 23, onde o aumento do comprimento L do canal demonstrou produzir resultados equivalentes como a diminuição da largura W .

O valor de 45° para o ângulo de inclinação do canal foi escolhido apenas por conveniência, a fim de facilitar a visualização dos resultados. Pode-se verificar facilmente que os

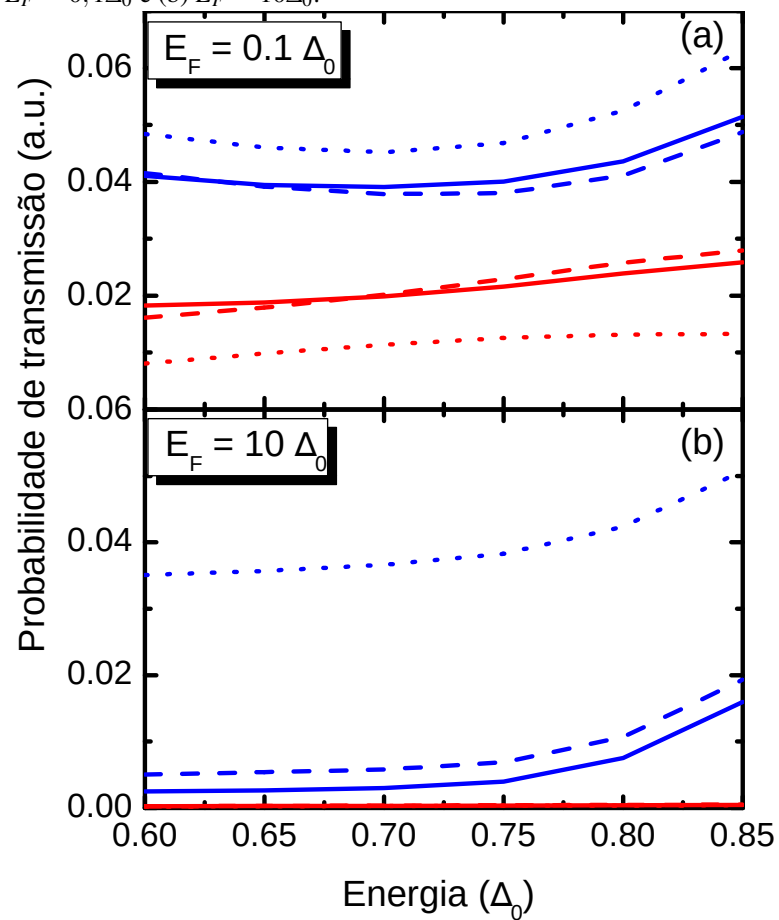
Figura 22 – Probabilidade de transmissão integrada em função da energia da frente de onda de entrada de elétron (azul) e buraco (vermelho), assumindo um canal na região supercondutora com comprimento $L = 300 \text{ \AA}$, e assumindo larguras $W = 200 \text{ \AA}$ (pontilhado), 300 \AA (tracejada) e 400 \AA (sólido). As energias de Fermi são (a) $E_F = 0,1\Delta_0$ e (b) $E_F = 10\Delta_0$.



Fonte: [52].

mesmos resultados qualitativos seriam observados para qualquer ângulo. Na verdade, mesmo um canal vertical linear mostra uma probabilidade de transmissão diferente de zero para buracos no caso $E_F < \Delta_0$. No entanto, este efeito é muito mais fraco para um canal vertical, uma vez que a conversão elétron-buraco requer que a função de onda salte para frente e para trás entre as interfaces normal/SC no canal, o que é otimizado conforme o ângulo entre o canal e o eixo vertical aumenta.

Figura 23 – Probabilidade de transmissão integrada em função da energia da frente de onda de entrada de elétron (azul) e buraco (vermelho), assumindo um canal na região supercondutora com largura $W = 300 \text{ \AA}$, para comprimentos $L = 200 \text{ \AA}$ (pontilhado), 350 \AA (tracejada) e 400 \AA (sólido). As energias de Fermi são (a) $E_F = 0,1\Delta_0$ e (b) $E_F = 10\Delta_0$.



Fonte: [52].

4 TRAJETÓRIA DO ELÉTRON INCIDENTE GUIADA POR CAMPO MAGNÉTICO

Neste capítulo, serão abortados os resultados para o caso onde as trajetórias dos elétrons incidentes são controladas por um campo magnético. Assim como no Capítulo anterior, definimos $r_0 = \hbar v_F / \Delta_0$ como a unidade de comprimento e Δ_0 como a unidade de energia. A unidade natural do campo magnético neste caso é $\Phi_0 / \pi r_0^2$, onde $\Phi_0 = h / 2e$ é o fluxo magnético quantizado.

Neste caso será considerado um pacote de ondas gaussiano inicial da forma

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{d\sqrt{2\pi}} \exp \left[\frac{x^2 + (y - y_0)^2}{2d^2} + ik_0 y \right], \quad (4.1)$$

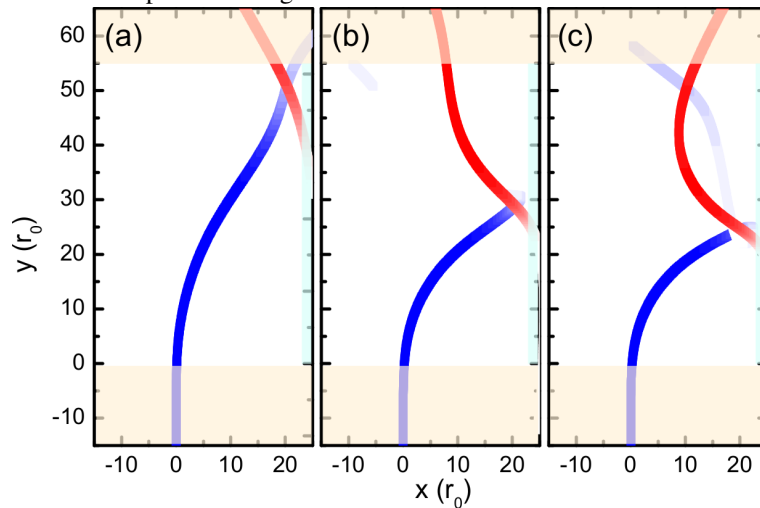
onde o centro do pacote de ondas começa em $(x_0, y_0) = (0, -15r_0)$ e se propaga inicialmente (na ausência de campo magnético) ao longo da direção y positiva, devido ao momento inicial k_0 diferente de zero. O momento se relaciona com a energia do pacote de ondas como $\varepsilon = \hbar v_F k_0 - E_F$. Além disso, para evitar o movimento trêmulo do pacote de ondas nos passos de tempo iniciais da propagação, também conhecido como *zitterbewegung* [65, 47], é assumido o pseudo-espinoar inicial para o estado eletrônico na Eq. (2.13) apontando na mesma direção de seu momento, ou seja, $u_A = 1$, $u_B = i$ e $v_A = v_B = 0$. A largura do pacote de ondas em todos os cálculos é mantida como $d = 6.67r_0$, o que representa uma largura de distribuição de energia de $\approx 0.15\Delta_0$.

