



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**  
**MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA**

**JOÃO VICTOR DA SILVA TAVARES**

**SUPERCONDUTIVIDADE MEDIADA POR EXCITONS E EXCITON-POLARITONS**  
**EM HETEROESTRUTURAS BIDIMENSIONAIS**

**FORTALEZA**

**2026**

JOÃO VICTOR DA SILVA TAVARES

SUPERCONDUTIVIDADE MEDIADA POR EXCITONS E EXCITON-POLARITONS EM  
HETEROESTRUTURAS BIDIMENSIONAIS

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

Orientador: Prof. Dr. Adrey Chaves

FORTALEZA

2026

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)

---

- T23s      Tavares, João Victor da Silva.  
            Supercondutividade mediada por excitons e exciton-polaritons em heteroestruturas bidimensionais /  
            João Victor da Silva Tavares. – 2026.  
            92 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação  
            em Física, Fortaleza, 2026.  
            Orientação: Prof. Andrey Chaves.
1. supercondutividade. 2. exciton-polaritons. 3. teoria BCS. 4. heteroestruturas 2D. 5. sistemas de baixa  
            dimensionalidade. I. Título.

CDD 530

---

JOÃO VICTOR DA SILVA TAVARES

SUPERCONDUTIVIDADE MEDIADA POR EXCITONS E EXCITON-POLARITONS EM  
HETEROESTRUTURAS BIDIMENSIONAIS

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

Aprovada em: 23/01/2026

BANCA EXAMINADORA

---

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

---

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Icaro Rodrigues Lavor  
Instituto Federal do Rio Grande do Norte (IFRN)

---

Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima  
Universidade da Integração Internacional da  
Lusofonia Afro Brasileira (UNILAB)

Dedico este trabalho aos meus pais e à minha avó, que infelizmente não pode estar aqui para me ver um físico formado.

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus e aos meus pais, Maria Aparecida e Paulo César, pelo apoio incondicional e confiança.

A minha amada companheira, Nazidy Oliveira, pela paciência, pelo apoio nos momentos difíceis e por ser a amiga de uma vida.

Ao Prof. Dr. Andrey Chaves pela orientação, disponibilidade e pela paciência com minhas dificuldades.

Aos professores do Departamento de Física que contribuíram para minha formação como pesquisador.

Aos meus bons amigos, pelo incentivo constante e apoio nos momentos difíceis da vida.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

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

"Os homens pedem a seus deuses que provem sua existência com milagres; mas a maravilha eterna é o fato de não haver milagres a todo instante".

(POINCARÉ, 1995, p.12)

## RESUMO

Este trabalho tem por objetivo investigar a supercondutividade em heteroestruturas semicondutoras bidimensionais. Nesses sistemas, a excitação de elétrons no semicondutor, por campos elétricos ou fótons de cavidade, pode dar origem a quasi-partículas bosônicas conhecidas como excitons e exciton-polaritons. Estudamos a viabilidade destes como mediadores de supercondutividade em um gás de elétrons bidimensional. No contexto da teoria BCS, mostramos que a interação entre eles e elétrons de condução dão origem a uma interação efetiva atrativa entre os elétrons favorecendo a formação de pares de Cooper, de forma análoga ao mecanismo de interação efetiva mediada por fônons em metais. Na literatura, sistemas deste tipo são candidatos para se alcançar a supercondutividade em altas temperaturas em razão de sua baixa massa efetiva e forte interação. Iniciamos com uma breve introdução sobre a supercondutividade e a teoria BCS, onde o mecanismo alternativo de mediação por excitons é discutido. Seguimos com a descrição detalhada da heteroestrutura sob investigação. Um modelo teórico e hamiltoniano são propostos, e é mostrado que existe interação atrativa efetiva entre elétrons permitindo que haja supercondutividade. O modelo é aplicado tanto para excitons como para exciton-polaritons. Descrevemos dois algoritmos para calcular a temperatura crítica  $T_C$  e o *gap* supercondutor  $\Delta$ , assim, mostramos que existe uma relação direta entre o aumento de  $T_C$  e a densidade de excitons/exciton-polaritons. O modelo também prevê uma diminuição na temperatura crítica quando se aumenta a densidade de elétrons  $N_e$ . Finalizamos com uma aplicação para uma heteroestrutura de van der Waals composta por dois dicalcogenetos de metais de transição e uma bicamada de grafeno (BLG) para hospedar o gás de elétrons. A heteroestrutura tem a configuração  $\text{WSe}_2\text{-hBN-MoSe}_2\text{-hBN-BLG}$ , que se justifica pelo fato de recentemente ter sido detectado experimentalmente excitons condensados em temperaturas da ordem de  $100\text{ K}$  nesta combinação de materiais. Mostramos que para esse sistema é esperado uma temperatura crítica  $\approx 101.2\text{ K}$ , que a coloca ao lado das de supercondutores de alta temperatura, como os Cupratos, por exemplo.

**Palavras-chave:** supercondutividade; exciton-polaritons; teoria BCS; heteroestruturas 2D; sistemas de baixa dimensionalidade.



## ABSTRACT

This work aims to investigate superconductivity in two-dimensional semiconductor heterostructures. In these systems, electron excitation in the semiconductor, by electric fields or cavity photons, can give rise to bosonic quasiparticles known as excitons and exciton-polaritons. We study their feasibility as mediators of superconductivity in a two-dimensional electron gas. Within the context of BCS theory, we show that the interaction between them and conduction electrons gives rise to an effective attractive interaction between electrons favoring the formation of Cooper pairs, analogously to the phonon-mediated effective interaction mechanism in metals. In the literature, systems of this type are candidates for achieving high-temperature superconductivity due to their low effective mass and strong interaction. We begin with a brief introduction to superconductivity and BCS theory, where the alternative exciton-mediated mechanism is discussed. We proceed with a detailed description of the heterostructure under investigation. A theoretical model and a Hamiltonian are proposed, and it is shown that there exists an effective attractive interaction between electrons enabling superconductivity. The model is applied to both excitons and exciton-polaritons. We describe two algorithms to calculate the critical temperature  $T_C$  and the superconducting gap  $\Delta$ ; thus, we show that there is a direct relationship between the increase in  $T_C$  and the density of excitons/exciton-polaritons. The model also predicts a decrease in the critical temperature when the electron density  $N_e$  is increased. We conclude with an application to a van der Waals heterostructure composed of two transition metal dichalcogenides and a bilayer graphene (BLG) to host the electron gas. The heterostructure has the configuration WSe<sub>2</sub>-hBN-MoSe<sub>2</sub>-hBN-BLG, which is justified by the fact that condensed excitons have been recently experimentally detected at temperatures of the order of 100 K in this combination of materials. We show that for this system a critical temperature of  $\approx 101.2$  K is expected, placing it alongside high-temperature superconductors, such as Cuprates.

**Keywords:** superconductivity; exciton–polaritons; BCS theory; 2D heterostructure; low-dimensional systems.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1	— Gráfico produzido por Onnes em 1911, que mostra a resistividade ( $\Omega$ ) em função da temperatura ( $K$ ). Uma queda abrupta na resistividade ocorre em $4.20\text{ K}$ . . . . .	18
Figura 2	— Linhas de um campo magnético $\vec{B}$ expulsas de um material no estado supercondutor. . . .	19
Figura 3	— Supercorrentes na superfície de um supercondutor. O supercondutor reage ao campo externo $\vec{B}$ produzindo uma corrente de superfície que o anula. . . . .	20
Figura 4	— Gráfico do calor específico do alumínio em função da temperatura. Uma descontinuidade surge em $T_c$ , com o valor do calor específico aumentando e em seguida decaindo exponencialmente. . . . .	22
Figura 5	— Densidade de estados de elétrons $g(\epsilon)$ no estado supercondutor, com $\epsilon_F$ sendo a energia de Fermi. A linha tracejada é a densidade de estados de um gás ideal de Fermi. Um <i>gap</i> de energia de valor $\Delta$ se abre em torno da energia de Fermi $\epsilon_F$ , com $g(\epsilon)$ divergindo nos pontos $\epsilon_F - \Delta$ e $\epsilon_F + \Delta$ . . . . .	22
Figura 6	— Efeito de retardação. As setas representam o elétron em movimento e o círculo um íon da rede, em que $E_F^{-1}$ (unidades em que $\hbar = 1$ ) é o tempo dos elétrons e $\omega_D^{-1}$ o tempo que o íon leva para retornar ao equilíbrio. . . . .	41
Figura 7	— Modelo da heteroestrutura do artigo (Allender <i>et al.</i> , 1973). Na camada de cima temos o semiconductor onde os excitons são formados; na camada de baixo temos o metal onde ficam os elétrons de condução. Ambas as camadas são separadas por uma distancia $L$ . O vetor $\vec{d}$ é o momento de dipolo do exciton. . . . .	42
Figura 8	— Representação da microcavidade que consiste em dois refletores de Bragg (DBR) montados sobre um substrato. Em seu interior, uma heteroestrutura composta por uma camada semicondutora em que se forma um BEC de exctions indiretos com comprimento de dipolo $d$ . Adjacente a uma distância $L$ desta, há um 2DEG sobre uma segunda camada bidimensional. . . . .	47
Figura 9	— Dispersão dos excitons sozinhos. Assim como a dispersão de uma partícula livre com massa efetiva $m_X$ , a forma do gráfico é a de uma parábola. . . . .	48
Figura 10	— Ramo inferior da dispersão dos exciton-polaritons. A curva se inicia com um comportamento linear, e para valores de $k$ grandes tem comportamento quadrático. A dependência em $ \vec{k} $ vem a forma de (3.3), que depende das dispersões quadráticas dos excitons e fótons. Em vermelho, as dispersão da parte do exciton dentro do polariton. . . . .	49

Figura 11 – Diagrama de Feynman para a interação efetiva entre elétrons. Dois elétrons com momento $\hbar\vec{k}$ e $\hbar\vec{k}'$ trocam momento $\hbar\vec{q}$ com a interação e acabam com momento $\hbar(\vec{k}-\vec{q})$ e $\hbar(\vec{k}'+\vec{q})$ respectivamente. . . . .	54
Figura 12 – Desenho da esfera de Fermi, como estamos num sistema 2D, a esfera se torna um círculo. Mantendo $\vec{k}'$ no eixo x negativo e variamos $\vec{k}$ no círculo cujo raio é o vetor de $k_F$ , por um ângulo $\theta$ a partir do eixo x positivo. . . . .	55
Figura 13 – Gráfico do potencial efetivo $V_A(\vec{q}, \omega)$ (em $\mu eV$ ), com $\hbar\omega = 40 meV$ , em função de $ \vec{q}  = \sqrt{2k_F(1+\cos\theta)}$ no intervalo $[0, 2\pi]$ . No centro, em $\theta = \pi$ , uma região atrativa, o zoom no quadro direito mostra que esta se encontra entre duas singularidades. Nas extremidades, duas regiões atrativas, o zoom no quadro esquerdo mostra um decaimento lento. Os pontos de singularidade separam todas essas regiões. . . . .	56
Figura 14 – Gráfico do potencial $U_0$ mediado por exciton-polaritons para vários valores de $N_0$ em $cm^{-2}$ . Observa-se uma região de valores negativos, seguida por uma positiva. A medida que $N_0$ cresce, a região negativa se amplia. . . . .	57
Figura 15 – Gráfico do potencial $U_0$ quando se tem exclusivamente excitons para alguns valores de $N_0$ em $cm^{-2}$ . Assim como na Fig. 14 a região negativa também aparece e se desloca para valores altos de $\hbar\omega$ com o aumento de $N_0$ . Nota-se que a ordem de grandeza da região negativa é menor que no caso da mediação por excitons-polaritons. . . . .	58
Figura 16 – O potencial de coulomb $\bar{V}_C$ se estende num raio $\hbar\omega_2$ e o potencial efetivo $\bar{V}_0$ um raio $\hbar\omega_1$ . O potencial de interação resultante da combinação destes é $U_0(\xi - \xi')$ e tem a forma de um poço $U_0$ com duas barreiras de valor $\bar{V}_C$ em suas bordas, sendo repulsivo nessas regiões. . . . .	59
Figura 17 – Gráficos para solução do $gap$ em $T=0$ e potencial $U_0(\xi)$ . Cada gráfico é produzido para um valor da densidade de excitons $N_0$ . A magnitude de $\Delta$ aumenta diretamente com o aumento de $N_0$ . . . . .	66
Figura 18 – Gráficos para solução do $gap$ em $T=0$ e potencial $U_0(\xi)$ . A forma dos gráficos se caracteriza por um pico grande acentuado no centro. A ordem de grandeza do decaimento cresce consideravelmente à medida que a densidade de polaritons aumenta. . . . .	67
Figura 19 – Solução do $gap$ para os excitons com $N_0 = 0.4 \times 10^{11} cm^{-2}$ , $T_C = 50.7 K$ . Em (a) vemos que a forma de solução é oscilatória em $\xi$ , mas suave em $T$ . Em (b) o $gap$ no ponto $\xi = 0$ em função da temperatura. . . . .	68
Figura 20 – Solução do $gap$ para os polaritons com $N_0 = 1.5 \times 10^{11} cm^{-2}$ , $T_C = 107.6 K$ . . . . .	68
Figura 21 – Temperatura crítica em função da densidade $N_0$ , onde $T_{amb}$ é a temperatura ambiente. . . . .	69

Figura 22 – Gráfico da temperatura crítica comparando excitons de massas distintas. A constante $m_X$ é a massa do éxciton. . . . .	70
Figura 23 – Gráfico da temperatura crítica comparando polaritons de massas distintas. As constantes $m_X$ e $m_C$ são a massa do éxciton e fóton de cavidade, respectivamente. . . . .	70
Figura 24 – Gráficos de $T_C$ em função de $N_e$ para alguns valores de $N_0$ no caso dos polaritons. A temperatura crítica decai à medida que $N_e$ cresce. A linha horizontal demarca a temperatura ambiente $T_{amb}$ . . . . .	71
Figura 25 – Esquema da heteroestrutura. Os elétrons na BLG são separados por uma distancia $L$ dos excitons. Os elétrons em $WSe_2$ saltam para a camada de $MoSe_2$ formando excitons intercamada com dipolo $d$ . . . . .	73
Figura 26 – $T_C$ em função de $N_0$ . Com a escolha para $N_e$ a temperatura crítica ambiente ocorre para valores maiores de $N_0$ do que os registrados nos gráficos da Fig. 21. . . . .	74
Figura 27 – Solução da função do $gap$ para o grafeno, com densidade de excitons $N_0 = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e energia de Fermi $\epsilon_F = 24.8 \text{ meV}$ . . . . .	74
Figura 28 – Na esquerda vemos as redes <b>A</b> e <b>B</b> no espaço de posições. Na direita a primeira zona de Brillouin no espaço recíproco, onde $\Gamma$ , $M$ , $\vec{K}$ e $\vec{K}'$ são os pontos de alta simetria. . . . .	87
Figura 29 – Gráfico da banda- $\pi^*$ e banda- $\pi$ . Em cada ponto de Dirac a dispersão assume uma forma aproximadamente cônica, característica de partículas com massa zero. . . . .	89
Figura 30 – Bicamada de Grafeno com empilhamento Bernal (AB). Os átomos $A_2$ (cinza claro) estão ligados fortemente aos átomos $B_1$ . . . . .	90

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros físicos relevantes do sistema com excitons/exciton-polaritons, onde escolhemos as unidades de massa do elétron (Laussy <i>et al.</i> , 2012). . . . .	50
Tabela 2 – Parâmetros físicos para o cálculo envolvendo a heteroestrutura com grafeno mostrada na Fig. 25. A permissividade está em unidades de permissividade do vácuo (Haastrup <i>et al.</i> , 2018). . . . .	75

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BCS	Bardeen, Cooper e Schrieffer
BEC	<i>Bose-Einstein Condensate</i>
BLG	<i>Bilayer Graphene</i>
CDW	<i>Charge Density Wave</i>
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
DBR	<i>Distributed Bragg Reflector</i>
SC	Supercondutor
TMD	<i>Transition-Metal Dichalcogenide</i>

## LISTA DE SÍMBOLOS

$T_C$	Temperatura crítica do supercondutor
$\Delta$	<i>Gap</i> de energia
$\omega_D$	Frequência de Debye
$\otimes$	Produto tensorial
$k_F$	Vetor de onda de Fermi
$\varepsilon_F$	Energia de Fermi
$E_b$	Energia de ligação do exciton
$m_e$	Massa do elétron
$N_0$	Densidade de excitons/exciton-polaritons
$N_e$	Densidade de elétrons
$\mathcal{N}$	Densidade de estados

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	17
2	INTRODUÇÃO À SUPERCONDUTIVIDADE . . . . .	18
2.1	História e Fenomenologia . . . . .	18
2.1.1	<i>Efeito Meissner e Equação de London</i> . . . . .	19
2.1.2	<i>Gap de Energia</i> . . . . .	21
2.1.3	<i>Efeito Isotópico</i> . . . . .	23
2.2	Teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) . . . . .	23
2.2.1	<i>Operadores de Criação e Aniquilação de Pares de Partículas</i> . . . . .	24
2.2.2	<i>Vetor de Estado Variacional</i> . . . . .	27
2.2.3	<i>Normalização</i> . . . . .	29
2.2.4	<i>Aproximação de Campo Médio</i> . . . . .	29
2.2.5	<i>Transformação de Bogoliubov e Equação do Gap</i> . . . . .	31
2.2.6	<i>Fônons como Mediadores de Interação entre Elétrons</i> . . . . .	35
2.2.7	<i>Efeito de Retardação</i> . . . . .	40
2.3	Mediações Alternativas aos Fônons . . . . .	41
2.3.1	<i>Excitons</i> . . . . .	41
2.3.2	<i>Exciton-Polaritons</i> . . . . .	43
2.4	Escopo da Dissertação . . . . .	44
3	INTERAÇÃO MEDIADA POR EXCITONS E EXCITON-POLARITONS	46
3.1	Modelo Teórico da Interação Efetiva . . . . .	46
3.1.1	<i>Descrição da Heteroestrutura</i> . . . . .	46
3.1.2	<i>Hamiltoniana do Sistema</i> . . . . .	47
3.1.3	<i>Interação Efetiva</i> . . . . .	49
3.1.4	<i>Potencial Efetivo Médio</i> . . . . .	54
3.2	Equação do Gap . . . . .	57
3.2.1	<i>Potencial de Bogoliubov</i> . . . . .	57
3.2.2	<i>Algoritmo para o calculo da Temperatura Crítica</i> . . . . .	62
3.2.3	<i>Algoritmo para o calculo de <math>\Delta(\xi, T)</math></i> . . . . .	64
4	RESULTADOS . . . . .	66
4.1	Função do Gap e $T_C$ : Excitons e Excitons-Polaritons . . . . .	66



<b>4.1.1</b>	<b><i>Análise da Temperatura Crítica</i></b> . . . . .	<b>69</b>
<b>4.1.2</b>	<b><i>T<sub>C</sub> em Função da Densidade Eletrônica N<sub>e</sub></i></b> . . . . .	<b>71</b>
<b>4.2</b>	<b>Aplicação Para uma Estrutura com TMDs e Bicamada de Grafeno</b> . . .	<b>72</b>
<b>4.2.1</b>	<b><i>Descrição do Sistema</i></b> . . . . .	<b>72</b>
<b>4.2.2</b>	<b><i>Temperatura Crítica e Função do Gap</i></b> . . . . .	<b>73</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b> . . . . .	<b>76</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>78</b>
	<b>APÊNDICES</b> . . . . .	<b>81</b>
	<b>APÊNDICE A – Valores médios e parâmetros variacionais</b> . . . . .	<b>81</b>
	<b>APÊNDICE B – Estrutura de Bandas de uma bicamada de Grafeno</b> . .	<b>86</b>

## 1 INTRODUÇÃO

A supercondutividade é um dos fenômenos mais fascinantes da física, não apenas pelo seu caráter frutífero em aplicações, mas também pela sofisticação teórica necessária para sua explicação. De fato, desde sua descoberta em 1911, é um dos campos de pesquisa mais ativos da física da matéria condensada e um grande esforço foi dedicado para obter uma teoria microscópica que se adequasse às teorias fenomenológicas. A teoria BCS, proposta em 1957, foi um passo pioneiro nesse sentido, que atribuía aos fônons o papel principal da supercondutividade.

Uma das características mais marcantes da supercondutividade são as baixíssimas temperaturas em que o estado supercondutor se forma, sendo, na maioria dos metais supercondutores, da ordem de poucos Kelvins acima do zero absoluto (Ginzburg *et al.*, 1987). Isso representa uma grande dificuldade para aplicações tecnológicas, uma vez que pequenas perturbações na temperatura podem destruir o seu estado. Por este motivo, a busca por supercondutores de altas temperaturas se tornou um dos grandes ramos de pesquisa dentro desse tema. Antes de 1986, não se acreditava que fosse possível existir supercondutividade em temperaturas acima de 30 K. No entanto, em 1986, Bednorz e Müller descobriram supercondutividade em óxido de lantânio e cobre na temperatura de  $\approx 36$  K (Bednorz; Müller, 1986) que foi o primeiro de toda uma nova classe de supercondutores denominados Cupratos. Nas décadas seguintes, novos supercondutores desse tipo foram descobertos em temperaturas ainda maiores, com até 203 K (Drozdov *et al.*, 2015).

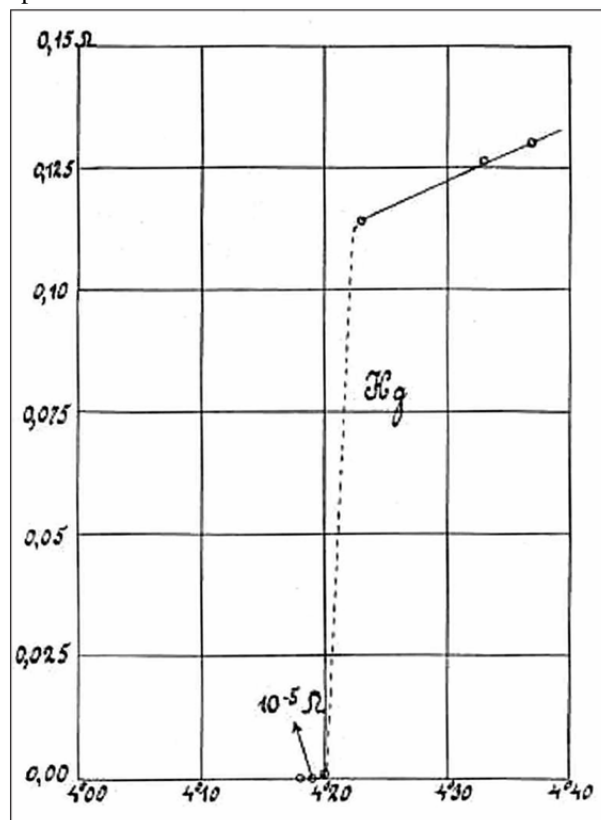
Neste trabalho iremos investigar outra proposta para um mecanismo gerador de supercondutividade, que consiste na substituição do papel dos fônons por excitons e exciton-polaritons. Uma vez que a teoria BCS permitiu uma compreensão profunda dos mecanismos internos dos supercondutores, diversos mecanismos alternativos podem ser tratados. Iniciamos com uma breve exposição de resultados fenomenológicos da supercondutividade, onde a teoria BCS será desenvolvida num contexto geral, e brevemente aplicada no caso convencional de fônons. Depois disso o mecanismo envolvendo excitons será apresentado. Um modelo teórico para uma microcavidade com uma heteroestrutura será apresentado, onde mostraremos que na presença de um condensado de Bose-Einstein de exciton-polaritons, a supercondutividade se torna possível. Por razões que serão detalhadas nos capítulos seguintes, a baixa massa dessas partículas junto com as fortes interações induzidas por elas levam a um aumento considerável na temperatura de formação. Este pode ser um possível caminho para supercondutividade de altas temperaturas, neste caso, até mesmo controlável por luz ou eletroluminescência.

## 2 INTRODUÇÃO À SUPERCONDUTIVIDADE

### 2.1 História e Fenomenologia

Em 1911 o físico holandês Kamerlingh Onnes, no contexto de um programa de pesquisa em Leiden sobre o comportamento da resistência elétrica em metais, trabalhava em experimentos de refrigeração do mercúrio a temperaturas próximas do zero absoluto. Ele observou que, em temperaturas abaixo de  $4.16\text{ K}$ , medidas de resistividade caíam de forma abrupta para valores não mensuráveis, efetivamente para zero (Onnes, 1911). Embora os modelos teóricos de condutividade em metais, como o modelo de Drude, impliquem em uma queda na resistividade com a temperatura, a queda abrupta observada caracterizava um comportamento anômalo (Delft; Kes, 2010). No ano seguinte, em 1912, o mesmo comportamento de resistência zero foi observado em metais de transição como o chumbo e estanho.

Figura 1 – Gráfico produzido por Onnes em 1911, que mostra a resistividade ( $\Omega$ ) em função da temperatura ( $K$ ). Uma queda abrupta na resistividade ocorre em  $4.20\text{ K}$ .



Fonte: Retirado de (Delft; Kes, 2010)

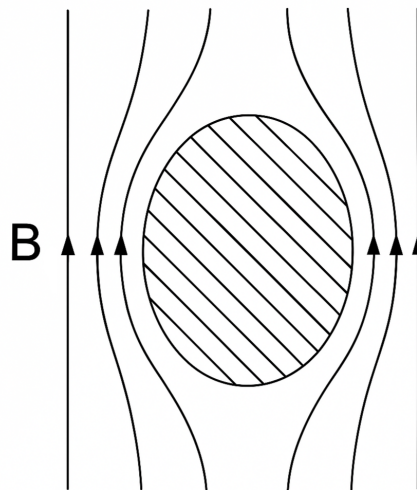
A resistividade nula em uma certa temperatura crítica  $T_C$  foi observada em diversos metais nos anos seguintes com o aprimoramento das técnicas experimentais de medição de

resistividade e outras grandezas eletrodinâmicas a baixas temperaturas. A ausência de dissipação no fluxo de portadores de carga tem por consequência as chamadas correntes persistentes, que não decaem com o tempo e podem persistir por tempos da ordem de 300 anos (Kim *et al.*, 1962). A descontinuidade observada no gráfico da Figura 1 é um dos primeiros indícios de que o metal sofre uma mudança descontínua nas suas propriedades termodinâmicas, assim caracterizando uma transição de fase. Um material que apresenta as características acima em uma certa temperatura crítica  $T_C$  é chamado de **supercondutor (SC)**.

### 2.1.1 Efeito Meissner e Equação de London

Em 1933 Meissner e Ochsenfeld descobriram um novo fenômeno relacionado ao estado SC (Meissner; Ochsenfeld, 1933). Quando uma amostra de um material supercondutor é exposta a um campo magnético  $\vec{B}$  e a sua temperatura é reduzida até a temperatura crítica  $T_C$ , o campo no interior da amostra é imediatamente expulso. Este é o chamado efeito Meissner e é ilustrado na figura 2.

Figura 2 – Linhas de um campo magnético  $\vec{B}$  expulsas de um material no estado supercondutor.



Fonte: Adaptado de (Fujita; Godoy, 2002)

Embora aparente ser uma mera consequência da resistividade zero, este efeito se diferencia do que se esperaria em um condutor perfeito clássico. Se um material condutor perfeito exposto a um campo magnético tiver sua resistividade anulada, o campo magnético em seu interior não necessariamente se anulará. Com o objetivo de explicar esse efeito anômalo, em 1935 os irmãos F. London e H. London propuseram um modelo fenomenológico que consistia em supor que dentro de um material supercondutor uma fração dos elétrons com densidade  $n_N$  tem

resistividade não nula, e outra com densidade  $n_S$  são elétrons responsáveis pelas supercorrentes. Acima de  $T_C$  temos obviamente  $n_S = 0$ .

Na ausência de resistência, um campo elétrico constante  $\vec{E}$  aplicado acelera os elétrons de supercondutores sem a dissipação de energia proveniente do efeito Joule, assim temos a equação de movimento:

$$m \frac{d\vec{v}_S}{dt} = -e\vec{E}. \quad (2.1)$$

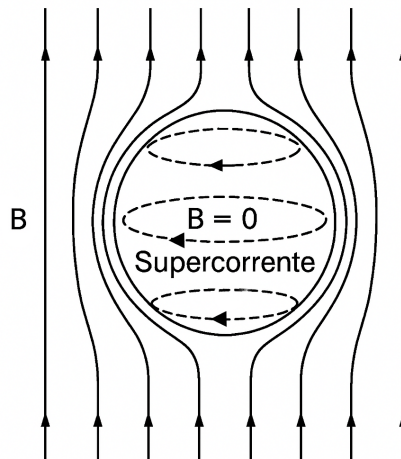
Sendo a supercorrente resultante dada por  $\vec{j} = -en_S\vec{v}_S$ , reescrevemos a equação (2.1) como:

$$\frac{d\vec{j}_S}{dt} = \frac{n_S e^2}{m} \vec{E}. \quad (2.2)$$

Substituindo a equação (2.2) na lei de indução da Faraday  $\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$ , obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \times \vec{j}_S + \frac{n_S e^2}{mc} \vec{B} \right) = 0. \quad (2.3)$$

Figura 3 – Supercorrentes na superfície de um supercondutor. O supercondutor reage ao campo externo  $\vec{B}$  produzindo uma corrente de superfície que o anula.



