

19  
24m

# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO



FACULTAD DE CIENCIAS

**PARES DE COOPER CON  
MOMENTO TOTAL NO NULO EN UN  
SUPERCONDUCTOR BCS**

T E S I S

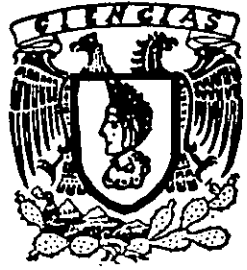
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

M A T E M Á T I C A

P R E S E N T A:

MARÍA GUADALUPE/LÓPEZ ARRIETA

DIRECTORES DE TESIS: DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA  
DR. MIGUEL ÁNGEL SOLÍS ATALA



FACULTAD DE CIENCIAS  
UNAM

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

1998



FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR

257501



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

M. en C. Virginia Abrin Batule  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:

Pares de Cooper con momento total no nulo en un superconductor BCS.

realizado por María Guadalupe López Arrieta  
con número de cuenta 7731816-5 , pasante de la carrera de Matemáticas

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

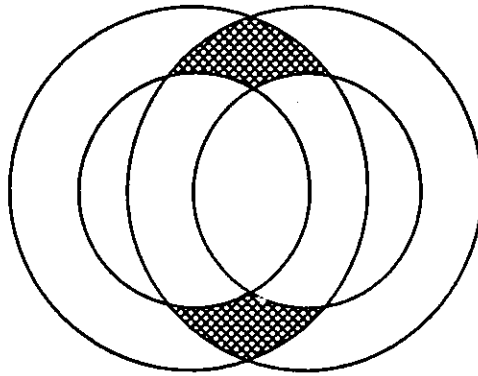
Atentamente

Director de Tesis *Manuel de Llano de la Garza* Dr. Manuel de Llano de la Garza / Dr. Miguel Ángel Solís Atala  
Propietario Dr. Manuel Falconi Magaña *M. Falconi*  
Propietario M. en C. Miguel Lara Aparicio *Miguel Lara Aparicio*  
Propietario Dr. Miguel Angel Solís Atala *M. Solís Atala*  
Suplente M. en C. Agustín Ontiveros Pineda *Agustín Ontiveros Pineda*  
Suplente

Consejo Departamental de Matemáticas

Mat. César Guevara Bravos

CUNTA DE CIENCIAS  
CONSEJO DEPARTAMENTAL  
DE  
MATEMATICAS



*A menudo se dice que la Geometría es el arte de  
razonar bien con figuras mal hechas.*

**H. POINCARÉ**

## Agradecimientos

Quiero aprovechar la oportunidad para dar las gracias muy especiales a los Drs. Miguel Ángel Solís Atala y Manuel de Llano de la Garza, por la confianza y dirección tan profesional que los distingue, la dedicación, motivación, paciencia y su muy positiva disposición académica que convirtió mi incursión en la interdisciplina una muy agradable experiencia.

Al departamento de Matemáticas que me asignó al Jurado el cual aceptó con gusto, sugiriendo comentario que han enriquecido la presentación final de este trabajo y recordarme el gran compromiso que en cualquier área interdisciplinaria es el del formalismo. En particular al Dr. Manuel Falconi Magaña, al M. en C. Miguel Lara Aparicio y al M. en C. Agustín Ontiveros Pineda.

A todos mis profesores, muy especialmente al Dr. Onofre Rojo Asenjo, al M. en C. Rodolfo San Agustín Chi y al Dr. Santiago López de Medrano Sánchez, por el sincero interés con que han seguido el desarrollo de mis estudios y por las diversas formas como los han impulsado en cada una de sus etapas.

A mis compañeros del IFUNAM, a la Fís. Yuri Hiranaka, y al Mat. Enrique Solís por sus valiosos consejos.

Al Instituto de Física e Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM el haberme aceptado como estudiante Asociado y así mismo disponer de sus instalaciones y servicios durante la elaboración de esta tesis. El poder concluir esta tesis fue gracias al apoyo de quienes allí laboran, en particular a la bibliotecaria Lic. Sara Jiménez por sus eficientes servicios y su muy buena disponibilidad, así como a la Dra. Mirna Estrada por sus múltiples consejos. Al personal de cómputo de IFUNAM por sus asesorías en cuanto a la edición e impresión de esta tesis en LATEX.

Por último, quiero agradecer a la Fundación UNAM, el haberme otorgado la beca de tesis de licenciatura que disfruté durante un año.

# RESUMEN

En la teoría BCS de la superconductividad el ingrediente principal es el apareamiento de electrones que forman los llamados pares de Cooper de los cuales, por sencillez, sólo se toman en cuenta los pares con momento total igual a cero. Es decir, se menosprecia a los pares con momento total distinto de cero los cuales se comportan como bosones con una relación de dispersión lineal que pueden condensarse a la Bose-Einstein no tan sólo en tres sino en cualquier dimensión mayor que uno. Esto podría explicar la superconductividad en todos los materiales conocidos, inclusive los de alta  $T_c$  que son casi-bidimensionales. Sin abandonar el mecanismo fonónico de interacción entre pares de electrones, calculamos la fracción de pares de electrones con momento diferente de cero respecto a los pares con momento igual a cero. Esta fracción es diferente de cero y aunque decae rápidamente conforme la magnitud del momento del par aumenta desde cero, muestra que para valores del momento del par menores que 0.0002 veces el número de onda de Fermi del material, el valor de la fracción se separa de la unidad en menos del diez por ciento.

# ÍNDICE

<b>Agradecimientos</b>	i
<b>Resumen</b>	ii
<b>1 Introducción</b>	1
<b>2 Los fermiones</b>	
2.1 Gas ideal de electrones	10
2.2 Funciones de distribución	
Fermi-Dirac y Bose-Einstein	15
2.3 Densidad de estados	20
<b>3 Los bosones</b>	
3.1 Pares de Cooper con $K > 0$ a $T > 0$	22
3.2 Fracción de pares de Cooper en tres dimensiones	28
<b>4 Resultados y conclusiones</b>	39
<b>Referencias</b>	47
<b>Apéndice</b>	
Fracción de pares de Cooper en dos dimensiones	49
Lista de figuras	60

# Capítulo 1

## Introducción

El objetivo principal de esta tesis es el de mostrar cómo la Matemática puede apoyar a otras disciplinas, como la Física, no sólo como herramienta, sino como un medio de formalizar los distintos conceptos de la disciplina en cuestión dando claridad y confiabilidad a los resultados.

Ciertos fenómenos físicos son capaces de cambiar de manera permanente la forma material de vivir del ser humano. Uno de estos fenómenos es el de la superconductividad. Ocurre cuando ciertos materiales se enfrían por debajo de una temperatura, denominada *temperatura crítica*, la cual es particular para cada material; a esta temperatura la resistividad eléctrica del material decrece abruptamente hasta llegar a cero.

La superconductividad fue observada por primera vez en 1911 por el holandés Kamerlingh Onnes (1853-1926) quien, en 1908, pudo licuar el helio, y lo usó como refrigerante para enfriar sus muestras a temperaturas menores que 4.2K. En particular, enfrió muestras de mercurio donde observó que la resistividad de éste disminuye drásticamente cuando la temperatura alcanzada es de 4.15K. La importancia de este suceso fue reconocida inmediatamente, tanto desde el punto de vista de avance del conocimiento como de las múltiples aplicaciones tecnológicas que se avisoraron. Parte de este reconocimiento fue el Premio Nobel otorgado a Onnes en 1913.

La gran utilidad e ilimitadas aplicaciones de los materiales superconductores se basa en su capacidad de transportar corriente eléctrica con resistencia nula. Esto es, las pérdidas de energía eléctrica por calentamiento (efecto Joule) desaparecen, posibilitando que se



pueda transportar grandes cantidades de corrientes eléctricas necesarias, por ejemplo, en la construcción de electroimanes gigantes.

Con el descubrimiento de la superconductividad se dio inicio también a la búsqueda de materiales con temperaturas críticas más altas y a la explicación teórica del fenómeno. En 1933, Meissner y Ochsenfeld [1], descubren una segunda propiedad característica de un superconductor que consiste en que cuando es enfriado por debajo de su temperatura crítica en presencia de un campo magnético externo, las líneas de flujo magnético son expelidas, es decir, el superconductor actúa como un diamagneto perfecto, donde los electrones de los átomos ajustan sus movimientos rotacionales para producir un momento magnético neto opuesto al campo externo. Este fenómeno, que reconocemos como efecto Meissner, es el mismo que posibilita la construcción de trenes de pasajeros de muy alta velocidad levitados. Cabe hacer notar que si la magnitud del campo externo aplicado rebasa cierto campo crítico  $H_c$  el superconductor regresa a su estado normal.

Para 1950 el material con la temperatura crítica más alta era la aleación NbN con una temperatura crítica de 15.2K. Ese mismo año Fröhlich [2] consideró el efecto de las vibraciones de la red iónica en el fenómeno de la superconductividad. Predijo que la temperatura de transición decrecería conforme la masa isotópica promedio del material aumentara, esto es

$$T_c \propto 1/\sqrt{M},$$

de donde se puede deducir que si no hay vibraciones en la red  $M \rightarrow \infty$  entonces  $T_c \rightarrow 0$  ocasionando que no haya superconductividad. La gran importancia de este efecto isotópico radica en que fortaleció la idea de que el mecanismo electrón-fonón es básico en la superconductividad.