A Fig. 24 mostra as trajetórias calculadas do espalhamento de Andreev de elétrons e buracos para $\varepsilon = 0, 8\Delta_0$ e três valores diferentes de campo magnético, $B =$ (a) $1.75 \times 10^{-2} \Phi_0 / \pi r_0^2$, (b) $3.25 \times 10^{-2} \Phi_0 / \pi r_0^2$, e (c) $3.75 \times 10^{-2} \Phi_0 / \pi r_0^2$. A região do campo magnético é definida entre $y = 0$ e $y = 55r_0$, de modo que P_e e P_h nas Eqs. (2.31) e (2.32), respectivamente, são calculadas assumindo intervalos $[y_1, y_2] = [-\infty, 0]$ para T_1 e $[y_1, y_2] = [55r_0, +\infty]$ para T_2 . O pacote de onda inicial é de um elétron (azul), mas, conforme atinge a região SC em $x = 25r_0$ (região sombreada em azul claro), torna-se predominantemente com caráter de buraco (vermelho), ou seja, $P_e \rightarrow 0$ e $P_h \neq 0$. Cores mais escuras (mais claras) nas trajetórias representam densidade de probabilidade mais alta (mais baixa) para o elétron ou buraco. Devido ao baixo nível de Fermi $E_F = 0.1\Delta_0$ neste caso, buracos espalhados ocupam a banda de condução, exibindo assim reflexão especular de Andreev e, conseqüentemente, propagando-se em direção a T_2 .

É observado que a situação $E_F < \Delta_0$ é qualitativamente a mesma que a investigada no dispositivo apresentado por Bhandari *et al.* [45]. O aumento da intensidade dos campos reduzem o raio da órbita, fazendo com que os elétrons incidentes atinjam a região SC (área sombreada em

azul à direita de cada painel) quase perpendicularmente na Fig.24 (b), o que leva a um pacote de ondas refletido quase totalmente dominado pelas componentes do buraco. Aumentar o campo aumenta ainda mais as componentes de elétrons do pacote de ondas refletido novamente, como observado na Fig. 24 (c). É possível notar que possíveis desvios no ângulo de incidência neste sistema já são naturalmente contabilizados no método de pacote de ondas proposto, uma vez que os pacotes de ondas não possuem um vetor de momento único, mas sim uma distribuição de momentos em ambas as componentes do vetor momento, cuja largura é proporcional a $1/d$.

Figura 24 – Trajetórias de elétrons (azul) e buracos (vermelho) com energia $\varepsilon = 0,8\Delta_0$, espalhados por uma interface N/SC com nível de Fermi $E_F = 0,1\Delta_0$ sob três valores diferentes de campo magnético B : (a) $1,75 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$, (b) $3,25 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$, e (c) $3,75 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$. As cores mais escuras (mais claras) nas trajetórias representam densidade de probabilidade mais alta (mais baixa) para o elétron ou buraco. As áreas sombreadas em amarelo representam os terminais, enquanto a área sombreada em azul claro à direita representa a região SC

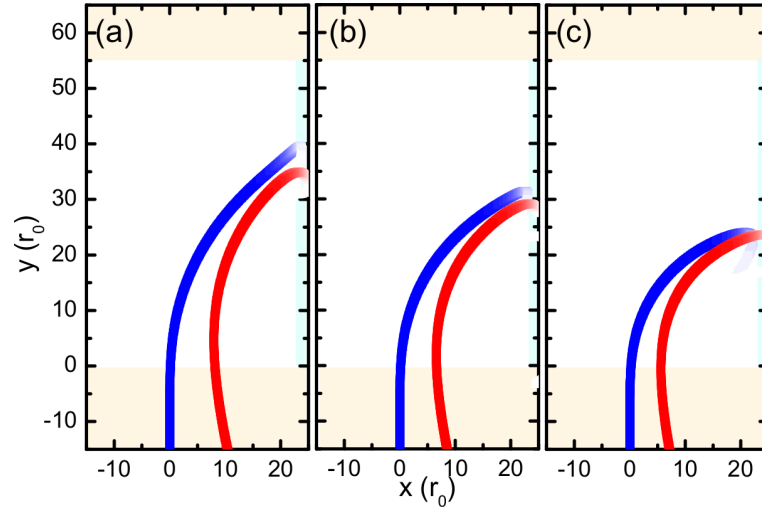


Fonte: [53].

As trajetórias para $E_F = 10\Delta_0$ são mostradas na Fig. 25, assumindo os mesmos parâmetros de pacote de ondas que os da Fig. 24 e campos magnéticos $B =$ (a) $2.5 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$, (b) $3.25 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$, (c) $4.25 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$. Pode-se observar que esta energia de Fermi E_F muito mais alta neste caso leva a um maior momento do pacote de ondas e, conseqüentemente, campos magnéticos mais intensos são necessários para obter as mesmas órbitas que as da Fig. 24. Para $E_F > \Delta_0$, buracos espalhados ocupam a banda de valência, exibindo assim a retroreflexão de Andreev e, conseqüentemente, propagam-se de volta para T_1 . Nesta situação, a quantidade relevante a ser investigada é a probabilidade de reflexão do dispositivo T_{11} . O sinal em T_2 é naturalmente positivo, uma vez que todos os buracos retrorefletidos são coletados em T_1 , e só pode ser elevado se as componentes no pacote de ondas do elétron refletido forem relevantes.

