

Supercondutividade e magnetismo no sistema $Y(Ni,T=Mn,Co,Fe)_2B_2C$

Cláudia Lange dos Santos¹, Celso A. M. da Silva¹,
Affonso A. Gomes²

¹*Departamento de Física/Laboratório de Estrutura Eletrônica dos Materiais
UFSM/Santa Maria, RS
e-mail: lange@mail.ufsm.br*

²*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/MCT*

1. Introdução

A observação experimental de que impurezas de Mn formam momento magnético quando substituem o Ni no borocarbeto pseudoquaternário $Y(Ni_{(1-x)}M_x)_2B_2C$, enquanto que as impurezas de Fe e Co não exibem tal comportamento, levantou algumas questões interessantes. Uma delas está relacionada com o fato do Mn possuir um momento magnético diferente de zero enquanto que o Co e o Fe , que são impurezas magnéticas, não formam momento neste composto. Além disso, o ferro e o cobalto produzem um efeito muito maior no decréscimo da temperatura crítica supercondutora desse sistema do que o Mn . Isto parece ser contraditório uma vez que o magnetismo tenderia a quebrar os pares de Cooper e se esperaria justamente que o efeito fosse maior para o caso do manganês.

Baseados nestes trabalhos, um estudo teórico acerca do sistema $Y(Ni_{(1-x)}M_x)_2B_2C$ com $M=Mn, Fe$ e Co foi realizado com duas finalidades: estudar a variação do parâmetro de ordem supercondutor desse sistema e a possível formação de momento magnético no sítio dessas impurezas para concentrações finitas.

2. Borocarbeto

Os borocarbeto quaternários, descobertos na primeira metade da década de 90 [1,2], têm sido extensivamente estudados devido à grande variedade de fenômenos físicos exibidos por esta classe de material. Dependendo dos elementos que são combinados com boro e carbono, os sis-

temas podem ser supercondutores, podem apresentar ordem antiferromagnética, coexistência entre supercondutividade e magnetismo, entre outras características. Esta descoberta abriu novos horizontes na área da supercondutividade, a qual estava quase que totalmente voltada para os cupratos, devido às suas temperaturas críticas relativamente altas ($8K$ a $23K$). Além disso, a existência simultânea de dois fenômenos que em princípio não poderiam coexistir, tem atraído o interesse de alguns pesquisadores.

A descoberta destes compostos foi na verdade, resultado dos estudos feitos em amostras de YNi_4C as quais revelavam indícios de ser um material supercondutor ao apresentar uma queda nas curvas de resistividade e susceptibilidade magnética na região de $12K$ [3]. Entretanto, o volume da amostra que apresentava supercondutividade era muito pequeno, em torno de 2% apenas, indicando que algo estava faltando para que o composto fosse um “supercondutor verdadeiro”. A resposta para este problema veio pouco tempo depois quando Nagarajan e colaboradores [1], depois de várias tentativas a fim de se melhorar as propriedades supercondutoras desse material, observaram o fenômeno em amostras de $YNi_4BC_{0.2}$ com $T_c \sim 12.5K$ e $YNi_2B_3C_{0.2}$ com $T_c \sim 13.5 K$. Poucos depois, Cava e colaboradores relataram seus resultados acerca da supercondutividade com temperatura crítica de $23K$ no composto $YPd_5B_3C_{0.3}$ [2] e em materiais com fórmula estequiométrica RNi_2B_2C , onde $R=Lu, Y, Tm, Er$ e Ho com $T_c \sim 16.6 K$, $15.6K$, $11K$, $10.5 K$ e $8 K$, respectivamente [4].