Con estos antecedentes Cooper [3] demuestra en 1956 que el estado base normal de un

gas de electrones es inestable con respecto a la formación de pares de electrones amarrados, donde la presencia del resto de electrones es crucial para que exista la formación de un par. En el estado base normal todos los niveles monoeléctricos con momento  $k < k_F$  están ocupados y los niveles con  $k > k_F$  están vacíos. Si, como supuso Cooper, existe entre los electrones una interacción débil atractiva, el efecto será dispersar los electrones con momentos  $k_1$  y  $k_2$  a estados con momentos  $k'_1$  y  $k'_2$ . Como todos los niveles abajo de  $k_F$  están ocupados, los momentos finales  $k'_1$  y  $k'_2$  caerán arriba de  $k_F$ , con el consecuente aumento de energía cinética del sistema. Sin embargo, el amarre del par de electrones genera una disminución en la energía potencial del sistema tal que el efecto neto es una disminución de la energía total del sistema. En 1957, Bardeen, Cooper y Schrieffer (premio Nobel 1972) [4], generalizan la discusión de Cooper del problema de dos cuerpos (dos electrones) al de  $N$ -cuerpos donde  $N$  es del orden de  $10^{23}$ , el número típico de electrones de conducción en una muestra mediana de un metal. Desarrollaron la teoría que hoy conocemos como BCS y que vino a explicar la superconductividad tal como se conocía hasta entonces y hasta 1986.

En 1986, Bednorz y Müller [5], descubren que ciertos materiales cerámicos con estructura cristalina, llamados *perovskitas* son superconductores a temperatura por encima de 30K. Estos materiales son rígidos, frágiles y se caracterizan por planos de átomos de cobre (Cu) y de oxígeno (O) en combinación con otros elementos, por ejemplo lantano (La) y bario (Ba). Como a principio de siglo, este hallazgo en 1986 propició un renaciente interés en la búsqueda de cerámicas con temperaturas aún más altas. Todas las bondades de la teoría BCS no se pudieron extrapolar a los nuevos superconductores. En particular, no es posible explicar mediante el modelo BCS las temperaturas superconductoras mayores a 46K, límite conocido como “barrera fonónica”.

Como intentos de explicar la nueva superconductividad, desde 1986 se han propuesto diversos modelos microscópicos [6]. Así, Anderson, considera, una separación de espín y de carga en que un electrón, dentro del cristal, posee excitaciones que son “dímeros” compuestos de un fermión (con espín pero sin carga, llamado “espinón”) más un bosón (cargado pero de espín entero, llamado “holón”), ambos ligados entre sí para formar el dímero. El gas bosónico que surge así podrá entonces sufrir una especie de condensación BE que sería la transición superconductor. Schrieffer, y colaboradores, en cambio, ven el fenómeno como una condensación de BE de “sacos” (“spin bags”) compuestos cada uno por dos huecos (dejados dentro del “mar de Fermi” electrónico por electrones excitados). Lee, y colaboradores estudian, sobre una serie de láminas paralelas, una mezcla en equilibrio de fermiones (no apareados) y de bosones compuestos (fermiones apareados), y logran ajustar los extensos datos experimentales de Uemura *et al.* [7], sobre temperaturas críticas de los cupratos, materiales casi-bidimensionales que consisten en “láminas” de átomos de cobre y de oxígeno. Es notable que deducen también una transición tipo BE pero en  $(2 + \epsilon)$ -dimensiones, siendo  $\epsilon$  muy pequeño (del orden de 0.03). Esto sucede en el modelo de láminas paralelas, débilmente acopladas entre sí, de los átomos de cobre y oxígeno. En cada lámina la masa efectiva de los pares de Cooper casi-bosónicos (de huecos electrónicos en el caso de los cupratos) adquiere en la dirección perpendicular a las láminas—como único parámetro ajustable de la teoría—valores que se aproximan hasta los cinco órdenes de magnitud del valor de la anisotropía que se viene observando experimentalmente, por ejemplo, en el cuprato  $Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10}$  ( $T_c \leq 125K$ ), por Farrell *et al.* [8]. Por otro lado, Alexandrov, Mott [6] y Ranninger [6], abogan por modelos de “polarones” (una nube de cargas iónicas deformada por la presencia de un electrón o hueco) que se ligan entre sí para formar “bipolarones” los que a su vez, siendo bosones,

pueden condensarse a la BE. Estos autores además señalan la muy notable semejanza con el helio líquido bosónico de dos cupratos típicos con  $T_c \sim 92\text{K}$  (el  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ) y con  $T_c \sim 107\text{K}$  (el  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ ) en cuanto al parecidísimo comportamiento del calor específico a pesar de que la transición superfluida del helio líquido ocurre apenas a  $T_c \sim 2.2\text{K}$  a presión atmosférica.

Este amplio panorama de teorías tan distintas muestra la riqueza de ideas originales que actualmente prevalece en el entorno del enigma de la superconductividad, en especial la de alta temperatura. Además, nos percatamos de la actividad e interés en este tema por parte de cuatro Premios Nobel: Anderson, Schrieffer, Lee y Mott. No obstante, falta un mecanismo dinámico o una teoría capaz de justificar las altas temperaturas de transición de los recientes materiales y, esperamos también, un formalismo capaz de predecir la existencia de nuevos materiales con temperaturas críticas del orden de la temperatura ambiente, lo que iniciaría sin duda otra era tecnológica semejante a la Revolución Industrial del siglo XVIII.

Dentro de este panorama de nuevas teorías se ha replanteado la superconductividad como una condensación de Bose-Einstein de los pares de Cooper. La idea no es nueva, pues ya la usaban Blatt y Schrafroth antes de que apareciera la teoría BCS. El ingrediente nuevo es el considerar los pares de electrones con  $K > 0$  además de los pares con  $K = 0$ . Ni en la teoría BCS habían sido considerados antes, dado que allí se supone, sin demostrar, que éstos son mucho menos numerosos que los pares con  $K = 0$ . La relación de la condensación de Bose-Einstein con la superconductividad se basa en considerar a los pares de electrones como un sistema cuántico de muchos bosones en el que una fracción *apreciable* de ellos se encuentra en el estado de energía más baja del sistema cuando se enfría por debajo de una cierta temperatura crítica.

Si los bosones satisfacen una relación de dispersión cuadrática, es decir sus energías cinéticas  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ , entonces la temperatura crítica en  $d$  dimensiones es [9]

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left[ \frac{n_B}{\zeta(d/2)} \right]^{2/d}, \quad (1)$$

donde  $m$  es la masa del bosón y  $n_B$  la densidad de número de los bosones,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $\zeta(d/2)$  es la función zeta de Riemann de orden  $d/2$ .

Esta temperatura crítica es válida y diferente de cero, para toda dimensionalidad  $d > 2$ ; si  $d = 2$  entonces la función  $\zeta(1) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots \rightarrow \infty$  y  $T_c \rightarrow 0$ ; si  $d < 2$  la ecuación (1) debe ser modificada sustituyendo la función zeta por la suma  $g_{d/2}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{d/2}}$ , que diverge más rápidamente que  $\zeta(1)$ , y en consecuencia  $T_c \rightarrow 0$ . En particular, si la dimensión es  $d = 3$  la temperatura crítica es

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2 n^{2/3}}{mk_B [\zeta(3/2)]^{2/3}} \simeq \frac{3.31\hbar^2}{mk_B} n_B^{2/3},$$

dado que  $\zeta(3/2) \simeq 2.612$ .

Con este tipo de bosones se podría explicar la superconductividad de materiales casi-bidimensionales, como una condensación BE, pero no la de materiales casi-unidimensionales tales como los superconductores orgánicos consistentes en cadenas de átomos paralelos entre sí.

Sin embargo, resulta que los pares de Cooper en el límite de acoplamiento débil, se comportan no con una relación de dispersión cuadrática sino como bosones con una relación de dispersión *lineal*

$$\varepsilon_K = a(d)v_F\hbar K, \quad \text{cuando } K \rightarrow 0,$$

en que  $\hbar K$  es el momento de centro de masa del par y, donde  $a(d)$  es un coeficiente adimensional del orden de la unidad,  $d$  la dimensión del sistema y  $v_F$  velocidad de Fermi.

La temperatura crítica asociada a estos bosones en el límite de acoplamiento débil, es [10]

$$T_c = \frac{a(d)\hbar v_F}{k_B} \left[ \frac{\pi^{(d/2+1/2)} n_B}{\Gamma(d/2 + 1/2)\zeta(d)} \right]^{1/d}, \quad (2)$$

donde  $\Gamma(x) \equiv (x-1)!$  es la función gamma. Notese que ahora  $T_c > 0$  para toda  $d > 1$ . Esto es, pueden condensarse si el sistema es de dimensión mayor que uno, eliminando la limitación impuesta por los bosones con una relación de dispersión cuadrática para explicar la superconductividad de los materiales orgánicos casi-unidimensionales como una BEC. En la figura 1, se muestran las temperaturas críticas (1) y (2), en unidades de la temperatura de Fermi  $T_F$ , para  $1 < d \leq 3$ , donde  $d$  es la dimensión. En el intervalo sombreado  $0.01 \leq T_c/T_F \leq 0.06$ , se encuentran las temperaturas críticas medidas por Uemura para los superconductores exóticos. También, se muestra la barrera fonónica de 46K y la zona (cuadrículada) de las temperaturas críticas de los materiales convencionales.

Más realista sería un modelo no de un *gas puro* de bosones sino el de una *mezcla* en equilibrio químico [11] de fermiones (no apareados) y de bosones compuestos por dos fermiones apareados por la misma interacción modelo BCS. Este modelo de mezcla bosón-fermión a temperatura absoluta cero resulta ser el modelo descrito cuantitativa y *precisamente* por la teoría BCS en el estado fundamental.