Fonte: Adaptado de (Fujita; Godoy, 2002)

Combinando a equação (2.3) com a lei de ampere  $\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_S$ , concluímos que quaisquer soluções  $\vec{B}$  e  $\vec{j}_S$  independentes do tempo são compatíveis com a equação (2.3). Isso está de acordo com a condutividade perfeita clássica, mas inclui o caso em que um campo

magnético não nulo pode existir dentro do material, algo incompatível como efeito Meissner. Para modelar adequadamente o supercondutor, London impôs a condição adicional de que

$$\nabla \times \vec{j}_S = -\frac{n_S e^2}{mc} \vec{B}, \quad (2.4)$$

ou seja, uma supercorrente superficial induzida  $\vec{j}_S$  sempre produz um campo de indução magnética  $\vec{B}$  que anula do campo aplicado em todo o volume do supercondutor, como mostrado na figura 3. A equação (2.4) é chamada de equação de London e implica diretamente o efeito Meissner.

Combinando (2.4) com a lei de ampere, obtemos o conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \vec{B} &= \frac{4\pi n_S e^2}{mc^2} \vec{B} \\ \nabla^2 \vec{j}_S &= \frac{4\pi n_S e^2}{mc^2} \vec{j}_S \end{aligned} \quad (2.5)$$

e considerando um supercondutor semi-infinito da direção  $x$ , a simetria nas direções  $y$  e  $z$  implica que  $\vec{B}(\vec{r}) = \vec{B}(x)$ . Assim, com a equação (2.5) e as condições de contorno adequadas, obtemos a solução:

$$\vec{B}(x) = \vec{B}(0) e^{-\frac{x}{\Lambda}}, \quad (2.6)$$

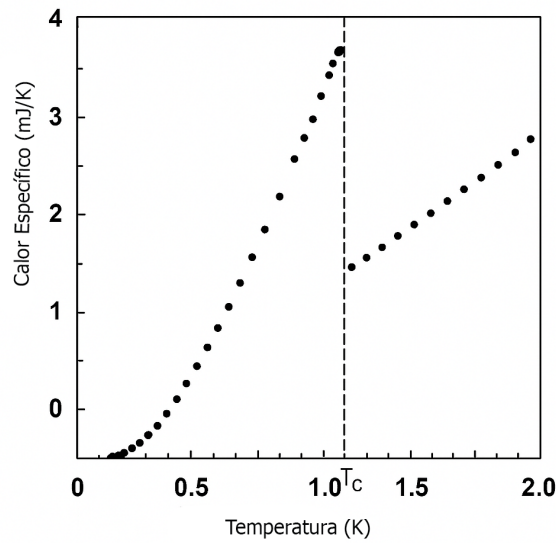
onde  $\Lambda = \left( \frac{mc^2}{4\pi n_S e^2} \right)^{1/2}$  é chamado de profundidade de penetração de London, pois quando  $x \sim \Lambda$  o campo decai rapidamente de forma exponencial. Os valores típicos para  $\Lambda$  são da ordem de  $10^3 \text{ \AA}$ .

### 2.1.2 Gap de Energia

Em sólidos normais, a capacidade térmica em baixas temperaturas tem contribuição mais forte dos elétrons próximos à energia de Fermi e da vibração dos íons da rede.

O calor específico tem a forma  $C_V = \alpha T + \beta T^3$ , com o termo de terceiro grau vindo da dinâmica da rede. Quando a temperatura esta próxima do zero absoluto o termo linear domina: este vem da contribuição dos elétrons com energia próxima da energia de Fermi. Entretanto, em um supercondutor, este comportamento de  $C_V$  se mantêm até a temperatura crítica, e abaixo dela se torna maior de forma descontínua e passa a decair exponencialmente com um termo da ordem de  $e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$ , que é um comportamento característico de um sistema com *gap* de energia de  $2\Delta$  entre a energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado. Próximo do zero absoluto, o *gap* impede que uma fração grande dos elétrons participe da condução de calor o que leva ao decaimento rápido do calor específico (Mermin; Ashcroft, 1968).

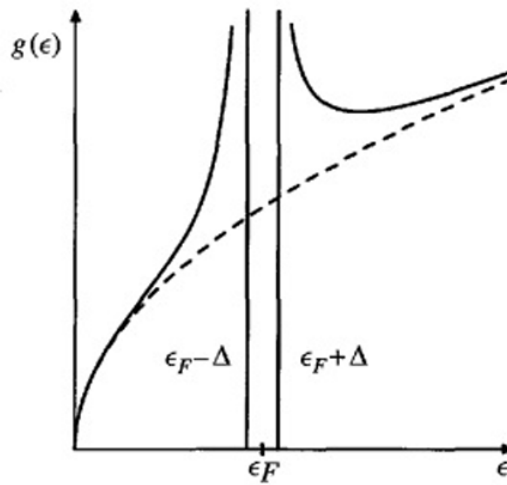
Figura 4 – Gráfico do calor específico do alumínio em função da temperatura. Uma descontinuidade surge em  $T_c$ , com o valor do calor específico aumentando e em seguida decaindo exponencialmente.



Fonte: Adaptado de (Fujita; Godoy, 2002)

A figura 4 mostra medidas do calor específico do alumínio que exhibe este comportamento. A presença do *gap* de energia tem grande importância na formação do estado supercondutor, tendo papel central na teoria BCS que será desenvolvida posteriormente. O *gap* surge em outros experimentos como espectroscopia de tunelamento e espectroscopia de micro-ondas.

Figura 5 – Densidade de estados de elétrons  $g(\epsilon)$  no estado supercondutor, com  $\epsilon_F$  sendo a energia de Fermi. A linha tracejada é a densidade de estados de um gás ideal de Fermi. Um *gap* de energia de valor  $\Delta$  se abre em torno da energia de Fermi  $\epsilon_F$ , com  $g(\epsilon)$  divergindo nos pontos  $\epsilon_F - \Delta$  e  $\epsilon_F + \Delta$ .



Fonte: Adaptado de (Annett., 2004)

A figura 5 mostra o comportamento da densidade de estados em um modelo onde

há na presença de um *gap* de energia em torno de  $\varepsilon_F$ . Na região  $(\varepsilon_F - \Delta, \varepsilon_F + \Delta)$  não existem estados disponíveis no gás de Fermi, nos limites inferior e superior deste intervalo um acúmulo de estados ocorre, um fenômeno que pode ser observado com os métodos experimentais citados anteriormente.

### 2.1.3 Efeito Isotópico

A descoberta fenomenológica mais relevante para a compreensão do estado SC talvez seja a relação entre a massa dos íons da rede do material e a temperatura crítica. Em 1950, Maxwell e Reynolds, descobriram que ao substituir íons de mercúrio por seus isotopos mais pesados, provocava-se uma diminuição no valor da temperatura crítica do supercondutor (Kresin; Wolf, 1990). Variando a unidade de massa atômica  $M$  de  $199.5 \text{ u}$  para  $203.4 \text{ u}$ , a temperatura crítica  $T_C$  se reduz de  $4.185 \text{ K}$  para  $4.146 \text{ K}$ . Em seu trabalho, eles estabeleceram a seguinte relação:

$$T_C M^\alpha = \text{const}, \quad (2.7)$$

onde é possível determinar  $\alpha \approx 1/2$ .

Como a massa da rede afeta diretamente as propriedades do supercondutor, sua dinâmica deve ter um papel relevante. Do modelo de Debye, sabemos que a frequência típica de vibração dos íons da rede de um sólido é  $\omega_D$  e que é da ordem de  $M^{-1/2}$ , que combinada com a relação (2.7) nos leva a:

$$T_C \propto \omega_D, \quad (2.8)$$

que mostra o primeiro caminho para compreender os mecanismos microscópicos por trás dos supercondutores, que posteriormente será deduzida de um modelo teórico que considera interações entre elétrons e os fônons da rede. Na próxima seção, nos dedicaremos descrever as primeiras tentativas de se criar tal modelo.

## 2.2 Teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)

Durante mais de 40 anos após a observação experimental dos fenômenos associados à SC, sua explicação em termos de uma teoria fundamental não havia sido descoberta. Os



primeiros passos nesse sentido foram dados por Fröhlich (Combescot; Shiau, 2015), que em 1952 sugeriu um mecanismo de atração efetiva entre elétrons intermediado pelos íons da rede cristalina. Os elétrons de carga negativa atrairiam os íons positivos, aumentando a densidade de carga efetiva ao seu redor, assim atraindo outros elétrons. Uma vez que esse mecanismo depende da mobilidade, e por sua vez da massa dos íons, mudanças na proporção entre os isótopos destes deveriam causar alterações nas propriedades típicas do supercondutor, e de fato era isso que se observava, como foi mostrado na seção 2.1.3.

Em 1956, Cooper (Combescot; Shiau, 2015) propôs um modelo que consistia em um par de elétrons em um mar de outros elétrons não interagentes, como os com energia abaixo da energia de Fermi em um gás degenerado. Ele supôs a existência de um potencial de atração efetivo fraco entre os elétrons do par, e como o mecanismo de atração entre eles é mediado pelos movimentos dos íons da rede, supôs também que a energia típica da interação era da ordem da energia dos fônons do material. Com essas suposições, Cooper mostrou que a formação de um estado ligado entre os elétrons era possível, este ficou conhecido como **par de Cooper**. Somente em 1957, Bardeen e Schrieffer melhoraram o modelo de Cooper, e em conjunto publicaram a solução para um sistema de  $P = 2N$  pares (Bardeen *et al.*, 1957), a teoria ficou conhecida como **teoria BCS**, levando as iniciais dos nomes de seus criadores.

A abordagem desta teoria usa o método variacional para encontrar o estado fundamental do sistema de  $2N$  corpos, propondo um vetor variacional que leva em conta o emparelhamento dos elétrons. No decorrer desta Seção, iremos nos dedicar a desenvolver essa teoria. Tomaremos como hipótese a existência de um potencial efetivo atrativo entre os elétrons do par, sua origem será discutida nas próximas Seções.

### 2.2.1 Operadores de Criação e Aniquilação de Pares de Partículas

A abordagem da teoria BCS é semelhante à da teoria de campo médio para sistemas de  $N$  corpos; nesta, propõe-se um vetor de estado variacional que consiste em  $N$  aplicações de operadores de criação de elétrons  $\sigma_{\vec{k},v}^\dagger$  (com momento  $\hbar\vec{k}$  e spin  $v$ ) sobre o estado de vácuo  $|0\rangle$ , o que, após a sua otimização, leva a um potencial externo efetivo que é a média das interações de uma partícula com as demais, ou seja, um potencial de campo médio. Os operadores obedecem a álgebra de anti-comutadores férmions, com  $\{\sigma_{\vec{k},v}, \sigma_{\vec{k}',v'}^\dagger\} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{v,v'}$ ,  $\{\sigma_{\vec{k},v}, \sigma_{\vec{k}',v'}\} = 0$  e  $\{\sigma_{\vec{k},v}^\dagger, \sigma_{\vec{k}',v'}^\dagger\} = 0$ . Embora leve a boas aproximações do estado fundamental do sistema, a forma mais simples do vetor de estado variacional leva em conta apenas as correlações estatísticas

entre as partículas, pois, como o movimento de uma partícula afeta todas as demais, o potencial efetivo não captura as correlações dinâmicas entre elas (Cohen-Tannoudji *et al.*, 2020).

Devido à natureza dos fenômenos da SC, não é possível negligenciar totalmente os efeitos das correlações dinâmicas, por isso procedemos introduzindo um novo tipo de vetor de estado variacional que leva em conta não apenas o estado de uma partícula mas o de um par de partículas. Seja um sistema de duas partículas idênticas com spin  $S$  que interagem. Considere que estão dentro de uma grande caixa cúbica de lado  $L$ . Considere o sistema nas coordenadas relativas  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$  e de centro de massa  $(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$ . Seja  $|\Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle$  o estado do sistema com momento total  $\vec{K}$  e  $|\chi_S\rangle$  o estado conjunto de spin das partículas. Temos:

$$|\Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \sum_{v_1, v_2} |1 : \vec{r}_1, v_1; 2 : \vec{r}_2, v_2\rangle \langle 1 : \vec{r}_1, v_1; 2 : \vec{r}_2, v_2 | \Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle, \quad (2.9)$$

onde:

$$\begin{aligned} \Phi_{\vec{K}}^{v_1, v_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \langle 1 : \vec{r}_1, v_1; 2 : \vec{r}_2, v_2 | \Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle \\ &= (L)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{K} \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2} \chi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \langle v_1, v_2 | \chi_S\rangle. \end{aligned} \quad (2.10)$$

O momento total  $\vec{K}$  do sistema assume valores num conjunto enumerável,  $v_1$  e  $v_2$  são os valores de spin das partículas. Expandimos a função  $\chi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  em termos de sua serie de Fourier:

$$\chi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = (L)^{-\frac{3}{2}} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}. \quad (2.11)$$

A natureza fermiônica das partículas implica que a função de onda deve ser antissimétrica, portanto fazemos  $g_{-\vec{k}} = g_{\vec{k}}$  e  $\langle v_1, v_2 | \chi_S\rangle = -\langle v_2, v_1 | \chi_S\rangle$ . Além disso a normalização requer que  $\sum |g_{\vec{k}}|^2 = 1$ . Finalmente, substituindo (2.11) em (2.10) e reorganizando os termos:

$$\Phi_{\vec{K}}^{v_1, v_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (L)^{-3} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} e^{i(\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}) \cdot \vec{r}_1} e^{i(\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}) \cdot \vec{r}_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S\rangle, \quad (2.12)$$

portanto, ficamos com:

$$\begin{aligned} |\Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle &= \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S\rangle (L)^{-3} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} e^{i(\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}) \cdot \vec{r}_1} e^{i(\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}) \cdot \vec{r}_2} |1 : \vec{r}_1, v_1; 2 : \vec{r}_2, v_2\rangle = \\ &= \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S\rangle \left\{ \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 (L)^{-3} e^{i(\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}) \cdot \vec{r}_1} e^{i(\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}) \cdot \vec{r}_2} |1 : \vec{r}_1, v_1; 2 : \vec{r}_2, v_2\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

o termo entre chaves é simplesmente o estado de duas partículas, onde a primeira tem componente de spin  $v_1$  e momento  $\hbar(\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k})$ , e a segunda tem componente de spin  $v_2$  e momento  $\hbar(\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k})$ , assim ficamos com:

$$\begin{aligned} |\Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle &= \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle \left| 1 : \left( \frac{\vec{K}}{2} + \vec{k} \right), v_1; 2 : \left( \frac{\vec{K}}{2} - \vec{k} \right), v_2 \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \left\{ \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle \left| 1 : \left( \frac{\vec{K}}{2} + \vec{k} \right), v_1; 2 : \left( \frac{\vec{K}}{2} - \vec{k} \right), v_2 \right\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle \left| 1 : \left( \frac{\vec{K}}{2} + \vec{k} \right), v_1; 2 : \left( \frac{\vec{K}}{2} - \vec{k} \right), v_2 \right\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Como a variável  $\vec{k}$  no somatório assume valores positivos e negativos de forma simétrica, no segundo termo da ultima parte de (2.14) trocamos  $\vec{k}$  por  $-\vec{k}$ , por consequência  $g_{-\vec{k}} = g_{\vec{k}}$ . Também trocamos, no segundo termo,  $v_1$  por  $v_2$ . Como  $\langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle = -\langle v_2, v_1 | \chi_S \rangle$ ,  $|\Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle$  é igual a:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle \left\{ \left| 1 : \left( \frac{\vec{K}}{2} + \vec{k} \right), v_1; 2 : \left( \frac{\vec{K}}{2} - \vec{k} \right), v_2 \right\rangle - \right. \\ &\quad \left. - \left| 1 : \left( \frac{\vec{K}}{2} - \vec{k} \right), v_2; 2 : \left( \frac{\vec{K}}{2} + \vec{k} \right), v_1 \right\rangle \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, v_1}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, v_2}^\dagger |0\rangle, \end{aligned} \quad (2.15)$$

finalmente:

$$|\Phi_{\vec{K}}, \chi_S\rangle = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, v_1}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, v_2}^\dagger \right\} |0\rangle. \quad (2.16)$$

Definimos o termo entre chaves como o **operador de criação de par de partículas** com momento  $\hbar\vec{K}$  e spin  $S$ .

$$A_{\vec{K}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sum_{v_1, v_2} \langle v_1, v_2 | \chi_S \rangle \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, v_1}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, v_2}^\dagger \quad (2.17)$$

O operador (2.17) cria uma "molécula" com duas partículas. Como os parâmetros  $g_{\vec{k}}$  são a transformada de Fourier da função  $\chi(\vec{r})$ , toda a informação referente a função de onda está contida nestes parâmetros e no estado conjunto de spin  $|\chi_S\rangle$ . Queremos que os operadores  $A_{\vec{K}}^\dagger$  criem estados de pares de partículas como os pares de Cooper. Antes da teoria BCS, em seu modelo de um único par, Cooper supôs que, devido ao princípio de exclusão de Pauli, os estados de elétrons emparelhados que teriam probabilidade maior de existir seriam aqueles em

que suas componentes tem spins opostos (Combescot; Shiau, 2015). Portanto, se no estado de spin conjunto tivermos  $S = 1/2$ , devemos escolher que este seja o estado de singlete:

$$|\chi_{1/2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle], \quad (2.18)$$

portanto  $\langle\uparrow, \uparrow|\chi_{1/2}\rangle = \langle\downarrow, \downarrow|\chi_{1/2}\rangle = 0$  e  $\langle\uparrow, \downarrow|\chi_{1/2}\rangle = 1/\sqrt{2}$   $\langle\downarrow, \uparrow|\chi_{1/2}\rangle = -1/\sqrt{2}$ , e o operador em (2.17) fica:

$$A_{\vec{K}}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \left[ \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, \uparrow}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, \downarrow}^\dagger - \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, \downarrow}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, \uparrow}^\dagger \right], \quad (2.19)$$

no segundo membro de (2.19) trocamos  $\vec{k}$  por  $-\vec{k}$  e invertemos a ordem dos operadores de criação. Como  $\sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, \downarrow}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, \uparrow}^\dagger = -\sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, \uparrow}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, \downarrow}^\dagger$  e  $g_{-\vec{k}} = g_{\vec{k}}$  ficamos com:

$$A_{\vec{K}}^\dagger = \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{k}, \uparrow}^\dagger \sigma_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{k}, \downarrow}^\dagger, \quad (2.20)$$

o operador (2.20) cria um par de Cooper com momento total  $\hbar\vec{K}$ . Com este operador podemos construir um vetor de estado variacional da teoria BCS, modificando os parâmetros  $g_{\vec{k}}$  podemos encontrar uma aproximação para o estado fundamental.

### 2.2.2 Vetor de Estado Variacional

O par de elétrons é composto por duas partículas de spin semi-inteiro, logo o momento angular conjunto será o de uma partícula de spin inteiro. Isso sugere que um vetor variacional seja semelhante ao que é usado na teoria de campo médio para bósons, embora sejam sistemas de natureza diferente. Assim, em um sistema com  $P$  pares de Cooper e  $N = 2P$  elétrons, teríamos:

$$|\Psi_P(\vec{K})\rangle = [A_{\vec{K}}^\dagger]^P |0\rangle, \quad (2.21)$$

onde podemos escolher o momento total do par  $\hbar\vec{K} = 0$ , pois o estado buscado é o de menor energia.

$$|\Psi_P\rangle = [A_{\vec{K}=0}^\dagger]^P |0\rangle. \quad (2.22)$$

Apesar da aparente simplicidade, a forma do estado na equação (2.22) é tremendamente difícil de manipular, uma vez que temos o produto de  $P$  somas sobres os vários  $\vec{k}s$ , e não temos a simplicidade, como no caso de bósons condensados, de que o estado seja um mero produto tensorial de vários estados individuais (Cohen-Tannoudji *et al.*, 2020). Isso motiva a definição *ad hoc* de um outro estado variacional, que será chamado de estado BCS:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \frac{1}{P!} [A_{\vec{k}=0}^{\dagger}]^P |0\rangle = \exp(A_{\vec{k}=0}^{\dagger}) |0\rangle. \quad (2.23)$$

O vetor definido pela equação (2.23) não possui mais um número bem definido de partículas, no entanto, será mostrado nas próximas seções e no apêndice A que de modo semelhante ao ensemble grão-canônico, quando sistema é suficientemente grande a flutuação relativa do número de partículas em relação ao valor médio  $\langle \hat{N} \rangle$  tende para zero (Cohen-Tannoudji *et al.*, 2020). Continuando, temos ainda:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \exp\left\{\sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}\right\} |0\rangle = \prod_{\vec{k}} \exp(g_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle, \quad (2.24)$$

e considerando a expansão da exponencial de operador e a anti-simetria dos operadores de criação:

$$\exp(g_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (g_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger})^n = \mathbb{I} + g_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}, \quad (2.25)$$

portanto, o estado BCS tem a forma final:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\vec{k}} (\mathbb{I} + g_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle. \quad (2.26)$$

Definindo  $|\varphi_{\vec{k}}\rangle = (\mathbb{I} + g_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle$ , reescrevemos a equação (2.26) como simplesmente um produto tensorial:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \bigotimes_k |\varphi_{\vec{k}}\rangle. \quad (2.27)$$

### 2.2.3 Normalização

Com a forma (2.27) é imediato obter a condição de normalização para o estado BCS.

Assim:

$$1 = \langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle = \left[ \bigotimes_k \langle \varphi_{\vec{k}} | \right] \left[ \bigotimes_k | \varphi_{\vec{k}} \rangle \right] = \prod_{\vec{k}} \langle \varphi_{\vec{k}} | \varphi_{\vec{k}} \rangle, \quad (2.28)$$

logo, uma condição suficiente para normalização é  $\langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle = 1$ , o que leva a definição das constantes de normalização  $u_{\vec{k}}$  e  $v_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} g_{\vec{k}}$  tais que:

$$|\bar{\varphi}_{\vec{k}}\rangle = (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle, \quad (2.29)$$

impondo a condição de normalização:

$$\begin{aligned} 1 = \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle &= \langle 0 | (u_{\vec{k}}^* + v_{\vec{k}}^* \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}) (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle = \\ &= |u_{\vec{k}}|^2 + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^* \langle 0 | \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} |0\rangle + u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}} \langle 0 | \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger} |0\rangle + |v_{\vec{k}}|^2 \langle 0 | \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \end{aligned} \quad (2.30)$$

os termos cruzados se anulam e o termo de  $|v_{\vec{k}}|^2$  é igual a 1, assim obtemos a condição:

$$|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1. \quad (2.31)$$

Definimos uma parametrização nas variáveis de normalização que obedece esta equação escolhendo as formas complexas  $u_{\vec{k}} = \cos \theta_{\vec{k}} e^{-i\zeta_{\vec{k}}}$  e  $v_{\vec{k}} = \sin \theta_{\vec{k}} e^{i\zeta_{\vec{k}}}$ . O estado BCS normalizado se escreve então como:

$$|\bar{\Psi}_{BCS}\rangle = \bigotimes_{\vec{k}} (\cos \theta_{\vec{k}} e^{-i\zeta_{\vec{k}}} + \sin \theta_{\vec{k}} e^{i\zeta_{\vec{k}}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle, \quad (2.32)$$

onde operador  $\sigma_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}$  cria dois estados com momento e spin  $(\hbar \vec{k}, \uparrow)$  e  $(-\hbar \vec{k}, \downarrow)$ . Assim, uma interpretação para os parâmetros seria a seguinte:  $|v_{\vec{k}}|^2$  é a probabilidade de que exista um estado com  $(\hbar \vec{k}, \uparrow)$  e  $(-\hbar \vec{k}, \downarrow)$ , e  $|u_{\vec{k}}|^2$  é a probabilidade desse estado estar vazio.

### 2.2.4 Aproximação de Campo Médio

A utilização do vetor da forma (2.23) permitiu simplificar enormemente as manipulações e cálculos de valores médios, no entanto, introduziu-se uma flutuação no número de pares

do sistema. Embora, como demonstra (A.14), a flutuação seja pequena no limite termodinâmico, devemos levar em conta a variação na energia total do sistema devido à variação virtual do número de pares. Seja o Hamiltoniano do sistema dado por (Combescot; Shiau, 2015):

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \} + \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}, \quad (2.33)$$

como o potencial químico  $\mu$  do sistema representa a taxa de variação da energia total em função da variação do número de partículas de um sistema, a parcela da energia devido a essa variação é  $\mu \hat{N}$ , assim definimos o hamiltoniano como o operador:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \} + \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} - \mu \hat{N}. \quad (2.34)$$

Como  $\hat{N} = \sum_{\vec{k}} \{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \sigma_{\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\downarrow} \}$ , definindo  $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon(\vec{k}) - \mu$ , temos finalmente:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \sigma_{\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\downarrow} \} + \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}. \quad (2.35)$$

O hamiltoniano  $\hat{H}_{BCS}$  representa a energia livre do sistema descontando parte devido a variação virtual de pares. Este também é conhecido como hamiltoniano grão-canônico por sua conexão com o ensemble grão-canônico.

Sejam dois observáveis  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$ , o valor médio operador  $(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)$  pode ser interpretado, do ponto de vista estatístico, como a correlação entre os observáveis. Se a correlação entre eles for zero, então:

$$(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) = \hat{A}\hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle = 0, \quad (2.36)$$

o que nos leva à aproximação de Hartree–Fock:

$$\hat{A}\hat{B} = \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \langle \hat{B} \rangle \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle. \quad (2.37)$$

A aproximação de campo médio ignora as correlações dinâmicas entre as partículas. Ao introduzir os operadores de pares estados, levamos em conta as correlações entre duas partículas. O operador do tipo  $\sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}$ , que aparece no termo de interação, aniquila um par com momento  $\hbar \vec{k}$  e cria outro com momento  $\hbar \vec{k}'$ , logo este captura a correlação dinâmica

entre dois pares. Neste ponto, fazemos a aproximação de ignorar quaisquer correlações de ordem mais alta (três, quatro, cinco partículas e etc), o que nos permite escrever:

$$(\sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger)(\sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}) = \langle \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \rangle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \langle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \rangle \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger - \langle \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \rangle \langle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \rangle, \quad (2.38)$$

substituindo (2.38) em (2.35), ficamos com:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BCS} = & \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \sigma_{\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\downarrow} \} + \\ & + \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \left\{ \langle \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \rangle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \langle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \rangle \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger - \langle \sigma_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \rangle \langle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Definimos o **gap**, como a quantidade:

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \rangle, \quad (2.40)$$

e reescrevemos a hamiltoniana como:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \} - \sum_{\vec{k}} \left\{ \Delta_{\vec{k}}^* \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \Delta_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger - \Delta_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \rangle \right\}. \quad (2.41)$$

Com isto, é possível mostrar que para um vetor  $|\bar{\Psi}_{BCS}\rangle$  ótimo é suficiente escolher  $\zeta_{\vec{k}} = 0$ , logo,  $u_{\vec{k}}$  e  $v_{\vec{k}}$  são parâmetros reais. Após efetuar a otimização (os detalhes são feitos no apêndice A) obtemos os valores:

$$u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right)} \quad \text{e} \quad v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right)}, \quad (2.42)$$

onde  $E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}$ .