2.1 O sistema YNi_2B_2C

O borocarbeto YNi_2B_2C ($Y1221$) é um supercondutor não magnético ($T_c \sim 15.6 K$) sendo classificado como supercondutor convencional, ou seja, seu comportamento pode ser explicado pela teoria BCS, sendo que o acoplamento elétron-fônon é apontado como o responsável pela formação dos pares de Cooper [5]. Cálculos de estrutura eletrônica mostram que este composto possui um caráter metálico apresentando um pico na densidade de estados no nível de Fermi. O alto valor de $N(E_f)$ é apontado como sendo o responsável pela alta temperatura crítica exibida por este material, o que vem a fortalecer a sua classificação como supercondutor convencional, onde T_c aumenta com $N(E_f)$.

A estrutura cristalina desse material (Fig 2.1) é uma tetragonal de corpo centrado (BCT), pertencente ao grupo espacial $I4/mmm$, com planos de YC alternados por camadas de Ni_2B_2 .

Esta estrutura é caracterizada por três parâmetros, os parâmetros a e c , e o parâmetro $z=0.353$ que determina as posições dos átomos de boro em relação aos átomos de ítrio e de níquel.

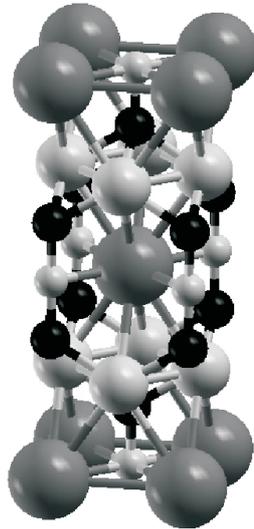


Figura 2.1. Estrutura cristalina do YNi_2B_2C . As esferas maiores representam os átomos de Y , as esferas médias os de Ni , as pretas os de B e as menores os átomos de C

Apesar da estrutura de camadas deste composto remeter a supercondução em planos, assim como ocorre nos supercondutores de alta temperatura crítica, cálculos de estrutura de bandas mostraram uma clara natureza tridimensional neste material [6], sendo que a largura de banda na direção z é da mesma ordem de grandeza do que as larguras de banda no plano xy . Além disso, ao contrário do Cu nos cupratos, o átomo de Ni não possui momento magnético local neste sistema [7].

O borocarbeto $Y1221$ é um supercondutor do tipo II com $H_{c2}(T=0) \sim 10T$ [5]. Embora seja classificado como um supercondutor convencional, estudos recentes vem apontando comportamentos que desviam do padrão BCS. O primeiro deles é a curvatura positiva de $H_{c2}(T)$ perto de T_c [8] que não pode ser descrito por essa teoria.

Além disso, enquanto estudos iniciais sugeriam um *gap* supercondutor do tipo *s-wave* isotrópico, característica da supercondutividade convencional, medidas de condutividade térmica [9], calor específico [10], espectroscopia de tunelamento [11], e espectroscopia de ponto de contato [12-14] forneceram fortes evidências de um *gap* anisotrópico para este composto, o que caracteriza os supercondutores não convencionais.

A dependência do calor específico com o campo magnético ($\gamma(H) \approx \sqrt{H}$) no estado misto [10], também apresenta um comportamento não esperado para este composto. Esta característica é típica da

supercondutividade *d-wave*, a mesma dos cupratos de alta temperatura crítica.

A estrutura de bandas desse sistema (Fig 2.2) mostra que a banda mais baixa é derivada dos estados *2s* do *C* que está bem separada das demais bandas que participam da condução, indicando que o carbono não está no estado hibridizado *sp³*. Logo acima desta banda, localiza-se uma banda parabólica vinda principalmente dos estados *2s* do *B*, a qual também se encontra separada das demais. A energia de Fermi é cruzada por três bandas, as quais possuem um caráter predominantemente *3d* do *Ni* e *4d* do *Y*.