En esta tesis exhibimos detalladamente la proporción de pares de electrones con  $K > 0$ ,  $N_K(T)$ , respecto a los pares con  $K = 0$ ,  $N_0(T)$ , para una temperatura  $T < T_c$ , en 2 y 3 dimensiones. Como una primera aproximación, mas no por ello lejos de la realidad, proponemos la función de Fermi-Dirac a  $T = 0$  trasladada por  $\hbar\omega_D$ , como la función de distribución de los electrones a  $T > 0$ . El comportamiento de la proporción  $N_K(T)/N_0(T)$ , como función de  $K$  y para diferentes materiales (o diferentes  $\nu = \Theta_D/T_F$ , donde  $\Theta_D$  y  $T_F$  son las temperaturas de Debye y Fermi del material, respectivamente), muestra

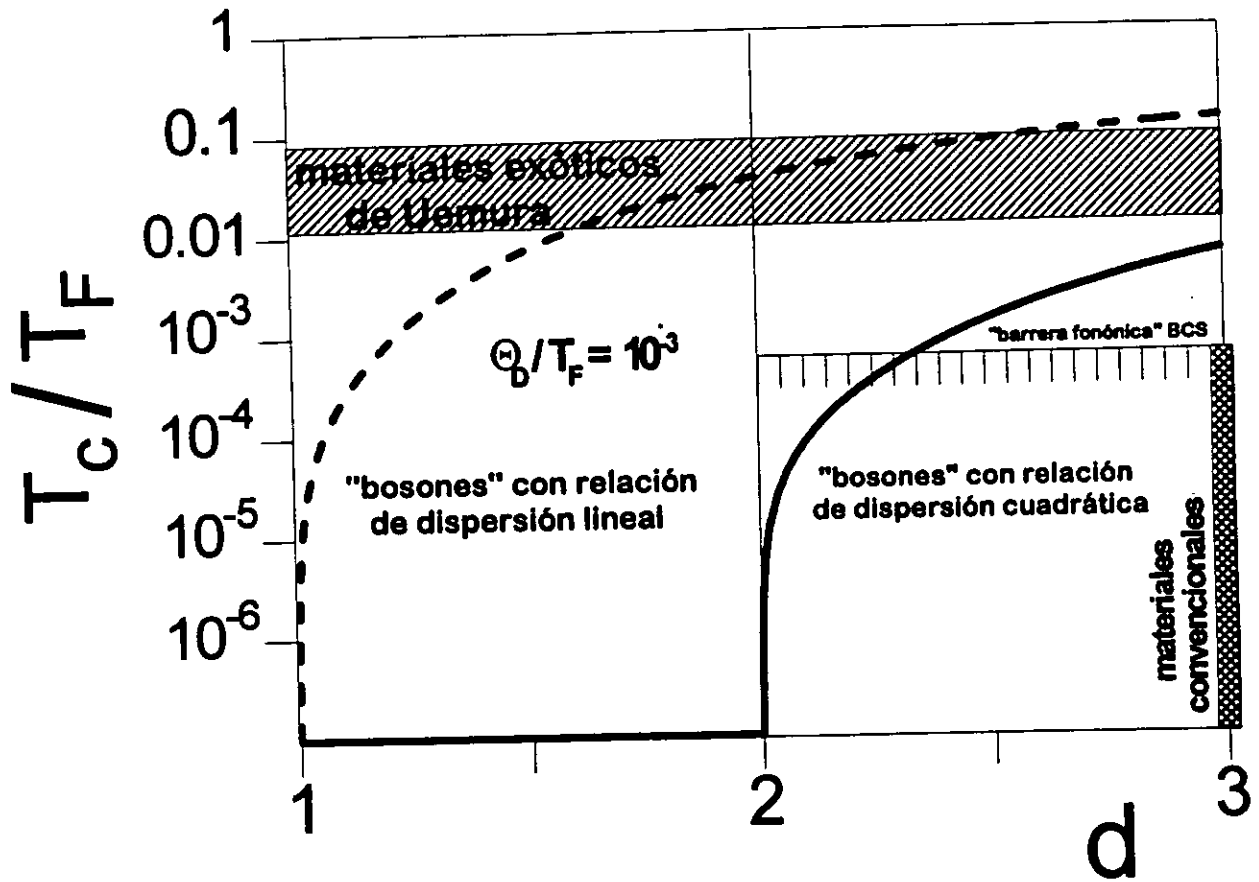


Figura 1: Temperaturas críticas  $T_c$ , en unidades de la temperatura de Fermi  $T_F$ , como función de la dimensión  $d$ , para sistemas de bosones cuya energía es proporcional al cuadrado del momento (curva llena) y proporcional al momento (curva a trazos).

la existencia no despreciable de los pares con  $K > 0$ , que justifica su inclusión en la teoría antes mencionada y por consiguientes las variaciones en las temperaturas críticas obtenidas. Aunque los pares con  $K > 0$  no son considerados en la teoría BCS, desempeñan un papel preponderante en la superconductividad interpretada como una transición de fase tipo Bose-Einstein.

En el capítulo 2 se muestran algunas propiedades del sistema de  $N$ -electrones. Para esto, se resuelve la ecuación de Schrödinger para un solo electrón. Los niveles de energía monoeléctronicos son ocupados por los  $N$ -electrones no interactuantes de un gas ideal de fermiones según la función de distribución de Fermi-Dirac. Se da la densidad de estados y se relaciona la densidad de partículas con el vector de onda de Fermi. En el capítulo 3 calculamos la razón del número de pares de electrones con momento de centro de masas total diferente de cero respecto a los pares con momento de centro de masas total igual a cero. La interacción entre los electrones es la de BCS, tal que los electrones con la posibilidad de aparearse se encuentran en una franja de ancho  $\hbar\omega_D$  alrededor del nivel de Fermi, en el espacio  $k$ . Proponemos que los electrones estén representados por la función de distribución de Fermi-Dirac a  $T = 0$ . Aquí se reporta el cálculo para sistemas tridimensionales y en el apéndice se resumen los resultados para sistemas bidimensionales. En el capítulo 4 se resumen los resultados y se exponen las conclusiones.



## Capítulo 2

# Los Fermiones

### 2.1 Gas Ideal de electrones.

Aquí calculamos las propiedades de un gas de  $N$ -electrones que no interaccionan entre sí, dentro de un volumen  $V$ . Utilizando la aproximación de electrón independiente, podemos calcular el estado base del sistema de  $N$ -electrones calculando primero los niveles de energía (monoestados) de un electrón dentro de un volumen  $V$ , y luego llenando estos niveles con los  $N$ -electrones.

Un solo electrón es descrito por una función de onda y la especificación de las dos orientaciones de su espín. La función de onda  $\Psi(x, y, z)$  asociada a una partícula con posición  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  debe satisfacer la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi(x, y, z) = \varepsilon \Psi(x, y, z), \quad (3)$$

donde  $m$  es la masa y  $\varepsilon$  es la energía de la partícula,  $\hbar = h/2\pi$  donde  $h$  es la constante de Planck. Además, una condición a la frontera que, para efecto de considerar que la partícula representa un electrón dentro de una estructura periódica (un cristal), proponemos sean las siguientes condiciones de periodicidad en las fronteras

$$\begin{aligned} \Psi(x + L, y, z) &= \Psi(x, y, z) \\ \Psi(x, y + L, z) &= \Psi(x, y, z) \\ \Psi(x, y, z + L) &= \Psi(x, y, z). \end{aligned} \quad (4)$$

Para resolver la ecuación de Schrödinger usamos el método de separación de variables. Se propone a la función de onda como un producto de tres funciones donde cada una

de ellas depende sólo de una variable  $x, y$  o  $z$ , es decir,  $\Psi(x, y, z) = \Psi_x(x)\Psi_y(y)\Psi_z(z)$ .

Sustituyendo la anterior expresión en (3), se obtiene

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_x(x) &= \varepsilon_x \Psi_x(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi_y(y) &= \varepsilon_y \Psi_y(y), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_z(z) &= \varepsilon_z \Psi_z(z), \end{aligned}$$

donde  $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ . La condición a la frontera (4) se transforma en

$$\begin{aligned} \Psi_x(L) &= \Psi_x(0) \\ \Psi_y(L) &= \Psi_y(0) \\ \Psi_z(L) &= \Psi_z(0), \end{aligned} \tag{5}$$

cuando la evaluamos en sus extremos.

Dejando de lado momentáneamente la condición a la frontera verificamos, por sustitución, que una solución de la ecuación (3) es

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}, \tag{6}$$

ya que al realizar, las segundas derivadas parciales de (6) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_x(x) &= -k_x^2 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x}, \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi_y(y) &= -k_y^2 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_y y}, \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_z(z) &= -k_z^2 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_z z}, \end{aligned}$$

las cuales sustituimos en el primer miembro de la ecuación (3)

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left( -k_x^2 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} - k_y^2 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_y y} - k_z^2 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_z z} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}|^2 \left( -\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right), \end{aligned}$$

como  $k = |\mathbf{k}|$  entonces,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) = \varepsilon \Psi,$$

con  $\varepsilon$  la energía dada por

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \varepsilon,$$

donde  $k \equiv 2\pi/\lambda$  es el número de onda de una onda estacionaria con una longitud de onda  $\lambda = h/p$ .

Sabemos que la intensidad, o energía por unidad de tiempo por unidad de área, asociada a una onda es proporcional al cuadrado de la amplitud. Por lo tanto, la intensidad de la onda que describe a la partícula, y que nos proporciona las regiones del espacio en las cuales es más probable encontrarla, está dada por el cuadrado de la función de onda  $|\Psi(\mathbf{r})|^2$  o densidad de probabilidad. Así, la probabilidad de encontrar al electrón en un volumen  $\gamma$ , está dada por

$$\int_{\gamma} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}.$$

Si esta integral es extendida a todo el espacio  $V$ , donde la partícula se encuentra, la probabilidad de encontrarla allí será:

$$\int_V |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1.$$

La función de onda que cumple con esta ecuación se dice que está normalizada. El vector de onda  $\mathbf{k}$  de la función  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  está relacionado con el momento lineal  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$  del electrón, donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad, a través de su energía cinética, esto es

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

donde hemos usado que  $p = h/\lambda$ .