### 2.2.5 Transformação de Bogoliubov e Equação do Gap

O ultimo passo para completar a solução é encontrar o valor para o *gap* (2.40), que está presente em  $E_{\vec{k}}$ . Para isso reescrevemos o hamiltoniano (2.41):

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \left\{ \xi_{\vec{k}} \{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \} - \Delta_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} - \Delta_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right\} - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \rangle, \quad (2.43)$$



definimos  $E_0 = -\sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \rangle$ , e reescrevemos os termos do hamiltoniano  $\hat{H}_{BCS}$  usando as relações de anti-comutação entre os operadores.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BCS} &= \sum_{\vec{k}} \left\{ \xi_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \xi_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} - \Delta_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} - \Delta_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right\} + E_0 = \\ &= \sum_{\vec{k}} \left\{ \xi_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \Delta_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger - \xi_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger + \Delta_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \right\} + E_0 = \\ &= \sum_{\vec{k}} \left\{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger (\xi_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow} + \Delta_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger) + \sigma_{-\vec{k},\downarrow} (\Delta_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow} - \xi_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger) \right\} + E_0, \end{aligned} \quad (2.44)$$

escrevendo em notação matricial:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \left\{ \begin{pmatrix} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger & \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{k}} & \Delta_{\vec{k}} \\ \Delta_{\vec{k}} & -\xi_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \\ \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \right\} + E_0. \quad (2.45)$$

A equação (2.45) evidencia o fato de que  $\hat{H}_{BCS}$  é uma forma quadrática nos operadores  $\sigma_{\vec{k},\uparrow}$  de aniquilação e  $\sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  de criação, com a matriz que a define sendo chamada de hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes (Jr, 2010).

$$H_{BdG} = \begin{pmatrix} \xi_{\vec{k}} & \Delta_{\vec{k}} \\ \Delta_{\vec{k}} & -\xi_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

cujos autovalores são  $\pm \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}$ , que podemos reconhecer imediatamente como  $\pm E_{\vec{k}}$  e seus autovetores associados normalizados sendo:

$$v_+ = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad v_- = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -v_{\vec{k}} \\ u_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

assim, podemos escrever (2.46) em uma representação diagonal:

$$H_{BdG} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & -v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & -v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix}. \quad (2.48)$$

Substituindo isso em (2.45), ficamos com:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \left\{ \begin{pmatrix} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger & \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ -v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & -v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \\ \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \right\} + E_0. \quad (2.49)$$

Finalmente, definimos os operadores de criação e aniquilação  $b_{\vec{k},\uparrow}$  e  $b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  através da transformação:

$$\begin{pmatrix} b_{\vec{k},\uparrow} \\ b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & -v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \\ \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

A relação (2.50) é conhecida como **Transformação de Bogoliubov**. É imediato constatar que os operadores assim definidos satisfazem as relações de anti-comutação.

$$\{b_{\vec{k},\uparrow}, b_{-\vec{k},\downarrow}\} = u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \left[ \left\{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}, \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \right\} - \left\{ \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger, \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \right\} \right] = 0, \quad (2.51)$$

analogamente,  $\{b_{\vec{k},\uparrow}^\dagger, b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger\} = 0$ ,  $\{b_{\vec{k},\uparrow}, b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger\} = 0$  e  $\{b_{-\vec{k},\downarrow}, b_{\vec{k},\uparrow}^\dagger\} = 0$ , e também:

$$\{b_{\vec{k},\uparrow}, b_{\vec{k},\downarrow}^\dagger\} = u_{\vec{k}}^2 \left\{ \sigma_{\vec{k},\uparrow}, \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \right\} + v_{\vec{k}}^2 \left\{ \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger, \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \right\} = u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1. \quad (2.52)$$

Em resumo, concluímos que os operadores  $b_{\vec{k},\uparrow}$  e  $b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  são operadores de criação fermiônicos:

$$\{b_{\vec{k},\uparrow}^\dagger, b_{\vec{k}',\downarrow}^\dagger\} = 0 \quad \{b_{\vec{k},\uparrow}, b_{\vec{k}',\downarrow}\} = 0 \quad \{b_{\vec{k},\uparrow}, b_{\vec{k}',\downarrow}^\dagger\} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}. \quad (2.53)$$

Considere a ação dos operadores de aniquilação  $b_{\vec{k},\uparrow}$  e  $b_{-\vec{k},\downarrow}$  sobre os estados  $|\bar{\varphi}_{\vec{k}}\rangle$

$$b_{\vec{k},\uparrow} |\bar{\varphi}_{\vec{k}}\rangle = \left[ u_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow} - v_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right] \left[ u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle. \quad (2.54)$$

Como  $\sigma_{\vec{k},\uparrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle = \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle$  temos

$$b_{\vec{k},\uparrow} |\bar{\varphi}_{\vec{k}}\rangle = \left[ u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger - v_{\vec{k}} u_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle = 0, \quad (2.55)$$

da mesma forma, temos  $b_{-\vec{k},\downarrow} |\bar{\varphi}_{\vec{k}}\rangle = 0$ . O que implica que:

$$b_{\vec{k},\uparrow} |\bar{\Psi}_{BCS}\rangle = 0 \quad \text{e} \quad b_{-\vec{k},\downarrow} |\bar{\Psi}_{BCS}\rangle = 0. \quad (2.56)$$

Como o operador de aniquilação anula o estado  $|\bar{\Psi}_{BCS}\rangle$ , este pode ser interpretado como um estado de vácuo para as excitações criadas por estes operadores. Escrevendo a hamiltoniana (2.45) com a transformação de Bogoliubov:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \left\{ b_{\vec{k},\uparrow}^\dagger b_{\vec{k},\uparrow} + b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger b_{-\vec{k},\downarrow} \right\} + E_0, \quad (2.57)$$

obtemos uma forma que é idêntica à de uma hamiltoniana de partículas não interagentes. Como  $b_{\vec{k},\uparrow}^\dagger = u_{\vec{k}}\sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger - v_{\vec{k}}\sigma_{-\vec{k},\downarrow}$ , podemos interpreta-los como criadores de excitações no estado supercondutor BCS, que consiste numa superposição coerente entre estados de partículas reais e buracos. Afirmamos que os operadores  $b_{\vec{k},\uparrow}^\dagger$  e  $b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  criam estados de quase-partículas, que são criadas quando estes atuam sobre o novo vácuo na forma do estado BCS (Combescot; Shiau, 2015). A partir de (2.57) obtemos imediatamente que  $\hat{H}_{BCS}|\bar{\Psi}_{BCS}\rangle = E_0|\bar{\Psi}_{BCS}\rangle$ , logo  $E_0$  é a energia do estado fundamental do sistema, ou a energia do vácuo de quase-partículas.

A transformação de Bogoliubov possui uma inversa:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \\ \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ -v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\vec{k},\uparrow} \\ b_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.58)$$

portanto, a equação do *gap* pode ser reescrita em termos dos novos operadores de criação e aniquilação:

$$\Delta_{\vec{k}} = -\sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k}',\uparrow} \rangle = -\sum_{\vec{k}''} V_{\vec{k}\vec{k}''} \left\langle \left( u_{\vec{k}'} b_{-\vec{k}',\downarrow} - v_{\vec{k}'} b_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \right) \left( u_{\vec{k}''} b_{\vec{k}'',\uparrow} + v_{\vec{k}''} b_{-\vec{k}'',\downarrow}^\dagger \right) \right\rangle \quad (2.59)$$

$$\text{onde } \langle \sigma_{-\vec{k}',\downarrow} \sigma_{\vec{k}',\uparrow} \rangle = u_{\vec{k}'}^2 \langle b_{-\vec{k}',\downarrow} b_{\vec{k}',\uparrow} \rangle + u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \langle b_{-\vec{k}',\uparrow} b_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \rangle - u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \langle b_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger b_{\vec{k}',\uparrow} \rangle - v_{\vec{k}'}^2 \langle b_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger b_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \rangle,$$

usando a transformação inversa e os valores médios (A.17), obtemos  $\langle b_{-\vec{k}',\downarrow} b_{\vec{k}',\uparrow} \rangle = u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'}$ , o que leva a:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{-\vec{k}',\downarrow} \sigma_{\vec{k}',\uparrow} \rangle &= u_{\vec{k}'}^2 u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} + u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \langle b_{-\vec{k}',\uparrow} b_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \rangle - u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \langle b_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger b_{\vec{k}',\uparrow} \rangle + v_{\vec{k}'}^2 u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \\ &= u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left[ 1 - \langle b_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger b_{-\vec{k}',\uparrow} \rangle - \langle b_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger b_{\vec{k}',\uparrow} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Como a hamiltoniana (2.57) tem a forma da de um sistema de partícula livre com energia  $E_{\vec{k}'}$ , as ocupações médias seguem a distribuição de Fermi-Dirac  $\langle b_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger b_{-\vec{k}',\uparrow} \rangle = \langle b_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger b_{\vec{k}',\uparrow} \rangle = (1 + e^{\beta E_{\vec{k}'}})^{-1}$  o que implica:

$$\langle \sigma_{-\vec{k}',\downarrow} \sigma_{\vec{k}',\uparrow} \rangle = u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \left[ 1 - \frac{2}{1 + e^{\beta E_{\vec{k}'}}} \right] = \frac{1}{2} \sqrt{\left( 1 - \frac{\xi_{\vec{k}'}^2}{E_{\vec{k}'}^2} \right)} \operatorname{tgh} \left( \frac{\beta}{2} E_{\vec{k}'} \right). \quad (2.61)$$

Finalmente, chegamos na equação do *gap*.

$$\Delta_{\vec{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \left( \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta_{\vec{k}'}^2}} \right) \operatorname{tgh} \left( \frac{\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta_{\vec{k}'}^2}}{2k_b T} \right). \quad (2.62)$$

A equação (2.62) define  $\Delta = \Delta(\xi_{\vec{k}}, T)$  e permite obter soluções acima da temperatura  $T$  do zero absoluto.

### 2.2.6 Fônons como Mediadores de Interação entre Elétrons

Os elétrons, sendo partículas de carga negativa, se repelem por interações coulombianas, o que por si só tornaria impossível a formação de qualquer estado ligado entre eles. No entanto, quando estão em um meio com outras partículas, podem interagir indiretamente através de interações com elas. Como foi discutido no início da seção 2.2, foi teorizado por Cooper que um elétron que se propaga provoca uma deformação na rede cristalina, e essa deformação afeta outros elétrons. As deformações em um cristal são quantizadas, e podem ser vistas como quasi-partículas chamadas de fônons. Investigaremos sob que condições essa interação pode ser atrativa.

Vamos considerar um sistema de elétrons na aproximação do elétron independente, mas que interagem com a rede subjacente. Essas interações podem ser vistas como interações entre elétrons e fônons da rede. Assim, a hamiltoniana do sistema é dada por:

$$\hat{H} = \hat{H}_{0e} + \hat{H}_{0f} + \hat{H}_{e-f}, \quad (2.63)$$

onde:

$$\hat{H}_{0e} = \sum_{\vec{k}, v} \varepsilon(\vec{k}) \sigma_{\vec{k}, v}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}, v}, \quad (2.64)$$

$$\hat{H}_{0f} = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega(\vec{q}) c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}}, \quad (2.65)$$

$$\hat{H}_{e-f} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, v} T_{\vec{q}} (c_{-\vec{q}}^{\dagger} + c_{\vec{q}}) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}, v}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}, v}, \quad (2.66)$$

com  $\sigma_{\vec{k}, v}^{\dagger}$  sendo o operador de criação de um elétron com momento  $\hbar \vec{k}$  e spin  $v$  e  $c_{\vec{q}}^{\dagger}$  sendo o operador de criação de um fônon com momento  $\hbar \vec{q}$ . Os termos  $\varepsilon(\vec{k})$  e  $\hbar \omega(\vec{q})$  são, respectivamente, as dispersões dos elétrons e dos fônons. A parte  $\hat{H}_{e-f}$  é o termo de interação entre elétrons e fônons, com  $T_{\vec{q}}$  sendo o potencial de interação na representação do momento (Nolting; Brewer, 2009).

A partir de uma transformação canônica, vamos obter um termo de interação efetiva entre elétrons. Assim, seja  $S$  um operador, definimos a transformação:

$$\hat{H} = e^{-S} \hat{H} e^S = \hat{H} + [\hat{H}, S] + \frac{1}{2} [[\hat{H}, S], S] + \dots \quad (2.67)$$

Consideramos o termo  $\hat{H}_{e-f}$  como sendo pequeno, também escolhemos  $S$  para ser da mesma ordem. Assim, definindo  $\hat{H}_0 = \hat{H}_{0e} + \hat{H}_{0f}$  escrevendo apenas os termos de primeira ordem

$$\hat{H} \approx \hat{H} + [\hat{H}, S] = \hat{H}_0 + \hat{H}_{e-f} + [\hat{H}_0, S] + [\hat{H}_{e-f}, S]. \quad (2.68)$$

Queremos escolher  $S$  de tal forma que  $\hat{H}_{e-f} + [\hat{H}_0, S] = 0$ , assim, supomos que seja da forma:

$$S = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \nu} T_{\vec{q}} (y c_{-\vec{q}}^\dagger + x c_{\vec{q}}) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}, \nu}^\dagger \sigma_{\vec{k}, \nu}, \quad (2.69)$$

onde as constantes  $x$  e  $y$  devem ser determinadas. Iniciamos isso calculando o comutador  $[\hat{H}_0, S]$ , em duas partes. Primeiro:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{0e}, S] &= \sum_{\vec{p}, \nu'} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \nu} \varepsilon(\vec{p}) T_{\vec{q}} \left[ \sigma_{\vec{p}\nu}^\dagger \sigma_{\vec{p}\nu'}, (x c_{\vec{q}} + y c_{-\vec{q}}^\dagger) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}\nu} \right] = \\ &= \sum_{\vec{p}, \vec{k}, \vec{q}} \sum_{\nu, \nu'} \varepsilon(\vec{p}) T_{\vec{q}} (x c_{\vec{q}} + y c_{-\vec{q}}^\dagger) \left[ \sigma_{\vec{p}\nu}^\dagger \sigma_{\vec{p}\nu'}, \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}\nu} \right]. \end{aligned} \quad (2.70)$$

O comutador  $\left[ \sigma_{\vec{p}\nu}^\dagger \sigma_{\vec{p}\nu'}, \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}\nu} \right]$  pode ser calculado usando as relações de comutação, portanto:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{0e}, S] &= \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \varepsilon(\vec{p}) T_{\vec{q}} (x c_{\vec{q}} + y c_{-\vec{q}}^\dagger) \delta_{\nu\nu'} \left( \delta_{\vec{p}, \vec{k}+\vec{q}} \sigma_{\vec{p}\nu}^\dagger \sigma_{\vec{k}\nu} - \delta_{\vec{k}, \vec{p}} \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{p}\nu} \right) = \\ &= \sum_{\vec{k}, \vec{q}} T_{\vec{q}} (\varepsilon(\vec{k} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}\nu}^\dagger (x c_{\vec{q}} + y c_{-\vec{q}}^\dagger). \end{aligned} \quad (2.71)$$

Para o segundo termo, de forma análoga, usamos as relações de comutação para

bósons nos operadores de fônons:

$$\begin{aligned}
[\hat{H}_{0f}, S] &= \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{v}} \hbar\omega(\vec{p}) T_{\vec{q}} \left[ c_{\vec{p}}^{\dagger} c_{\vec{p}}, (xc_{\vec{p}} + yc_{-\vec{q}}^{\dagger}) \right] \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}} = \\
&= \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{v}} \hbar\omega(\vec{p}) T_{\vec{q}} \left( -x\delta_{\vec{q}\vec{p}} c_{\vec{p}} + y\delta_{\vec{q}\vec{p}} c_{-\vec{p}}^{\dagger} \right) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}} = \\
&= \sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{v}} T_{\vec{q}} \hbar\omega(\vec{q}) \left( -xc_{\vec{q}} + yc_{-\vec{q}}^{\dagger} \right) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}}.
\end{aligned} \tag{2.72}$$

Combinando ambos os termos:

$$[\hat{H}_0, S] = \sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{v}} T_{\vec{q}} \left\{ x \left( \varepsilon(\vec{k} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{k}) - \hbar\omega(\vec{q}) \right) c_{\vec{q}} + y \left( \varepsilon(\vec{k} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{k}) + \hbar\omega(\vec{q}) \right) c_{-\vec{q}}^{\dagger} \right\} \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}}, \tag{2.73}$$

como devemos ter  $[\hat{H}_0, S] = -\hat{H}_{e-f}$ , as constantes devem ser:

$$\begin{aligned}
x &= - \left( \varepsilon(\vec{k} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{k}) - \hbar\omega(\vec{q}) \right)^{-1}, \\
y &= - \left( \varepsilon(\vec{k} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{k}) + \hbar\omega(\vec{q}) \right)^{-1}.
\end{aligned} \tag{2.74}$$

Finalmente, devemos calcular o comutador  $[\hat{H}_{e-f}, S]$ . Iremos nos concentrar apenas nos termos com operadores de criação de elétrons.

$$[\hat{H}_{e-f}, S] = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{v}, \vec{k}', \vec{q}', \vec{v}'} T_{\vec{q}} T_{\vec{q}'} \left[ \left( c_{\vec{q}'}^{\dagger} + c_{-\vec{q}'}^{\dagger} \right) \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}'\vec{v}'}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}'\vec{v}'}^{\dagger}, \left( xc_{\vec{q}} + yc_{-\vec{q}}^{\dagger} \right) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}} \right], \tag{2.75}$$

com o comutador sendo:

$$\begin{aligned}
&\left[ \left( c_{\vec{q}'}^{\dagger} + c_{-\vec{q}'}^{\dagger} \right) \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}'\vec{v}'}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}'\vec{v}'}^{\dagger}, \left( xc_{\vec{q}} + yc_{-\vec{q}}^{\dagger} \right) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}} \right] = \\
&= \left( c_{\vec{q}'}^{\dagger} + c_{-\vec{q}'}^{\dagger} \right) \left( xc_{\vec{q}} + yc_{-\vec{q}}^{\dagger} \right) \left[ \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}'\vec{v}'}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}'\vec{v}'}^{\dagger}, \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}} \right] + \\
&\quad + \left[ \left( c_{\vec{q}'}^{\dagger} + c_{-\vec{q}'}^{\dagger} \right), \left( xc_{\vec{q}} + yc_{-\vec{q}}^{\dagger} \right) \right] \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}'\vec{v}'}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}'\vec{v}'}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}+\vec{q}\vec{v}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}\vec{v}},
\end{aligned} \tag{2.76}$$

onde usamos a propriedade de que operadores de fônons e elétrons comutam. Descartamos o primeiro termo da soma do lado direito da equação 2.76, o que nos leva a calcular o comutador envolvendo os operadores dos fônons

$$\left[ \left( c_{\vec{q}'}^{\dagger} + c_{-\vec{q}'}^{\dagger} \right), \left( xc_{\vec{q}} + yc_{-\vec{q}}^{\dagger} \right) \right] = x[c_{-\vec{q}'}^{\dagger}, c_{\vec{q}}] + y[c_{\vec{q}'}, c_{-\vec{q}}^{\dagger}] = y\delta_{\vec{q}', -\vec{q}} - x\delta_{\vec{q}', -\vec{q}}, \tag{2.77}$$

o que leva a

$$\begin{aligned}
[\hat{H}_{e-f}, S] &\approx \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \nu, \vec{k}', \vec{q}', \nu'} T_{\vec{q}} T_{\vec{q}'} (y-x) \delta_{-\vec{q}', \vec{q}} \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}', \nu'}^\dagger \sigma_{\vec{k}', \nu'} \sigma_{\vec{k}+\vec{q}, \nu}^\dagger \sigma_{\vec{k}, \nu} \\
&= \sum_{\vec{k}, \nu, \vec{k}', \vec{q}', \nu'} T_{-\vec{q}'} T_{\vec{q}'} (y-x) \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}', \nu'}^\dagger \sigma_{\vec{k}', \nu'} \sigma_{\vec{k}-\vec{q}', \nu}^\dagger \sigma_{\vec{k}, \nu} \\
&= \sum_{\vec{k}, \nu, \vec{k}', \vec{q}', \nu'} T_{-\vec{q}'} T_{\vec{q}'} (y-x) \left\{ \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}', \nu'}^\dagger \sigma_{\vec{k}-\vec{q}', \nu}^\dagger \sigma_{\vec{k}', \nu'} \sigma_{\vec{k}, \nu} + \delta_{\vec{k}', \vec{k}+\vec{q}} n_{\vec{k}} \right\}.
\end{aligned} \tag{2.78}$$

Sabendo que  $T_{-\vec{q}} = T_{\vec{q}}$  e desprezando o termo  $\delta_{\vec{k}', \vec{k}+\vec{q}} n_{\vec{k}}$ , encontramos um potencial efetivo de interação que envolve apenas elétrons. Assim, definimos

$$\hat{H}_{e-e} = \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}, \nu, \nu'} 2|T_{\vec{q}}|^2 \left\{ \frac{\hbar\omega(\vec{q})}{\left(\varepsilon(\vec{k}+\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})\right)^2 - (\hbar\omega(\vec{q}))^2} \right\} \sigma_{\vec{p}+\vec{q}, \nu'}^\dagger \sigma_{\vec{k}-\vec{q}, \nu}^\dagger \sigma_{\vec{k}, \nu} \sigma_{\vec{p}, \nu'}. \tag{2.79}$$

Concluimos que uma condição suficiente para que ocorra interação atrativa entre elétrons, é a desigualdade

$$\left(\varepsilon(\vec{k}+\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})\right)^2 < (\hbar\omega(\vec{q}))^2 \tag{2.80}$$

ser satisfeita.

Como a energia de Debye  $\hbar\omega_D$  é a maior energia num sólido, temos  $\varepsilon(\vec{k}+\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k}) \leq \hbar\omega_D$  que é a condição para existencia de um potencial efetivo.

O modelo original proposto por Cooper considerava um potencial atrativo fraco entre elétrons, assim, seu modelo consistia em considerar um potencial da forma:

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{se } |\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')| \leq \hbar\omega_D \\ 0, & \text{caso contrario} \end{cases}, \tag{2.81}$$

onde  $V_0$  é uma constante positiva. Substituindo na equação (2.62), vemos que  $\Delta_{\vec{k}} = \Delta$  não depende de  $\vec{k}$ , assim ficamos com:

$$1 = \frac{1}{2} V_0 \sum_{\varepsilon(\vec{k}') \leq \hbar\omega_D} \left( \frac{1}{\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta^2}} \right) \tanh \left( \frac{\sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta^2}}{2k_b T} \right). \tag{2.82}$$

Sabemos que a energia de Debye é maior do que a energia de Fermi  $\varepsilon_F$ , o que leva a  $-\hbar\omega_D < \varepsilon_F < \hbar\omega_D$ . Usando a densidade de estados de energia  $\rho(\varepsilon)$ , reescrevemos o somatório como a integral:

$$1 = \frac{1}{2}V_0 \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \left( \frac{\rho(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \right) \tanh \left( \frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right) d\varepsilon. \quad (2.83)$$

Como a maioria dos estados se concentram próximos à energia de Fermi, podemos aproximar a densidade de estados  $\rho(\varepsilon) \approx \rho(\varepsilon_F) = \rho_F$ , e também sendo a integral de uma função par,

$$1 = V_0 \rho_F \int_0^{\hbar\omega_D} \left( \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \right) \tanh \left( \frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right) d\varepsilon. \quad (2.84)$$

Ao resolver esta equação, obtemos  $\Delta_0(T)$ , que existe apenas como uma função implícita. Vejamos como a equação se modifica em casos especiais. Se  $T = 0$ , então  $\Delta(T = 0) = \Delta_0$  e temos  $\tanh(x \rightarrow \infty) \rightarrow 1$ , o que dá:

$$1 = V_0 \rho_F \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta_0^2}} = V_0 \rho_F \sinh^{-1} \left( \frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right), \quad (2.85)$$

sabemos por medidas experimentais que o *gap*  $\Delta_0$  é de apenas alguns *meV*, portanto é muito menor do que a energia de Debye. Logo fazemos a aproximação  $\sinh^{-1}(x) \approx \ln(2x)$ , o que nos dá:

$$\frac{1}{V_0 \rho_F} \approx \ln \left( \frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right), \quad (2.86)$$

e portanto:

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{V_0 \rho_F}}. \quad (2.87)$$

A temperatura crítica  $T_C$  é atingida quando o *gap* é diferente de zero, assim, fazendo  $\Delta = 0$ , a equação do *gap* se torna:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_0 \rho_F} &= \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh \left( \frac{\varepsilon}{2k_B T_C} \right) = \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_C}} \frac{dx}{x} \tanh x = \\ &= \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_C}} \frac{\tanh x}{x} dx \approx (\tanh x \ln x)_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_C}} - \int_0^{\infty} \frac{\ln x}{\cosh^2 x} dx \approx \\ &\approx \ln \left( \frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_C} \right) - \ln \left( \frac{\pi}{4e^\gamma} \right) = \ln \left( \frac{2e^\gamma \hbar\omega_D}{\pi k_B T_C} \right), \end{aligned} \quad (2.88)$$



onde  $\gamma$  é a constante de Euler-Mascheroni. Concluimos então que:

$$T_C = \frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\hbar \omega_D}{k_B} e^{-\frac{1}{V_0 \rho_F}}, \quad (2.89)$$

ou seja, temos  $T_C \propto \omega_D \propto M^{-1/2}$ , que é exatamente o resultado previsto por Maxwell e Reynolds, e que confirma a dependência da temperatura crítica com a massa dos íons. Substituindo a equação (2.87) em (2.89), chegamos em uma relação entre o *gap* em  $T = 0$  e a temperatura crítica:

$$\frac{\Delta_0}{k_B T_c} \approx 1.76, \quad (2.90)$$

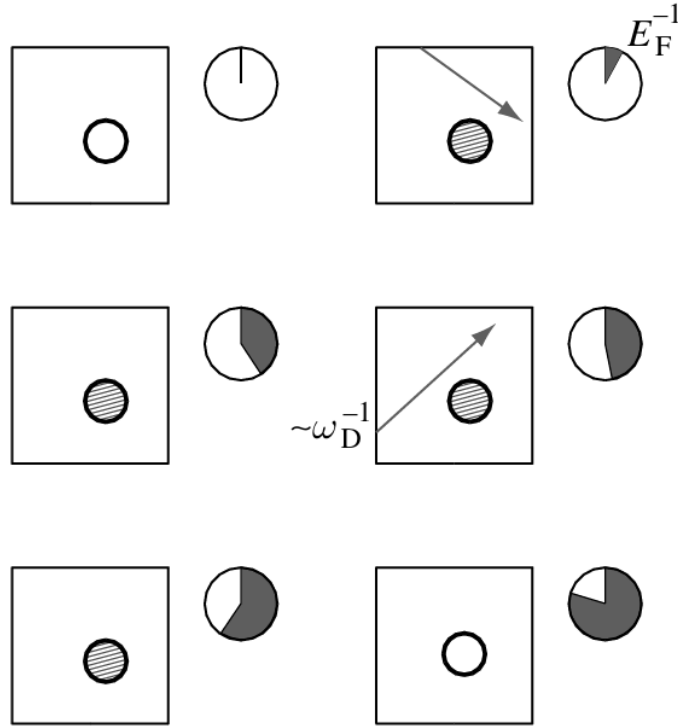
ou seja, quanto maior for o *gap*, maior será a temperatura crítica. Isso permite prever a temperatura crítica de forma a priori para uma grande variedade de supercondutores. Ressaltamos que uma limitação deste modelo é que os elétrons não podem ter uma energia térmica  $k_B T$  maior do que a energia de Fermi  $\varepsilon_F$ , pois caso contrario, não há como garantir que estejam próximos ao nível de Fermi.

### 2.2.7 Efeito de Retardação

Embora tenhamos mostrado que existe uma atração efetiva fraca entre elétrons, uma questão que surge é como esta consegue se sobrepor as fortes interações de coulomb. A resposta para isso está nas escalas de tempo em que essas interações ocorrem. Os elétrons que contribuem para o estado BCS têm energia próxima a de Fermi, portanto a escala de tempo do seu movimento na rede é da ordem de  $\sim \hbar/\varepsilon_F = t_e$ . No entanto a ordem de tempo do movimento dos íons é  $\sim 1/\omega_D = t_D$ , e como  $\hbar \omega \ll \varepsilon_F$  temos  $t_e \gg t_D$  (Altland; Simons, 2010). Quando um elétron em movimento distorce a rede, esta demora muito mais tempo para retornar ao equilíbrio, assim outro elétron pode se aproximar e sentir a influencia da distorção provocada pelo primeiro elétron. A Fig. 6 mostra um esquema desse processo.

O efeito liquido deste processo é que a interação efetiva ocorre num período de tempo finito, isto é, a influencia de um elétron leva tempo até alcançar outro, e assim, o alcance da interação efetiva pode se estender por distancias muito maiores. Em contra partida a interação de coulomb é praticamente instantânea nas escalas de baixa energia e depende diretamente da densidade eletrônica por um fator da ordem de  $\sim n^{-1/2}$ , onde  $n$  é a densidade.

Figura 6 – Efeito de retardação. As setas representam o elétron em movimento e o círculo um íon da rede, em que  $E_F^{-1}$  (unidades em que  $\hbar = 1$ ) é o tempo dos elétrons e  $\omega_D^{-1}$  o tempo que o íon leva para retornar ao equilíbrio.



Fonte: Adaptado de (Altland; Simons, 2010).

A distancia média entre dois elétrons num par de Cooper é definido como o comprimento de coerência  $\chi_C = (2\pi\hbar^2 k_F)/m_e \Delta(\xi = 0, T = 0)$  (com  $m_e$  sendo a massa do elétron). Esta quantidade mede o alcance da interação efetiva (Laussy *et al.*, 2010). Quando  $n^{-1/2} \gg \chi_C$  a atração prevalece sobre a repulsão de coulomb em longas distancias: este é o chamado **efeito de retardação**. A abordagem da seção anterior não incorpora diretamente este efeito apesar de sua importância, uma crítica comum na abordagem original de Bardeen, Cooper e Schrieffer (Combescot; Shiau, 2015).

## 2.3 Mediações Alternativas aos Fônons

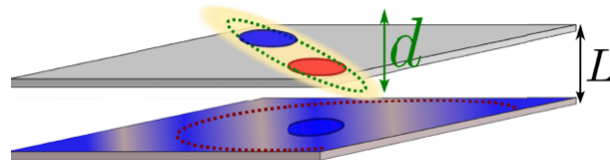
### 2.3.1 Excitons

A compreensão em termos de teorias microscópicas da SC abriu um horizonte totalmente novo de investigação teórica. Uma ideia que surgiu imediatamente foi a de substituir os fônons por outras partículas de natureza bosônica que interagem com elétrons. Para esse objetivo o primeiro tipo de quasi-partícula sugerida foram os excitons, que surgem em semicondutores quando um elétron na camada de valência salta para banda de condução deixando um estado

desocupado para trás, que é chamado de buraco. O comportamento o buraco se comporta como uma partícula com carga positiva e interage com o elétron na banda de condução formando assim o exciton. Uma característica relevante é que eles se comportam como bósons, e podem interagir com os elétrons e intermediar interações entre eles.

A primeira proposta desse tipo de mecanismo veio em 1964, quando Little propôs que a temperatura crítica  $T_C$  poderia ser elevada em cadeias de polímeros orgânicos quase-unidimensionais, onde os excitons fossem mediadores das interações entre elétrons (Little, 1964). Em 1973, John Bardeen, James Bary e David Allender (Allender *et al.*, 1973) propuseram um modelo teórico pioneiro para uma heteroestrutura que consistia na junção de duas camadas finas de um metal e um semiconductor, separadas por uma distância pequena. No semiconductor, excitons virtuais interagem com os elétrons de valência no metal induzindo a formação de pares de Cooper. Ginzburg (Ginzburg *et al.*, 1987) teorizou que esse mecanismo poderia ser um possível caminho para a SC em altas temperaturas. Sistemas 2D como este tem as possibilidades mais promissoras: a Fig. 7 apresenta um desenho de como os elétrons e excitons são posicionados dentro da heteroestrutura, onde acoplamento entre excitons e elétrons depende fortemente de características como a distancia  $L$  entre as camadas de semiconductor e metal, por exemplo.