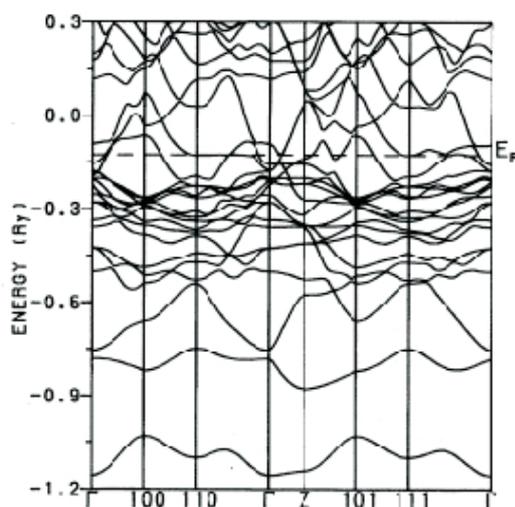


Figura 2.2. Estrutura de bandas do sistema YNi_2B_2C [15]

2.2.1 Desordem e supercondutividade no sistema $Y(Ni_{(1-x)}M_x)_2B_2C$

Geralmente depois da descoberta de um dado material, vários estudos são realizados com o intuito de melhorar suas propriedades físicas, ou seja, modificar este material de modo a torná-lo útil em aplicações futuras. As modificações nas propriedades de um material podem ser feitas de várias maneiras, como por exemplo, aplicar uma tensão mecânica na estrutura do material, aplicar campos elétricos e magnéticos observando como este reage à aplicação destes campos, fazer um processo de dopagem ao substituir átomos de sua estrutura por outros. Com o borocarbeto *Y1221* não foi diferente. Depois da sua descoberta, vários estudos foram feitos colocando impurezas substitucionalmente na rede cristalina deste composto.

Exemplos deste fato se tem ao analisar trabalhos anteriores que mostraram que o Mn forma momento magnético quando substituído no borocarbeto pseudoquaternário $Y(Ni_{(1-x)}Mn_x)_2B_2C$ [16,17] enquanto que os átomos de Fe [18,19] e Co [19-21] não exibem tal comportamento. Além disso, observou-se que a T_c diminui com o aumento da concentração de impurezas.

A dependência da resistividade elétrica com a temperatura para diferentes concentrações de Mn e a variação do momento magnético da impureza com o valor de x do sistema referido acima, são mostradas nas Figuras 2.3 e 2.4, respectivamente.

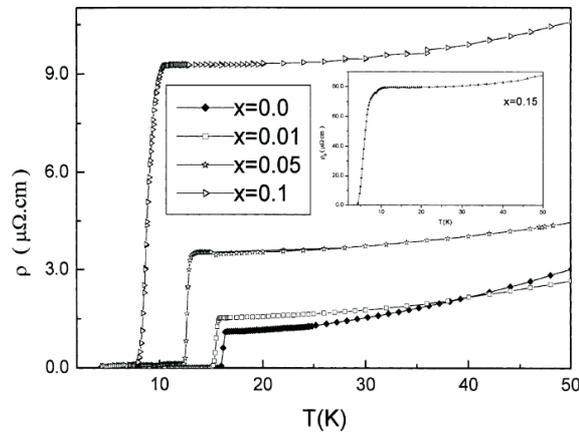


Figura 2.3. Variação da resistividade em função da temperatura para $x=0.0, 0.01, 0.05$ e 0.1 . O gráfico menor mostra esta dependência quando $x=0.15$ [17]

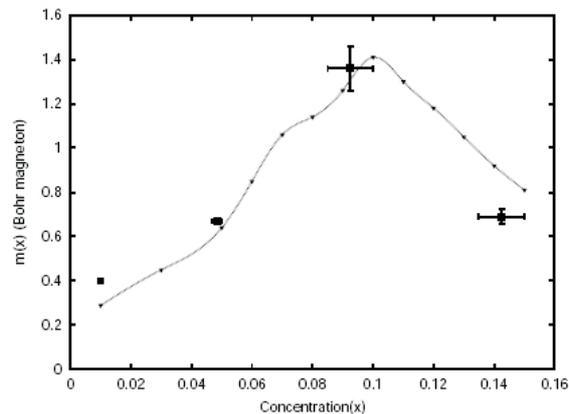


Figura 2.4. Valores obtidos experimentalmente para o momento magnético do Mn com as barras de erro (quadrados abertos) e os resultados obtidos através do modelo teórico (triângulos fechados) [16]