La última igualdad es consecuencia de la ley de De Broglie que asocia a la partícula con momento  $\mathbf{p}$  una longitud de onda  $\lambda$  tal que  $p = h/\lambda$ . De aquí que el momento lineal y la velocidad de la partícula quedan expresados en términos del vector de onda  $\mathbf{k}$  de la siguiente forma

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad \text{y} \quad \mathbf{v} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}.$$

La onda plana  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  es constante en todo plano perpendicular a  $\mathbf{k}$  (donde tales planos están definidos por la ecuación  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = \text{cte.}$ ), mientras que a lo largo de las líneas rectas paralelas a  $\mathbf{k}$  su amplitud varía repitiéndose la onda cada  $k/2\pi \equiv 1/\lambda$ , veces por unidad de longitud, donde  $\lambda$  es la longitud de onda de Broglie.

La condición a la frontera (5) será satisfecha por la función de onda general (6), si y sólo si,

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1.$$

Como  $e^z = 1$  sólo si  $z = 2\pi in$ , con  $n \in \mathcal{Z}$ , entonces las componentes de los vectores de onda  $\mathbf{k}$  que cumplen la anterior identidad son

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}n_z,$$

donde  $n_x, n_y, n_z \in \mathcal{Z}$ , que generan un conjunto discreto de valores de  $\mathbf{k}$ , a diferencia del caso clásico, en el cual los valores posibles de  $k$  forman un continuo.

Si permitimos a los vectores de onda estar a lo largo de los ejes coordenados  $k_x, k_y, k_z$ , donde se supone que los momentos son medidos en unidades de  $2\pi/L$ , los momentos serán proporcionales a  $(\pm n_x, \pm n_y, \pm n_z)$  y un volumen  $\Omega$  del espacio  $k$  contenido en la red de valores permitidos de  $\mathbf{k}$ , contendrá

$$\frac{\Omega}{(2\pi/L)^3} = \frac{\Omega V}{(2\pi)^3},$$

valores de  $k$  permitidos. Equivalentemente, el número de estados permitidos por unidad de volumen del espacio  $k$  es,

$$\frac{V}{(2\pi)^3}$$

Por tanto, el número total de estados ocupados  $N_F$  en una esfera de radio  $k_F$  de Fermi, y volumen  $4\pi k_F^3/3$ , es

$$N_F \equiv 2\left(\frac{4\pi k_F^3}{3}\right)\left(\frac{V}{8\pi^3}\right) = \frac{k_F^3}{3\pi^2}V \quad (7)$$

donde el factor 2 toma en cuenta los dos valores del espín.

La extrapolación a un gas de partículas es inmediata. Para ello consideremos un gas de  $N$ -partículas sin interacción entre ellas, dentro de un volumen  $V$ , donde  $N \rightarrow \infty$  y  $V \rightarrow \infty$ , pero tal que la densidad de partículas  $n \equiv N/V = \text{cte}$ . Entonces, los niveles de energía accesibles a cada una de las partículas son los mismos que los de una partícula sola (los monoestados) en el mismo volumen  $V$ .

Por la forma en que las partículas se distribuyen en los monoestados, podemos distinguir al menos dos tipos de ellas: fermiones y bosones. Los electrones son fermiones y obedecen el principio de exclusión de Pauli, que prohíbe que se acomoden más de dos partículas, con espines opuestos, en cada nivel de energía. Si las  $N$ -partículas son fermiones, se acomodarán sin estar más de un electrón por monoestado. En  $T = 0$  los  $N$ -electrones ocupan los primeros  $N_F$  monoestados dentro de una esfera (esfera de Fermi) de radio  $k_F$  (número de onda de Fermi). De (7) podemos deducir que la densidad electrónica  $n \equiv N/V$  está relacionada con  $k_F$  de la siguiente forma

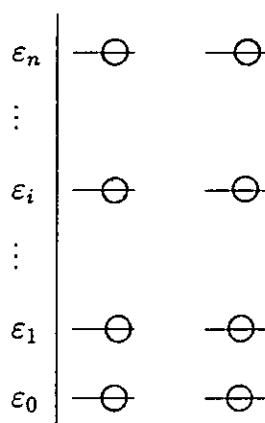
$$n \equiv \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (8)$$

Los bosones no obedecen el principio de exclusión de Pauli por lo que pueden acomodarse un número indefinido de bosones en un solo nivel.

## 2.2 Funciones de distribución Fermi-Dirac y Bose Einstein.

Las leyes de distribución de Fermi-Dirac y de Bose-Einstein representan dos formas posibles en que las  $N$ -partículas indistinguibles de un sistema pueden acceder a los niveles de energía del mismo. Las partículas de espín fraccionario  $\pm\frac{1}{2}$ , obedecen el principio de exclusión de Pauli que prohíbe que dos o más partículas ocupen el mismo nivel de energía, éstas se distribuyen en los niveles de energía según la ley de distribución de Fermi Dirac por lo que se les denomina fermiones. Partículas idénticas de espín cero o entero, denominadas bosones hacen caso omiso del principio de exclusión y se distribuyen en los niveles más bajos de energía según la ley de distribución de Bose-Einstein.

En el caso de los *fermiones*, se aplica el principio de exclusión de Pauli que permite, como máximo una partícula por estado cuántico. Ya que una posible distribución de partículas entre los estados cuánticos del  $i$ -ésimo nivel de energía del sistema se representa en la siguiente figura



donde  $i = 1, 2, \dots, n$  representa al  $i$ -ésimo nivel de energía, con energía  $\epsilon_i$ ,  $N_i$  es la población del  $i$ -ésimo estado, y  $g_i$  es la degeneración o número de estados con la misma energía. El número total de maneras de acomodar  $N_i$  partículas en el  $i$ -ésimo nivel se genera con  $g_i$  formas de seleccionar el punto en el que se debe insertar la primera partícula,  $g_i - 1$  formas de insertar la segunda ya que esta no puede ocupar el estado

cuántico anterior,  $g_i - 2$  formas de insertar la tercera y así sucesivamente. Es decir,

$$g_i(g_i - 1)(g_i - 2) \dots (g_i - N_i + 1) = \frac{g_i!}{(g_i - N_i)!}. \quad (9)$$

Como las partículas no se pueden distinguir entre sí en un arreglo, las  $N_i$  formas de permutarlas unas con otras y entre estados, no se consideran como permutaciones diferentes, por lo que el número real de formas independientes de lograr una distribución de  $N_i$  partículas en el  $i$ -ésimo nivel, se obtiene dividiendo (9) entre  $N_i!$  lo cual da

$$\frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} = \binom{g_i}{N_i},$$

El número total de formas independientes de lograr una distribución de  $(N_1, N_2, N_3, \dots, N_n)$  de partículas indistinguibles entre  $n$  niveles energéticos es sólo el producto de los factores individuales de la forma anterior sobre todos los niveles, esto es, la probabilidad  $W$  de la distribución total de partículas es el producto

$$W = \prod_{i=1}^n \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} = \prod_{i=1}^n \binom{g_i}{N_i},$$

tomando logaritmos en a ambos miembros de la igualdad y luego aplicando la fórmula de Stirling  $\ln n! \simeq n \ln n - n$  obtenemos

$$\ln W \simeq \sum_{i=1}^n [g_i \ln g_i - N_i \ln N_i - (g_i - N_i) \ln (g_i - N_i)].$$

La distribución  $\bar{N}_i$  más probable es aquella de probabilidad  $W$  máxima, o aquella que ante una pequeña variación  $\delta N_i$  en cualquiera de los  $N_i$  valores no altera el valor de  $W$ , entonces

$$\delta \ln (W_{\max}) = \sum_{i=1}^n [-\ln \bar{N}_i + \ln (g_i - \bar{N}_i)] \delta \bar{N}_i = 0.$$

Teniendo en cuenta la conservación del número de partículas y de la energía, al sumar

$$\begin{aligned}
 & -\alpha \sum_{i=1}^n \delta N_i = 0 \quad \text{y} \quad -\beta \sum_{i=1}^n \varepsilon_i \delta N_i = 0, \\
 \Rightarrow & \sum_{i=1}^n [-\ln \bar{N}_i + \ln (g_i - \bar{N}_i) - \alpha - \beta \varepsilon_i] \delta \bar{N}_i = 0.
 \end{aligned}$$

Como los  $\delta N_i$  son independientes entre sí, la cantidad entre paréntesis se debe anular para cada valor de  $i$ , por lo tanto,

$$\begin{aligned}
 \ln \frac{g_i - \bar{N}_i}{\bar{N}_i} - \alpha - \beta \varepsilon_i &= 0 \\
 \frac{g_i}{\bar{N}_i} - 1 &= e^{\alpha} e^{\beta \varepsilon_i} \\
 \Rightarrow \bar{N}_i &= \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\beta \varepsilon_i} + 1} \\
 \text{Como } \beta &= \frac{1}{k_B T} \\
 \Rightarrow \bar{N}_i &= g_i / (e^{\alpha} e^{\varepsilon_i / k_B T} + 1),
 \end{aligned}$$

haciendo  $\alpha \equiv \mu / k_B$  el parámetro adimensional, donde la energía  $\mu$  es el llamado “potencial químico”, tendremos

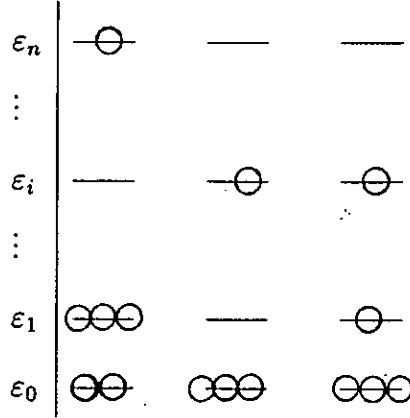
$$\boxed{f_{\text{FD}}(\varepsilon_i) \equiv \bar{N}_i / g_i = 1 / [e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1]} \quad (10)$$

mejor conocida como la función de distribución de Fermi-Dirac, que es el número promedio de partículas (de espín  $1/2$  ó  $-1/2$ ) con energía  $\varepsilon_i$ . Nótese que  $\mu(T)$  es el valor de la energía  $\varepsilon_i$  donde  $f$  vale  $1/2$ . En nuestro caso que tratamos con electrones  $g_i = 2$ , ya que hay dos posibles valores del espín en cada estado energético.