A razão do pacote de ondas de elétron-buraco refletidos depende do ângulo de

Figura 25 – As trajetórias de elétrons (azul) e buracos (vermelho) com energia $\varepsilon = 0,8\Delta_0$, espalhados por uma interface N/SC com nível de Fermi $E_F = 10\Delta_0$ sob três valores diferentes de campo magnético B : (a) $2,5 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$, (b) $3,25 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$, (c) $4,25 \times 10^{-1}\Phi_0/\pi r_0^2$. As cores mais escuras (mais claras) das trajetórias representam uma densidade de probabilidade mais alta (mais baixa) para o elétron ou buraco. As áreas sombreadas em amarelo representam os terminais, enquanto a área sombreada em azul claro à direita representa a região SC.



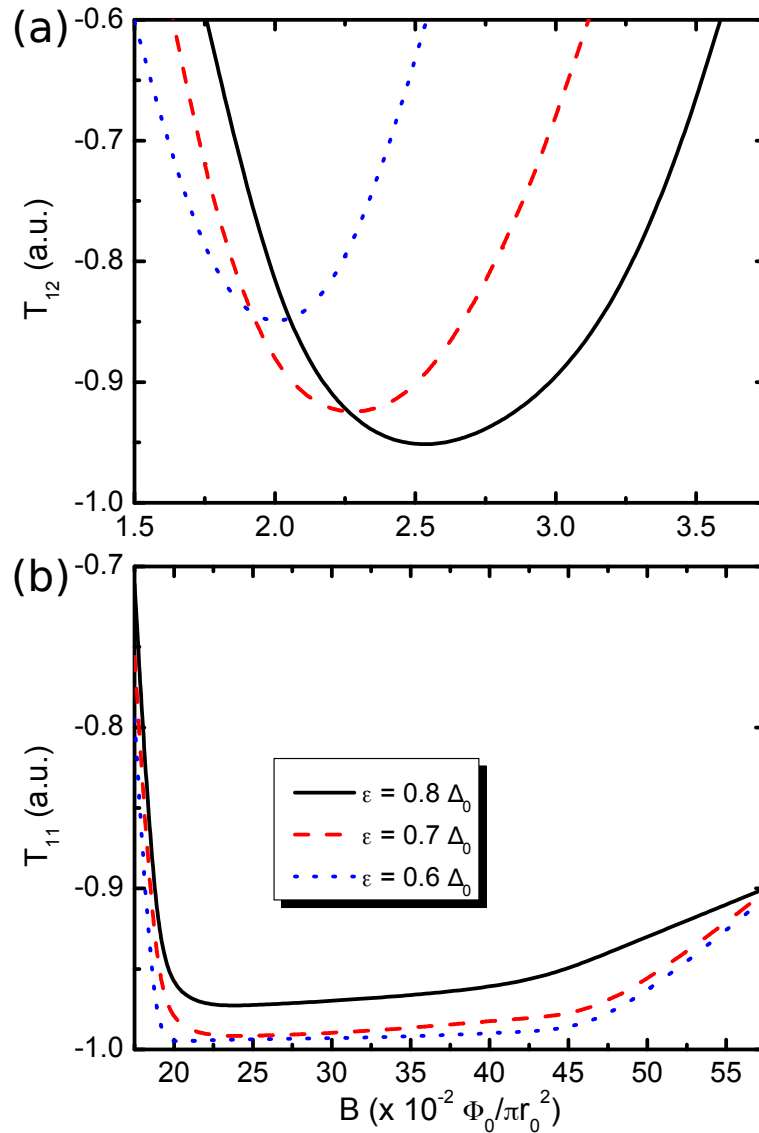
Fonte: [53].

incidência, como se infere, por exemplo no integrando na fórmula Blonder-Tinkham-Klapwijk, que tem um análogo aqui em T_{12} e T_{11} . Controlar as trajetórias por meio de campo magnético aplicado e detectar o acúmulo de carga em T_1 e T_2 é uma maneira indireta de investigar a dependência angular da contribuição do pacote de ondas do buraco para reflexão de Andreev. Isso é verificado pela dependência do campo magnético de T_{12} e T_{11} na Fig. 26, para (a) $E_F = 0.1\Delta_0$ e (b) $E_F = 10\Delta_0$, respectivamente. Todos os valores na Fig. 26 são negativos, representando a predominância de reflexão dos pacotes de ondas de buracos em todos os casos estudados aqui.

Uma das características que mais se destacam da conversão especular para retrorreflexão de Andreev na interface de uma monocamada de grafeno/SC, conforme o nível de Fermi aumenta de $E_F < \Delta_0$ para $E_F > \Delta_0$, é o fato de que, para $E_F < \Delta_0$ ($E_F > \Delta_0$), energias mais altas do elétron incidente produzem maior (menor) espalhamento elétron-buraco com uma dependência angular mais fraca (mais forte). De fato, os resultados na Fig. 26 (a) mostram T_{12} mais baixos à medida que ε aumenta, enquanto o oposto é observado para T_{11} em 26 (b). Além disso, uma forte dependência do campo magnético para menores ε no caso $E_F < \Delta_0$ [Fig. 26 (a)] é refletido na curva mais estreita para $\varepsilon = 0.6\Delta_0$, em comparação com aquela com $\varepsilon = 0.8\Delta_0$. Uma vez que o campo magnético leva a diferentes ângulos de incidência, esta é uma verificação indireta da forte dependência angular na razão no pacote de ondas elétron-buraco refletidos conforme a energia ε do elétron incidente é reduzida, conforme previsto por trabalhos teóricos

anteriores [40]. Na Fig. 26 (b), apenas uma dependência de campo magnético muito fraca é observada para valores de campo intermediários. Mesmo assim, verifica-se que energias mais altas ε levam a uma dependência de campo ligeiramente mais intensa, em contraste com o caso anterior da reflexão especular. Para $\varepsilon = 0.8\Delta_0$, campos da ordem de $\approx 40 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$ são suficientes para produzir uma variação observável em T_{11} , enquanto para uma energia inferior $\varepsilon = 0.6\Delta_0$, um platô quase plano em torno de $T_{11} = -1$ persiste até um campo visivelmente superior, $\approx 47 \times 10^{-2}\Phi_0/\pi r_0^2$.