3. Metodologia

A metodologia está dividida em duas partes: (1) cálculo de primeiros princípios para determinar as propriedades eletrônicas do sistema puro (YNi_2B_2C) e (2) cálculo do sistema desordenado ($Y(Ni_{(1-x)}M_x)_2B_2C$) utilizando a aproximação do potencial coerente – CPA (*Coherent Potential Approximation*) dentro do modelo de Hubbard atrativo.

3.1 Primeiros Princípios

O cálculo para a determinação das propriedades eletrônicas do borocarbeto puro foi realizado utilizando a Teoria do Funcional da Densidade – DFT (*Density Functional Theory*), que é considerada atualmente como sendo o método mais bem sucedido em cálculos de estrutura eletrônica devido a sua alta eficiência computacional juntamente com os bons resultados fornecidos. Como o próprio nome sugere, a densidade eletrônica passa a ser a quantidade física relevante ao invés da função de onda. A vantagem está no fato de que a densidade depende somente de três variáveis e, além disso, é uma quantidade mais simples de ser interpretada e menos abstrata do que a função de onda do sistema. Dentro desta teoria, proposta por Hohenberg e Khon (1964) [22] e por Khon e Sham (1965) [23], a densidade eletrônica do estado fundamental é obtida resolvendo-se uma equação de partícula única do tipo Schrödinger.

Esse cálculo foi feito utilizando o código WIEN97 [24] que usa a base das ondas planas aumentadas e linearizadas – LAPW (*Linearized Augmented Plane Wave*) para expandir os orbitais de partícula única (orbitais de Khon-Sham). O potencial de troca e correlação foi tratado dentro da aproximação do gradiente generalizado – GGA (*Generalized Gradient Approximation*).

3.2 Sistema desordenado

3.2.1 Aproximação CPA

Esta aproximação foi introduzida por Soven [25] para tratar problemas de estrutura eletrônica de ligas desordenadas. A CPA é uma das técnicas mais utilizadas para abordar um sistema com desordem substitucional [26-30]. Isto se deve principalmente à sua formulação clara e simples em termos das funções de Green.

A idéia fundamental da CPA é substituir a rede desordenada, onde os átomos estão distribuídos aleatoriamente, por um meio efetivo ordena-

do caracterizado por uma auto-energia $\Sigma(\omega)$, onde $\omega = \varepsilon + i\delta$.

Após a troca dos átomos originais A e B por átomos efetivos, é feito uma substituição de um dado átomo do sistema efetivo por um átomo A com probabilidade $(1-x)$ ou por um átomo B com probabilidade x , onde x é a concentração de B.

A auto-energia do sistema efetivo é determinada autoconsistentemente pela condição de que uma impureza A ou B quando mergulhada nesse meio, em média, não produza espalhamento, ou seja, a média configuracional da matriz transferência no sítio da impureza deve ser nula. Assim, tem-se:

$$\left\langle \frac{V_0}{1 - V_0 g_{00}} \right\rangle = 0, \quad (3.1)$$

onde g_{00} é a função de Green do sistema efetivo e $V_0 = \varepsilon_{A,B} - \Sigma$ é o potencial localizado na origem devido à presença da impureza.

Fazendo-se a média da expressão (3.1) e resolvendo para Σ , tem-se,

$$\Sigma = (1-x)\varepsilon_A + x\varepsilon_B - (\varepsilon_A - \Sigma)g_{00}(\varepsilon_B - \Sigma) \quad (3.2)$$

A equação acima é chamada de equação CPA.