En el caso de *bosones*, estos no cuplen con el principio de exclusión de Pauli por lo que el número de formas posibles en que el estado de energía  $\varepsilon_i$ , con degeneración  $g_i$ , puede ser ocupado por  $N_i = 0, 1, \dots$ , está dado por  $(N_i + g_i - 1)!$  permutaciones posibles de las  $N_i$  partículas en  $g_i$  celdas. Como las partículas son indistinguibles cualquier intercambio



entre dos cualesquiera de ellas, o entre dos estados con la misma energía, no cambia la distribución por lo que las anteriores permutaciones habrá que dividir las entre  $N_i!(g_i - 1)!$  de tal forma que las diferentes distribuciones de las  $N_i$  partículas indistinguibles entre las  $g_i$  celdas es



Como las partículas son indistinguibles cualquier intercambio entre dos cualesquiera de ellas, o entre dos estados con la misma energía, no cambia la distribución por lo que las anteriores permutaciones habrá que dividir las entre  $N_i!(g_i - 1)!$  de tal forma que las diferentes distribuciones de las  $N_i$  partículas indistinguibles entre las  $g_i$  celdas es

$$\frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i!(g_i - 1)!} = \binom{N_i + g_i - 1}{N_i}.$$

La probabilidad  $W$  de la distribución total de  $N$  partículas es el producto de las diferentes distribuciones de partículas entre los estados de cada energía:

$$W = \prod_{i=1}^n \frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i!(g_i - 1)!} = \prod_{i=1}^n \binom{N_i + g_i - 1}{N_i}.$$

Suponiendo  $(N_i + g_i) \gg 1$  de modo que podemos sustituir  $(N_i + g_i - 1)$  por  $(N_i + g_i)$ , y después de aplicar logaritmos y la fórmula de Stirling, la expresión anterior se transforma en

$$\ln W \simeq \sum_{i=1}^n [(N_i + g_i) \ln(N_i + g_i) - N_i \ln N_i - (g_i - 1) \ln(g_i - 1)],$$

donde el valor de  $W$  no se altera si la variación de  $\delta_{N_i}$  en cualquiera de los  $N_i$  valores es pequeña. Si  $\ln W$  varía en  $\delta \ln W$  al variar  $N_i$  en  $\delta_{N_i}$ :

$$\Rightarrow \delta(\ln W_{\text{máx}}) = \sum_{i=1}^n [\ln(\bar{N}_i + g_i) - \ln \bar{N}_i] \delta_{\bar{N}_i} = 0$$

Utilizando  $\delta \ln N = \frac{1}{N} \delta N$ , e incorporando la conservación de partículas y de energía

$$\sum_{i=1}^n \delta_{N_i} = 0, \quad \sum_{i=1}^n \varepsilon_i \delta_{N_i} = 0,$$

que multiplicadas por  $-\alpha$  y  $-\beta$  respectivamente, al sumarlas se obtiene

$$\sum_{i=1}^n [\ln(\bar{N}_i + g_i) - \ln \bar{N}_i - \alpha - \beta \varepsilon_i] \delta_{\bar{N}_i} = 0,$$

donde las  $\delta_{N_i}$  son independientes, para cada valor de  $i$  el término entre corchetes desaparece, entonces,

$$\begin{aligned} \ln \frac{\bar{N}_i + g_i}{\bar{N}_i} - \alpha - \beta \varepsilon_i &= 0 \\ 1 + \frac{g_i}{\bar{N}_i} &= e^\alpha e^{\beta \varepsilon_i} \\ \Rightarrow \bar{N}_i &= \frac{g_i}{e^\alpha e^{\beta \varepsilon_i} - 1}. \end{aligned}$$

Finalmente, sustituyendo  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  y  $\alpha \equiv \mu_B(T)/k_B T$ , en la expresión anterior, donde  $\mu_B(T)$  es el potencial químico bosónico, obtenemos la función de distribución de Bose-Einstein

$$f_{\text{BE}}(\varepsilon_i) \equiv \bar{N}_i/g_i = 1/[e^{\beta(\varepsilon_i - \mu_B)} - 1]. \quad (11)$$

Para obtener la energía de  $N$ -electrones en un volumen  $V$  sumaremos las energías de todos los niveles monoeléctricos ocupados. A  $T = 0$ , los niveles monoeléctricos se ocupan de manera ordenada y completa hasta el último electrón que ocupa el nivel de energía más alto conocido como nivel de Fermi. Así

$$E = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (12)$$

Para realizar la suma anterior recurramos a la aproximación siguiente. Como tenemos  $\mathbf{k}$  valores en un volumen  $V$  del espacio  $k$  al sumar cualquier función lisa, que denotamos como  $F(\mathbf{k})$  con la condición de que no varíe su distancia en el orden de  $2\pi/L$ , la podemos reescribir como

$$\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{V}{8\pi^3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \Delta\mathbf{k},$$

donde  $\Delta\mathbf{k} = 8\pi^3/V$ . Cuando  $\Delta\mathbf{k} \rightarrow 0$  está suma  $\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \Delta\mathbf{k}$  se aproxima a la integral  $\int F(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$ , es decir

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{8\pi^3} F(\mathbf{k}).$$

Aplicando las expresiones anteriores a la suma de la ecuación (12) obtenemos la densidad de energía en el gas de electrones como

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} dk = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m},$$

o bien

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} E_F \quad \text{donde} \quad E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m},$$

donde se usó la relación (8).

### 2.3 Densidad de estados en 3D.

El volumen de una celda unitaria en el espacio de cantidad de movimiento de un electrón con sus dos estados permitidos correspondientes a las dos posibles orientaciones que el espín posee, es decir,  $\pm \frac{1}{2}$ , de un solo estado cuántico del sistema que se denota como

$$V_p = \frac{1}{2} \frac{h^3}{V},$$

y si además consideramos un sistema de tamaño microscópico, entonces los valores de energía permitidos y la cantidad de movimiento estarán distribuidos de una forma continua en el espacio de cantidad de movimiento. Calculemos ahora todos los niveles de energía entre  $\varepsilon$  y  $\varepsilon + d\varepsilon$  en el espacio de cantidad de movimiento, donde la relación de dispersión entre  $\varepsilon$  y  $p$ , es  $\varepsilon = p^2/2m$ . Así, una superficie de energía  $\varepsilon$ , en el espacio de cantidad de movimiento, es una esfera de radio

$$p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2} = \sqrt{2m\varepsilon}.$$

Como conocemos el volumen en el espacio de cantidad de movimiento por estados, calculemos primero el número de estados en el elemento de volumen  $dV_p$  entre  $p$  y  $p + dp$ .

$$dV_p = 4\pi p^2 dp \Rightarrow g'(p)dp \equiv \frac{dV_p}{V_p} = \frac{8\pi p^2 V dp}{h^3}.$$

Con la ayuda de la relación de dispersión estas identidades las podemos reescribir en términos de la energía  $\varepsilon$ :

$$dV_\varepsilon = 4\pi(2m\varepsilon)^{\frac{1}{2}} m d\varepsilon \Rightarrow g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{dV_\varepsilon}{V_\varepsilon} = \frac{8\sqrt{2}\pi V}{h^3} m^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon,$$

donde la función  $g(\varepsilon)$  se conoce como la *densidad de estados* la cual representa el número de estados por unidad de energía, tal que  $g(\varepsilon)d\varepsilon$  es el número de estados entre  $\varepsilon$  y  $\varepsilon + d\varepsilon$ . Nótese que el número de partículas del sistema cuya energía está dentro del rango  $d\varepsilon$  alrededor de  $\varepsilon$  está dado por

$$N(\varepsilon)d\varepsilon = f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon$$

donde  $f(\varepsilon)$  es la función de distribución de Fermi-Dirac, que es el número promedio de fermiones en el estado de energía  $\varepsilon$ , es decir

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}. \quad (13)$$

## Capítulo 3

# Los Bosones

### 3.1 Pares de Cooper con $K > 0$ , a $T > 0$ .

La superconductividad clásica ha sido explicada por la teoría de Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS), donde la idea central es el hecho de que los electrones puedan aparearse formando entes conocidos como pares de Cooper, con la propiedad de moverse libremente en el material superconductor. Estas parejas de electrones apareados, pueden tener momento de centro de masa cero o diferente de cero.

En un superconductor, el número de pares de Cooper está condicionado por el número de electrones que tienen la posibilidad de aparearse. Estos electrones son los que se encuentran en un intervalo de energía (o momento) alrededor del nivel de Fermi. El tamaño del intervalo depende de la interacción que genera el amarre entre los electrones.