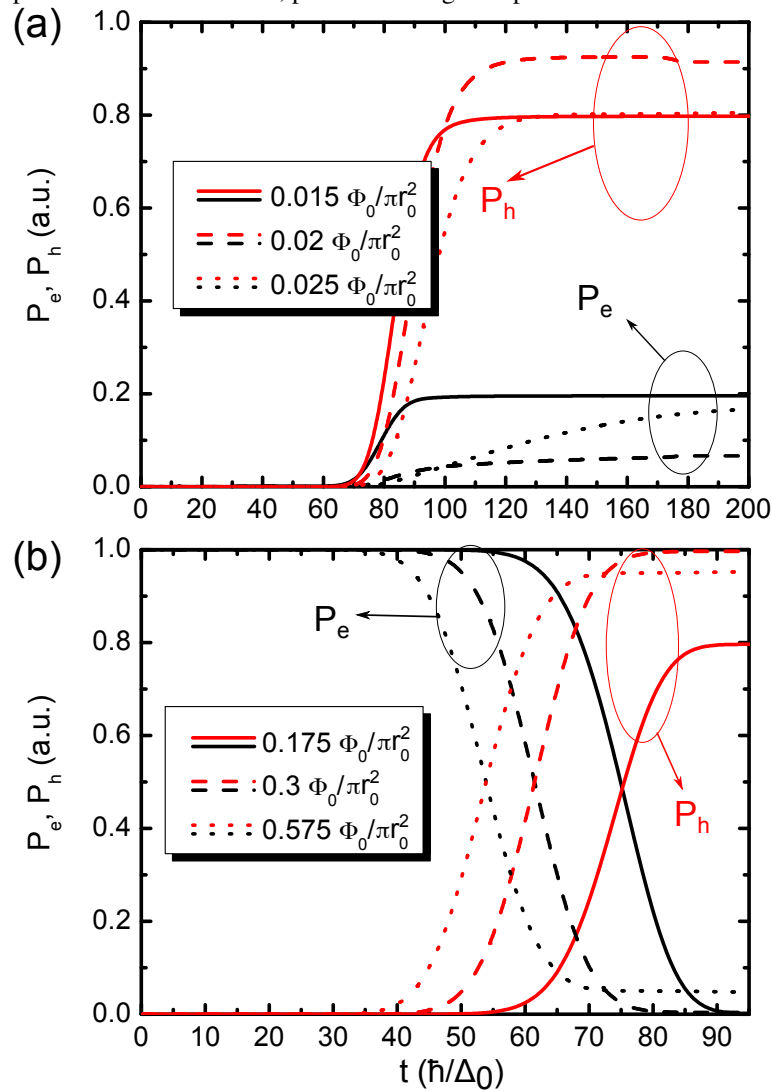
Figura 26 – Dependência do campo magnético das probabilidades de transporte T_{11} e T_{12} , assumindo um sistema com níveis de Fermi (a) $E_F = 0,1\Delta_0$ e (b) $E_F = 10\Delta_0$, respectivamente. Três valores diferentes da energia do elétron ε são considerados.



Fonte: [53].

A Fig. 27 mostra a evolução temporal das probabilidades de encontrar elétrons (P_e , preto) e buracos (P_h , vermelho), conforme calculado pelas Eqs. (2.31) e (2.32), em (a) T_2 , para

Figura 27 – Evolução temporal das probabilidades P_e (preto) e P_h (vermelho) de encontrar elétrons e buracos, respectivamente, em (a) T_2 , para $E_F = 0, 1\Delta_0$, e em (b) T_1 , para $E_F = 10\Delta_0$. Três valores diferentes de campo aplicado são considerados, para uma energia de pacote de ondas fixa $\varepsilon = 0, 6\Delta_0$.



Fonte: [53].

um sistema com reflexão especular de Andreev, ou seja, $E_F < \Delta_0$, e em (b) T_1 , para um sistema com retrorreflexão de Andreev, ou seja, $E_F > \Delta_0$. Em ambos os casos, a energia do pacote de ondas é $\varepsilon = 0, 6\Delta_0$. Três valores de campo magnético são considerados em torno dos mínimos observados para as curvas $\varepsilon = 0, 6\Delta_0$ (pontilhada em azul) na Fig. 26. Na Fig. 27 (a), fica claro que a probabilidade do buraco (elétron) é mais alta (mais baixa) no mínimo da curva T_{12} na Fig. 26 (a), ou seja, em $B = 0.02\Phi_0/\pi r_0^2$ (tracejado). Para $E_F > \Delta_0$, aumentar o campo magnético de $B = 0.175\Phi_0/\pi r_0^2$ (sólido) para $B = 0.3\Phi_0/\pi r_0^2$ (tracejado) produz um aumento significativo na probabilidade de encontrar buracos que sofreram espalhamento de Andreev em T_1 , como se verifica na Fig.27 (b). No entanto, conforme o campo é aumentado ainda mais para $B = 0.575\Phi_0/\pi r_0^2$ (pontilhado), uma pequena probabilidade de encontrar elétrons retornando a

T_1 também é observada, devido ao fato de que um campo tão intenso leva a um raio de órbita de Lorentz muito pequeno, de modo que (uma pequena) parte do pacote de ondas do elétron retorna a T_1 sem alcançar a interface N/SC. Portanto, em campo tão intenso, como no caso do nível de Fermi mais alto, a presença de elétrons em T_1 pode dificultar o entendimento adequado da reflexão de Andreev por este dispositivo, uma vez que a probabilidade de buraco mais baixa P_h observada na Fig. 27 (b) para $B = 0.575\Phi_0/\pi r_0^2$ (pontilhado) resulta não apenas da dependência angular do espalhamento de Andreev, mas também do fato de que uma parte ligeiramente menor da função de onda do elétron é realmente espalhada na interface.

Os resultados da Fig. 27 também fornecem informações sobre o tempo de resposta do dispositivo proposto. Para buracos com reflexão especular ($E_F < \Delta_0$), a Fig. 27(a) mostra que aumentar o campo magnético retarda a resposta do dispositivo, pois a probabilidade do elétron P_e leva mais tempo para alcançar convergência. O oposto é observado no caso de retroreflexão ($E_F > \Delta_0$), onde aumentar o campo resulta em convergência mais rápida de P_e e P_h .