3.2.2 Modelo

Para estudar qualquer sistema físico, antes de mais nada, devemos escrever o hamiltoniano desse sistema onde deve constar todas as interações dominantes que descrevem seu comportamento. O que acontece muitas vezes é que para sistemas mais complexos, temos que desprezar alguns termos do hamiltoniano ou fazer aproximações a fim de que seja possível resolver o problema, mesmo que de forma aproximada. Para este problema em particular, foi utilizado o hamiltoniano de Hubbard atrativo. Este hamiltoniano tem sido usado com frequência [29-33] porque ele descreve de maneira bastante satisfatória o fenômeno da supercondutividade. No entanto, os pares de Cooper ocorrem no espaço real e quando se considera o mesmo sítio, eles são locais.

O hamiltoniano do sistema puro é dado por,

$$H_0 = \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{ij} U_{ij}^b n_{i\uparrow} n_{j\downarrow}, \quad (3.3)$$

onde ε_i é a energia no sítio i , μ é o potencial químico, t_{ij} é o termo de *hopping* entre os sítios i e j , $c_{i\sigma}^+$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores criação e destruição, respectivamente, de um elétron com spin σ no sítio i e U_{ij}^b é a interação atrativa entre elétrons de spins opostos localizados nos sítios i e j . O superíndice b indica que a atração entre os elétrons está sendo mediada por bósons.

Levando em consideração somente o comportamento supercondutor do composto, o último termo do hamiltoniano pode ser reescrito da seguinte forma,

$$H_0 = \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{ij} (\Delta_{ij} c_{i\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ + \Delta_{ij}^+ c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}), \quad (3.4)$$

onde

$$\Delta_{ij} = U_{ij}^b \langle c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} \rangle \quad \text{e} \quad \Delta_{ij}^+ = U_{ij}^b \langle c_{i\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ \rangle.$$

O potencial que descreve o efeito devido às impurezas de metais de transição (levando em consideração somente o termo que descreve a repulsão entre elétrons no mesmo sítio) substituídas no borocarbeto puro no sítio l é dado por:

$$V = \sum_{l\sigma} \left(\delta\varepsilon_l c_{l\sigma}^+ c_{l\sigma} + \frac{1}{2} U^c \langle n_{l-\sigma} \rangle n_{l\sigma} \right) \quad (3.5)$$

onde $\delta\varepsilon_l$ é a mudança nos níveis de energia e U^c é a repulsão coulombiana entre elétrons no sítio l .

O hamiltoniano H_0 , dado pela equação (3.4), descreve um sistema ordenado. A adição de impurezas no composto faz com que este perca a sua periodicidade e então a resolução do problema se torna um pouco mais complexa. Para tratar a desordem, a aproximação CPA é feita e o hamiltoniano do sistema efetivo passa a ser:

$$H_{eff} = \sum_{i\sigma} (\Sigma_\sigma - \mu) c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{ij} (\Delta_{ij} c_{i\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ + \Delta_{ij}^+ c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}), \quad (3.6)$$

onde Σ_σ é a auto-energia CPA, ou seja, a energia dos átomos efetivos, a qual é dependente do spin e de $\omega = \varepsilon + i\delta$ e Δ_{ij} é o parâmetro de ordem supercondutor efetivo.

Escrevendo o hamiltoniano acima na notação de Nambu, o propagador do sistema efetivo $g(\omega) = (\omega - H_{eff})^{-1}$ será dado por uma

matriz 2×2 , ou seja,

$$\hat{g}(\omega) = \frac{1}{\text{Det}(\omega)} \begin{pmatrix} (\omega + \Sigma_{\downarrow} - \mu)\delta_{ij} + t_{ij} & -\Delta_{ij} \\ -\Delta_{ij}^+ & (\omega - \Sigma_{\uparrow} + \mu)\delta_{ij} - t_{ij} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

onde $\text{Det}(\omega) = [(\omega - \Sigma_{\uparrow} + \mu)\delta_{ij} - t_{ij}][(\omega + \Sigma_{\downarrow} - \mu)\delta_{ij} + t_{ij}] - |\Delta_{ij}|^2$ é o determinante da matriz $(\omega\hat{I} - \hat{H}_{\text{eff}})$.