En la teoría BCS la interacción atractiva entre un par de electrones es resultado de la suma de dos interacciones: la repulsión coulombiana y la atracción fonón-electrón. Este mecanismo dinámico explica la resistencia nula en un superconductor en donde un fonón de energía máxima  $\hbar\omega_D$  es transferido entre los electrones que forma el par;  $\omega_D$  es la máxima frecuencia de oscilación de la red iónica del material, o frecuencia de Debye. En la figura 2, se muestra el diagrama de Feynmann con el que se representa la interacción entre un par de electrones al intercambiar un fonón. Esta interacción modelo BCS se representa en el espacio de momentos por la sencilla relación matemática

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{si } E_F < \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}'} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{otro caso,} \end{cases} \quad (14)$$

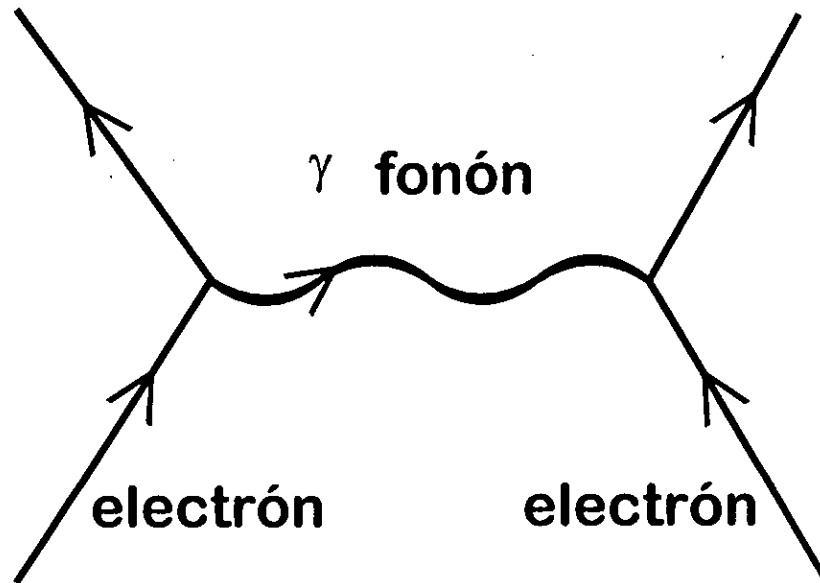


Figura 2: Diagrama llamado de Feynmann que permite representar la interacción atractiva entre dos electrones en una red iónica en vibración (a través del intercambio virtual de un fonón, que constituye la interacción electrón-fonón de Fröhlich).

donde  $V > 0$  mide la intensidad de la fuerza de atracción neta entre el par cuando los electrones que intervienen tienen energías relativas  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  y  $\varepsilon_{\mathbf{k}'}$ , dentro de un intervalo  $\hbar\omega_D$  alrededor de la energía de Fermi  $E_F$ .

El número de pares,  $N_K$ , con una  $K$  determinada es proporcional a

$$N_K \propto V_K \equiv \int d\mathbf{k} n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_2}, \quad (15)$$

esto es, a la probabilidad de que un electrón con vector de onda  $\mathbf{k}_1$  coincida con un segundo electrón con vector de onda  $\mathbf{k}_2$ , en cierta región del espacio de momentos relativos  $\hbar\mathbf{k}$  que satisfaga la interacción (14). De esta forma, las magnitudes de los vectores  $\mathbf{k}_1$  y  $\mathbf{k}_2$ , estarán dentro del intervalo  $[k_F, k_F\sqrt{1+\nu}]$  con  $\nu = \hbar\omega_D/E_F = \Theta_D/T_F$ , que forman cascarones de grueso  $\hbar\omega_D$  alrededor de la energía de Fermi. Además  $\mathbf{k}_1$  y  $\mathbf{k}_2$  deben satisfacer las relaciones

$$\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$$

$$\mathbf{k} \equiv (1/2)(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2),$$

con  $\hbar\mathbf{K}$  el momento total del par, y  $\hbar\mathbf{k}$  su momento relativo, figura 3. Si pensamos que cada uno de los electrones con la posibilidad de formar un par tiene su propio cascarón de niveles de energía disponibles para estar, se formarán pares sólo en la zona de coincidencia de ambos cascarones y la separación de los centros de éstos es igual a la magnitud de  $K$ . En otras palabras, los pares con momento total  $\hbar\mathbf{K} = 0$  son aquellos formados por todos los electrones que se encuentran en la franja de energía  $\hbar\omega_D$  alrededor de la energía de Fermi. El número se determina cuando fijamos la densidad de estados y la distribución de electrones por nivel, esto es, la distribución de Fermi-Dirac. Los pares con momento  $\hbar\mathbf{K} > 0$ , serán aquellos formados por los electrones que se encuentran en el traslape de

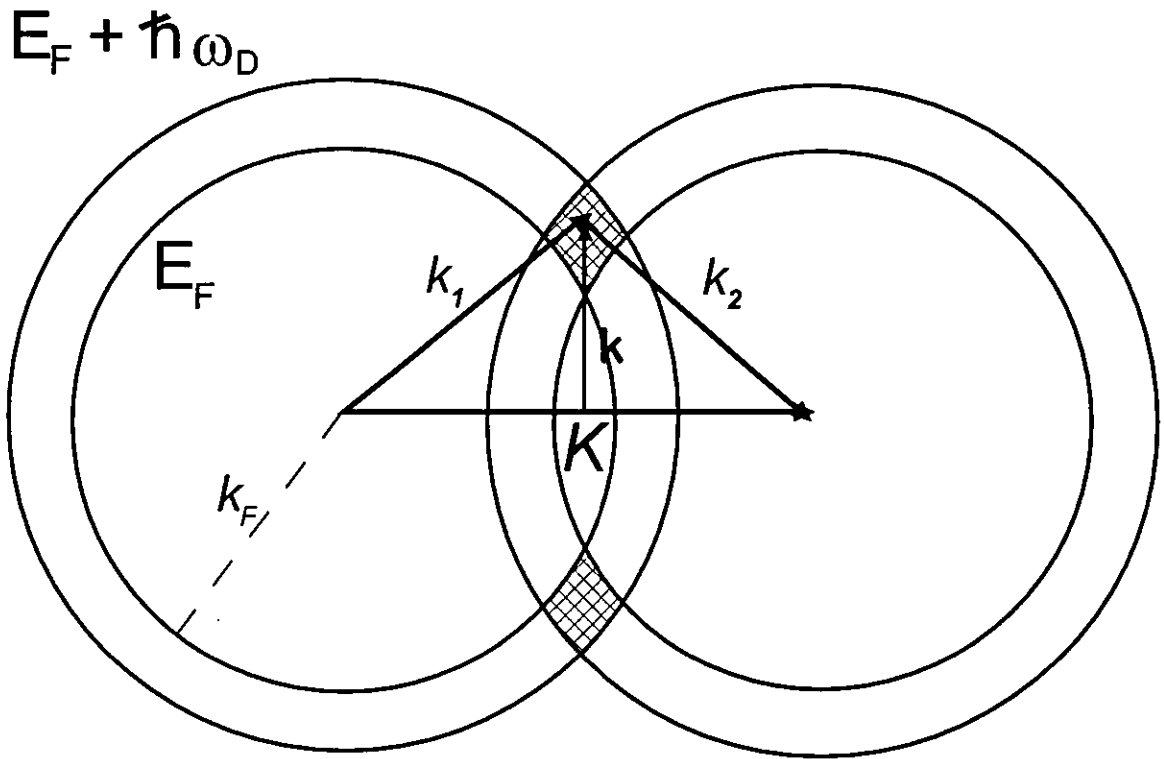


Figura 3: Corte transversal del volumen de traslape (cuadriculado) de dos cascarones esféricos de grueso  $\hbar\omega_D$ , cuyos centros están separados una distancia igual a la magnitud del vector de onda total  $K$  del par. El par asociado interactúa vía el modelo de interacción BCS.



dos cascarones esféricos de grueso  $\hbar\omega_D$ , de radio interno  $k_F$  y centros separados por una distancia igual a la magnitud de  $K$ . En el espacio de momentos, la función de distribución de Fermi-Dirac es el número promedio de electrones (con un espín) en el estado  $k$ , y está representada por

$$n_k = \frac{1}{e^{(\hbar^2 k^2 / 2m - \mu) / k_B T} + 1} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \theta(E_F - \hbar^2 k^2 / 2m), \quad (16)$$

donde  $\mu$  es el potencial químico fermiónico, es decir, el valor de la energía  $\varepsilon_k \equiv \hbar^2 k^2 / 2m$  donde la distribución fermiónica  $n_k$  vale exactamente 1/2 y  $\theta$  es la función escalonada de Heaviside, definida como

$$\theta(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon > 0 \\ 0 & \varepsilon < 0. \end{cases}$$

Notamos que  $\mu(T) \xrightarrow{T \rightarrow 0} E_F$ . En la figura 4 se grafica la función de distribución de Fermi-Dirac para varias  $T > 0$  como función del número de onda  $k$ . Aquí aproximamos la distribución de Fermi a  $T > 0$  por la correspondiente a temperatura cero pero trasladada  $\hbar\omega_D$ , esto es, una función escalón,

$$n_k^0 = \begin{cases} 1 & \text{si } \varepsilon_k < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{si } \varepsilon_k > E_F + \hbar\omega_D. \end{cases}$$

Esta aproximación se muestra en la figura 4, con línea gruesa, como un escalón. Si consideráramos la correcta función de distribución a  $T > 0$ , el potencial químico  $\mu$  ocuparía el lugar de la energía de Fermi y la función de distribución caería rápido, pero suavemente, alrededor de  $\mu$ , de tal forma que la probabilidad de que el nivel  $\mu$  esté ocupado es 1/2. Hemos iniciado los correspondientes cálculos con la función de distribución correcta y hemos notado un aumento desproporcionado de la labor y a la vez sólo cambios ligeros respecto a los resultados que reportamos aquí.