Para fins práticos, é instrutivo estimar os valores de comprimento e campo magnético considerados nas Figs. 24 - 27 em unidades convencionais, como nm e Tesla, respectivamente. A conversão das unidades dimensionais escolhidas nos cálculos apresentados é direta e resulta em órbitas, por exemplo, da ordem de $\approx 0.094 \mu\text{m}$ para campos magnéticos $\approx 1.73 \text{ T}$, para os parâmetros da Fig. 24 (c). Realmente, as imagens experimentais para as órbitas apresentadas por Bhandari *et al.* [45] para reflexão especular de Andreev, como na Fig. 24, foram produzidas com campos ≈ 5 vezes menores em magnitude, resultando conseqüentemente em raios ≈ 5 vezes maiores do que os da Fig. 24.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Em síntese, foi proposta nesta tese uma técnica numérica geral para investigar o espalhamento de elétrons e a conversão elétron-buraco em interfaces normais/SC com formas e perfis arbitrários. O método, baseado na propagação de pacotes de ondas em tempo real através de um sistema descrito por um modelo de Bogoliubov-de Gennes, é facilmente adaptado para Hamiltonianos do tipo Dirac-Weyl representando diferentes materiais bidimensionais e permite observar trajetórias de elétrons e buracos de forma pedagógica e conveniente. Como exemplo, aplicou-se o método para revisitar o problema de reflexão de Andreev em uma interface normal/SC em monocamada de grafeno, onde a transição de retroreflexão para reflexão especular é observada apenas rastreando trajetórias de elétrons e buracos à medida que o nível de Fermi do sistema varia. Em seguida, expandimos este estudo para a investigação da reflexão de Andreev também em casos de bicamada e tricamada de grafeno, observando discrepâncias com o caso do da monocamada, especialmente para pacotes de ondas com energia menor que o *gap* supercondutor. Isso ilustra o quão flexível é o método aqui proposto, sendo facilmente adaptável a outros Hamiltonianos do tipo Dirac-Weyl.

Como exemplo de um perfil arbitrário da região SC, consideramos o caso de uma frente de onda de elétrons se propagando através de um canal normal dentro da região supercondutora, inclinada 45° em relação à trajetória de propagação do elétron incidente. O sistema demonstrou funcionar como um guia eletrônico de ondas para qualquer valor do nível de Fermi E_F . No entanto, o canal guia os buracos junto com os elétrons apenas para $E_F < \Delta_0$, enquanto os buracos retrorefletidos no caso $E_F > \Delta_0$ se propagam para trás e saem do canal por sua entrada. Esse efeito é aprimorado à medida que o comprimento ou a largura do canal aumentam.

Também foram investigadas teoricamente utilizando a mesma técnica a reflexão de elétron e buraco por espalhamento de Andreev em uma interface N/SC baseada em grafeno, onde as trajetórias dessas quasi-partículas são controladas por um campo magnético externo. Nossos resultados sugerem que esta configuração pode ser usada para sondar a natureza e a dependência angular da reflexão de Andreev. À medida que o campo magnético aplicado aumenta, as probabilidades de transporte entre os terminais apresentam um mínimo, cuja largura fornece informações sobre a dependência angular da reflexão de Andreev. Com um nível de Fermi $E_F < \Delta_0$ ($E_F > \Delta_0$), energias mais altas do elétron incidente resultam em mínimos de probabilidade de transporte mais baixos (mais altos) dominados pelo buraco, bem como dependência de campo magnético mais forte (mais fraca). Isso está intimamente relacionado

ao fato de que a condutividade em sistemas submetidos à (retro) reflexão especular de Andreev aumenta (diminui) à medida que a energia do elétron aumenta, conforme previsto por estudos anteriores usando ondas planas.

O método proposto poderá estimular futuros estudos onde serão investigadas a reflexão de Andreev em, por exemplo, dicalcogenetos de metais de transição e monocamada de fosforeno, mesmo sob campos elétricos e/ou magnéticos aplicados externamente, pois as modificações necessárias são simples. Também é possível, ajustando adequadamente o potencial e os níveis de Fermi, usar convenientemente o método aqui proposto no estudo do CAR e fenômenos de co-tunelamento em materiais de Dirac-Weyl. Os resultados dessas simulações provavelmente também despertarão interesse em experimentalistas que trabalham com heteroestruturas envolvendo materiais 2D e supercondutores.

REFERÊNCIAS

- [1] ONNES, H. The disappearance of the resistance of mercury. *Commun. Phys. Lab.*, n. 122b, 1911.
- [2] ONNES, H. The resistance of pure mercury at helium temperatures. *Commun. Phys. Lab.*, n. 120b, 1911.
- [3] BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 108, n. 5, p. 1175–1204, dec 1957.
- [4] BOGOLIUBOV, N. N. On a new method in the theory of superconductivity. *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, n. 7, p. 794–805, 1958.
- [5] LANDAU, L. Theory of the superfluidity of helium ii. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 60, p. 356–358, aug 1941.
- [6] ABRIKOSOV, A. A. *Fundamentals of the Theory of Metals*. Amsterdam: North-Holland, 1988. ISBN 0444870954.
- [7] ANNETT, J. *Superconductivity, Superfluids and Condensates*. [S.l.]: CRC Press, 2008.
- [8] LEVY, L.-P. *Magnetism and superconductivity / Laurent-Patrick Lévy ; translated by Stephen Lyle*. New York: Springer, 2000. (Texts and monographs in physics). ISBN 3540666885.
- [9] FROHLICH, H. Theory of the superconducting state. i. the ground state at the absolute zero of temperature. *Phys. Rev.*, United States, v. 79, n. 5, p. 845–856, 1950. ISSN 0031-899X.
- [10] BARDEEN, J. Zero-point vibrations and superconductivity. *Phys. Rev.*, United States, v. 79, n. 1, p. 167–168, 1950. ISSN 0031-899X.
- [11] BARDEEN, J. Wave functions for superconducting electrons. *Phys. Rev.*, United States, v. 80, n. 4, p. 567–574, 1950. ISSN 0031-899X.
- [12] BARDEEN, J.; PINES, D. Electron-phonon interaction in metals. *Phys. Rev.*, v. 99, n. 4, p. 1140–1150, 1955. ISSN 0031-899X.
- [13] GENNES, P. G. D. *Superconductivity of Metals and Alloys*. Cambridge, MA: Perseus, 1999. (Advanced book classics).
- [14] FROHLICH, H. Interaction of electrons with lattice vibrations. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and physical sciences*, The Royal Society, v. 215, n. 1122, p. 291–298, 1952. ISSN 1364-5021.
- [15] SOLYOM, J. *Fundamentals of the Physics of Solids*. [S.l.]: Springer, 2010. v. 3.
- [16] TINKHAM, M. *Introduction to superconductivity*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1996.
- [17] ZHANG, L. *Effects of quantum confinement in nanoscale superconductors: from electronic density of states to vortex matter 2015*. 206 f. Tese (Doutorado em Física) — Faculdade Wetenschappen, Departamento de Física, Universidade da Antuérpia, Antuérpia, 2015.
- [18] SCHRIEFFER, J. *Theory of Superconductivity*. [S.l.]: Oxford University Press, 2004.