O termo Δ_{ij}^2 na expressão (3.7) é muito pequeno ($10^{-6} eV$) quando comparado com os outros termos do $\text{Det}(\omega)$, então os termos diagonais do propagador podem ser escritos da seguinte forma:

$$g^{11}(\omega) = ((\omega - \Sigma_{\uparrow} + \mu)\delta_{ij} - t_{ij})^{-1}, \quad g^{22}(\omega) = ((\omega + \Sigma_{\downarrow} - \mu)\delta_{ij} + t_{ij})^{-1}.$$

O termo fora da diagonal será:

$$g^{12}(\omega) = -\Delta_{ij} \{ [(\omega - \Sigma_{\uparrow} + \mu)\delta_{ij} - t_{ij}][(\omega + \Sigma_{\downarrow} - \mu)\delta_{ij} + t_{ij}] - |\Delta_{ij}|^2 \}^{-1}.$$

Com o potencial dado pela expressão (3.5) escrito nesse formalismo, o propagador do sistema com impurezas será:

$$\hat{G}(\omega) = \frac{1}{\text{Det}(\omega)} \begin{pmatrix} (\omega + \Sigma_{\downarrow} - \mu)\delta_{ij} + t_{ij} + \delta\varepsilon_i + U^c < n_{i\uparrow} > & -\Delta_{ij} \\ -\Delta_{ij}^+ & (\omega - \Sigma_{\uparrow} + \mu)\delta_{ij} - t_{ij} - \delta\varepsilon_i - U^c < n_{i\downarrow} > \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

onde

$$\text{Det}(\omega) = [(\omega - \Sigma_{\uparrow} + \mu)\delta_{ij} - t_{ij} - \delta\varepsilon_i - U^c < n_{i\downarrow} >][(\omega + \Sigma_{\downarrow} - \mu)\delta_{ij} + t_{ij} + \delta\varepsilon_i + U^c < n_{i\uparrow} >] - |\Delta_{ij}|^2.$$

Os elementos da matriz (3.8) podem ser escritos de uma forma mais sucinta em termos dos elementos de matrizes do propagador puro e do potencial. Dessa forma, obtém-se,

$$G^{11} = \frac{g^{11}}{1 - V^{11}g^{11}}, \quad G^{22} = \frac{g^{22}}{1 - V^{22}g^{22}} \quad (3.9)$$

e

$$G^{12} = \frac{g^{12}}{(1 - V^{11}g^{11})(1 - V^{22}g^{22}) - V^{11}g^{12}V^{22}g^{21}}. \quad (3.10)$$

Como o termo de *hopping* não é determinado num cálculo de primeiros princípios, uma transformada de Fourier do propagador (3.7) se faz necessária de tal modo que o termo t_{ij} passa a ser expresso em termos da estrutura de bandas.

Os propagadores efetivos para os sítios em R_i e R_j são dados em

termos de uma soma na zona de Brillouin dos $g_k^{mn}(\omega)$. Para o caso deste problema em particular, as funções $g^{11}(\omega)$, $g^{22}(\omega)$ e $g^{12}(\omega)$ foram escritas em termos da densidade de estados (*3d do Ni*) do composto puro obtida do cálculo de primeiros princípios, ou seja, a soma em k foi substituída por uma integral na densidade de estados. Esses propagadores são dados por,

$$g^{11}(\omega) = \int \frac{\rho(\varepsilon)d\varepsilon}{\omega - \Sigma_{\uparrow} + \mu - \varepsilon} \quad , \quad g^{22}(\omega) = \int \frac{\rho(\varepsilon)d\varepsilon}{\omega + \Sigma_{\downarrow} - \mu + \varepsilon} \quad (3.11)$$