Figura 7 – Modelo da heteroestrutura do artigo (Allender *et al.*, 1973). Na camada de cima temos o semiconductor onde os excitons são formados; na camada de baixo temos o metal onde ficam os elétrons de condução. Ambas as camadas são separadas por uma distancia  $L$ . O vetor  $\vec{d}$  é o momento de dipolo do exciton.



Fonte: Adaptado de (Laussy *et al.*, 2012).

A interação entre elétrons normalmente ocorre quando um elétron de condução polariza o meio dielétrico criando assim um exciton, que posteriormente pode interagir com outro elétron. Assim, os dois trocam momentos de forma indireta. Como apontado por Ginzburg (Ginzburg *et al.*, 1987), a principal característica dos excitons é que sua energia característica  $k_B T_e$  é muito maior do que a energia de Debye  $k_B T_D$ . Isso se deve ao fato de que a energia de Debye depende do inverso da massa dos íons, e como os excitons são muito mais leves, a energia típica é maior. Se  $M$  é a massa do íon e  $m$  a massa do excitons, como  $T_D \sim M^{-1/2}$  temos  $T_e \sim \left[\frac{M}{m}\right]^{1/2} T_D \leq 100 \times T_D$ , o que necessariamente implica num temperatura crítica maior.

Embora promissora, a mediação por excitons logo começou a apresentar algumas

dificuldades, sendo a primeira delas a baixa estabilidade em certos materiais, possuindo um vida curta ou baixa coerência. Posteriormente, verificou-se que a redução do efeito de retardamento da interação também é um fator prejudicial (Morel; Anderson, 1962). Os fônons geralmente possuem uma velocidade muito mais lenta que os elétrons na superfície de Fermi, e isso se reflete em um forte efeito de retardação na interação mediada por eles, o que resulta num tamanho do par de Cooper onde os elétrons estão suficientemente afastados para que a interação coulombiana seja pequena. Em contraste, os excitons são partículas muito rápidas, o que reduz o efeito de retardação, acarretando num tamanho de par menor e consequentemente num regime em que a interação repulsiva de Coulomb é não desprezível, o que prejudica a formação de pares de Cooper (Cherotchenko *et al.*, 2016). Embora o mecanismo éxciton ainda tenha um papel relevante para explicar a SC de certos sistemas (Cherotchenko *et al.*, 2016; Sun *et al.*, 2021; Milczewski *et al.*, 2024; Cao; Kavokin, 2025), ele não foi detectado ainda como o mecanismo principal que a torna possível.

Apesar de todas essas dificuldades, é possível ainda obter interações fortes quando os excitons estão em um estado de condensado de Bose-Einstein (BEC). O estado SC se caracteriza por ser coerente e com fase complexa global, como fica evidente na forma do estado BCS. Assim, quando os mediadores já são coerentes como no caso de um BEC, a mediação é mais eficiente, pois os estes deixam de ter movimentos aleatórios e desorganizados. Além disso, é teorizado que excitons com grande momento de dipolo também induzem interações mais fortes. Nesse caso, os que possuem elétron e buraco distantes espacialmente se destacam: estes são os chamados excitons indiretos (Laussy *et al.*, 2012), que serão o caso estudado como aplicação do nosso modelo mais adiante nesta dissertação.

### 2.3.2 *Exciton-Polaritons*

A principal dificuldade em se obter BECs de excitons é que estes só ocorrem em baixíssimas temperaturas. Nesse contexto, surgem os exciton-polaritons como candidatos para substituir os excitons na mediação da SC. Essas quase-partículas são híbridas, parte exciton e parte fóton, que surgem quando luz confinada em uma microcavidade interage fortemente com a matéria, geralmente semicondutores. Estas têm sido grande foco de pesquisa nas últimas décadas, sendo uma das razões para isso a sua capacidade de formar BECs em temperatura ambiente, fato que já é confirmado experimentalmente (Houdré *et al.*, 1994; Su *et al.*, 2020; Ghosh *et al.*, 2022; Alnatah *et al.*, 2025).

Em 2010, exciton-polaritons foram propostos como possíveis candidatos mediadores de SC, tendo em destaque sua capacidade de induzir interações atrativas muito mais fortes do que os mecanismos tradicionais, mesmo em comparação com o mecanismo de excitons (Laussy *et al.*, 2010). Isso é um caminho para contornar o baixo efeito de retardação inerente à mediação por bósons leves como este. Entre as principais dificuldades com essas quase-partículas está a formação de fases exóticas que competem diretamente com a fase SC, como a super sólida e a onda de densidade de carga (CDW), que surgem espontaneamente à medida que a força da interação efetiva aumenta. Uma outra vantagem, como será mostrado posteriormente, é que a força da interação pode ser controlada opticamente, o que abre margem para muitas aplicações em dispositivos.

A SC de alta temperatura permanece um dos problemas abertos mais desafiadores da física moderna. Enquanto a teoria BCS explica satisfatoriamente a SC convencional mediada por fônons, a busca por mecanismos alternativos que permitam  $T_C$  mais elevadas é intensa. A mediação pelos bósons do tipo mencionado acima surge como um candidato promissor.

## 2.4 Escopo da Dissertação

O objetivo principal deste trabalho é obter a temperatura crítica e a função do *gap* em um sistema onde a SC é mediada por excitons. Nos próximos capítulos propomos um modelo teórico para a mediação da SC por quase-partículas bosônicas, tendo como principal foco os excitons e exciton-polaritons. No capítulo 3 introduzimos o design da heteroestrutura que será modelada por um hamiltoniano de uma mistura de Bose-Fermi. Usando a aproximação de campo médio, mostramos que este hamiltoniano pode ser reduzido à mesma forma do de fônons, assim obtendo o potencial efetivo. O formalismo é desenvolvido tanto para excitons como para exciton-polaritons. Definindo um potencial médio sob a curva de Fermi de um gás de elétrons bidimensional (2DEG), obtemos um potencial  $U_0(\omega)$  que depende da energia de troca entre elétrons  $\hbar\omega$ , o que incorpora um efeito de retardação no modelo. Com a presença de regiões negativas dessa função, a SC é possível. Finalizamos o capítulo expondo um algoritmo para o cálculo de  $T_C$  e outro para o cálculo da função do *gap*  $\Delta(\xi, T)$ . No capítulo 4 passamos para análise dos resultados, onde se mostra que a força de interação depende diretamente da densidade de bósons no sistema. A temperatura crítica e o *gap* são obtidos. Finalizamos o capítulo fazendo uma aplicação do modelo em um sistema composto por dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) para hospedar os excitons e uma bicamada de grafeno para abrigar o 2DEG. No capítulo

5 apresentamos as conclusões e perspectivas futuras de pesquisa.

### 3 INTERAÇÃO MEDIADA POR EXCITONS E EXCITON-POLARITONS

#### 3.1 Modelo Teórico da Interação Efetiva

Passamos agora à formulação de um modelo teórico que descreve a SC em sistemas de baixa dimensionalidade, tendo como base a teoria BCS. Mostramos que é possível encontrar uma hamiltoniana efetiva análoga a para o caso da mediação por fônons.

##### 3.1.1 Descrição da Heteroestrutura

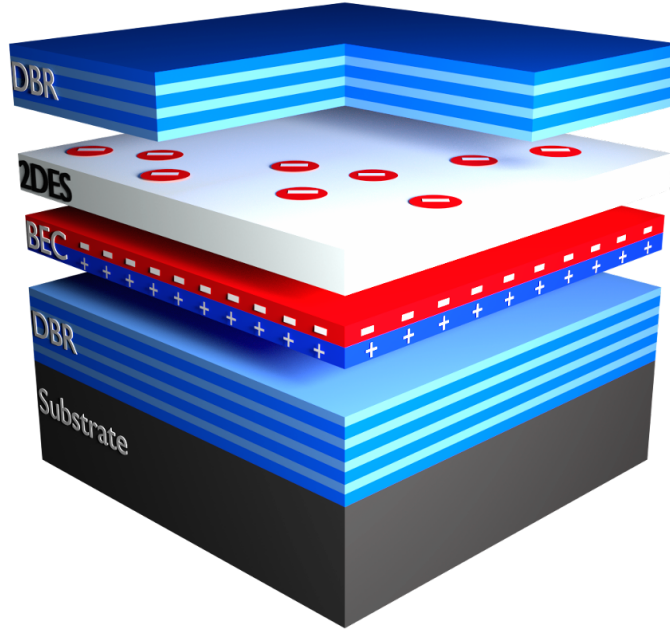
Introduzimos agora um *design* de heteroestrutura que será a base para nossa formulação teórica, sendo usado em diversos trabalhos envolvendo sistemas análogos ao nosso. (Cotlet *et al.*, 2016; Cherotchenko *et al.*, 2016). Trataremos da mediação por excitons e exciton-polaritons em conjunto. Com o objetivo de formar excitons com momentos de dipolo adotamos um heteroestrutura bidimensional com semicondutores onde os elétrons e buracos estejam espacialmente separados por uma distância  $d$ , formando um momento de dipolo explícito. Quanto maior for esta distância, maior será a força de interação com os elétrons. Espera-se que quanto maior for a energia de ligação entre elétrons e buracos  $E_b$ , maior a força de interação.

Para hospedar o gás de elétrons livres bidimensional (2DEG) escolhemos algum material bidimensional que possua uma densidade eletrônica controlável. Candidatos mais diretos são bicamadas de grafeno ou monocamadas de semicondutores dopados com impurezas que doam ou roubam elétrons. Esta camada é separada dos excitons por algum material isolante de espessura  $L$ .

Para induzir a formação de excitons puros, usamos um campo elétrico ou consideramos heteroestruturas semicondutores de tipo-II. No caso de exciton-polaritons, usa-se fótons de cavidade. Para isso inserimos a heteroestrutura descrita no parágrafo anterior em uma microcavidade composta por dois refletores de Bragg. Na Fig. 8, temos um desenho deste sistema. Os refletores de Bragg, embora eficientes, ainda possuem alguma perda de energia a medida que um fóton é refletido varias vezes entre os refletores. Isso se traduz num decaimento na concentração de fótons com o tempo, o que dá aos exciton-polaritons um tempo de vida finito. Isso pode ser contornado bombeando constantemente fótons com um laser para manter a concentração constante, o que deve acarretar num gradual aquecimento do sistema. Em nossa análise, vamos desprezar o eventual aquecimento do BEC.

A interação com os elétrons na 2DEG se dá de forma predominante com a parte

Figura 8 – Representação da microcavidade que consiste em dois refletores de Bragg (DBR) montados sobre um substrato. Em seu interior, uma heteroestrutura composta por uma camada semicondutora em que se forma um BEC de excitações indiretas com comprimento de dipolo  $d$ . Adjacente a uma distância  $L$  desta, há um 2DEG sobre uma segunda camada bidimensional.



Fonte: Adaptado de (Cotlet *et al.*, 2016)

excitônica dos excitons-polaritons, o que permite tratar ambos os casos de quasi-partículas de forma muito semelhante.

### 3.1.2 Hamiltoniana do Sistema

Denotamos os operadores de criação de elétrons e exciton-polaritons com momento  $\hbar\vec{k}$  por  $\sigma_{\vec{k}}^{\dagger}$  e  $a_{\vec{k}}^{\dagger}$ , respectivamente. Em seus operadores de criação/aniquilação, como nos pares de Cooper, o spin  $\uparrow$  ( $\downarrow$ ) só ocorre com  $\vec{k}$  positivo (negativo), portanto, abreviamos a notação para  $\sigma_{\vec{k},v}^{\dagger} = \sigma_{\vec{k}}^{\dagger}$ . O sistema pode ser modelado pela seguinte hamiltoniana:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\vec{k}} \left[ E_{\text{pol}}(\vec{k}) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + E_{\text{el}}(\vec{k}) \sigma_{\vec{k}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}} \right] + \\ & + \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left[ V_C(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}_1+\vec{q}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}_2-\vec{q}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}_2} \sigma_{\vec{k}_1} + X^2 V_X(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{k}'+\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + U a_{\vec{k}_1}^{\dagger} a_{\vec{k}_2+\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{k}_1+\vec{q}} a_{\vec{k}_2} \right], \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde na primeira parte  $E_{\text{el}}(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_e$  é a dispersão dos elétrons. A primeira parte do termo de interação se deve à força de Coulomb entre os elétrons, com  $V_C(\vec{q})$  sendo o potencial de Yukawa com comprimento de blindagem de Coulomb  $\kappa$ :

$$V_C(\vec{q}) = \frac{e^2}{2\epsilon A} \frac{1}{|\vec{q}| + \kappa}, \quad (3.2)$$



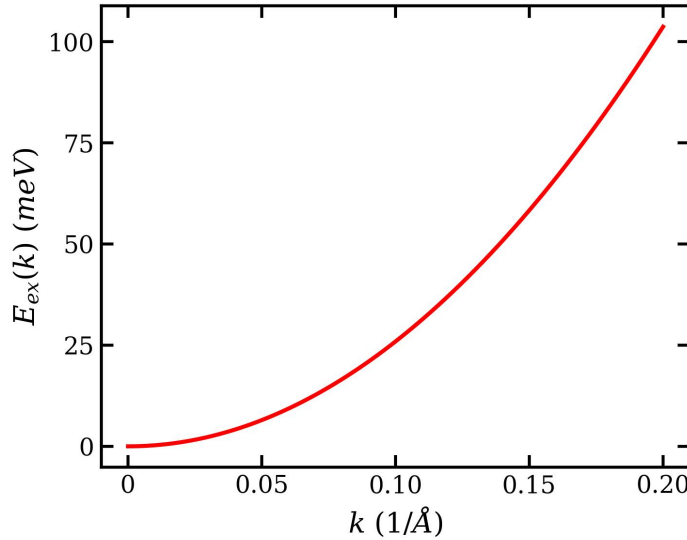
onde  $\varepsilon$  é a constante dielétrica do meio e  $A$  é uma área de normalização. O segundo termo de interação  $X^2 V_X(\vec{k})$  representa a interação entre os excitons/exciton-polaritons e os elétrons, onde normalmente a parte excitônica do primeiro predomina na interação. A constante  $X$  é o coeficiente de Hopfield, que quantifica a fração de excitons no BEC. O último termo é a interação entre os excitons/exciton-polaritons, onde usamos a aproximação *s-wave* com um potencial constante dado por  $U = 6a_X E_b X^4 / A$ .

Como os exciton-polaritons são acoplamentos entre fótons e excitons, usamos o modelo de Rabi com a dispersão do ramo inferior, assim  $E_{pol}(\vec{k})$  é escolhida como (Cotlet *et al.*, 2016; Laussy *et al.*, 2012):

$$E_{pol}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left( E_C(\vec{k}) + E_{ex}(\vec{k}) - \sqrt{(E_{ex}(\vec{k}) - E_C(\vec{k}))^2 + (2\hbar\Omega_R)^2} \right), \quad (3.3)$$

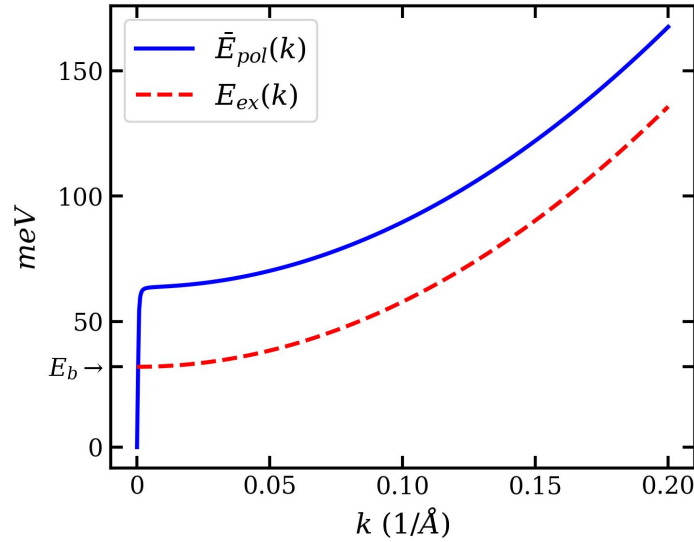
onde  $m_X$  é a massa do excitons,  $m_C$  é a massa efetiva dos fótons de cavidade e  $\hbar\Omega_R$  é a energia de separação de Rabi. As dispersões  $E_{ex}(\vec{k}) \approx \hbar^2 k^2 / 2m_X + E_b$  e  $E_C(\vec{k}) \approx \hbar^2 k^2 / 2m_C$  são, respectivamente, a dos excitons e fótons de cavidade. A constante  $E_b$  é a energia de ligação do exciton, que é zero para excitons puros. A Fig. 10 mostra o gráfico da equação (3.3) e na Fig. 9 vemos o gráfico da dispersão  $E_{ex}(\vec{k})$ . O procedimento que adotaremos é válido tanto para excitons como exciton-polaritons, bastando apenas trocar a dispersão  $E_{pol}(\vec{k}) \rightarrow E_{ex}(\vec{k})$ , definir  $X = 1$  e  $\Omega_R = 0$  para abarcar o caso do primeiro.

Figura 9 – Dispersão dos excitons sozinhos. Assim como a dispersão de uma partícula livre com massa efetiva  $m_X$ , a forma do gráfico é a de uma parábola.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 10 – Ramo inferior da dispersão dos exciton-polaritons. A curva se inicia com um comportamento linear, e para valores de  $k$  grandes tem comportamento quadrático. A dependência em  $|\vec{k}|$  vem a forma de (3.3), que depende das dispersões quadráticas dos excitons e fótons. Em vermelho, as dispersão da parte do exciton dentro do polariton.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O potencial de interação entre elétrons e excitons  $V_X(\vec{q})$  é dado por

$$V_X(\vec{q}) = \frac{e^2}{2\epsilon A} \frac{e^{-qL}}{q} \left\{ \frac{1}{[1 + (\beta_e q a_X/2)^2]^{3/2}} - \frac{1}{[1 + (\beta_h q a_X/2)^2]^{3/2}} \right\} + \frac{ed}{2\epsilon A} e^{-qL} \left\{ \frac{\beta_e}{[1 + (\beta_e q a_X/2)^2]^{3/2}} + \frac{\beta_h}{[1 + (\beta_h q a_X/2)^2]^{3/2}} \right\}, \quad (3.4)$$

onde:  $a_X$  é o raio de Bohr do exciton,  $\beta_e = m_e/(m_e + m_h)$  e  $\beta_h = m_h/(m_e + m_h)$  são, respectivamente, a frações de massa dos elétrons  $m_e$  e a massa dos buracos  $m_h$ , e a última parte se refere ao momento de dipolo  $\vec{d}$  do exciton. Com ja foi mencionado antes, a constante  $L$  se refere a distancia de separação entre o BEC e 2DEG (Laussy *et al.*, 2012).

Na tabela 1 estão os valores de todas as constantes presentes na hamiltoniana 3.1.

### 3.1.3 Interação Efetiva

Considerando a parte de interação dos exciton-polaritons:

$$\hat{H}_{pol} = \sum_{\vec{k}} E_{pol}(\vec{k}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} U a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}_1+\vec{q}} a_{\vec{k}_2}, \quad (3.5)$$

e usando a abordagem de campo médio, fazemos  $a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} \approx \langle a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \rangle a_{\vec{k}} + \langle a_{\vec{k}} \rangle a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger$ , seguimos a abor-

Parâmetro	Significado	Valor
$\epsilon_r$	Permissividade relativa	4.5
$m_e$	Massa do elétron (exciton)	$\approx 0.22$
$m_h$	Massa do buraco	$\approx 1.25$
$L$	Distância entre 2DEG e BEC	$50 \text{ \AA}$
$\kappa$	Blindagem de Coulomb	$12 \text{ \AA}^{-1}$
$m_X$	Massa do exciton	$(0.22 + 1.25)m_e \approx 1.3 \times 10^{-30} \text{ kg}$
$m_C$	Massa do fóton	$10^{-5}m_e \approx 9.1 \times 10^{-36} \text{ kg}$
$\hbar\Omega_R$	Separação de Rabi (polariton)	$45 \text{ meV}$
$\hbar\Omega_R$	Separação de Rabi (exciton)	$0 \text{ meV}$
$X$	Coefficiente de Hopfield (polariton)	$1/\sqrt{2}$
$X$	Coefficiente de Hopfield (exciton)	1
$k_F$	Vetor de onda de Fermi	$0.05 \text{ \AA}^{-1}$
$a_X$	Raio de Bohr do exciton	$19.8 \text{ \AA}$
$E_b$	Energia de ligação do exciton	$32 \text{ meV}$
$d$	Comprimento do momento de dipolo	$120 \text{ \AA}$

Tabela 1 – Parâmetros físicos relevantes do sistema com excitons/exciton-polaritons, onde escolhemos as unidades de massa do elétron (Laussy *et al.*, 2012).

dagem de Bogoliubov aproximando  $\langle a_{\vec{k}} \rangle \approx \sqrt{N_0 A} \delta_{\vec{k},0}$ , onde  $N_0$  é a densidade de excitons/exciton-polaritons e  $A$  é a área de normalização (Laussy *et al.*, 2012). Como os bósons mediadores estão condensados em um BEC, a maioria das partículas se concentra no estado fundamental. Essas aproximações também significam tomar o este último  $\vec{k} = 0$  e a partir dele obter os estados excitados, assim consideramos na soma apenas  $\vec{k} \neq 0$ . Com essas considerações, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} U a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}_1+\vec{q}} a_{\vec{k}_2} &= \frac{N_0 A U}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \{ \delta_{\vec{k}_1+\vec{q},0} a_{\vec{k}_1}^\dagger + \delta_{\vec{k}_1,0} a_{\vec{k}_1+\vec{q}}^\dagger \} \{ \delta_{\vec{k}_2+\vec{q},0} a_{\vec{k}_2}^\dagger + \delta_{\vec{k}_2,0} a_{\vec{k}_2+\vec{q}}^\dagger \} = \\
&= \frac{N_0 A U}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \{ a_{-\vec{q}}^\dagger + a_{\vec{q}}^\dagger \} \{ a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}} \} = \\
&= \frac{N_0 A U}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \{ a_{-\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger \},
\end{aligned} \tag{3.6}$$

e como o somatório é simétrico em  $\vec{k}$ , substituímos  $a_{-\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} = a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$  e ficamos com

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} U a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}_1+\vec{q}} a_{\vec{k}_2} = \frac{N_0 A U}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \{ 2a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger \}, \tag{3.7}$$

substituindo na equação (3.5), temos:

$$\hat{H}_{pol} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ E_{pol}(\vec{k}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + N_0 A U a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{N_0 A U}{2} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger) \right\}. \tag{3.8}$$

No caso dos exciton-polaritons definimos uma nova dispersão fazendo uma mudança de referencial do zero de energia, medindo-o a partir do estado fundamental, com  $\bar{E}_{pol}(\vec{k}) = E_{pol}(\vec{k}) - E_{pol}(0)$ . Essa convenção torna a solução numérica mais simples. Definindo as constantes  $\alpha_{\vec{k}} = \bar{E}_{pol}(\vec{k}) + N_0 AU$  e  $\beta_{\vec{k}} = N_0 AU$ , temos:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{pol} &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ (\bar{E}_{pol}(\vec{k}) + N_0 AU) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{N_0 AU}{2} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger) \right\} + \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{pol}(0) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \\ &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \alpha_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{\beta_{\vec{k}}}{2} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger) \right\} + \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{pol}(0) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Mudando o zero de energia para  $E_{pol}(0)$ , a hamiltoniana fica:

$$\begin{aligned} H_{pol} &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \frac{\alpha_{\vec{k}}}{2} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}) + \frac{\beta_{\vec{k}}}{2} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger) \right\} \\ &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{2} \left\{ a_{\vec{k}}^\dagger (\alpha_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^\dagger) + a_{-\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^\dagger + \beta_{\vec{k}} a_{\vec{k}}) \right\} \\ &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}}^\dagger & a_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} & \beta_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ a_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Com o objetivo de diagonalizar esta forma quadrática, definimos a seguinte transformação de Bogoliubov:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ a_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} &= T_{\vec{k}} \begin{pmatrix} b_{\vec{k}} \\ b_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad \text{onde se define} \quad T_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \\ \text{tal que} \quad T_{\vec{k}}^\dagger \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} & \beta_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}} \end{pmatrix} T_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} E_{bog}(\vec{k}) & 0 \\ 0 & E_{bog}(\vec{k}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Os operadores  $b_{\vec{k}}$  e  $b_{-\vec{k}}^\dagger$  criam excitações no estado fundamental do BEC. A partir da relação de comutação para bósons  $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^\dagger] = 1$  deduzimos  $u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1$ . Aplicando a condição para  $T_{\vec{k}}$ , temos:

$$T_{\vec{k}}^\dagger \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} & \beta_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}} \end{pmatrix} T_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}}(v_{\vec{k}}^2 + u_{\vec{k}}^2) + \beta_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} & \beta_{\vec{k}}(v_{\vec{k}}^2 + u_{\vec{k}}^2) + \alpha_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}}(v_{\vec{k}}^2 + u_{\vec{k}}^2) + \alpha_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}}(v_{\vec{k}}^2 + u_{\vec{k}}^2) + \beta_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{bog}(\vec{k}) & 0 \\ 0 & E_{bog}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

e assim, deduzimos o sistema de três equações:

$$\begin{cases} \alpha_{\vec{k}}(v_{\vec{k}}^2 + u_{\vec{k}}^2) + \beta_{\vec{k}}u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} = E_{bog}(\vec{k}) \\ \beta_{\vec{k}}(v_{\vec{k}}^2 + u_{\vec{k}}^2) + \alpha_{\vec{k}}u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} = 0 \\ u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1 \end{cases}, \quad (3.13)$$

cuja solução determina completamente a matriz  $T_{\vec{k}}$  e é dada por:

$$E_{bog}(\vec{k}) = \sqrt{\alpha_{\vec{k}} - \beta_{\vec{k}}} \quad , \quad u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\alpha_{\vec{k}}}{E_{bog}(\vec{k})} + 1 \right)} \quad \text{e} \quad v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\alpha_{\vec{k}}}{E_{bog}(\vec{k})} - 1 \right)}, \quad (3.14)$$

substituindo em (3.10), ficamos com:

$$\hat{H}_{pol} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}}^\dagger & a_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} & \beta_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ a_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

logo

$$\begin{aligned} \hat{H}_{pol} &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b_{\vec{k}}^\dagger & b_{-\vec{k}} \end{pmatrix} T_{\vec{k}}^\dagger \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} & \beta_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}} \end{pmatrix} T_{\vec{k}} \begin{pmatrix} b_{\vec{k}} \\ b_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b_{\vec{k}}^\dagger & b_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{bog}(\vec{k}) & 0 \\ 0 & E_{bog}(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\vec{k}} \\ b_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{2} E_{bog}(\vec{k}) \{b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + b_{-\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}\}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Finalmente, encontramos a hamiltoniana dos excitons/exciton-polaritons diagonalizada.

$$\hat{H}_{pol} = \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{bog}(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \quad (3.17)$$

onde  $E_{bog}(\vec{k}) = \sqrt{\bar{E}_{pol}(\vec{k})(\bar{E}_{pol}(\vec{k}) + 2N_0AU)}$  é a energia das excitações do estado fundamental do BEC. Estas excitações podem ser vistas como quase-partículas, que recebem o nome de bogolons.