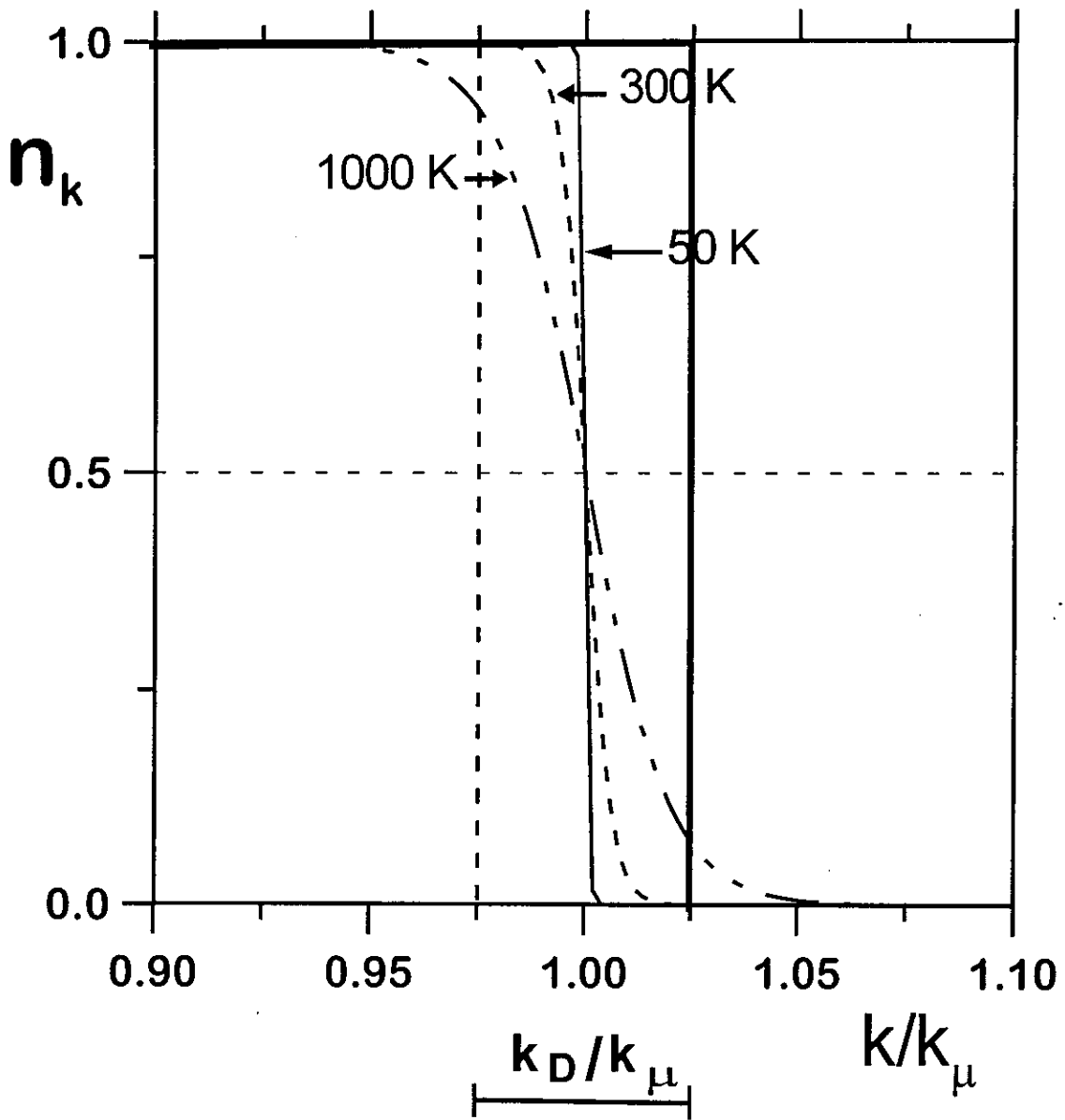


Figura 4: Función de distribución de Fermi-Dirac (FDFD) para diferentes  $T$ , como función del número de onda  $k$  normalizado al número de onda  $k_\mu$  asociado al potencial químico  $\mu$ . La función escalón (línea gruesa) es la aproximación a la FDFD usada en los cálculos.

Estamos interesados en calcular la razón del número de pares con  $K > 0$  respecto al de pares con  $K = 0$ . Sustituyendo en la ecuación (16) a  $T = 0$  en (15) la integral se transforma en

$$V_K = \int dk \theta(|\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}| - k_F) \theta(|\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}| - k_F) \theta(\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - |\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}|) \theta(|\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}| - \sqrt{k_F^2 + k_D^2}), \quad (17)$$

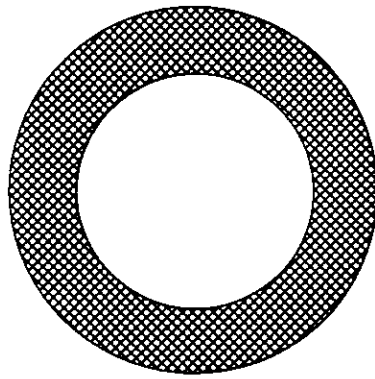
que es una simple integración del volumen de traslape de los dos cascarones. Como el número de pares con  $K = 0$  ó  $K > 0$  es proporcional al volumen del traslape de los correspondientes cascarones, la razón de los números de pares será igual al cociente de los volúmenes, es decir,  $N_K/N_0 = V_K/V_0$ . Las topologías de los volúmenes que se generan al separar un cascarón respecto al otro dependen de la magnitud del vector  $\mathbf{K}$ , que en la figura 3 representa la separación de los centros de los cascarones. Estas topologías se muestran en la figura 5 con zonas sombreadas las cuales enumeramos y denominamos de la siguiente forma:

- i) Cascarón esférico,
- ii) Cascarón no esférico,
- iii) Anillo con sección transversal rómbica,
- iv) Daga doble,
- v) Lente doblemente convexo.

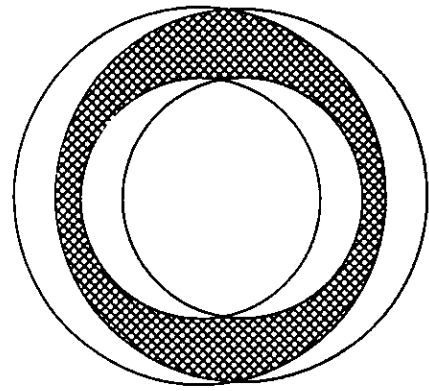
A continuación calculamos la fracción de pares de electrones, como el cociente de los volúmenes de traslape, en función de  $K$ , para 3D y en el apéndice, resumimos los análogos resultados para 2D.

### 3.2 Fracciones de pares de Cooper en tres dimensiones.

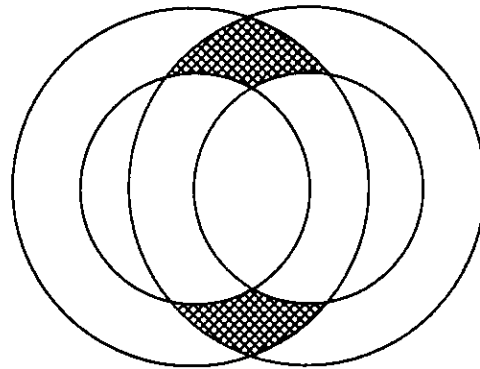
Aquí calculamos el volumen del traslape de dos cascarones de ancho  $\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - k_F$



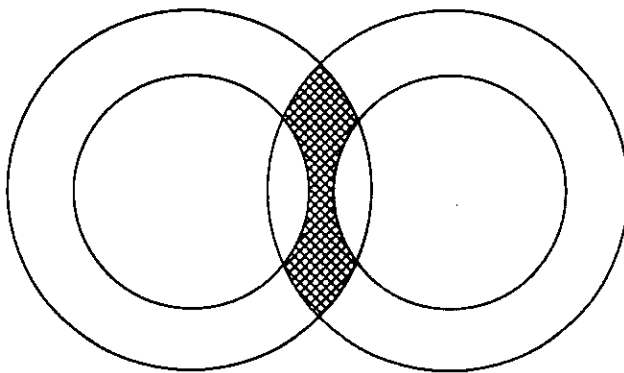
i) Cascarón esférico



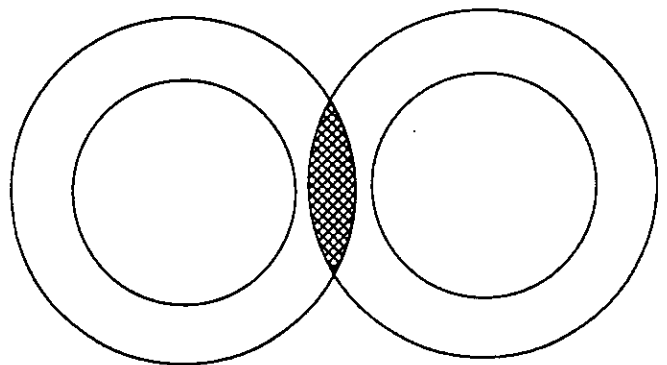
ii) Cascarón no esférico



iii) Anillo con sección transversal rómbica



iv) Daga Doble



v) Lente doblemente convexo

Figura 5: Topologías de los volúmenes de traslape de dos cascarones esféricos, que se generan dependiendo de la magnitud del vector  $\mathbf{K}$ .

de radios iguales cuyos centros  $C_1$  y  $C_2$  están separados una distancia  $K$ .

Consideremos un par de cascarones esféricos de grueso  $\hbar\omega_D$ , cuyos centros están separados una distancia  $K = |\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2|$ , con  $\mathbf{k}_1$  el vector de onda del primer electrón y  $\mathbf{k}_2$ , el vector de onda del segundo electrón, los cuales se aparean para formar el par de Cooper. Como mencionamos arriba, el número de pares será proporcional al volumen de traslape de los dos cascarones. Dada la simetría de este volumen, encontramos conveniente utilizar coordenadas cilíndricas para realizar el cálculo, ver figura 6.

En el espacio de coordenadas cartesianas podemos describir a un punto  $(x, y, z)$  como la intersección de tres planos mutuamente perpendiculares tal que  $x, y, z = \text{constante}$  o en coordenadas cilíndricas como la intersección de tres nuevas superficies: Cilindros circulares rectos teniendo al eje  $z$  como eje común

$$\rho = (x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}} = \text{constante};$$

medios planos que contienen al eje  $z$

$$\varphi = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) = \text{constante};$$

planos paralelos al plano  $xy$ , como en el sistema cartesiano

$$z = \text{constante}.$$

Con intervalos de variación

$$0 \leq \rho < \infty, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi \quad \text{y} \quad -\infty \leq z \leq \infty,$$

donde  $\rho$  es perpendicular al eje  $z$ .