- [19] BLONDER, G. E.; TINKHAM, M.; KLAPWIJK, T. M. Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 25, p. 4515–4532, apr 1982.
- [20] YOUNES, W.; GOGNY, D. M.; BERGER, J.-F. Hartree-fock-bogoliubov theory. In: _____. *A Microscopic Theory of Fission Dynamics Based on the Generator Coordinate Method*. Cham: Springer Int. Publishing, 2019. p. 3–40. ISBN 978-3-030-04424-4.
- [21] DEUTSCHER, G.; GENNES, P. G. de. Proximity effects. *pp 1005-34 of Superconductivity. Vols. 1 and 2. Parks, R. D. (ed.). New York, Marcel Dekker, Inc., 1969.*, oct 1969.
- [22] WOLF, E. *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy*. 2nd ed. [S.l.]: Oxford University Press, 2012. v. 9780199589494. ISBN 9780199589494.
- [23] LIKHAREV, K. K. Superconducting weak links. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 51, p. 101–159, jan 1979.
- [24] ANDREEV, A. F. Thermal conductivity of the intermediate state of superconductors. v. 46, may 1964.
- [25] MENDELSSOHN, K.; OLSEN, J. L. Anomalous heat flow in superconductors. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 80, p. 859–862, dec 1950.
- [26] BEENAKKER, C. W. J. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 69, p. 731–808, jul 1997.
- [27] SAITO, R.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. [S.l.]: Imperial College Press, 1998. ISBN 9781860940934.
- [28] CASTRO NETO, A. H. *et al.* The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, APS, v. 81, p. 109–162, jan 2009.
- [29] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 71, n. 9, p. 622–634, may 1947.
- [30] NOVOSELOV, K. S. *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, AAAS, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004. ISSN 0036-8075.
- [31] PEREIRA, J. *et al.* Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene. *Semicond Sci Technol*, v. 25, p. 033002, feb 2010.
- [32] NOVOSELOV, K. S. *et al.* Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nat.*, Nature Publishing Group, v. 438, n. 7065, p. 197, 2005.
- [33] MCCANN, E.; FAL'KO, V. I. Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 96, p. 086805, mar 2006.
- [34] MCCANN, E.; KOSHINO, M. The electronic properties of bilayer graphene. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 76, n. 5, p. 056503, apr 2013.
- [35] TABERT, C. J.; NICOL, E. J. Dynamical conductivity of aa-stacked bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 86, p. 075439, aug 2012.

- [36] KOSHINO, M.; MCCANN, E. Trigonal warping and berry's phase $n\pi$ in abc-stacked multilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 80, p. 165409, oct 2009.
- [37] KOSHINO, M.; MCCANN, E. Gate-induced interlayer asymmetry in aba-stacked trilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 79, p. 125443, mar 2009.
- [38] YUAN, S.; ROLDÁN, R.; KATSNELSON, M. I. Landau level spectrum of aba- and abc-stacked trilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 84, p. 125455, sep 2011.
- [39] NAKAMURA, M.; HIRASAWA, L. Electric transport and magnetic properties in multilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 77, p. 045429, jan 2008.
- [40] BEENAKKER, C. W. J. Specular andreev reflection in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 97, p. 067007, aug 2006.
- [41] LUDWIG, T. Andreev reflection in bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 75, p. 195322, may 2007.
- [42] EFETOV, D. K. *et al.* Specular interband andreev reflections at van der waals interfaces between graphene and nbse2. *Nat. Phys.*, Springer Science and Business Media LLC, v. 12, n. 4, p. 328–332, dec 2015.
- [43] BAI, C.; YANG, Y. Retro-normal reflection and specular andreev reflection in a transition metal dichalcogenides superconducting heterojunction. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 32, n. 8, p. 085302, nov 2019.
- [44] CHEN, S. *et al.* Electron optics with p-n junctions in ballistic graphene. *Science*, AAAS, v. 353, n. 6307, p. 1522–1525, 2016. ISSN 0036-8075.
- [45] BHANDARI, S. *et al.* Imaging andreev reflection in graphene. *Nano Lett.*, v. 20, n. 7, p. 4890–4894, 2020. PMID: 32484357.
- [46] LEE, G.-H. *et al.* Inducing superconducting correlation in quantum hall edge states. *Nat. Phys.*, apr 2017.
- [47] CHAVES, A. *et al.* The split-operator technique for the study of spinorial wavepacket dynamics. *Commun Comput Phys*, v. 97, p. 850–866, 2015.
- [48] DEGANI, M. H.; MAIALLE, M. Z. Numerical calculations of the quantum states in semiconductor nanostructures. *J. Comput. Theor. Nanosci*, v. 7, p. 454–473, 2010.
- [49] ZETTILI, N. *Quantum Mechanics: concepts and applications*. [S.l.]: John Wiley, 2009.
- [50] GROSSMANN, F. *Theoretical Femtosecond Physics*. [S.l.]: Springer, 2008.
- [51] SUZUKI, M. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and monte carlo simulations. *Phys. Lett. A*, v. 146, n. 6, p. 319–323, 1990. ISSN 0375-9601.
- [52] LINARD, F. *et al.* Wave-packet scattering at a normal-superconductor interface in two-dimensional materials: a generalized theoretical approach. (Submetido).