Vamos agora escrever o termo de interação entre elétrons e o BEC em termos dos operadores  $b_{\vec{k}}$  e  $b_{\vec{k}}^\dagger$ . Usando a aproximação de campo médio:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} X^2 V_X(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} &= \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \sqrt{N_0 A} X^2 V_X(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger \{ \delta_{\vec{k}+\vec{q}, 0} a_{\vec{k}} + \delta_{\vec{k}, 0} a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \} \\ &= \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0} \sqrt{N_0 A} X^2 V_X(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \{ a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger \}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

usando as transformações de Bogoliubov  $a_{\vec{q}} = u_{\vec{q}}b_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}b_{-\vec{q}}^\dagger$  e  $a_{-\vec{q}}^\dagger = u_{\vec{q}}b_{-\vec{q}}^\dagger + v_{\vec{q}}b_{\vec{q}}$  o que leva a  $\{a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger\} = (u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}})(b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger)$ . Como  $(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}})^2 = u_{\vec{q}}^2 + v_{\vec{q}}^2 + 2u_{\vec{q}}v_{\vec{q}}$ , a partir do sistema (3.13) deduzimos

$$\begin{aligned} u_{\vec{q}}^2 + v_{\vec{q}}^2 &= \frac{\alpha_{\vec{q}}}{E_{bog}(\vec{q})} \\ 2u_{\vec{q}}v_{\vec{q}} &= \frac{\beta_{\vec{q}}}{E_{bog}(\vec{q})}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

o que leva a

$$u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} = \sqrt{\frac{\alpha_{\vec{q}} + \beta_{\vec{q}}}{E_{bog}(\vec{q})}} = \sqrt{\frac{\bar{E}_{pol}(\vec{q}) + N_0AU}{E_{bog}(\vec{q})}} = \sqrt{\frac{E_{bog}(\vec{q}) - \bar{E}_{pol}(\vec{q})}{2N_0AU - E_{bog}(\vec{q}) + \bar{E}_{pol}(\vec{q})}}, \quad (3.20)$$

portanto:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} X^2 V_X(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} &= \\ = \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0} \sqrt{N_0 A X^2} V_X(\vec{q}) \sqrt{\frac{E_{bog}(\vec{q}) - \bar{E}_{pol}(\vec{q})}{2N_0AU - E_{bog}(\vec{q}) + \bar{E}_{pol}(\vec{q})}} \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger), \end{aligned} \quad (3.21)$$

definido  $M(\vec{q}) = \sqrt{N_0 A X^2} V_X(\vec{q}) \sqrt{\frac{E_{bog}(\vec{q}) - \bar{E}_{pol}(\vec{q})}{2N_0AU - E_{bog}(\vec{q}) + \bar{E}_{pol}(\vec{q})}}$ , finalmente obtemos a hamiltoniana do sistema em termos dos operadores de excitação de excitons/exciton-polaritons

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\vec{k}} E_{el}(\vec{k}) \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{bog}(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0} M(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger) + \\ &+ \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left[ V_C(\vec{q}) \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}'}^\dagger \sigma_{\vec{k}} \right], \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde a primeira parte tem a mesma forma da hamiltoniana (2.63), onde o papel dos fônons é substituído pelo das excitações do "gás de bogolons". Definimos a energia de troca entre elétrons como  $\hbar\omega(\vec{q}) = E_{pol}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{pol}(\vec{k})$ , e escrevemos o potencial de interação efetiva:

$$V_A(\vec{q}, \omega) = \frac{2M(\vec{q})^2 E_{bog}(\vec{q})}{(\hbar\omega(\vec{q}))^2 - E_{bog}(\vec{q})^2}. \quad (3.23)$$

Finalmente, chegamos à hamiltoniana efetiva do sistema:

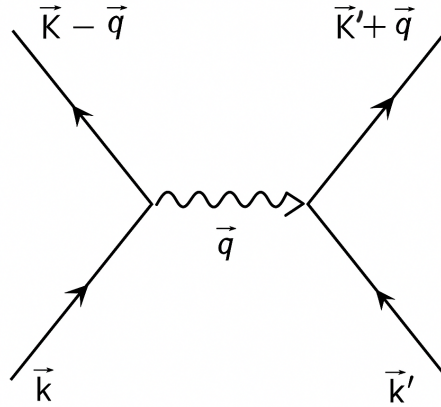
$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\vec{k}} E_{el}(\vec{k}) \sigma_{\vec{k}}^\dagger \sigma_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left[ V_C(\vec{q}) + \frac{2M(\vec{q})^2 E_{bog}(\vec{q})}{(\hbar\omega(\vec{q}))^2 - E_{bog}(\vec{q})^2} \right] \sigma_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \sigma_{\vec{k}'}^\dagger \sigma_{\vec{k}}. \quad (3.24)$$

### 3.1.4 Potencial Efetivo Médio

A parte de interação agora se divide em duas partes, uma de caráter coulombiano e outra sendo a parte que é mediada pelos bósons, que pode ser macroscopicamente controlada. Notamos que esta última tem uma dependência em relação à frequência  $\omega$ . Isso evidencia o caráter retardado da interação induzida por excitons/exciton-polaritons, que também surge na mediação por fônons e favorece a formação dos pares de Cooper. Neste ponto, chamamos atenção para o fato de que o potencial (3.23) tem uma dependência linear na densidade  $N_0$ , ou seja, a força de interação pode ser controlada apenas modificando a concentração de bósons no BEC (Laussy *et al.*, 2012). Como já foi discutido, isso permite contornar a dificuldade da retardação fraca com o aumento na força de interação.

A maioria dos elétrons no gás bidimensional possui energia próxima a energia de Fermi  $\varepsilon_F$ , por isso podemos eliminar a dependência em  $\vec{q}$  do potencial efetivo aproximando-o por uma média sobre a curva de Fermi do 2DEG.

Figura 11 – Diagrama de Feynman para a interação efetiva entre elétrons. Dois elétrons com momento  $\hbar\vec{k}$  e  $\hbar\vec{k}'$  trocam momento  $\hbar\vec{q}$  com a interação e acabam com momento  $\hbar(\vec{k}-\vec{q})$  e  $\hbar(\vec{k}'+\vec{q})$  respectivamente.

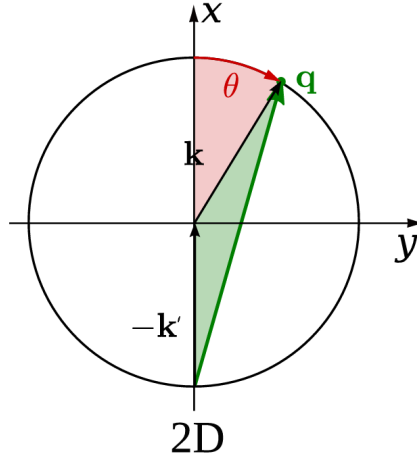


Fonte: Elaborado pelo autor.

Pelo diagrama de Feynman da interação na Fig. 11, vemos que  $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ , assim podemos integrar o potencial efetivo  $V_{eff}(\vec{q}) = V_C(\vec{q}) + V_A(\vec{q}, \omega)$  mantendo  $\vec{k}'$  constante e variando  $\vec{k}$  na curva de Fermi. Como se trata de um sistema de duas dimensões que está confinado num círculo de raio  $k_F$ , podemos parametrizá-lo com o ângulo  $\theta$  entre o semi-eixo positivo  $y$  e o vetor  $\vec{k}$ , a Fig. 12 exibe este desenho. Assim escrevemos  $|\vec{q}|^2 = |\vec{k}|^2 + |\vec{k}'|^2 + 2|\vec{k}||\vec{k}'|\cos\theta$ , e como  $|\vec{k}'| = |\vec{k}| = k_F$ , temos  $q^2 = 2k_F^2(1 + \cos\theta)$ . Com a densidade de estados sendo dado por  $\mathcal{N} = m_e/(\pi\hbar^2)$ , definimos o potencial médio:

$$U_0(\omega) = \frac{A\mathcal{N}}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[ V_C \left( \sqrt{2k_F^2(1 + \cos \theta)} \right) + V_A \left( \sqrt{2k_F^2(1 + \cos \theta)}, \omega \right) \right] d\theta. \quad (3.25)$$

Figura 12 – Desenho da esfera de Fermi, como estamos num sistema 2D, a esfera se torna um círculo. Mantendo  $\vec{k}'$  no eixo x negativo e variamos  $\vec{k}$  no círculo cujo raio é o vetor de  $k_F$ , por um ângulo  $\theta$  a partir do eixo x positivo.



Fonte: Adaptado de (Laussy *et al.*, 2012).

Imediatamente percebemos que o termo do potencial de atração entre elétrons é uma constante, como  $V_C(\vec{q}) = \frac{e^2}{2\epsilon A} \frac{1}{|\vec{q}| + \kappa}$ , temos que:

$$\frac{A\mathcal{N}}{2\pi} \int_0^{2\pi} V_C \left( \sqrt{2k_F^2(1 + \cos \theta)} \right) d\theta = \frac{\mathcal{N}e^2}{2\pi\epsilon} \left( \frac{\ln \left[ \frac{2k_F + \sqrt{4k_F^2 - \kappa^2}}{2k_F - \sqrt{4k_F^2 - \kappa^2}} \right]}{\sqrt{4k_F^2 - \kappa^2}} \right). \quad (3.26)$$

Quando  $N_0$  é baixo este termo tende a dominar o potencial efetivo e assim a interação entre elétrons se torna repulsiva novamente, o que torna necessário investigar que condições devem satisfazer os parâmetros típicos do sistema para que um potencial atrativo seja alcançado.

O termo da média que corresponde à interação mediada por bósons exige um pouco mais de cuidado, pois a função  $V_A(\vec{q}(\theta), \omega)$  apresenta uma singularidade no ponto em que  $E_{bog}(\vec{q}(\theta)) = \hbar\omega$ . A integral em (3.25) diverge nesses pontos. Notamos, primeiramente, que o sinal do potencial é determinado pelo termo no denominador. Em segundo lugar, por estar em função de  $\cos\theta$ , o potencial se torna uma função simétrica em torno de  $\pi$ , logo esperamos que existam pontos de singularidade em ambas as metades do círculo de Fermi.

Escrevendo em termos de  $\theta$  temos  $E_{bog} \left( \sqrt{2k_F^2(1 + \cos \theta_0)} \right) = \hbar\omega$ , onde  $\theta_0$  é o ponto de singularidade no círculo de Fermi, notamos também que este é o ponto que marca



a divisão entre o regime atrativo e o regime repulsivo do potencial  $V_A(\vec{k}, \omega)$ . Pela simetria do potencial, podemos calcular a integral no intervalo  $[0, \pi]$ . Na Fig. 13 vemos que duas regiões atrativas se formam, com uma de repulsão. As divisões entre essas regiões são marcadas pelos pontos de singularidade. Uma vez que existe o limite  $\lim_{\theta \rightarrow \theta_0} f(\theta)$  a singularidade é de primeira ordem, o que permite redefinir (3.25) em termos de uma integral de valor principal de Cauchy. Entretanto, desejamos encontrar seu valor numericamente, para isso podemos isolar a singularidade analiticamente definindo a função  $f(\theta) = (\theta - \theta_0)V_A(\vec{q}(\theta), \omega)$ , assim:

$$U_0(\omega) = \frac{A\mathcal{N}}{\pi} \int_0^\pi \frac{(\theta - \theta_0)V_A(\vec{q}(\theta), \omega)}{(\theta - \theta_0)} d\theta = \int_0^\pi \frac{f(\theta)}{(\theta - \theta_0)} d\theta. \quad (3.27)$$

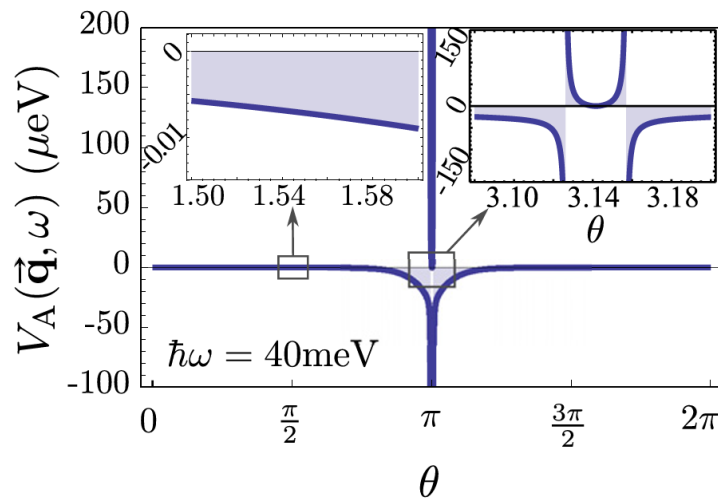
Definindo o resíduo  $\lim_{\theta \rightarrow \theta_0} f(\theta) = f(\theta_0)$ , reescrevemos:

$$\int_0^\pi \frac{f(\theta)}{(\theta - \theta_0)} d\theta = \int_0^\pi \left( \frac{f(\theta)}{(\theta - \theta_0)} - \frac{f(\theta_0)}{(\theta - \theta_0)} + \frac{f(\theta_0)}{(\theta - \theta_0)} \right) d\theta, \quad (3.28)$$

portanto,

$$U_0(\omega) = \frac{A\mathcal{N}}{\pi} \int_0^{2\pi} \frac{f(\theta) - f(\theta_0)}{(\theta - \theta_0)} d\theta + f(\theta_0) \ln \left( \frac{\pi - \theta_0}{\theta_0} \right). \quad (3.29)$$

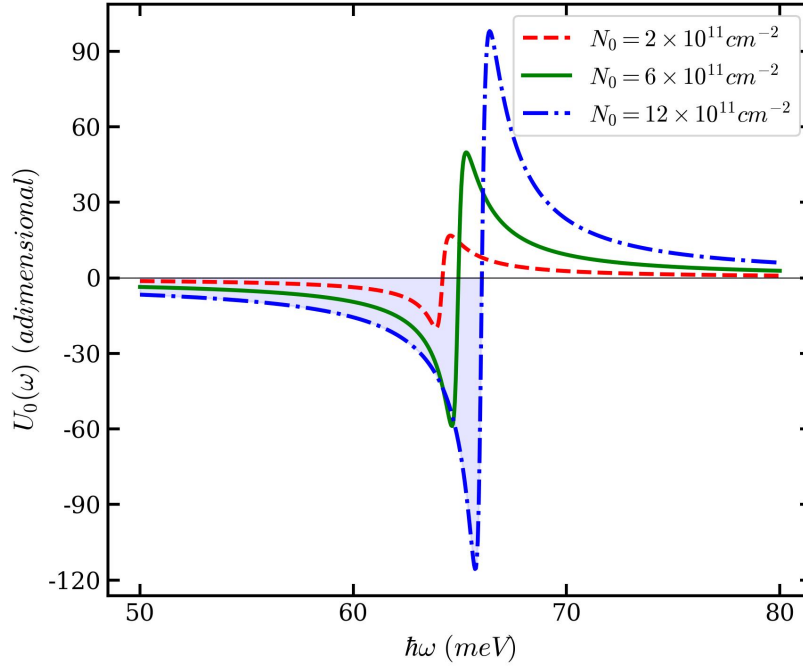
Figura 13 – Gráfico do potencial efetivo  $V_A(\vec{q}, \omega)$  (em  $\mu\text{eV}$ ), com  $\hbar\omega = 40 \text{ meV}$ , em função de  $|\vec{q}| = \sqrt{2k_F(1 + \cos\theta)}$  no intervalo  $[0, 2\pi]$ . No centro, em  $\theta = \pi$ , uma região atrativa, o zoom no quadro direito mostra que esta se encontra entre duas singularidades. Nas extremidades, duas regiões atrativas, o zoom no quadro esquerdo mostra um decaimento lento. Os pontos de singularidade separam todas essas regiões.



Fonte: Adaptado de (Laussy *et al.*, 2012).

A Fig. 14 mostra o gráfico de  $U_0$  para alguns valores de  $N_0$ , a primeira característica que chama atenção é a presença de uma região negativa: isso é notável, pois a teoria BCS garante

Figura 14 – Gráfico do potencial  $U_0$  mediado por exciton-polaritons para vários valores de  $N_0$  em  $cm^{-2}$ . Observa-se uma região de valores negativos, seguida por uma positiva. A medida que  $N_0$  cresce, a região negativa se amplia.



Fonte: Elaborado pelo autor.

que na presença de um potencial atrativo fraco sempre há a formação de pares de Cooper e portanto, a SC neste modelo é possível. Observamos que há uma tendência de deslocamento da região negativa para valores mais altos de  $\hbar\omega$  a medida que  $N_0$  aumenta, uma característica que se mostra relevante para o valor da temperatura crítica.

Na Fig. 15 exibimos potencial médio considerando apenas os excitons sem a parte dos fótons de cavidade. Os parâmetros da Tabela 1 foram usados para este cálculo.

## 3.2 Equação do Gap

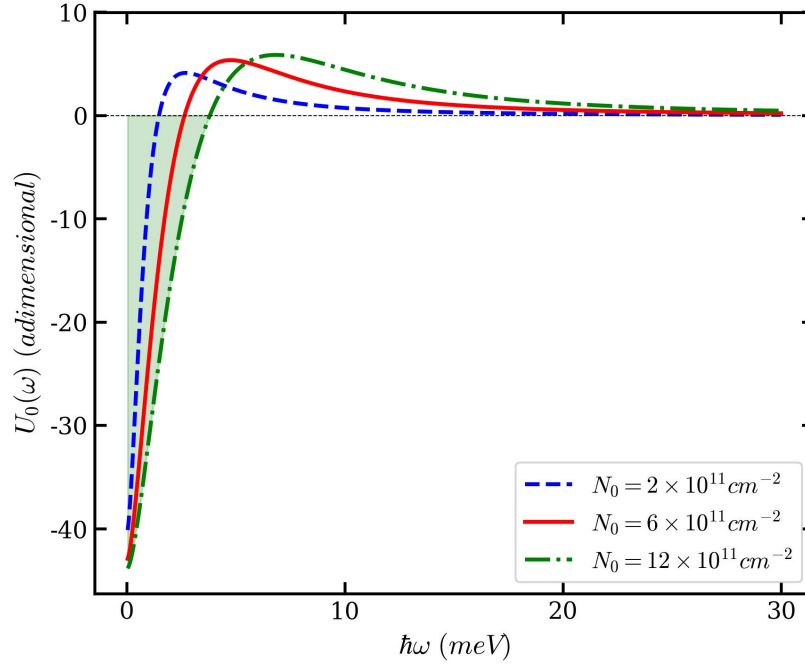
### 3.2.1 Potencial de Bogoliubov

Uma vez que calculamos a média da energia de interação  $U_0(\omega)$ , seguimos os passos tradicionais da teoria BCS, obtemos a equação do gap (Laussy *et al.*, 2010):

$$\Delta(\xi, T) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{U_0(\xi - \xi') \Delta(\xi', T)}{2 \sqrt{\Delta(\xi', T)^2 + (\xi')^2}} \tanh \left( \frac{\sqrt{\Delta(\xi', T)^2 + (\xi')^2}}{2k_B T} \right) d\xi', \quad (3.30)$$

onde  $U_0(\xi - \xi')$  tem uma dependência na diferença entre os níveis de energia. Assim, a função do gap é obtida ao se solucionar numericamente a equação integral não linear dada por (3.30),

Figura 15 – Gráfico do potencial  $U_0$  quando se tem exclusivamente excitons para alguns valores de  $N_0$  em  $cm^{-2}$ . Assim como na Fig. 14 a região negativa também aparece e se desloca para valores altos de  $\hbar\omega$  com o aumento de  $N_0$ . Nota-se que a ordem de grandeza da região negativa é menor que no caso da mediação por excitons-polárítos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

que pertence a uma família conhecida como equações de Hammerstein (Kitamura, 1963), e possuem a forma geral:

$$\Delta(\xi, T) = \int_{-\infty}^{\infty} K(\xi, \xi') f[\xi', \Delta(\xi')] d\xi'. \quad (3.31)$$

Comparando com (3.30), temos

$$K(\xi, \xi') = -\frac{U_0(\xi - \xi')}{2} \quad (3.32)$$

$$f[\xi', \Delta(\xi', T)] = \frac{1}{2\sqrt{\Delta(\xi', T)^2 + (\xi')^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\Delta(\xi', T)^2 + (\xi')^2}}{2k_B T}\right),$$

e quando  $K(\xi, \xi') > 0$  a equação possui soluções não-triviais, o que cai diretamente no caso onde  $U_0 < 0$  é atrativo (Vansevenant, 1985).

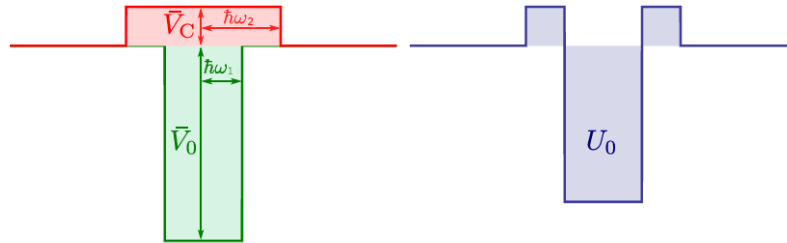
Na seção 2.2.6 explanamos brevemente o modelo BCS, que consistia em supor que o potencial  $V_{\vec{k}, \vec{k}'} = -V_0$  se a diferença de energia era menor do que  $\hbar\omega$  e  $V_{\vec{k}, \vec{k}'} = 0$  caso contrário. Chamamos atenção para o fato de que o modelo de Cooper considerava apenas o potencial atrativo, e não o potencial de repulsão entre os elétrons de forma separada, que já era incluído no

potencial efetivo. Um modelo um pouco mais refinado, embora ainda simples, é o que considera um potencial de repulsão entre os elétrons de forma separada, que é o que foi feito no início da seção 3.1.4 quando se definiu  $V_{eff}(\vec{q})$ . Seja  $\bar{V}_C$  o valor médio potencial coulombiano do elétrons, sendo  $\bar{\xi} = \xi - \xi'$ , supomos que o potencial  $U_0(\omega) = \bar{V}_0 + \bar{V}_C$  seja da forma:

$$U_0(\bar{\xi}) = \begin{cases} -U_o & \text{se } -\hbar\omega_1 \leq \bar{\xi} \leq \hbar\omega_1 & \text{(Região 1)} \\ \bar{V}_C & \text{se } -\hbar\omega_2 < \bar{\xi} < -\hbar\omega_1 \text{ e } \hbar\omega_1 < \bar{\xi} < \hbar\omega_2 & \text{(Região 2)} \\ 0 & \text{caso contrário} & \text{(Região 3)} \end{cases} \quad (3.33)$$

onde  $U_0 = \bar{V}_0 - \bar{V}_C$  e  $\bar{V}_C$  são constantes positivas e as constantes  $\hbar\omega_1$  e  $\hbar\omega_2$  são energias de corte para evitar divergências nos potenciais, de forma semelhante a energia de Debye  $\hbar\omega_D$ . Outra hipótese deste modelo é que  $\omega_1 \approx \omega_2$ . Com essa forma, a energia de interação é um potencial do tipo degrau, em que na **Região 2** é repulsivo e na **Região 1** atrativo. Este é conhecido como potencial de Bogoliubov, que é mostrado na Fig. 16.

Figura 16 – O potencial de coulomb  $\bar{V}_C$  se estende num raio  $\hbar\omega_2$  e o potencial efetivo  $\bar{V}_0$  um raio  $\hbar\omega_1$ . O potencial de interação resultante da combinação destes é  $U_0(\xi - \xi')$  e tem a forma de um poço  $U_0$  com duas barreiras de valor  $\bar{V}_C$  em suas bordas, sendo repulsivo nessas regiões.



Fonte: Adaptado de (Laussy *et al.*, 2012).

Em seguida, aplicamos uma aproximação na função do *gap*, considerando que esta também seja uma função do tipo degrau como o potencial em (3.33) (Ketterson; Song, 1999). Embora seja uma suposição grosseira, ela torna possível obter valores para temperatura crítica de forma direta. Assim, seja:

$$\Delta(\xi, T) = \begin{cases} \Delta_1 & \text{se } -\hbar\omega_1 \leq \xi \leq \hbar\omega_1 \\ \Delta_2 & \text{se } -\hbar\omega_2 < \xi < -\hbar\omega_1 \text{ e } \hbar\omega_1 < \xi < \hbar\omega_2 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.34)$$

Como  $\omega_1 < \omega_2$ , a equação do *gap* (3.30) fica:

$$\begin{aligned} \Delta(\xi, T) = & - \left\{ \int_{-\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_1} \frac{U_0(\xi - \xi')\Delta_1}{2E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' + \right. \\ & + \int_{\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_2} \frac{U_0(\xi - \xi')\Delta_2}{2E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' + \\ & \left. + \int_{-\hbar\omega_2}^{-\hbar\omega_1} \frac{U_0(\xi - \xi')\Delta_2}{2E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' \right\}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

onde  $E = \sqrt{\Delta(\xi', T)^2 + \xi'^2}$ . Como o integrando é simétrico,

$$\Delta(\xi, T) = - \left\{ \Delta_1 \int_0^{\hbar\omega_1} \frac{U(\xi - \xi')}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' + \Delta_2 \int_{\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_2} \frac{U(\xi - \xi')}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' \right\}. \quad (3.36)$$

Considerando os diversos valores de  $\xi$ , se  $\xi'$  está na região 1, temos  $-\hbar\omega_1 \leq \xi - \xi' \leq \hbar\omega_1$  e nesse caso  $U_0(\xi - \xi') = -U_0$ . Se  $\xi'$  está na região 2 então  $-\hbar\omega_2 < \xi - \xi' < -\hbar\omega_1$  o que implica que  $U_0(\xi - \xi') = \bar{V}_C$  neste intervalo. Isso nos leva à equação:

$$\Delta_1 = - \left\{ -\Delta_1 U_0 \int_{-\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_1} \frac{1}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' + \Delta_2 \bar{V}_C \int_{\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_2} \frac{1}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' \right\}. \quad (3.37)$$

Repetindo esses passos, no caso em que  $-\hbar\omega_2 < \xi < -\hbar\omega_1$  e  $\hbar\omega_1 < \xi < \hbar\omega_2$ , podemos encontrar um certo valor de  $\xi$  neste intervalo, tal que a equação do *gap* fique:

$$\Delta_2 = - \left\{ \Delta_1 \bar{V}_C \int_{-\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_1} \frac{1}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' + \Delta_2 \bar{V}_C \int_{\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_2} \frac{1}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi' \right\}. \quad (3.38)$$

Definindo as constantes  $I_1 = \int_{-\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_1} \frac{1}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi'$  e  $I_2 = \int_{\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_2} \frac{1}{E} \tanh\left(\frac{E}{2k_bT}\right) d\xi'$ , chegamos em um sistema de equações que pode ser posto em uma forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} -U_0 I_1 & \bar{V}_C I_2 \\ \bar{V}_C I_1 & \bar{V}_C I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \end{pmatrix}, \quad (3.39)$$

que é conhecida com equação do *gap* linearizada (Ketterson; Song, 1999). Para que exista uma solução não trivial, devemos ter:

$$\det \begin{pmatrix} U_0 I_1 - 1 & -\bar{V}_C I_2 \\ -\bar{V}_C I_1 & -\bar{V}_C I_2 - 1 \end{pmatrix} = 0, \quad (3.40)$$

lembrando que  $U_0 = \bar{V}_0 - \bar{V}_C$ , chegamos na equação:

$$I_1 = \left( \bar{V}_0 - \frac{\bar{V}_C}{1 + I_2 \bar{V}_C} \right)^{-1}. \quad (3.41)$$

A temperatura crítica  $T_C$  é obtida quando  $\Delta(\xi, T_C) = 0$ . Fazendo o *gap*  $|\vec{\Delta}| \rightarrow 0$  na equação (3.41), e usando as aproximações do final da seção 2.2.6:

$$\begin{cases} I_1 = \lim_{\Delta_1 \rightarrow 0} \int_0^{\hbar\omega_1} \frac{\tanh[\xi/(2k_B T_C)]}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_1^2}} d\xi \approx \ln\left(\frac{1.13\hbar\omega_1}{k_B T_C}\right) \\ I_2 = \lim_{\Delta_2 \rightarrow 0} \int_{\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_2} \frac{\tanh[\xi/(2k_B T_C)]}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_2^2}} d\xi \approx \ln\left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right) \end{cases}, \quad (3.42)$$

o que leva a uma equação para a temperatura crítica:

$$k_B T_C \approx 1.13\hbar\omega_1 \exp\left(-\left\{\bar{V}_0 - \frac{\bar{V}_C}{1 + \ln\left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)\bar{V}_C}\right\}^{-1}\right). \quad (3.43)$$

Comparando a equação (3.43) com a equação (2.89) vemos que considerar um potencial coulombiano separadamente introduz uma pequena correção na equação da temperatura crítica. Outro ponto importante é que, mesmo se tivermos um potencial repulsivo, com  $U_0 = \bar{V}_0 - \bar{V}_C < 0$ , ainda seria possível que o denominador na exponencial de (3.43) permanecesse positivo, e portanto, mesmo nesse caso ainda leva a um *gap* não nulo. (Laussy *et al.*, 2012).

### 3.2.2 Algoritmo para o calculo da Temperatura Crítica

A introdução do potencial de Bogoliubov aliado à linearização da equação (3.30) permitiu o calculo direto da temperatura crítica. Desejamos generalizar esse procedimento para o caso de um potencial de interação geral. Primeiro, notamos que  $U_0(\xi)$  tende a zero rapidamente quando  $\xi \rightarrow \pm\infty$ , assim podemos definir uma energia de corte  $\pm\xi_{max}$  tal que  $U_0(\xi) = 0$  se  $|\xi| > \xi_{max}$ . Logo, (3.30) fica

$$\Delta(\xi, T) = - \int_{-\xi_{max}}^{+\xi_{max}} \frac{U_0(\xi - \xi') \Delta(\xi', T)}{2E(\xi, T)} \tanh\left(\frac{E(\xi, T)}{2k_B T}\right) d\xi', \quad (3.44)$$

onde definimos  $E(\xi, T) = \sqrt{\Delta(\xi, T)^2 + (\xi')^2}$ . A integral em (3.44) pode ser convertida numa soma: começamos discretizando o intervalo  $[-\xi_{max}, \xi_{max}]$  em  $N$  pontos igualmente espaçados, assim a função do *gap* se converte em um vetor  $\Delta(\xi_k, T) = \Delta_k(T)$  com  $N$  valores, e o potencial se transforma em uma matriz  $N \times N$  definida por  $U_0(\xi_k - \xi_{k'}) = U_{k,k'}$ , o que nos leva à soma

$$\Delta_k(T) = \sum_{k'} \left\{ - \frac{U_{k,k'}}{2E_{k'}(T)} \tanh\left(\frac{E_{k'}(T)}{2k_B T}\right) \Delta_{k'} \right\} \Delta_{k'}(T), \quad (3.45)$$

com  $\Delta\xi$  sendo o espaçamento entre os pontos da malha. A discretização do potencial e da função do *gap* é uma generalização evidente do procedimento que levou ao potencial de Bogoliubov.