Para o propagador $g^{12}(\omega)$, foi feita a fatoração do denominador. Assim,

$$g^{12}(\omega) = -\frac{\Delta}{2R} \left(\int \frac{\rho(\varepsilon)d\varepsilon}{R - 1/2(\Sigma_{\uparrow} + \Sigma_{\downarrow}) - \varepsilon} + \int \frac{\rho(\varepsilon)d\varepsilon}{R + 1/2(\Sigma_{\uparrow} + \Sigma_{\downarrow}) + \varepsilon} \right) \quad (3.12)$$

onde

$$R = \sqrt{(\omega + 1/2(\Sigma_{\downarrow} - \Sigma_{\uparrow}))^2 - \Delta^2}.$$

Como pode ser visto na expressão acima, a dependência em k do Δ foi negligenciada, pois o parâmetro de ordem desse sistema é suposto ser *s-wave*. Esta suposição é pertinente, pois estudos têm mostrado que a presença de impurezas em borocarbeto modifica o parâmetro de ordem de um *s-wave* assimétrico para um parâmetro quase *s-wave*, [34].

A equação autoconsistente para Σ_{σ} é dada pela equação CPA (3.2).

Uma vez que a autoconsistência é encontrada, os números de ocupação n_{\uparrow} e n_{\downarrow} podem ser obtidos das equações (3.9).

As equações para o número de ocupação *up* e *down* dos átomos A e B são dadas por,

$$n_{\uparrow}^{A,B} = -\frac{1}{\pi} \int d\omega \text{Im} \left(\frac{g^{11}}{1 - (\varepsilon_{\uparrow}^{A,B} - \Sigma_{\uparrow})g^{11}} \right) f(\omega) \quad (3.13)$$

e

$$n_{\downarrow}^{A,B} = -\frac{1}{\pi} \int d\omega \text{Im} \left(\frac{g^{22}}{1 - (\varepsilon_{\downarrow}^{A,B} - \Sigma_{\downarrow})g^{22}} \right) f(\omega), \quad (3.14)$$

onde é a função de Fermi.

O momento magnético é calculado pela expressão:

$$m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}. \quad (3.15)$$

O parâmetro de ordem do sistema efetivo poderá ser obtido pela expressão:

$$\Delta_{eff} = -\frac{U^b}{\pi} \int d\omega \text{Im}(g^{12}) f(\omega). \quad (3.16)$$

4. Resultados

A densidade de estados das equações (3.11) e (3.12) foi obtida do cálculo LAPW para o composto puro. O nível de energia da impureza foi estimado de tal forma que o número de ocupação fosse o correto, ou seja, 5 elétrons para o *Mn*, 6 para o *Fe* e 7 elétrons para o *Co*.

Diversos valores foram testados para o potencial Coulombiano U^c , sendo utilizado o que melhor ajustou os valores experimentais para o momento magnético do *Mn*. O valor encontrado é menor que a largura de banda (aproximadamente 9 eV), o que é compatível com a aproximação Hartree-Fock usada no modelo. Com esse valor para a interação coulombiana, foi feito o cálculo do parâmetro de ordem efetivo e do momento magnético das impurezas com mudanças no número de ocupação ΔZ aumentando de 1 para 3 elétrons. Estas grandezas foram calculadas para as concentrações de $x=0, 0.01, 0.05$ e 0.1 .

Os resultados obtidos deste estudo para o momento magnético reproduziram corretamente, e de forma qualitativa, o que era esperado, ou seja, aumentando a concentração de *Mn*, aumenta-se o valor do momento magnético no sítio dessa impureza, enquanto que tal comportamento não se observa para os átomos de *Fe* e *Co*.