- [53] CHAVES, A. *et al.* Tunable magnetic focusing using andreev scattering in superconductor-graphene hybrid devices. *Journal of Appl. Phys.*, AIP Publishing LLC, v. 128, n. 12, p. 124303, 2020.
- [54] DAS, S. *et al.* Beyond graphene: progress in novel two-dimensional materials and van der waals solids. *Annual Review of Materials Research*, v. 45, n. 1, p. 1–27, 2015.
- [55] LOW, T. *et al.* Polaritons in layered two-dimensional materials. *Nat. Mater.*, v. 16, p. 182 – 194, nov 2016. ISSN 1476-1122.
- [56] CUNHA, S. M. *et al.* Wave-packet dynamics in multilayer phosphorene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 99, p. 235424, jun 2019.
- [57] BEENAKKER, C. W. J. *et al.* Quantum goos-hänchen effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 102, p. 146804, apr 2009.
- [58] SELLIER, H. *et al.* On the imaging of electron transport in semiconductor quantum structures by scanning-gate microscopy: successes and limitations. *Semicond. Sci Technol.*, IOP Publishing, v. 26, n. 6, p. 064008, 2011.
- [59] KRUECKL, V.; KRAMER, T. Revivals of quantum wave packets in graphene. *New Journal of Physics*, v. 11, n. 9, p. 093010, sep 2009.
- [60] LAVOR, I. R. *et al.* Effect of zitterbewegung on the propagation of wave packets in ABC-stacked multilayer graphene: an analytical and computational approach. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 33, n. 9, p. 095503, dec 2020.
- [61] CHAVES, A. *et al.* Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 82, p. 205430, nov 2010.
- [62] CAYSSOL, J. Crossed andreev reflection in a graphene bipolar transistor. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 100, p. 147001, apr 2008.
- [63] HERRMANN, L. G. *et al.* Carbon nanotubes as cooper-pair beam splitters. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 104, p. 026801, jan 2010.
- [64] GÓMEZ, S. *et al.* Selective focusing of electrons and holes in a graphene-based superconducting lens. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 85, p. 115411, mar 2012.
- [65] RUSIN, T. M.; ZAWADZKI, W. Zitterbewegung of electrons in graphene in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 78, p. 125419, sep 2008.
- [66] ELTSOV, V. B. Notas de aula, *Theory of Superconductivity*. 2021. Disponível em: https://mycourses.aalto.fi/pluginfile.php/1414652/mod_resource/content/13/theory_sc.pdf. Acesso em: 02 mar. 2023.
- [67] FERNANDES, R. Notas de aula, *BCS theory of superconductivity*. Disponível em: https://portal.ifi.unicamp.br/images/files/graduacao/aulas-on-line/fen-emerg/lecture_notes_BCS.pdf. Acesso em: 02 mar. 2023.

APÊNDICE A – CÁLCULO PARÂMETROS VARIACIONAIS

Para obter os parâmetros, faz-se necessário a utilização do Hamiltoniano reduzido dado pela Eq. (1.18) e a função de onda BCS da Eq. (1.22). O *ket* $|\Psi_{BCS}\rangle$ não tem um número fixo de partículas, logo para regular o número médio de partículas, \bar{N} , será incluído um termo $-\mu N_{op}$, onde μ é o potencial químico (ou energia de Fermi) que funciona como multiplicador de Lagrange e N_{op} que é o operador número de partículas. Em seguida, minimiza-se o valor esperado da soma

$$\delta \langle \Psi_{BCS} | (H_{red} - \mu N_{op}) | \Psi_{BCS} \rangle = 0. \quad (A.1)$$

A inclusão de N_{op} é matematicamente equivalente a tomar o zero da energia cinética como sendo μ (ou E_F) [16]. Logo, substituindo H_{red} na Eq. (A.1) tem-se

$$\delta \left(\langle \Psi_{BCS} | \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} | \Psi_{BCS} \rangle + \langle \Psi_{BCS} | \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} | \Psi_{BCS} \rangle \right) = 0, \quad (A.2)$$

onde $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ é a energia da partícula livre relativa a energia de Fermi. Então, substituindo a função de onda nos dois termos da Eq. (A.2), obtém-se

$$\langle \Psi_{BCS} | \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} | \Psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2, \quad (A.3)$$

$$\langle \Psi_{BCS} | \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} | \Psi_{BCS} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'}. \quad (A.4)$$

A Eq. (A.1) torna-se

$$E_S = \langle \Psi_{BCS} | (H_{red} - \mu N_{op}) | \Psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'}. \quad (A.5)$$

Minimizando a energia da Eq. (A.5) em relação a $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ utilizando a condição de normalização e impondo que $u_{\mathbf{k}} = \text{sen}\theta_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}} = \text{cos}\theta_{\mathbf{k}}$ (ver Ref. [16, 17]), obtém-se que

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} + 1 \right), \quad (A.6)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (A.7)$$

onde também são definidas as relações

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} = - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} \quad (A.8)$$

$$E_{\mathbf{k}} = (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.9})$$

Com a função de onda determinada, calcula-se que a energia que é dada por

$$E_S = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V}, \quad (\text{A.10})$$

é menor que a energia do mar de Fermi [16]. A Diferença entre a energia no estado supercondutor e a energia no estado normal resulta na chamada energia de condensação em $T = 0K$ e é dada por

$$E_{cond} \approx -\frac{1}{2}N(0)|\Delta|^2. \quad (\text{A.11})$$

Agora será abordado o método que utiliza transformações canônicas e não será necessário nenhuma utilização de cálculo variacional. O desenvolvimento das contas seguiu as Refs. [16, 66, 67]. O ponto inicial é o Hamiltoniano da Eq. (1.18) regulado pelo número médio de partículas e é dado por

$$H - \mu N = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}. \quad (\text{A.12})$$

O segundo termo desse Hamiltoniano é quadrático em relação aos operadores quasi-partículas, o que torna difícil a análise. Logo, na teoria BCS é utilizada a aproximação de campo médio para desacoplar o termo quadrático. Para isso faz-se o produto do operador expresso por

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} = b_{\mathbf{k}} + (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - b_{\mathbf{k}}), \quad (\text{A.13})$$

e $b_{\mathbf{k}} = \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle_{med}$ e $b_{\mathbf{k}}^* = \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle_{med}$. A partir disso termo do potencial de interação do Hamiltoniano da Eq. (A.12) pode ser reescrito utilizando a Eq. (A.13) e torna-se

$$\begin{aligned} V_{int} &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(b_{\mathbf{k}}^* + (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - b_{\mathbf{k}}^*) \right) (b_{\mathbf{k}'} + (c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} - b_{\mathbf{k}'})) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[b_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + b_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}'} + (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - b_{\mathbf{k}}^*) (c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\uparrow} - b_{\mathbf{k}'}) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

onde o último termo do lado direito da Eq. (A.14) é menor do que o grande número de partículas, logo esse termo é desprezado e o potencial de interação torna-se

$$V_{int} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[b_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + b_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}'} \right], \quad (\text{A.15})$$

onde substituindo a Eq. (A.15) na Eq. (A.12) é obtido o chamado Hamiltoniano modelo

$$H_M = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[b_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + b_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}'} \right]. \quad (\text{A.16})$$