Agora, consideremos o caso em que  $T \rightarrow T_C$ . Nesse limite, para cada  $k$  temos  $\Delta_k(T) = \Delta_k \rightarrow 0$ , o que implica  $\lim_{T \rightarrow T_C} E(\xi_k, T) = |\xi_k|$ . Adotamos a aproximação em (3.45) de que  $E(\xi_k, T) \approx |\xi_k|$ , e assim obtemos

$$\Delta_k(T) = \sum_{k'} \left\{ - \frac{U_{k,k'}}{2|\xi_{k'}|} \tanh\left(\frac{|\xi_{k'}|}{2k_B T}\right) \Delta_{k'} \right\} \Delta_{k'}(T), \quad (3.46)$$

definindo o elemento de matriz  $M_{k,k'}(T) = - \frac{U_{k,k'}}{2|\xi_{k'}|} \tanh\left(\frac{|\xi_{k'}|}{2k_B T}\right) \Delta_{k'}$ , chegamos na equação matricial

$$\vec{\Delta}(T) = M(T) \vec{\Delta}(T), \quad (3.47)$$

que estabelece  $\vec{\Delta}(T)$  como um autovetor da matriz  $M(T)$  com autovalor  $\lambda = 1$ . Isso mostra que, a medida que nos aproximamos de  $T_C$ , a equação de *gap* discretizada (3.46) se aproxima do

sistema linear em (3.47), onde  $M(T)$  tem a propriedade de que seus autovalores correspondentes a autovetores que são soluções devem necessariamente ser próximos de  $\lambda = 1$  (Tinkham, 2004). Assim um método para encontrar  $T_C$  consiste em tomar a matriz  $M(T)$ , calcular o seu conjunto de autovalores  $\sigma(M(T))$  e obter o seu máximo  $\lambda_{\max}(T) = \max\{\sigma[M(T)]\}$ , que está bem definido para cada valor de  $T$ . Devemos ter  $\lambda_{\max}(T_C) = 1$ , logo a temperatura crítica sera determinada pela raiz da equação  $\lambda_{\max}(T) - 1 = 0$ . O algoritmo que formaliza esse procedimento é dado a seguir.

---

**Algoritmo 1:** Cálculo de  $T_C$  via Equação do *gap* Linearizada

---

**Data:** Parâmetros físicos  $k_B, \xi_{\max}$ , número de pontos  $N$  e função de potencial  $U_0$ .  
**Result:** Temperatura Crítica  $T_C$ .

```
// 1. Discretização e Inicialização
Gerar vetor  $\xi$  com  $N$  pontos no intervalo  $[-\xi_{\max}, \xi_{\max}]$ ;
 $\Delta\xi \leftarrow \xi_1 - \xi_0$ ;
Inicializar matriz  $U$  de tamanho  $N \times N$  com zeros;
// 2. Pré-cálculo do Potencial
for  $i \leftarrow 0$  to  $N - 1$  do
    for  $j \leftarrow 0$  to  $N - 1$  do
         $U_{ij} \leftarrow U_0(|\xi_i - \xi_j|)$ ;
    end
end
// 3. Definição da Função de Erro do Autovalor
Function ErroAutovalor( $T$ ):
    if  $T \leq 0$  then
        return  $\infty$ ;
    end
    Inicializar matriz  $M(T)$  de tamanho  $N \times N$  com zeros;
    for  $j \leftarrow 0$  to  $N - 1$  do
         $E' \leftarrow |\xi_j|$ ;
        if  $E' < 10^{-9}$  then
             $\Theta \leftarrow \frac{1}{4k_B T}$ ; // Evita divisão por zero quando  $\xi \rightarrow 0$ 
        else
             $\Theta \leftarrow \frac{\tanh(E'/2k_B T)}{2E'}$ ;
        end
        for  $i \leftarrow 0$  to  $N - 1$  do
             $M_{ij} \leftarrow -V_{ij} \cdot \Theta \cdot \Delta\xi$ ;
        end
    end
    Calcular autovalores  $\sigma[M(T)]$  de  $M(T)$ ;
     $\lambda_{\max} \leftarrow \max(\sigma[M(T)])$ ;
    return  $\lambda_{\max} - 1$ ;
// 4. Solução Numérica
Definir intervalo de busca  $[T_{\min}, T_{\max}]$ ;
 $T_C \leftarrow$  Raiz de ErroAutovalor( $T$ ) no intervalo;
return  $T_C$ ;
```

---



### 3.2.3 Algoritmo para o calculo de $\Delta(\xi, T)$

A equação do *gap* (3.30) é auto consistente, o que significa que tem a forma  $\Delta = \phi(\Delta)$ , onde  $\phi$  é o operador integral não linear definido por:

$$\phi(\Delta) = \int_{-\xi_{max}}^{+\xi_{max}} \frac{-U_0(\xi - \xi')\Delta}{2E(\xi, T)} \tanh\left(\frac{E(\xi, T)}{2k_B T}\right) d\xi', \quad (3.48)$$

onde já adotamos a aproximação da energia de corte  $\xi_{max}$ . Também, notamos que este é um operador de ponto fixo sobre a solução  $\Delta(\xi, T)$ , o que significa que a aplicação repetida de  $\phi$  sobre ela não altera seu valor.

Entretanto, a propriedade mais importante deste operador é que, ao aplica-lo sobre uma função, obtemos uma outra que é mais próxima da solução. Em outras palavras, se  $\|\Delta(\xi, T)\|$  for a norma da função do *gap* no espaço de funções das soluções, então, se  $\Delta(\xi, T)$  for a solução exata e  $\Delta_0$  arbitrário, a função  $\Delta_1$  definida como:

$$\Delta_1(\xi, T) = \phi(\Delta_0(\xi, T)) = \int_{-\xi_{max}}^{+\xi_{max}} \frac{-U_0(\xi - \xi')\Delta_0(\xi, T)}{2E(\xi, T)} \tanh\left(\frac{E(\xi, T)}{2k_B T}\right) d\xi', \quad (3.49)$$

tem a propriedade  $\|\Delta(\xi, T) - \Delta_1(\xi, T)\| \leq \|\Delta(\xi, T) - \Delta_0(\xi, T)\|$ , ou seja,  $\Delta_1$  é mais próxima da solução exata do que  $\Delta_0$ . Escolhendo uma função arbitraria (constante ou gaussiana) podemos repetir esse procedimentos varias vezes de forma a se aproximar arbitrariamente da solução. A validade desse método esta condicionada a existência de uma solução, algo que nem sempre esta garantido dado que  $U_0$  pode assumir valores negativos e positivos (Laussy *et al.*, 2012).

Para implementar numericamente este procedimento seguimos passos semelhantes ao da seção anterior. Partimos o intervalo  $[-\xi_{max}, \xi_{max}]$  em  $N$  pontos e usamos a forma discretizada da equação do *gap* (3.45), que agora é não linear. Primeiro, iniciamos a matriz da energia de interação  $U_{ij} = U_0(|\xi_i - \xi_j|)$ , a cada iteração obtemos um  $\Delta_{novo}$  obtido a partir do anterior  $\Delta$ , o erro relativo é definido como  $Erro = |\Delta_{novo} - \Delta|/|\Delta|$ . Estabelecemos uma tolerância  $\varepsilon$  tal que o algoritmo encerra quando  $Erro \leq \varepsilon$ . Como a solução pode não existir, é recomendado estabelecer um numero máximo de iterações.

A convergência para a solução pode ser prejudicada caso a atualização da função  $\Delta$  ocorra de forma muito brusca. Para corrigir este problema, geralmente a tornamos mais suave definindo em cada iteração a combinação linear  $\Delta \leftarrow \alpha \cdot \Delta_{novo} + (1 - \alpha) \cdot \Delta$ , onde  $\alpha \leq 1$  é chamada de parâmetro de mistura. Assim, atualizamos  $\Delta$  com apenas uma fração da  $\Delta_{novo}$  o que

suaviza a convergência (Martin, 2020). Se  $\alpha = 1$  não corre mistura e a convergência se torna instável. Para maioria dos casos, escolhemos  $\alpha = 0.6$ , o que torna o algoritmo mais lento, mas permite uma melhora considerável na convergência.

---

**Algoritmo 2:** Solução Iterativa da Equação do *gap*


---

**Data:**  $T, \xi_{max}, N$ , função  $U_0(\xi)$ , iterações máximas  $n_{max}$ , tolerância  $\varepsilon$  e fator de mistura  $\alpha$ .

**Result:** Função do *gap*  $\Delta(\xi)$ .

// 1. Inicialização

Gerar vetor  $\xi$  com  $N$  pontos em  $[-\xi_{max}, \xi_{max}]$ ;

$\Delta\xi \leftarrow \xi_1 - \xi_0$ ;

Inicializa matriz  $U$  com  $N \times N$  elementos;

**for**  $i \leftarrow 0$  **to**  $N - 1$  **do**

**for**  $j \leftarrow 0$  **to**  $N - 1$  **do**

$U_{ij} \leftarrow U_0(|\xi_i - \xi_j|)$ ;

**end**

**end**

Inicializar vetor  $\Delta$  com um valor inicial (ex: constante ou Gaussiana);

$Erro \leftarrow \infty$ ;

// 2. Loop Iterativo Autoconsistente

$iter = 0$ ;

**while**  $Erro > \varepsilon$  e  $iter \leq n_{max}$  **do**

    Inicializar vetor  $\Delta_{novo}$  com zeros;

**for**  $i \leftarrow 0$  **to**  $N - 1$  **do**

$Soma \leftarrow 0$ ;

**for**  $j \leftarrow 0$  **to**  $N - 1$  **do**

$E_j \leftarrow \sqrt{\xi_j^2 + (\Delta_j)^2}$

**if**  $E_j > 0$  **then**

$\Theta \leftarrow \frac{\tanh(E_j/2k_B T)}{2E_j}$ ;

**end**

**else**

$\Theta \leftarrow \frac{1}{4k_B T}$  ;

// Evita divisão por zero quando  $E \rightarrow 0$

**end**

            // Implementação da integral

$Soma \leftarrow Soma - U_{ij} \cdot \Theta \cdot \Delta_j \cdot \Delta\xi$ ;

**end**

$\Delta_{novo}[i] \leftarrow Soma$ ;

**end**

    // Verificação de Convergência

$Erro \leftarrow |\Delta_{novo} - \Delta|/|\Delta|$ ;

    // Atualização com mistura para estabilidade

$\Delta \leftarrow \alpha \cdot \Delta_{novo} + (1 - \alpha) \cdot \Delta$ ;

$iter = iter + 1$ ;

**end**

**return**  $\Delta$ ;

---

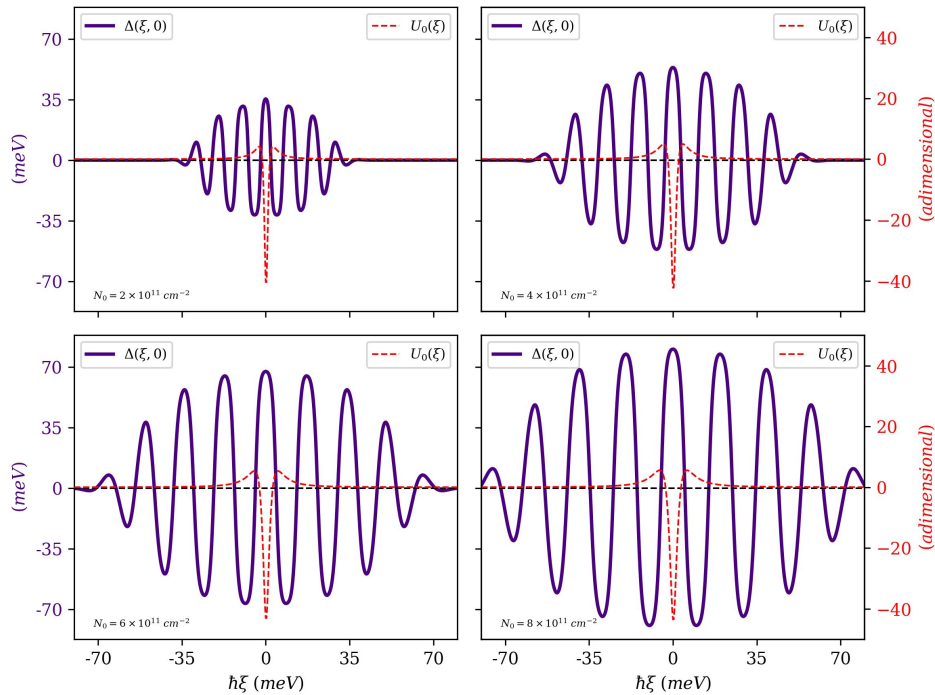
## 4 RESULTADOS

### 4.1 Função do Gap e $T_C$ : Excitons e Excitons-Polaritons

Iniciamos nossa análise comparando o *gap*  $\Delta$  e a temperatura crítica  $T_C$  dos excitons sozinhos com as dos excitons-polaritons. Isso é feito facilmente substituindo nas equações  $\bar{E}_{pol}(\vec{k}) \rightarrow E_{ex}(\vec{k})$ , anulando a constante de Rabi e colocando a fração de excitons nos polaritons  $X = 1$ . Uma vez que o modelo BCS só é válido para elétrons próximos à energia de Fermi, valores de transição  $\hbar\xi$  entre estados eletrônicos muito altos possuem pouco significado físico, portanto, devemos nos concentrar no comportamento de  $\Delta(\xi, T)$  apenas numa vizinhança próxima de  $\xi = 0$ .

A solução do *gap* em  $T = 0$  para o exciton é dada pela Fig. 17, onde  $N_0$  é a densidade de excitons. Como esperado, escolha de um potencial  $U_0$  mais complexo torna  $\Delta$  radicalmente diferente em comparação com a solução tradicional com um potencial atrativo de poço simples. A presença de regiões atrativas e repulsivas em  $U_0$  provoca um comportamento oscilatório acentuado, seguido por um decaimento a zero quando  $|\hbar\xi|$  é grande, significando que apenas elétrons próximos a energia de Fermi podem formar pares de Cooper.

Figura 17 – Gráficos para solução do *gap* em  $T=0$  e potencial  $U_0(\xi)$ . Cada gráfico é produzido para um valor da densidade de excitons  $N_0$ . A magnitude de  $\Delta$  aumenta diretamente com o aumento de  $N_0$ .

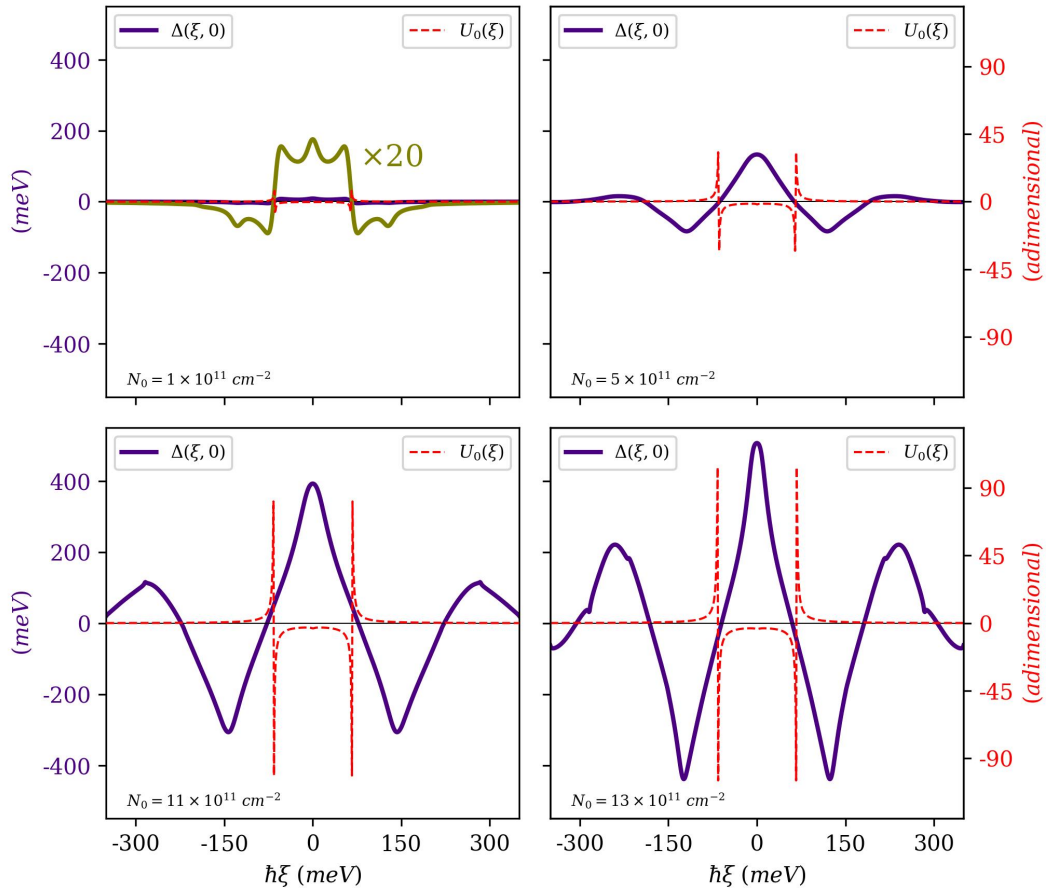


Fonte: Elaborado pelo autor.

Observamos que o aumento da densidade  $N_0$  se reflete em um crescimento na magnitude e na distancia (em termos de energia) de decaimento do  $gap$ .

Para o caso dos excitons-polaritons, o potencial  $U_0$  tem duas grande regiões de repulsão com uma única região atrativa localizada entre dois picos acentuados de máximo e mínimo. Isso dá à solução um caráter bem menos oscilatório, como se pode ver no gráficos da Fig. 18. Para valores baixos da densidade de excitons-polaritons  $N_0$  a magnitude do  $gap$  é extremamente baixa em relação aos de valores maiores de  $N_0$ : isso se reflete em uma densidade crítica, abaixo da qual  $\Delta$  é extremamente baixo.

Figura 18 – Gráficos para solução do  $gap$  em  $T=0$  e potencial  $U_0(\xi)$ . A forma dos gráficos se caracteriza por um pico grande acentuado no centro. A ordem de grandeza do decaimento cresce consideravelmente à medida que a densidade de polaritons aumenta.

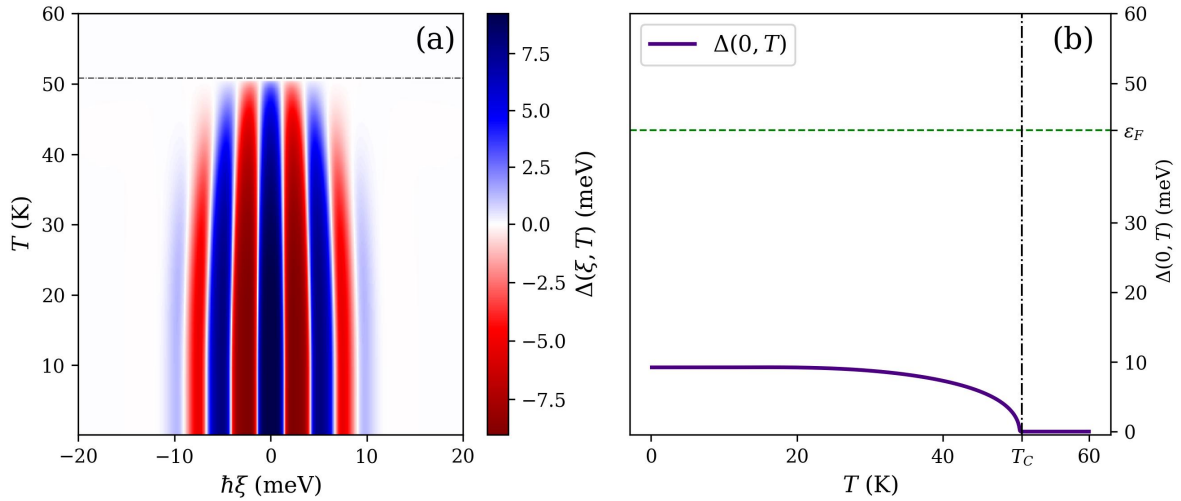


Fonte: Elaborado pelo autor.

Os valores de  $\Delta$  para os polaritons atingem ordens de grandeza muito maiores do que os dos excitons. Em contrapartida, seu decaimento na energia  $\hbar\xi$  é muito mais lento, o que torna sua validade, em termos de nosso modelo, restrito à apenas alguns valores em torno de  $\hbar\xi = 0$ . A força da interação atrativa mediada por polaritons se torna evidente.

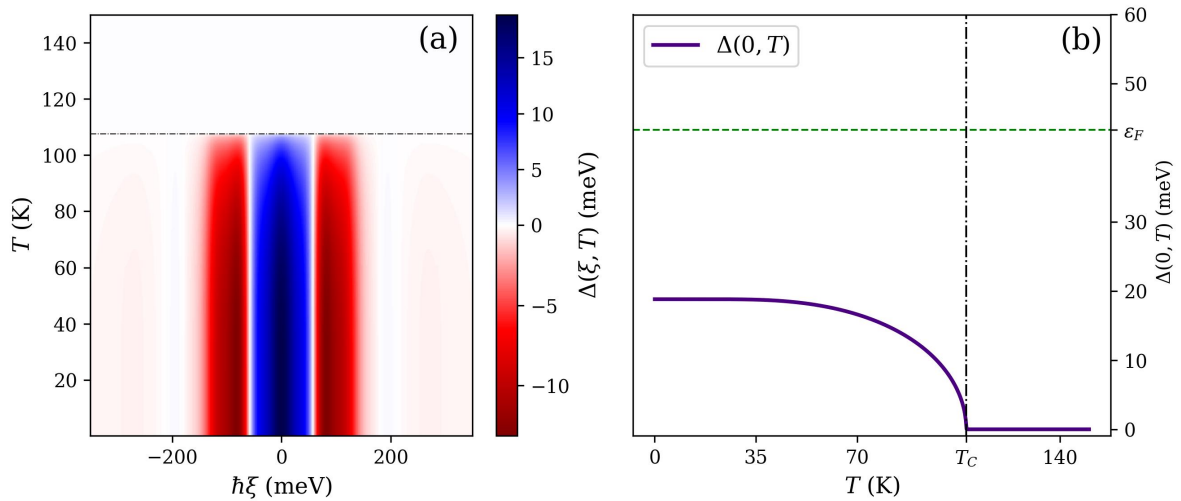
Nas Fig. 20 e Fig. 19 apresentamos a solução numérica completa da função do *gap*  $\Delta(\xi, T)$ . Os valores foram escolhidos de modo que o valor máximo do *gap* seja menor do que a energia de Fermi  $\varepsilon_F = 43.3 \text{ meV}$ . Ambas as funções tem comportamento suave à medida que  $T$  aumenta, caindo abruptamente para zero a partir da temperatura crítica.

Figura 19 – Solução do *gap* para os excitons com  $N_0 = 0.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $T_C = 50.7 \text{ K}$ . Em (a) vemos que a forma de solução é oscilatória em  $\xi$ , mas suave em  $T$ . Em (b) o *gap* no ponto  $\xi = 0$  em função da temperatura.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 20 – Solução do *gap* para os polaritons com  $N_0 = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $T_C = 107.6 \text{ K}$ .



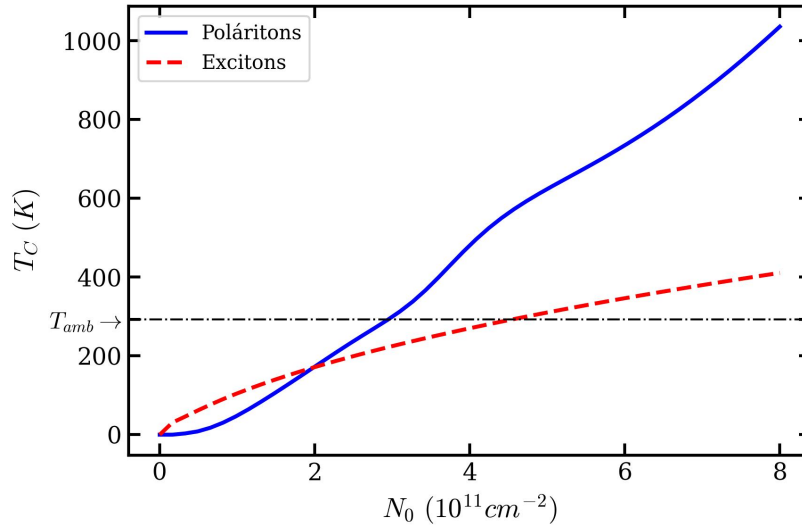
Fonte: Elaborado pelo autor.

Mesmo para densidade de polaritons baixa, vemos na Fig. 20 (a) escalas de energias muito maiores do que as da Fig. 19 (a).

#### 4.1.1 Análise da Temperatura Crítica

A diferença na ordem de energia envolvida nos potenciais  $U_0$  para excitons e excitons-polaritons dá a este último temperaturas críticas muito maiores. A Fig. 21 mostra a comparação entre  $T_C$  e a densidade  $N_0$ . A curva dos excitons cresce como uma função da ordem de  $\mathcal{O}(\sqrt{N_0})$ , enquanto que a dos polaritons tem  $T_C = 0$  para alguns valores da densidade e em seguida cresce aproximadamente como uma função da ordem de  $\mathcal{O}(N_0)$ . Os polaritons atingem altas temperaturas críticas de forma muito mais rápida que os excitons à medida que se aumenta a densidade, reforçando as hipóteses a partir da análise da função do *gap*. Assim, controlando  $N_0$ , controlamos o estado SC.

Figura 21 – Temperatura crítica em função da densidade  $N_0$ , onde  $T_{amb}$  é a temperatura ambiente.



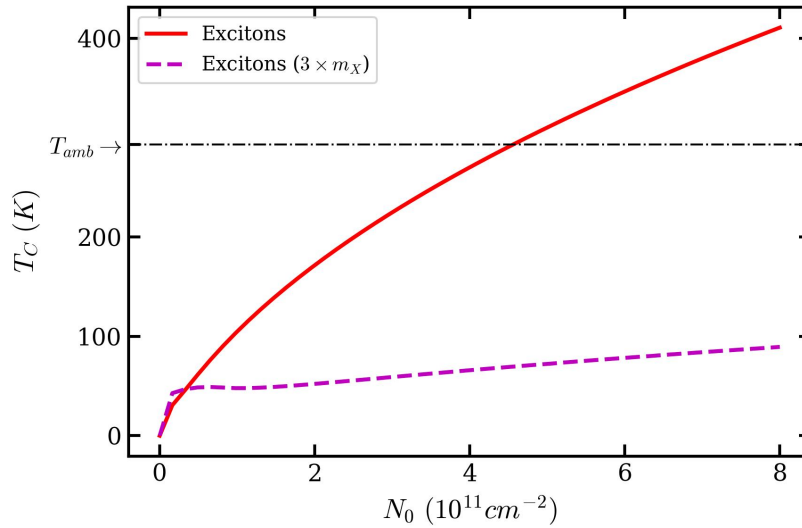
Fonte: Elaborado pelo autor.

Embora ambos os sistemas atinjam altas temperaturas críticas, deve-se considerar que a densidade dos polaritons/excitons não pode ser arbitrariamente aumentada devido à transição de Mott do condensado em um plasma de elétrons e buracos (Cherotchenko *et al.*, 2016), portanto, servem apenas como ilustração da tendência robusta de crescimento de  $T_C$  a medida que se aumenta a força da interação.

Uma das motivações para a proposta de excitons/polaritons é sua baixa massa efetiva, que deve levar a uma maior energia característica quando comparado com fônons. Vejamos o que ocorre quando se altera a massa  $m_X$  dos excitons. Na Fig. 22 vemos o efeito na temperatura crítica quando se aumenta em 3 vezes essa massa, onde se constata uma coincidência entre os valores para densidades pequenas e uma drástica redução nos valores da temperatura crítica

para grandes de densidades, uma previsão já esperada no contexto da teoria BCS.

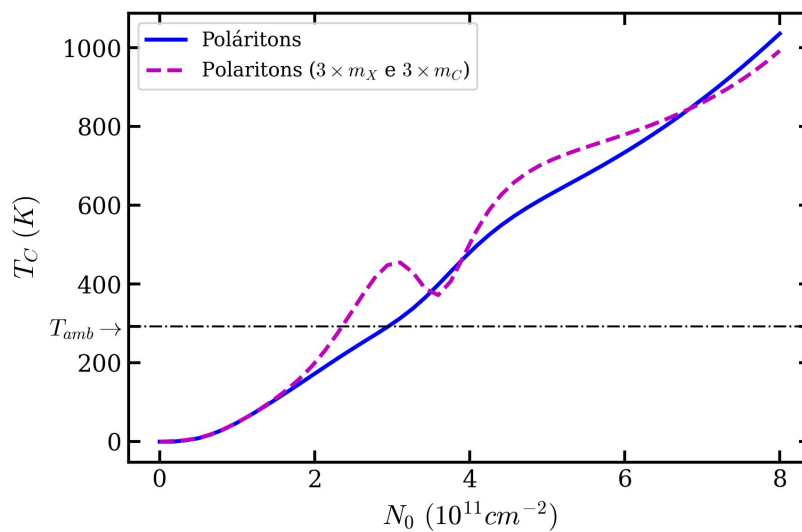
Figura 22 – Gráfico da temperatura crítica comparando excitons de massas distintas. A constante  $m_X$  é a massa do éxciton.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Ao se aumentar a massa dos polaritons, encontramos um resultado diferente. Na Fig. 23, observamos que os gráficos se sobrepõem para valores pequenos de  $N_0$ , mas o gráfico que corresponde a massa 3 vezes maior se distorce de forma inesperada, assumindo valores maiores em diversos pontos.

Figura 23 – Gráfico da temperatura crítica comparando polaritons de massas distintas. As constantes  $m_X$  e  $m_C$  são a massa do éxciton e fóton de cavidade, respectivamente.



Fonte: Elaborado pelo autor.