Quanto às variações no parâmetro de ordem, o estudo realizado mostrou que tanto para a impureza de *Mn* quanto para a impureza de *Fe* houve um decréscimo no valor dessa grandeza indicando que a temperatura crítica desses sistemas diminui com o aumento da concentração. Para o caso particular da impureza de *Co*, os resultados não apresentam concordância qualitativa com os resultados experimentais, indicando que, neste caso, é necessário a inclusão de outras interações.

5. Referências bibliográficas

- [1] R. Nagarajan et al. *Physical Review Letters*, 72, 274 (1994).
- [2] R. J. Cava et al. *Nature*, 367, 146 (1994).
- [3] C. Mazumdar et al. *Solid State Communications*, 87, 413 (1993).
- [4] R. J. Cava et al. *Nature*, 367, 252 (1994).
- [5] K. H. Müller e V. N. Narozhnyi. *Reports on Progress in Physics*, 64, 943 (2001).
- [6] M. Divis et al. *Physical Review B*, 62, 6774 (2000).
- [7] B. J. Suh et al. *Physical Review B*, 53, R6022 (1996).
- [8] C. Mazumdar e R. Nagarajan. *Current Science*, 88, 83 (2005).
- [9] K. Izawa et al. *Physical Review Letters*, 89, 137006.1 (2002).
- [10] C. L. Huang et al. *Physical Review B*, 73, 012502.1 (2006).
- [11] P. Martínez-Samper et al. *Physical Review B*, 67, 014526.1 (2003).
- [12] P. Raychaudhuri et al. *Physical Review Letters*, 93, 156802.1 (2004).
- [13] S. Mukhopadhyay et al. *Physical Review B*, 72, 014545.1 (2005).
- [14] Y. G. Naidyuk et al. (arXiv: cond-mat/0609769 v1).
- [15] P. Ravindran, S. Sankaralingam e R. Asokamani. *Physical Review B*, 52, 12921 (1995).
- [16] F. S. Rocha et al. *The European Physical Journal B*, 25, 307 (2002).
- [17] F. S. Rocha et al. *Physica C*, 363, 41 (2001).
- [18] T. G. Kumary et al. *Physica C*, 291, 41 (1997).
- [19] S. L. Bud'ko et al. *Physica C*, 243, 183 (1995).
- [20] A. K. Gangopadhyay, A. J. Schuetz e J. S. Schilling. *Physica C*, 246, 317 (1995).
- [21] H. Schmidt, M. Müller e H. F. Braun. *Physica C*, 235-240, 779 (1994).
- [22] K. Hohenberg e W. Khon. *Physical Review*, 136, B864 (1964).
- [23] W. Khon e J. Sham. *Physical Review*, 140, A1133 (1965).
- [24] P. Blaha, K. Schwarz, J. Luitz, A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties, Computer Code WIEN97, (Vienna University of Technology, Vienna). Update of P. Blaha et al., *Comp. Phys. Commun*, 59, 399 (1990).

- [25] P. Soven. *Physical Review*, 156, 809 (1967).
- [26] R. Vlaming e D. Vollhardt. *Physical Review B*, 45, 4637 (1992).
- [27] I. A. Abrikosov et al. *Computacional Materials Science*, 10, 302 (1998).
- [28] I. A. Abrikosov e B. Johansson. *Physical Review B*, 57, 14164 (1998).
- [29] R. Moradian, J. F. Annett e B. L. Györfy. *Physical Review B*, 62, 3508 (2000).
- [30] A. M. Martin et al. *Physical Review B*, 60, 7523 (1999).
- [31] R. Moradian et al. *Physical Review B*, 63, 024501.1 (2000).
- [32] G. Litak et al. *Physica C*, 199, 191 (1992).
- [33] R. Micnas, J. Ranninger e S. Robaszkiewicz. *Reviews of Modern Physics*, 62, 114 (1990).
- [34] M. Nohara et al. *Journal of the Physical Society of Japan*, 68, 1078 (1999).