Para reescrever o Hamiltoniano modelo são definidas as funções *gap*, que são diferentes de zero apenas na região SC e são dadas por

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'}, \quad (\text{A.17})$$

$$\Delta_{\mathbf{k}'}^* = - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^*, \quad (\text{A.18})$$

Logo, a Eq. (A.16) torna-se

$$H_M = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}^* c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*. \quad (\text{A.19})$$

Renomeando os índices de soma, vem

$$H_M = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right]. \quad (\text{A.20})$$

O Hamiltoniano modelo pode ser diagonalizado utilizando transformações lineares adequadas definindo novos operadores de Fermi, $\gamma_{\mathbf{k}}$, e coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$, onde esses coeficientes satisfazem a condição de normalização $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Estas transformações foram desenvolvidas independentemente por Bogoliubov e Valatin e são descritas por

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Abrindo o somatório em σ do primeiro termo do Hamiltoniano dado pela Eq. (A.20), tem-se

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right), \quad (\text{A.22})$$

onde o sinal negativo indica o emparelhamento no estado fundamental indicando que $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$.

Agora reescrevendo a Eq. (A.22) em termos das transformações da Eq. (A.21) obtém-se

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left[\left(u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \left(u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) + \left(u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \right) \left(u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left[|u_{\mathbf{k}}|^2 \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left[2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + |v_{\mathbf{k}}|^2 \left(\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left[\left(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 \right) \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + 2|v_{\mathbf{k}}|^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

onde na passagem da Eq. (A.23) para a Eq. (A.24) foram utilizadas as relações de anticomutação fermiônicas dadas por

$$\left[\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right]_+ = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} = 0, \quad (\text{A.25})$$

$$\left[\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'} \right]_+ = \left[\gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right]_+ = 0. \quad (\text{A.26})$$

Da mesma maneira, o segundo termo do Hamiltoniano dado pela Eq. (A.20) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} -\sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right] &= -\sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\mathbf{k}}^* \left(u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \left(u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \right] \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \left(u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \right) - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right] \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

$$\begin{aligned} &= -\sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\Delta_{\mathbf{k}}^* (u_{\mathbf{k}}^*)^2 - \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^*)^2 \right) \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \left(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 \right) \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right] \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned} &= -\sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\Delta_{\mathbf{k}}^* (u_{\mathbf{k}}^*)^2 - \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^*)^2 \right) \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \left(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 \right) \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \right) \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) - \left(\Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \right) + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right] \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Na passagem da Eq. (A.28) para a Eq. (A.29) também foram utilizadas as transformações de Bogoliubov-Valitin. Para o Hamiltoniano ficar diagonalizado, os termos que acompanham $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ e seu hermitiano conjugado nas Eqs. (A.24) e (A.29) devem desaparecer, logo, para isso tem-se

$$2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 = 0. \quad (\text{A.30})$$

Multiplicando a Eq. (A.30) por $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}^2}$ obtém-se

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{u_{\mathbf{k}}^2} + 2\xi_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \Delta_{\mathbf{k}}^* - |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 = 0, \quad (\text{A.31})$$

que é uma equação do segundo grau e sua solução será

$$\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\Delta_{\mathbf{k}}^*} + \frac{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}}{\Delta_{\mathbf{k}}^*},$$

podendo ser reescrita como

$$\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}}{\Delta_{\mathbf{k}}^*}, \quad (\text{A.32})$$

onde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ é a energia de excitação.

Utilizando a condição de normalização tem-se

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{1 + \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2}. \quad (\text{A.33})$$

Substituindo a Eq. (A.32) na Eq. (A.33) obtém-se

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2 + E_{\mathbf{k}}^2 - 2E_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}}^2},$$

onde utilizando a energia de excitação, vem

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{E_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}})}. \quad (\text{A.34})$$

Sabendo que $|\Delta_{\mathbf{k}}|^2 = E_{\mathbf{k}}^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2$ a Eq. (A.34) torna-se

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} + 1 \right). \quad (\text{A.35})$$

Para obtenção de $|v_{\mathbf{k}}|^2$, precisa-se substituir a solução na equação de normalização e obter

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right). \quad (\text{A.36})$$

A Eq. (A.24) reescrita em termos das Eqs. (A.35) e (A.36), torna-se

$$\sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left[(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) \sum_{\sigma} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\sigma} + 2|v_{\mathbf{k}}|^2 \right] = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\sigma} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (\text{A.37})$$

Fazendo o mesmo procedimento para a Eq. (A.29) e sabendo que

$$\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* = \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) (E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}),$$

tem-se

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} \left[(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) \sum_{\sigma} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\sigma} - (\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right] = \\ & = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) (E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}) \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\sigma} \right] - \sum_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) (E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Logo, o Hamiltoniano da Eq. (A.20) reescrito em termos das Eqs. (A.37) e (A.38), torna-se

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} + E_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} - E_{\mathbf{k}} + \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right) \quad (\text{A.39})$$

E por fim a Eq. (A.39) torna-se

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{A.40})$$




onde $E_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*)$ é a energia no estado fundamental. O segundo termo dá o aumento de energia acima do estado fundamental em termos do operador número, $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma}$, para os férmions $\gamma_{\mathbf{k}}$. Estes termos descrevem as excitações de quasi-partículas do sistema e são chamados bogoliubons [16].

APÊNDICE B – ARTIGOS RELACIONADOS À TESE

Journal of Applied Physics



Tunable magnetic focusing using Andreev scattering in superconductor-graphene hybrid devices

Cite as: J. Appl. Phys. **128**, 124303 (2020); <https://doi.org/10.1063/5.0020392>
Submitted: 02 July 2020 . Accepted: 03 September 2020 . Published Online: 28 September 2020

A. Chaves , V. N. Moura , F. J. A. Linard , L. Covaci, and M. V. Milošević 

COLLECTIONS

Paper published as part of the special topic on [2D Quantum Materials: Magnetism and Superconductivity](#)

View Online Export Citation CrossMark

- LINARD, F. *et al.* Wave-packet scattering at a normal-superconductor interface in two-dimensional materials: a generalized theoretical approach. (Submetido).