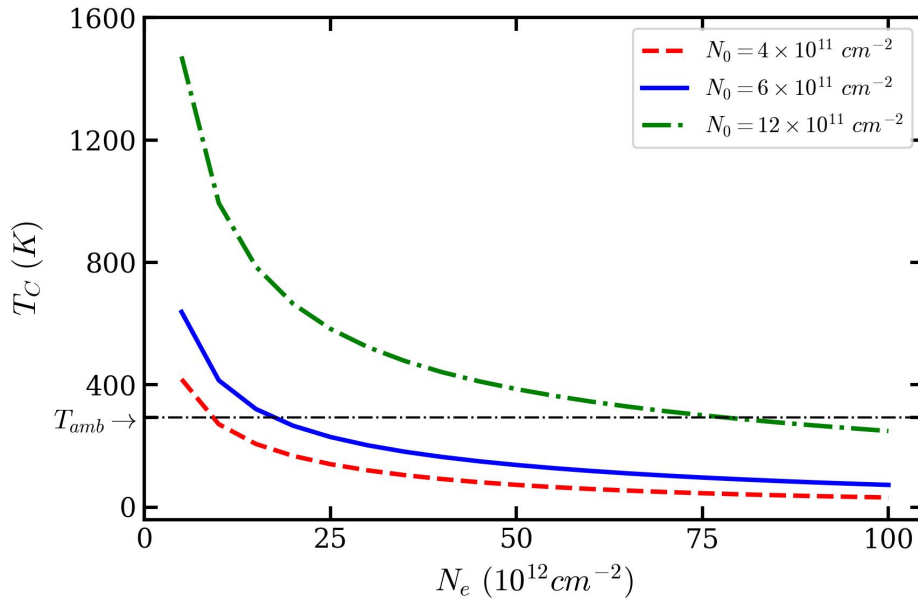
Uma explicação para isso é a natureza mais complexa de  $U_0(\omega)$ , que ao contrario

do potencial BCS (uma função degrau), é dependente de  $\hbar\omega$ . Ali, a temperatura crítica era proporcional à frequência de Debye  $\omega_D$ , que é tipicamente muito menor do que a energia de Fermi  $\varepsilon_F$ . No caso dos exciton-polaritons, como já foi mencionado anteriormente, o potencial  $U_0$  não está bem definido para valores muito grandes de  $\hbar\omega$ , ultrapassando o valor de  $\varepsilon_F$ , o que pode levar a resultados inesperados.

#### 4.1.2 $T_C$ em Função da Densidade Eletrônica $N_e$

Na tabela 1 escolhemos a densidade eletrônica  $N_e \approx 3.98 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , que corresponde a um vetor de onda de Fermi  $k_F = 0.05 \text{ \AA}^{-1}$ . Vejamos como a temperatura crítica se modifica em função de  $N_e$ .

Figura 24 – Gráficos de  $T_C$  em função de  $N_e$  para alguns valores de  $N_0$  no caso dos polaritons. A temperatura crítica decai à medida que  $N_e$  cresce. A linha horizontal demarca a temperatura ambiente  $T_{amb}$



Fonte: Elaborado pelo autor.

De forma surpreendente, a temperatura crítica reduz consideravelmente seu valor à medida que  $N_e$  aumenta. Uma explicação para esse comportamento no modelo é que com o aumento da densidade eletrônica, a energia de Fermi também aumenta, o que se reflete num crescimento na energia dos elétrons na curva de Fermi, logo, a mesma interação efetiva tem que lidar com partículas mais energéticas, o que prejudica a formação dos pares de Cooper. Isso mostra que o modelo se adequa melhor em descrever sistemas onde o material que hospeda os elétrons tem uma baixa densidade deles.



Além disso, espera-se que esse decréscimo em  $T_C$  seja ainda menor, já que o tamanho típico de um par de Cooper  $\xi_C$  ( $\sim 1/\varepsilon_F^2$ ) diminui. Isso torna os elétrons do par mais sensíveis às interações coulombianas de curto alcance. Esse efeito não é capturado diretamente pela teoria BCS.

## 4.2 Aplicação Para uma Estrutura com TMDs e Bicamada de Grafeno

### 4.2.1 Descrição do Sistema

Uma das maiores limitações para utilização de excitons na mediação da SC é a vida curta que essas quase-partículas possuem. Em heteroestruturas semicondutoras de poços quânticos de um mesmo material os elétrons em uma banda de condução rapidamente decaem aniquilando seu respectivo buraco na banda de valência. Uma forma de estender sua vida é fazer com que o elétron e seu buraco estejam em camadas separadas espacialmente por algum isolante, como nitreto de boro hexagonal (h-BN) por exemplo.

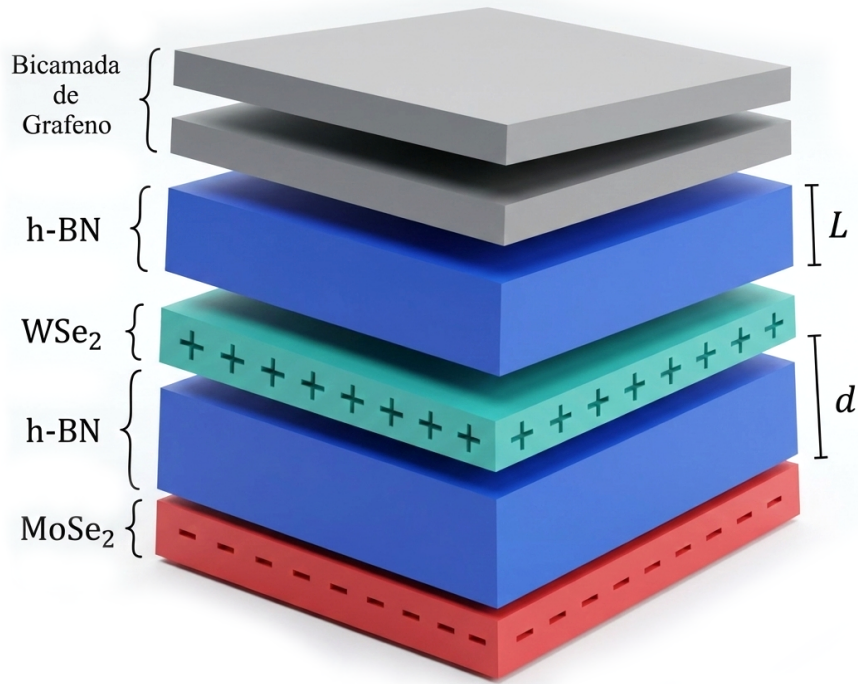
Recentemente os autores de (Wang *et al.*, 2019) mostraram experimentalmente que com esse *design* é possível obter condensação de excitons intercâmara a temperaturas da ordem de 100 K usando  $WSe_2$  e  $MoSe_2$ , materiais pertencentes à família dos dicalcogenetos de metais de transição (TMDs). Com base nessas descobertas, propomos um novo tipo de heteroestrutura que usa excitons desse tipo para mediar a SC como uma alternativa à mediação por excitons-polaritons.

Escolhemos uma bicamada de grafeno (BLG) para hospedar o gás de elétrons 2D. Essa escolha se justifica pela alta capacidade de ajuste da densidade e mobilidade eletrônicas do grafeno, já bem documentadas na literatura (Neto *et al.*, 2009). A escolha de uma bicamada é devido à forma parabólica da dispersão de seus elétrons, com massa efetiva  $m^* = \gamma_1/2v_F^2$ , onde  $v_F$  é a velocidade de Fermi e  $\gamma_1 \approx 0.4$  eV é uma constante de acoplamento entre camadas (Para mais detalhes, consulte o APÊNDICE A). Isso permite a aplicação direta de nosso modelo.

Seguindo o *design* de (Wang *et al.*, 2019), a parte que hospeda os excitons é composta por duas camadas de  $WSe_2$  e  $MoSe_2$  atômicas finas, com uma camada isolante de h-BN de comprimento  $d$  entre ambas, com suas propriedades ajustadas de forma que  $WSe_2$  tenha menos afinidade eletrônica que  $MoSe_2$ , o que faz os elétrons saltarem para a banda de condução deste último. Os excitons assim formados têm momentos de dipolo orientados de forma perpendicular ao plano, o que aumenta força de interação com os elétrons no grafeno. A bicamada é separada

desta ultima parte por uma outra camada isolante de h-BN com comprimento  $L$ . A Fig. 25 mostra um desenho completo deste sistema.

Figura 25 – Esquema da heteroestrutura. Os elétrons na BLG são separados por uma distancia  $L$  dos excitons. Os elétrons em  $WSe_2$  saltam para a camada de  $MoSe_2$  formando excitons intercamada com dipolo  $d$ .



Fonte: Elaborado pelo autor.

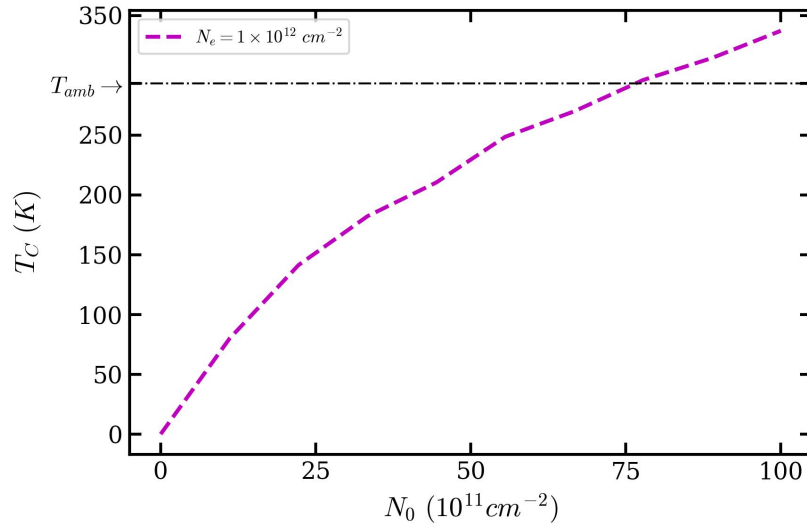
A característica que motiva o uso dos dois TMDs é a sua elevada energia de ligação do exciton quando está na forma de monocamada ( $\approx 0.5 \text{ eV}$ ), o que se traduz em uma energia da ordem de  $0.3 \text{ eV}$  quando são combinados (Wang *et al.*, 2019). A Tabela 2 tem as constantes que caracterizam completamente o sistema.

#### 4.2.2 Temperatura Crítica e Função do Gap

Nas condições de formação dos excitons intercamada a densidade eletrônica típica de uma BLG é da ordem de  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , onde adotamos o regime de baixas energias, onde a dispersão pode ser aproximada por uma forma parabólica (McCann *et al.*, 2007). Assim, na Fig. 26 vemos as temperaturas críticas em função da densidade de excitons. Comportamento da curva é o mesmo da Fig. 22 o que já era esperado.

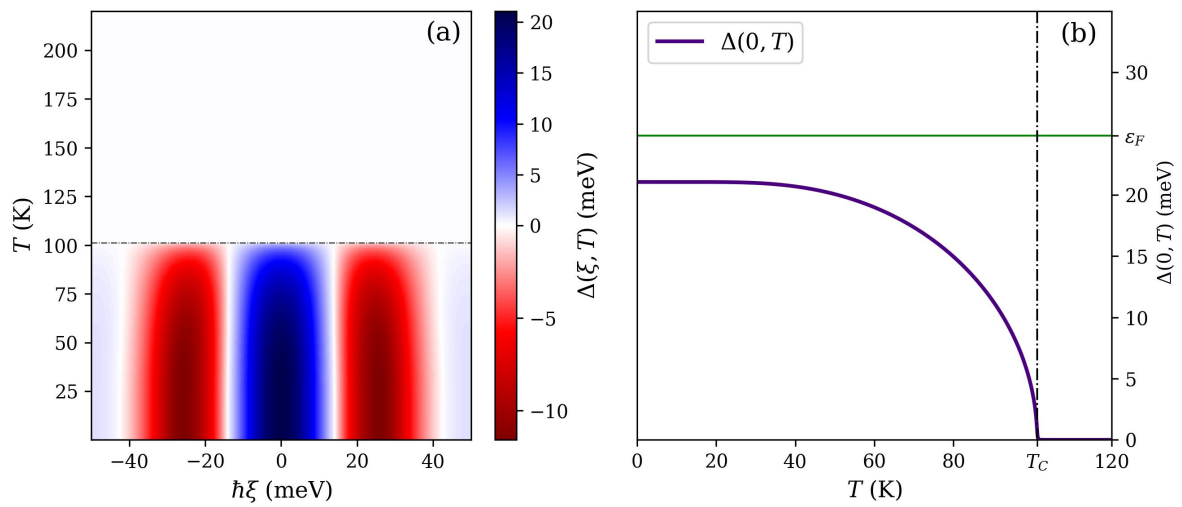
A condensação de excitons observada ocorre em temperaturas da ordem de  $100 \text{ K}$ . Tendo em vista as limitações do modelo e a aproximação de baixas energias feita sobre a

Figura 26 –  $T_C$  em função de  $N_0$ . Com a escolha para  $N_e$  a temperatura crítica ambiente ocorre para valores maiores de  $N_0$  do que os registrados nos gráficos da Fig. 21.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 27 – Solução da função do *gap* para o grafeno, com densidade de excitons  $N_0 = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  e energia de Fermi  $\varepsilon_F = 24.8 \text{ meV}$ .



Fonte: Elaborado pelo autor.

Parâmetro	Significado	Valor
$\epsilon_r$	Permissividade relativa	4.5
$m_e$	Massa do elétron	$\approx 0.49$
$m_h$	Massa do buraco	$\approx 0.40$
$L$	Distância entre elétrons e excitons	3 Å
$d$	Comprimento do momento de dipolo	10 Å
$a_X$	Raio de Bohr do exciton	5.3 Å
$N_e$	Densidade eletrônica	$1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$
$E_b$	Energia de ligação do éxiton	$\approx 0.3 \text{ eV}$
$\hbar\Omega_R$	Separação de Rabi	$\approx 46 \text{ meV}$
$m^*$	Massa efetiva do elétron	$\approx 0.096 m_e$

Tabela 2 – Parâmetros físicos para o cálculo envolvendo a heteroestrutura com grafeno mostrada na Fig. 25. A permissividade está em unidades de permissividade do vácuo (Haastrup *et al.*, 2018).

dispersão dos elétrons a temperatura crítica máxima que se pode prever com segurança razoável não deve exceder 100 K. Pelo gráfico da Fig. 26 o valor de  $N_0$  que fornece isso é um próximo de  $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

Com isso obtemos a solução do *gap* presente na Fig.27. A parte Fig.27 (b) mostra um gráfico de  $\Delta(0, T)$  com magnitude abaixo do valor da energia de Fermi  $\epsilon_F$ , algo que condiz com a hipótese do modelo BCS de que um *gap* se forma em uma vizinhança da superfície de Fermi. Finalmente, nosso modelo prevê uma temperatura crítica da ordem de 101.2 K para um sistema de excitons condensados nas condições da referencia (Wang *et al.*, 2019), um valor que caracteriza uma alta temperatura crítica em relação a  $T_C$  dos principais supercondutores. A utilização do grafeno e TMDs proporciona muitas possibilidades para modificar de forma controlada e reversível propriedades físicas do sistema.

Como já foi discutido anteriormente, embora o modelo não possa prever com segurança  $T_C$ s próximas à temperatura ambiente, ainda aponta para a possibilidade de se obtê-las com modelos mais sofisticados, o que deixa aberta uma ampla área de pesquisa.

## 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, nos dedicamos a investigar a supercondutividade mediada por BECs de excitons e exciton-polaritons em heteroestruturas bidimensionais. Iniciamos com uma breve exposição histórica da teoria da supercondutividade. Uma vez que nossa análise teórica segue a abordagem da teoria BCS, fazemos uma exposição breve desta teoria e obtemos a equação do *gap* considerando um potencial atrativo efetivo. O caso dos fônons é analisado brevemente. Mecanismos alternativos para supercondutividade são apresentados, com a substituição dos fônons por excitons ou excitons-polaritons como um possível caminho para a supercondutividade em altas temperaturas. As vantagens e desvantagens destes sistemas são discutidas.

Finalmente, descrevemos um sistema cujo mecanismo é dado por estas quase-partículas bosônicas: uma heteroestrutura que consiste numa camada semicondutora que abriga excitons indiretos que formam grandes momentos de dipolo, colocados a uma distância  $L$  de um material que abriga um 2DEG. A formação dos excitons se dá por campos elétricos ou por excitações de fótons. Neste caso, a heteroestrutura fica dentro de uma microcavidade com dois refletores de Bragg que criam fótons de cavidade que se acoplam fortemente com os excitons no semicondutor, assim formando exciton-polaritons. Estes mediam interações entre os elétrons e possivelmente levam a formação de pares de Cooper. Propomos um modelo teórico que desconsidera a dissipação dos refletores, e considerado apenas o ramo inferior da dispersão dos exciton-polaritons.

A partir de uma hamiltoniana efetiva para esse sistema, obtemos um potencial efetivo  $U_0(\omega)$  que depende da energia de troca  $\hbar\omega$  entre elétrons. Este possui propriedades distintas do potencial efetivo tradicional da teoria BCS, apresentando uma região atrativa em tempos longos sucedido por regiões de forte atração e repulsão. Também apresenta uma dependência linear direta com a densidade de excitons/excitons-polaritons  $N_0$ . Com o potencial efetivo, aplicamos a teoria BCS e obtemos a equação do *gap*. Esta é resolvida numericamente com a utilização de algoritmos iterativos, de forma que tanto a temperatura crítica como a solução completa da função do *gap* são obtidas. Obtemos  $T_C$  em função da densidade  $N_0$ , e vemos que rapidamente alcançamos uma temperatura crítica próxima à temperatura ambiente. A mediação por exciton-polaritons se mostra muito mais eficiente, algo que já se esperava em vista de sua maior capacidade de gerar interações efetivas fortes. Embora promissor, este resultado deve ser observado com cautela, uma vez que o aumento da força de interação pode gerar fases que competem com a SC. Observou-se também uma queda na temperatura crítica à medida que

se aumenta a densidade de elétrons no 2DEG, ao mesmo tempo que o modelo exige que a energia térmica destes esteja abaixo da energia de Fermi. Isso gera uma competição entre dois processos opostos, o que nos obriga a ajustar a densidade eletrônica com cuidado dentro de nossas limitações teóricas.

Finalmente, motivados por uma recente descoberta de excitons em um estado de BEC à temperaturas da ordem de 100 K, aplicamos nosso modelo a este sistema. A camada dos excitons é composta de uma heteroestrutura de  $WSe_2$  e  $MoSe_2$ , dois TMDs, separados por uma camada de h-BN. Para o 2DEG, escolhemos uma bicamada de grafeno, que possui a vantagem de ter sua densidade eletrônica facilmente ajustável. Com este modelo obtemos uma temperatura crítica igual a 101.2 K.

O sistema de exciton-polaritons tem se mostrado promissor para o objetivo de se alcançar altas temperaturas críticas. Este sistema é uma mistura de Bose-Fermi, e por isso, quando se varia a força de interação entre seus constituintes, transições de fase podem ocorrer. Em regimes de acoplamento forte a teoria BCS não é adequada, por isso se faz uso da teoria de Migdal-Eliashberg, uma versão aprimorada da teoria BCS, e técnicas de grupo de renormalização. De fato, é possível mostrar teoricamente a possibilidade de diferentes formações de fases e fenômenos coletivos em sistemas desse tipo (Cotleț *et al.*, 2016; Milczewski *et al.*, 2022; Julku *et al.*, 2022). Em particular, os autores referência (Cotleț *et al.*, 2016) mostram que surgem, além da supercondutividade, estados de onda de densidade de carga (CDW) e supersolidez, e que estas fases podem ser ajustadas e controladas por parâmetros ópticos e no *design* na microcavidade. Além disso, mostra-se que estas fases podem competir entre si, o que pode prejudicar a formação do estado supercondutor.

Uma proposta de pesquisa futura visa aprofundar os trabalhos citados anteriormente, propondo um novo modelo teórico que descreva o sistema em condições onde seus modelos antigos não são válidos. A possibilidade de alcançar supercondutividade em altas temperaturas em sistemas desse tipo ainda é um território teórico vasto e pouco explorado na literatura. Investigar se a troca de excitons-polaritons virtuais pode induzir um emparelhamento de Cooper robusto seria o foco desta pesquisa.

## REFERÊNCIAS

- ALLENDER, D.; BRAY, J.; BARDEEN, J. Model for an exciton mechanism of superconductivity. **Physical Review B**, APS, v. 7, n. 3, p. 1020, 1973.
- ALNATAH, H.; LIANG, S.; WAN, Q.; BEAUMARIAGE, J.; WEST, K.; BALDWIN, K.; PFEIFFER, L. N.; TAM, M. C. A.; WASILEWSKI, Z. R.; SNOKE, D. W. Strong coupling of polaritons at room temperature in a gaas/algaas structure. **Physical Review B**, APS, v. 112, n. 4, p. 045307, 2025.
- ALTLAND, A.; SIMONS, B. D. **Condensed matter field theory**. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.
- ANNETT., J. F. **Superconductivity, Superfluids and Condensates**. New York: Oxford University Press, 2004.
- BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Microscopic theory of superconductivity. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 106, p. 162–164, Apr 1957.
- BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible high  $T_c$  superconductivity in the  $La-Ba-Cu-O$  system. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, Springer, v. 64, n. 2, p. 189–193, 1986.
- CAO, J.; KAVOKIN, A. Exciton-enhanced superconductivity in monolayer films of aluminum. **Physical Review B**, APS, v. 112, n. 2, p. 024501, 2025.
- CHEROTCHENKO, E.; ESPINOSA-ORTEGA, T.; NALITOV, A.; SHELYKH, I.; KAVOKIN, A. Superconductivity in semiconductor structures: The excitonic mechanism. **Superlattices and Microstructures**, Elsevier, v. 90, p. 170–175, 2016.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics Volume III: Fermions, bosons, photons, correlations, and entanglement**. Weinheim, Germany: Wiley-VCH, 2020. v. 3.
- COMBESCOT, M.; SHIAU, S. Y. **Excitons and Cooper pairs: Two composite bosons in many-body physics**. [S.l.]: Oxford University Press, 2015.
- COTLET, O.; ZEYTINOĞLU, S.; SIGRIST, M.; DEMLER, E.; IMAMOĞLU, A. Superconductivity and other collective phenomena in a hybrid bose-fermi mixture formed by a polariton condensate and an electron system in two dimensions. **Physical Review B**, APS, v. 93, n. 5, p. 054510, 2016.
- DELFT, D. V.; KES, P. The discovery of superconductivity. **Physics today**, AIP Publishing, v. 63, n. 9, p. 38–43, 2010.
- DROZDOV, A.; EREMETS, M.; TROYAN, I.; KSENOFONTOV, V.; SHYLIN, S. I. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 525, n. 7567, p. 73–76, 2015.
- FUJITA, S.; GODOY, S. **Quantum Statistical Theory of Superconductivity**. New York: Kluwer Academic, 2002. v. 1.
- GHOSH, S. *et al.* Microcavity exciton polaritons at room temperature. **Photonics Insights**, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, v. 1, n. 1, p. R04–R04, 2022.

GINZBURG *et al.* High-temperature superconductivity (a review of theoretical ideas). **Soviet Physics Uspekhi**, IOP Publishing, v. 30, n. 8, p. 671, 1987.

GROSSO, G.; PARRAVICINI, G. P. **Solid state physics**. [S.l.]: Academic press, 2013.

HAASTRUP, S. *et al.* The computational 2d materials database: high-throughput modeling and discovery of atomically thin crystals. **2D Materials**, IOP Publishing, v. 5, n. 4, p. 042002, 2018.

HOUDRÉ, R.; STANLEY, R.; OESTERLE, U.; ILEGEMS, M.; WEISBUCH, C. Room-temperature cavity polaritons in a semiconductor microcavity. **Physical Review B**, APS, v. 49, n. 23, p. 16761, 1994.

JR, N. N. B. **Introduction to quantum statistical mechanics**. [S.l.]: World Scientific, 2010.

JULKU, A.; KINNUNEN, J. J.; CAMACHO-GUARDIAN, A.; BRUUN, G. M. Light-induced topological superconductivity in transition metal dichalcogenide monolayers. **Physical Review B**, APS, v. 106, n. 13, p. 134510, 2022.

KETTERSON, J. B.; SONG, S. N. **Superconductivity**. [S.l.]: Cambridge university press, 1999.

KIM, Y. B.; HEMPSTEAD, C. F.; STRNAD, A. R. Critical persistent currents in hard superconductors. **Phys. Rev. Letters**, Vol: 9, 1962.

KITAMURA, M. Non-linear integral equations of the hammerstein type. **Progress of Theoretical Physics**, Oxford University Press, v. 30, n. 4, p. 435–442, 1963.

KRESIN, V. Z.; WOLF, S. A. **Fundamentals of superconductivity**. New York: Springer Science, 1990.

LAUSSY, F. P.; KAVOKIN, A. V.; SHELYKH, I. A. Exciton-polariton mediated superconductivity. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 104, p. 106402, Mar 2010.

LAUSSY, F. P.; TAYLOR, T.; SHELYKH, I. A.; KAVOKIN, A. V. Superconductivity with excitons and polaritons: review and extension. **Journal of Nanophotonics**, SPIE, v. 6, n. 1, p. 064502, 2012.

LITTLE, W. Possibility of synthesizing an organic superconductor. **Physical review**, APS, v. 134, n. 6A, p. A1416, 1964.

MARTIN, R. M. **Electronic structure: basic theory and practical methods**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2020.

MCCANN, E.; ABERGEL, D. S.; FAL'KO, V. I. The low energy electronic band structure of bilayer graphene. **The European Physical Journal Special Topics**, Springer, v. 148, n. 1, p. 91–103, 2007.

MEISSNER, W.; OCHSENFELD, R. A new effect concerning the onset of superconductivity. **Die Naturwissenschaften**, v. 21, p. 787, 1933.

MERMIN, N. D.; ASHCROFT, N. **Solid State Physics**. United States: Saunders College Publishing, 1968.

MILCZEWSKI, J. von; CHEN, X.; IMAMOGLU, A.; SCHMIDT, R. Superconductivity induced by strong electron-exciton coupling in doped atomically thin semiconductor heterostructures. **Physical Review Letters**, APS, v. 133, n. 22, p. 226903, 2024.



MILCZEWSKI, J. von; ROSE, F.; SCHMIDT, R. Functional-renormalization-group approach to strongly coupled bose-fermi mixtures in two dimensions. **Physical Review A**, APS, v. 105, n. 1, p. 013317, 2022.

MOREL, P.; ANDERSON, P. W. Calculation of the superconducting state parameters with retarded electron-phonon interaction. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 125, p. 1263–1271, Feb 1962.

NETO, A. H. C.; GUINEA, F.; PERES, N. M.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The electronic properties of graphene. **Reviews of modern physics**, APS, v. 81, n. 1, p. 109–162, 2009.

NOLTING, W.; BREWER, W. D. **Fundamentals of many-body physics**. [S.l.]: Springer, 2009. v. 3.

NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.-e.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.

ONNES, H. K. The superconductivity of mercury. **Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden**, v. 122, p. 124, 1911.

ROZHKOV, A. V.; SBOYCHAKOV, A.; RAKHMANOV, A.; NORI, F. Electronic properties of graphene-based bilayer systems. **Physics Reports**, Elsevier, v. 648, p. 1–104, 2016.

SU, R.; GHOSH, S.; WANG, J.; LIU, S.; DIEDERICH, C.; LIEW, T. C.; XIONG, Q. Observation of exciton polariton condensation in a perovskite lattice at room temperature. **Nature Physics**, Nature Publishing Group UK London, v. 16, n. 3, p. 301–306, 2020.

SUN, M.; PARAFILO, A.; KOVALEV, V.; SAVENKO, I. Strong-coupling theory of condensate-mediated superconductivity in two-dimensional materials. **Physical Review Research**, APS, v. 3, n. 3, p. 033166, 2021.

TINKHAM, M. **Introduction to superconductivity**. [S.l.]: Courier Corporation, 2004.

VANSEVENANT, A. The gap equation in superconductivity theory. **Physica D**, Elsevier, v. 17, n. 3, p. 339–344, 1985.

WANG, Z.; RHODES, D. A.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; HONE, J. C.; SHAN, J.; MAK, K. F. Evidence of high-temperature exciton condensation in two-dimensional atomic double layers. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 574, n. 7776, p. 76–80, 2019.

## APÊNDICE A – VALORES MÉDIOS E PARÂMETROS VARIACIONAIS

Neste apêndice calculamos explicitamente valores médios especiais relacionados ao estado BCS. Com eles é possível mostrar a validade de nossa abordagem no limite termodinâmico e também calcular os valores dos parâmetros variacionais.

### Valores Médios Anômalos

Uma vez que o estado BCS esta devidamente normalizado, agora é possível calcular vários valores médios relevantes para a teoria BCS. O primeiro deles é o sobre o número total de partículas, como em cada par tem ou partículas no estado  $(\hbar\vec{k}, \uparrow)$  ou no estado  $(-\hbar\vec{k}, \downarrow)$ , definimos o operador  $\hat{n}_{(par \vec{k})}$  como:

$$\hat{n}_{(par \vec{k})} = \hat{n}_{\vec{k}, \uparrow} + \hat{n}_{-\vec{k}, \downarrow} = \sigma_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}, \uparrow} + \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}, \quad (A.1)$$

calculando o valor médio  $\langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle$ , temos:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle &= \langle 0 | (u_{\vec{k}}^* + v_{\vec{k}}^* \sigma_{-\vec{k}, \downarrow} \sigma_{\vec{k}, \uparrow}) \hat{n}_{(par \vec{k})} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}^{\dagger}) | 0 \rangle = \\ &= |u_{\vec{k}}|^2 \langle 0 | \hat{n}_{(par \vec{k})} | 0 \rangle + u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}} \langle 0 | \sigma_{-\vec{k}, \downarrow} \sigma_{\vec{k}, \uparrow} \hat{n}_{(par \vec{k})} | 0 \rangle + \\ &+ u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}} \langle 0 | \hat{n}_{(par \vec{k})} \sigma_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}^{\dagger} | 0 \rangle + |v_{\vec{k}}|^2 \langle 0 | \sigma_{-\vec{k}, \downarrow} \sigma_{\vec{k}, \uparrow} \hat{n}_{(par \vec{k})} \sigma_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}^{\dagger} | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (A.2)$$

os termos envolvendo  $|u_{\vec{k}}|^2$ ,  $u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}$  e  $u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}}$  são nulos. Usando as relações de comutação entre operadores de criação e aniquilação, o termo de  $|v_{\vec{k}}|^2$  se reduz a 2:

$$\langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle = |v_{\vec{k}}|^2 \langle 0 | \sigma_{-\vec{k}, \downarrow} \sigma_{\vec{k}, \uparrow} (\sigma_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} \sigma_{\vec{k}, \uparrow} + \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}) \sigma_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} \sigma_{-\vec{k}, \downarrow}^{\dagger} | 0 \rangle = 2|v_{\vec{k}}|^2 = 2sen^2 \theta_{\vec{k}}. \quad (A.3)$$

Para calcular  $\langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | [\hat{n}_{(par \vec{k})}]^2 | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle$  seguimos os mesmos passos, e encontramos:

$$\langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | [\hat{n}_{(par \vec{k})}]^2 | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle = 4|v_{\vec{k}}|^2 = 4sen^2 \theta_{\vec{k}}, \quad (A.4)$$

de posse desses valores médios, iremos calcular o valor médio de  $\hat{N}$  e  $\hat{N}^2$ . Sendo:

$$\hat{N} = \sum_{\vec{k}, v} \hat{n}_{\vec{k}, v} = \sum_{\vec{k}} (\hat{n}_{\vec{k}, \uparrow} + \hat{n}_{-\vec{k}, \downarrow}) = \sum_{\vec{k}} \hat{n}_{(par \vec{k})}, \quad (A.5)$$

temos, portanto:

$$\begin{aligned}\langle \hat{N} \rangle &= \langle \Psi_{BCS} | \hat{N} | \Psi_{BCS} \rangle = \sum_{\vec{k}} \langle \Psi_{BCS} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \Psi_{BCS} \rangle, \\ \text{com } \langle \Psi_{BCS} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \Psi_{BCS} \rangle &= \left[ \bigotimes_{\vec{l}} \langle \bar{\varphi}_{\vec{l}} | \right] \hat{n}_{(par \vec{k})} \left[ \bigotimes_{\vec{l}} | \bar{\varphi}_{\vec{l}} \rangle \right] = \\ &= \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle \prod_{\vec{l} \neq \vec{k}} \langle \bar{\varphi}_{\vec{l}} | \bar{\varphi}_{\vec{l}} \rangle = \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle,\end{aligned}\tag{A.6}$$

substituindo a equação (A.3) em (A.6) :

$$\implies \langle \hat{N} \rangle = \sum_{\vec{k}} \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \hat{n}_{(par \vec{k})} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 = 2 \sum_{\vec{k}} \text{sen}^2 \theta_{\vec{k}}.\tag{A.7}$$

Para  $\langle \hat{N}^2 \rangle$ , começamos notando que:

$$\hat{N}^2 = \left[ \sum_{\vec{k}} \hat{n}_{(par \vec{k})} \right] \left[ \sum_{\vec{k}'} \hat{n}_{(par \vec{k}')} \right] = \sum_{\vec{k}} (\hat{n}_{(par \vec{k})})^2 + \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} (\hat{n}_{(par \vec{k})}) (\hat{n}_{(par \vec{k}')}),\tag{A.8}$$

logo:

$$\begin{aligned}\langle \hat{N}^2 \rangle &= \langle \Psi_{BCS} | \hat{N}^2 | \Psi_{BCS} \rangle = \\ &= \sum_{\vec{k}} \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | (\hat{n}_{(par \vec{k})})^2 | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle + \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | (\hat{n}_{(par \vec{k})}) | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}'} | (\hat{n}_{(par \vec{k}')} ) | \bar{\varphi}_{\vec{k}'} \rangle,\end{aligned}\tag{A.9}$$

substituindo da equações (A.3) e (A.4), ficamos com:

$$\langle \hat{N}^2 \rangle = 4 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 + 4 \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} |v_{\vec{k}}|^2 |v_{\vec{k}'}|^2.\tag{A.10}$$

Com essas formulas podemos calcular o desvio quadrático médio para  $\hat{N}$ .

$$\begin{aligned}\Delta N^2 &= \langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 = 4 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 + 4 \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} |v_{\vec{k}}|^2 |v_{\vec{k}'}|^2 - \left( 2 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 \right)^2 = \\ &= 4 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 + 4 \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} |v_{\vec{k}}|^2 |v_{\vec{k}'}|^2 - \left( 4 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^4 + 4 \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} |v_{\vec{k}}|^2 |v_{\vec{k}'}|^2 \right) = \\ &= 4 \sum_{\vec{k}} (|v_{\vec{k}}|^2 - |v_{\vec{k}}|^4) = 4 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 (1 - |v_{\vec{k}}|^2),\end{aligned}\tag{A.11}$$

o desvio quadrático médio é:

$$\Delta N^2 = 4 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 (1 - |v_{\vec{k}}|^2), \quad (\text{A.12})$$

como  $1 - |v_{\vec{k}}|^2 \leq 1$

$$\Delta N^2 \leq 4 \sum_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 = 2 \langle \hat{N} \rangle, \quad (\text{A.13})$$

o que é equivalente à seguinte desigualdade:

$$\frac{\Delta N}{\langle \hat{N} \rangle} \leq \sqrt{\frac{2}{\langle \hat{N} \rangle}}. \quad (\text{A.14})$$

A desigualdade (A.14) mostra que a flutuação relativa do número de partículas tende a zero se  $\langle \hat{N} \rangle \rightarrow \infty$ , assim desde que estejamos próximos do limite termodinâmico, a utilização do estado BCS é válida.

Por fim, vamos calcular valores médios de operadores da forma  $\sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow}$ . Estes operadores são responsáveis pelas correlações dinâmicas entre duas partículas em um par. O fato destes serem não nulos se deve a escolha de se usar os estados de duas partículas na construção do vetor variacional. Assim, seja:

$$\sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} |\bar{\varphi}_{\vec{k}}\rangle = \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger) |0\rangle = v_{\vec{k}} |0\rangle, \quad (\text{A.15})$$

logo:

$$\langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle = \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | v_{\vec{k}} | 0 \rangle = v_{\vec{k}} \langle 0 | (u_{\vec{k}}^* + v_{\vec{k}}^* \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle = v_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^*. \quad (\text{A.16})$$

Tirando o conjugado hermitiano de (A.16) e usando as relações de anti-comutação, obtemos os quatro tipo de valores médios, conhecidos valores médios anômalos:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle &= v_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^* & \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \sigma_{\vec{k},\uparrow} \sigma_{-\vec{k},\downarrow} | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle &= -v_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^*, \\ \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle &= v_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}} & \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}} | \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger | \bar{\varphi}_{\vec{k}} \rangle &= -v_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

## Otimização dos Parâmetros Variacionais

Ao calcular o valor médio de  $\hat{H}_{BCS}$ , vemos que o termo de energia cinética é simplesmente o valor médio de  $\hat{n}_{(par \vec{k})}$  que é dado por (A.3), o que dá:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_{BCS} \rangle &= 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 - \sum_{\vec{k}} \left\{ \Delta_{\vec{k}}^* \langle \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \sigma_{\vec{k},\uparrow} \rangle + \Delta_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \rangle - \Delta_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \rangle \right\} = \\ &= 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^* \langle \sigma_{\vec{k},\uparrow} \sigma_{-\vec{k},\downarrow} \rangle. \end{aligned} \quad (A.18)$$

Usando os valores médios de (A.17), chegamos na equação:

$$\langle \hat{H}_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} |v_{\vec{k}}|^2 + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} v_{\vec{k}'}^* u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^*. \quad (A.19)$$

Lembrando que  $u_{\vec{k}} = \cos \theta_{\vec{k}} e^{-i\zeta_{\vec{k}}}$  e  $v_{\vec{k}} = \sin \theta_{\vec{k}} e^{i\zeta_{\vec{k}}}$ , o termo de interação fica:

$$\sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \cos \theta_{\vec{k}'} \sin \theta_{\vec{k}'} \cos \theta_{\vec{k}} \sin \theta_{\vec{k}} e^{2i(\zeta_{\vec{k}} - \zeta_{\vec{k}'})}. \quad (A.20)$$

Analizando os termos da soma, os  $V_{\vec{k}, \vec{k}'}$  são negativos devido à natureza atrativa do potencial efetivo. Os ângulos  $\theta_{\vec{k}}$  variam no intervalo de 0 a  $\pi/2$ , logo os termos de senos e cossenos são positivos. Para que este termo seja mínimo, a diferença de fase  $\zeta_{\vec{k}'} - \zeta_{\vec{k}}$  deve ser nula. A forma mais simples disso ocorrer é ambas as fases sejam nulas, logo  $\zeta_{\vec{k}} = 0$  cumpre a condição de otimização. Como consequência disso os parâmetros  $u_{\vec{k}}$  e  $v_{\vec{k}}$  são reais.

Calculando a diferencial da equação (A.19),

$$d\langle \hat{H}_{BCS} \rangle = 4 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}} dv_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \left\{ d(u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} d(u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}) \right\}. \quad (A.21)$$

Trocando os índices mudos  $\vec{k}$  e  $\vec{k}'$  no segundo termo, e substituindo a equação do gap:

$$d\langle \hat{H}_{BCS} \rangle = 4 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}} dv_{\vec{k}} - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \left\{ v_{\vec{k}} du_{\vec{k}} + u_{\vec{k}} dv_{\vec{k}} \right\}. \quad (A.22)$$

Pela condição de normalização  $u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1$  temos  $2u_{\vec{k}} du_{\vec{k}} + 2v_{\vec{k}} dv_{\vec{k}} = 0$ , logo:

$$\begin{aligned} d\langle \hat{H}_{BCS} \rangle &= 4 \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}} dv_{\vec{k}} - \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \left\{ u_{\vec{k}} - \frac{v_{\vec{k}}^2}{u_{\vec{k}}} \right\} dv_{\vec{k}} = \\ &= \sum_{\vec{k}} \left[ 4\xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}} - 2\Delta_{\vec{k}} \left\{ u_{\vec{k}} - \frac{v_{\vec{k}}^2}{u_{\vec{k}}} \right\} \right] dv_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (A.23)$$

A condição de otimização requer que  $d\langle\hat{H}_{BCS}\rangle = 0$  logo:

$$4\xi_{\vec{k}}v_{\vec{k}} - 2\Delta_{\vec{k}}\left\{u_{\vec{k}} - \frac{v_{\vec{k}}^2}{u_{\vec{k}}}\right\} = 0 \implies 2\xi_{\vec{k}}u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} = \Delta_{\vec{k}}\{u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2\}. \quad (\text{A.24})$$

Usando identidades trigonométricas,  $2u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} = \text{sen}2\theta_{\vec{k}}$  e  $u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = \text{cos}2\theta_{\vec{k}}$ , o que implica:

$$\xi_{\vec{k}}\text{sen}2\theta_{\vec{k}} = \Delta_{\vec{k}}\text{cos}2\theta_{\vec{k}}, \quad (\text{A.25})$$

obtemos:

$$(\text{cos}2\theta_{\vec{k}})^2 = \frac{\xi_{\vec{k}}^2}{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \quad \text{e} \quad (\text{sen}2\theta_{\vec{k}})^2 = \frac{\Delta_{\vec{k}}^2}{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}. \quad (\text{A.26})$$

Definindo  $E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}$ , as equações (A.26) são reescritas:

$$\text{cos}2\theta_{\vec{k}} = \pm \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \quad \text{e} \quad \text{sen}2\theta_{\vec{k}} = \pm \frac{\Delta_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}. \quad (\text{A.27})$$

Usando  $v_{\vec{k}}^2 = (\text{sen}\theta_{\vec{k}})^2 = 1/2(1 - \text{cos}2\theta_{\vec{k}})$  e  $u_{\vec{k}}^2 = (\text{cos}\theta_{\vec{k}})^2 = 1/2(1 + \text{cos}2\theta_{\vec{k}})$ , logo:

$$v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)} \quad \text{e} \quad u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)}. \quad (\text{A.28})$$

As equações (A.28) determinam várias possibilidades de extremos, no entanto, estamos interessados nos parâmetros que fornecem o estado fundamental, ou seja, os que tornam  $\langle\hat{H}_{BCS}\rangle$  o menor possível. Observando o comportamento do termo  $\xi_{\vec{k}} = (\varepsilon(\vec{k}) - \mu)$  em  $\langle\hat{H}_{BCS}\rangle$ , se  $\varepsilon(\vec{k}) < \mu$ , o termo  $|v_{\vec{k}}|^2$  multiplica um fator negativo. Portanto, é racional escolher  $V_n$  para ser o maior possível. Assim, escolhemos o sinal negativo na equação, pois  $\xi_{\vec{k}}$  se torna negativo nesse caso. Caso  $\varepsilon(\vec{k}) \gg \mu$ , o termo que  $v_{\vec{k}}$  multiplica se torna positivo, com  $\xi_{\vec{k}}$  se tornando positivo. Assim, mais uma vez, a escolha do sinal negativo é adequada. Escolher o sinal negativo em  $v_{\vec{k}}$  implica em escolher o sinal positivo em  $u_{\vec{k}}$ , e assim temos finalmente:

$$u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)} \quad \text{e} \quad v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}\right)}. \quad (\text{A.29})$$

Os parâmetros (2.42) minimizam o vetor de estado  $|\Psi_{BCS}\rangle$ , assim fornecendo uma aproximação do estado fundamental do sistema.

## APÊNDICE B – ESTRUTURA DE BANDAS DE UMA BICAMADA DE GRAFENO

O grafeno é uma forma alotrópica bidimensional do carbono onde os átomos se organizam em padrões hexagonais fortemente compactados. Se tornou grande foco de pesquisa nas ultimas décadas, embora já tendo suas propriedades eletrônicas conhecidas, isso só ocorreu após sua descoberta experimental em 2004 (Novoselov *et al.*, 2004). Nesta seção deduziremos sua estrutura da bandas e dispersão dos elétrons.

### Monocamada de Grafeno

#### Estrutura Cristalina

Embora se organizem em uma estrutura hexagonal os átomos individuais de carbono no grafeno não formam uma rede de Bravais. Para descrevê-lo em termos de um padrão periódico dividimos a rede em duas redes de Bravais triangulares bidimensionais **A** e **B** como mostra a Fig. 28. Cada ponto de ambas as redes tem uma base de dois átomos de carbono. Os vetores primitivos são dados por:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}) \quad (\text{B.1})$$

onde a constante  $a \approx 1.42 \text{ \AA}$  é a distancia entre carbonos em um hexágono na rede. (Neto *et al.*, 2009).

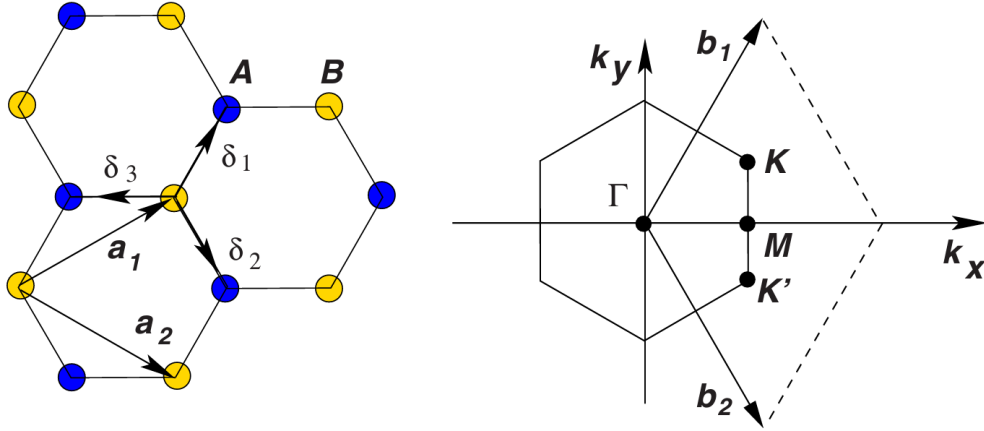
Os vetores que localizam os três primeiros vizinhos na rede **A** de cada carbono na rede **B** são:

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = a(-1, 0). \quad (\text{B.2})$$

No espaço recíproco mostrado na Fig. 28 temos também uma rede hexagonal, onde:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (\text{B.3})$$

Figura 28 – Na esquerda vemos as redes **A** e **B** no espaço de posições. Na direita a primeira zona de Brillouin no espaço recíproco, onde  $\Gamma$ ,  $M$ ,  $\vec{K}$  e  $\vec{K}'$  são os pontos de alta simetria.



Fonte: Adaptado de (Neto *et al.*, 2009).

### Hamiltoniano Tight-Binding

A estrutura nos níveis eletrônicos do átomo de carbono é  $1s^2 2s^2 2p^2$ . O orbital  $1s$  está fortemente localizado no núcleo, enquanto os demais orbitais  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  e  $2p_z$  formam as ligações covalentes e bandas de condução do Grafeno. Os níveis  $2s$ ,  $2p_x$  e  $2p_y$  no plano  $xy$  hibridizam-se em um orbital  $sp^2$ , que dá ao grafeno alta resistência estrutural mas forma níveis inertes do ponto de vista do transporte eletrônico. Esta é a chamada banda- $\sigma$  (Grosso; Parravicini, 2013). O orbital restante,  $p_z$ , forma a banda- $\pi$ , que é responsável por formar a banda de valência e condução, por isso será nosso foco nesta seção.

Para modelar o sistema lançamos mão da aproximação tight-binding, visto que os elétrons estão fortemente ligados. Consideramos que um elétron nesse orbital só pode saltar para o primeiro vizinho, assim, definimos a constante de hopping  $t \approx 2.8 \text{ eV}$  para ser da ordem de energia da banda- $\pi$ . Definimos o operador de criação  $a_{i,\sigma}^\dagger$  ( $b_{j,\sigma}^\dagger$ ) para um elétron com spin  $\sigma$  no  $i$ -ésimo( $j$ -ésimo) sítio da rede **A** (**B**). Assim, o hamiltoniano é escrito como:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( a_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + b_{j,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} \right), \quad (\text{B.4})$$

onde  $\langle i, j \rangle$  significa que para cada sítio  $i$  da rede **A** o índice  $j$  varia apenas nos sítios da rede **B** que são primeiro vizinhos do sítio em  $i$ .

Passamos para representação no espaço recíproco desses operadores. Definimos a partir da transformada Fourier sobre as ondas planas da rede:



$$a_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} a_{\vec{k},\sigma}, \quad b_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} b_{\vec{k},\sigma}, \quad (\text{B.5})$$

com  $N$  sendo o numero de sítios na rede total e  $R_i$  ( $R_j$ ) sendo o vetor na rede de Bravais da rede **A** (**B**). Com a restrição dos índices  $j$  em B.4, para cada vetor  $R_i$  só a três vetores primeiros vizinhos de **B** na forma  $R_i + \delta_j$ , com  $j = \{1, 2, 3\}$ . Assim, substituindo B.5 em B.4, ficamos com:

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \left( \phi(\vec{k}) a_{\vec{k},\sigma}^\dagger b_{\vec{k},\sigma} + \phi^*(\vec{k}) b_{\vec{k},\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma} \right) \quad (\text{B.6})$$

onde definimos a função  $\phi(\vec{k}) = -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_j}$ .

Usando a notação matricial para operadores usado na seção 2.2.5 podemos escrever o Hamiltoniano em uma forma compacta definindo  $\psi_{\vec{k},\sigma}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{\vec{k},\sigma}^\dagger & b_{\vec{k},\sigma}^\dagger \end{pmatrix}$ :

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \begin{pmatrix} a_{\vec{k},\sigma}^\dagger & b_{\vec{k},\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \phi(\vec{k}) \\ \phi^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\vec{k},\sigma} \\ b_{\vec{k},\sigma} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Para encontrar as energias, diagonalizamos a matriz  $2 \times 2$  usando as transformações de Bogoliubov em termos das excitações. Os dois autovalores que correspondem as energias são:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm |\phi(\vec{k})|, \quad (\text{B.8})$$

que, substituindo B.2 nesta equação chegamos na relação de dispersão:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)}. \quad (\text{B.9})$$

Naturalmente, surgem duas bandas, sinal (+) caracteriza a banda- $\pi^*$  e o sinal (-) a banda- $\pi$  (Neto *et al.*, 2009). Os pontos em que ambas se anulam correspondem precisamente aos chamados pontos Dirac. Dois destes são posições de alta simetria na primeira zona de Brillouin, que podem ser vistos na Fig. 28, e são:

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right). \quad (\text{B.10})$$

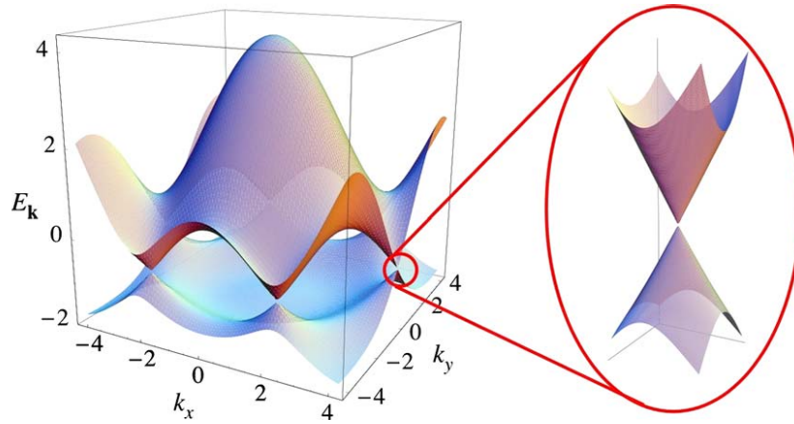
### Aproximação de Baixas Energias

Desejamos expandir a função  $\phi(\vec{k})$  em torno do ponto  $\vec{K}$ . Definindo  $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$ , encontramos imediatamente:

$$\phi(\vec{q}) \approx \frac{2at}{2}(q_x + iq_y)(1 + \mathcal{O}(q/K)^2), \quad (\text{B.11})$$

onde definimos a velocidade de fermi  $v_F = \frac{2at}{2\hbar}$ , o que leva imediatamente a relações de dispersão  $E_{\pm}(q) = \pm\hbar v_F |\vec{q}| + \mathcal{O}(q/K)^2$  que define a equação de um cone. Isso pode ser visualizado claramente nos pontos de Dirac na Fig. 29. Para baixas energias, isso nos permite calcular a energia de fermi de forma direta.

Figura 29 – Gráfico da banda- $\pi^*$  e banda- $\pi$ . Em cada ponto de Dirac a dispersão assume uma forma aproximadamente cônica, característica de partículas com massa zero.



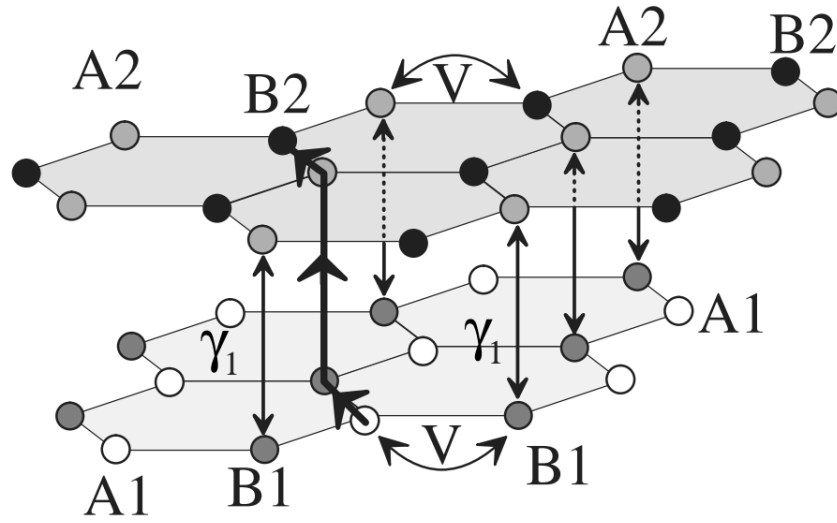
Fonte: Adaptado de (Neto *et al.*, 2009).

### Bicamada de Grafeno

A estrutura eletrônica da monocamada de grafeno se comporta como um gás de partículas com massa zero semelhantes as soluções da equação de Dirac, onde a dispersão característica é cônica. Quando adicionamos uma segunda camada, veremos que a dispersão volta a ser parabólica como a de um gás 2D tradicional. Enumeramos as sub-redes em 1 para a de baixo e 2 para a de cima. Os átomos de rede da sub-rede 1 são  $A_1$  e  $B_1$ , e dos da sub-rede 2 são  $A_2$  e  $B_2$ .

O empilhamento é escolhido para ser o de Bernal (ou AB), em que os átomos da sub-rede  $A_2$  estão localizados diretamente acima dos átomos da sub-rede  $B_1$ . Os átomos  $A_1$  ( $B_2$ ) estão localizados acima (abaixo) dos centros dos hexágonos da outra camada. Esta configuração também favorece a formação de um gap na estrutura de bandas do grafeno, algo que não ocorria na monocamada (McCann *et al.*, 2007). Na Fig. 30 vemos o desenho da estrutura.

Figura 30 – Bicamada de Grafeno com empilhamento Bernal (AB). Os átomos  $A_2$  (cinza claro) estão ligados fortemente aos átomos  $B_1$ .



Fonte: Adaptado de (McCann *et al.*, 2007).

### Hamiltoniano Tight-Binding Duplo

Adotamos novamente o modelo Tight-Binding para as duas sub-redes, onde assumimos que ambas interagem fortemente entre si através dos pontos em  $A_2$  e  $B_1$ . Assim, os hamiltonianos das duas sub-redes são:

$$H_1 = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( a_{1,i,\sigma}^\dagger b_{1,j,\sigma} + a_{1,i,\sigma} b_{1,j,\sigma}^\dagger \right) \quad (\text{B.12})$$

$$H_2 = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( a_{2,i,\sigma}^\dagger b_{2,j,\sigma} + a_{2,i,\sigma} b_{2,j,\sigma}^\dagger \right), \quad (\text{B.13})$$

que segue as mesmas definições adotadas na seção anterior. Para o termo de interação entre sub-redes, consideramos que seja localizada e forte, assim definimos:

$$H_{\perp} = \gamma_1 \sum_{i,\sigma} \left( a_{2,i,\sigma}^{\dagger} b_{1,i,\sigma} + a_{2,i,\sigma} b_{1,i,\sigma}^{\dagger} \right), \quad (\text{B.14})$$

onde definimos uma outra constante hopping  $\gamma_1$  ( $\approx 0.4 \text{ eV}$ ) entre camadas. O subscrito  $\perp$  no hamiltoniano se dá pelo fato da interação ocorrer perpendicularmente entre planos.

Assim o hamiltoniano total é  $H = H_1 + H_2 + H_{\perp}$ , onde mais uma vez fazemos a transformada de Fourier como no caso da monocamada. Definimos um vetor dos operadores de criação dos estados de momento  $\Psi_{\vec{k},\sigma} = (a_{1,\vec{k},\sigma}, b_{1,\vec{k},\sigma}, a_{2,\vec{k},\sigma}, b_{2,\vec{k},\sigma})$ , e a matriz:

$$H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \phi(\vec{k}) & 0 & 0 \\ \phi^*(\vec{k}) & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & \phi(\vec{k}) \\ 0 & 0 & \phi^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.15})$$

com  $\phi(\vec{k}) = -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_j}$ , assim reescrevemos  $H$  como:

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \Psi_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} H(\vec{k}) \Psi_{\vec{k},\sigma}. \quad (\text{B.16})$$

Diagonalizamos  $H(\vec{k})$  para encontrar a relação de dispersão  $E(\mathbf{k})$ , resolvemos a equação secular  $\det(H(\vec{k}) - E\mathbb{I}) = 0$ :

$$\det \begin{pmatrix} -E & \phi & 0 & 0 \\ \phi^* & -E & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & -E & \phi \\ 0 & 0 & \phi^* & -E \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{B.17})$$

o que leva a dispersão:

$$E_{\alpha,\beta}(\vec{k}) = \beta \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} + \alpha \frac{\gamma_1}{2} \sqrt{\gamma_1^2 + 4|\phi(\vec{k})|^2}}, \quad (\text{B.18})$$

onde  $\beta = \pm$  indica a banda de condução ou valência, e  $\alpha = \pm$  as bandas internas de alta ou baixa energia (Rozhkov *et al.*, 2016).

### Aproximação de Baixas Energias para Bicamada

No caso da monocamada, quando  $|\phi(\vec{k})| \ll \gamma_1$  perto do ponto  $\vec{K}$ , sendo  $\gamma_1 \approx t$ , temos  $|\phi(\vec{k})| = \hbar v_F k$ . Escolhemos  $\beta = +$  e  $\alpha = -$  nas dispersão, definindo  $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$ , e expandindo em série de Taylor para  $\vec{q}$  pequeno:

$$E(\vec{k}) \approx \pm \frac{|\phi(\vec{q})|^2}{\gamma_1}, \quad (\text{B.19})$$

e substituindo  $|\phi(\vec{q})| \approx \hbar v_F q$ :

$$E(\vec{k}) \approx \frac{\hbar^2 v_F^2 k^2}{\gamma_1}. \quad (\text{B.20})$$

Assim, a dispersão nesta aproximação volta a ter um formato parabólico do gás de elétrons 2D tradicional. Isso nos motiva a reescrever essa expressão na forma da de uma partícula massiva convencional  $E = \hbar^2 q^2 / 2m^*$ , onde definimos a massa efetiva como:

$$m^* = \frac{\gamma_1}{2v_F^2}. \quad (\text{B.21})$$