Al invertir las ecuaciones precedentes para  $\rho, \varphi$  y  $z$  se obtienen las relaciones de la transformación

$$x = \rho \cos \varphi,$$

$$y = \rho \operatorname{sen} \varphi,$$

$$z = z.$$

Esto es esencialmente un sistema bidimensional de coordenadas polares circulares con el eje  $z$  cartesiano añadido para formar un sistema tridimensional. Es así como el punto  $(x, y, z)$  es reemplazado por  $(\rho, \varphi, z)$ . A cada superficie le podemos asociar un vector unitario normal, que representamos por  $(\hat{\rho}, \hat{\varphi}, \hat{k})$ , tal que  $\hat{\rho}$  es normal a la superficie cilíndrica en la dirección creciente al radio  $\rho$ . El vector unitario  $\hat{\varphi}$  es tangencial a la superficie del cilindro, perpendicular a la mitad del plano  $\varphi = \text{constante}$  y apunta en la dirección creciente del ángulo azimutal  $\varphi$ ; el vector  $\hat{k}$  es el usual vector unitario cartesiano. En estas coordenadas el elemento de volumen es  $dk = \rho d\rho d\varphi dz$ , el cual será sustituido, junto con la función de distribución (16) en (15).

Para efecto de trabajar con variables adimensionales y normalizadas hacemos las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned} \kappa &\equiv K/(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2}), & \nu &\equiv k_D^2/k_F^2, \\ \kappa_1 &= (1/2)(1 - 1/\sqrt{1 + \nu}), & \kappa_2 &= 1/\sqrt{1 + \nu}, & \kappa_3 &= (1/2)(1 + 1/\sqrt{1 + \nu}), \end{aligned}$$

donde  $\kappa$  es el valor del vector de onda total del par normalizado con el valor máximo que puede adquirir éste. Los valores  $\kappa_1, \kappa_2$  y  $\kappa_3$ , marcan las fronteras entre una y otra topología.  $\nu$  es el cociente de energía de Debye entre la energía de Fermi.

Caso i) *Cascarón esférico.*

Sean  $C_1$  y  $C_2$  los centros de los dos cascarones esféricos de ancho  $\hbar\omega_D$  situados en el origen de nuestro sistema de coordenadas cuando el número de onda del centro de masa del par

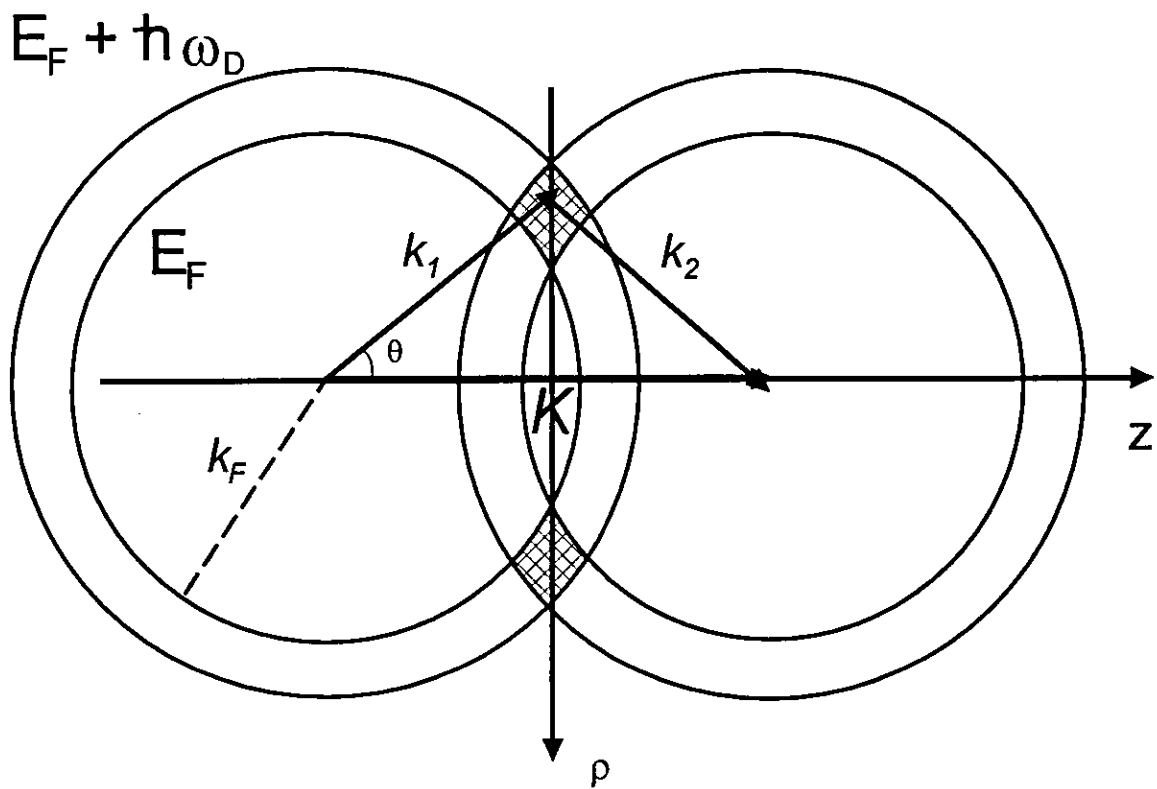


Figura 6: Sistema de coordenadas cilíndricas  $(\rho, \varphi, z)$  usadas para calcular el volumen de traslape (zona cuadrículada).

es  $K = 0$  ó  $\kappa = 0$ . La resultante  $K = 0$  implica que los vectores de onda de los electrones individuales satisfacen  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$  por lo que los electrones del par se encuentran en un cascarón esférico con radio interno  $k_F$  y radio externo  $\sqrt{k_F^2 + k_D^2}$ , equidistantes del centro y diametralmente opuestos. El volumen de traslape definido por la integral (17), considera a todos los electrones del espacio  $k$  contenido dentro de la región antes mencionada y es igual a

$$V_0 \equiv V_i = (4\pi/3) k_F^3 \left[ (1 + \nu)^{\frac{3}{2}} - 1 \right].$$

En los casos, en que  $K > 0$ , consideraremos que el vector de onda  $\mathbf{k}_1$  estará en el cascarón de centro  $C_1$ , y el vector de onda  $\mathbf{k}_2$  en el cascarón de centro  $C_2$ , separados una distancia  $K$ , coincidiendo sólo en el volumen de traslape de los dos cascarones.

Caso ii) *Cascarón no esférico.*

Para esta topología generada por el traslape, el número de onda del centro de masa  $K$  o la correspondiente magnitud normalizada  $\kappa$ , tomará valores en el intervalo

$$0 < K < k_F (\sqrt{1 + \nu} - 1)$$

$$\text{ó} \quad 0 < \kappa < (1/2)(1 - 1/\sqrt{1 + \nu}).$$

Una vez definido el intervalo se obtiene el volumen correspondiente. Los centros  $C_1$  y  $C_2$  de los cascarones se colocan separados una distancia  $K > 0$ , sobre el eje  $z$ , y equidistantes del origen. La integral (17) se transforma en

$$V_{ii}(K) = 2 \int_0^{k_F + K/2} dz \int_{\sqrt{k_F^2 - (z - K/2)^2}}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi,$$

$$+ 2 \int_{k_F + K/2}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - K/2}} dz \int_0^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi$$



de donde se obtiene el volumen de traslape como función de  $\kappa$  y  $\nu$

$$V_{ii}(\kappa) = (4\pi/3) k_F^3 \left\{ (1+\nu)^{\frac{3}{2}} [1 - (1+\nu)^{-\frac{3}{2}} + \kappa^3 - (3/2) \kappa (2+\nu)/(1+\nu)] \right\}. \quad (18)$$

Al evaluar (18) en los extremos del intervalo en que  $\kappa$  varía, obtenemos que  $V_{ii}(0) = V_i(0) = V_0$  y  $V_{ii}(\kappa_1) = V_{ii}(\kappa_1)$ , donde

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow 0} V_{ii}(\kappa) &= (4\pi/3) k_F^3 \left[ (1+\nu)^{\frac{3}{2}} - 1 \right] \\ \lim_{\kappa \rightarrow \kappa_1} V_{ii}(\kappa) &= (4\pi/3) k_F^3 \left[ (3/8) \nu^2 / (\sqrt{1+\nu} - 1) \right]. \end{aligned}$$

La fracción de pares de electrones con  $K > 0$  con respecto a  $K = 0$ , dentro de este intervalo de  $K$ , se obtiene dividiendo  $V_{ii}$  entre  $V_0$ ,

$$\begin{aligned} V_{ii}(\kappa)/V_0 &= \left( 1 / [(1+\nu)^{\frac{3}{2}} - 1] \right) \left[ - (3/2) \kappa \sqrt{1+\nu} (2+\nu) \right. \\ &\quad \left. + (1+\nu)^{\frac{3}{2}} + \kappa^3 (1+\nu)^{\frac{3}{2}} - 1 \right]. \end{aligned}$$

Como se quiere saber en que tanto por ciento difiere el número de pares con  $K$  alrededor de  $K = 0$ , respecto a los pares con  $K = 0$ , se desarrolla la expresión anterior en términos de  $\kappa$ , alrededor de cero. La figura 11 es una ampliación de la figura 7 donde se muestra el comportamiento de los primeros tres términos del desarrollo

$$\begin{aligned} V_{ii}(\kappa)/V_0 &\simeq 1 - [((3/2)\sqrt{1+\nu}(2+\nu))/((1+\nu)^{\frac{3}{2}} - 1)]\kappa \\ &\quad + [(1+\nu)^{\frac{3}{2}}/((1+\nu)^{\frac{3}{2}} - 1)]\kappa^3. \end{aligned}$$

Caso iii) *Anillo con sección transversal rómbica.*

En este caso la topología está generada por la variación de la magnitud  $K$  en el intervalo

$$k_F (\sqrt{1+\nu} - 1) < K < 2k_F$$

$$\text{ó} \quad (1/2) (1 - 1/\sqrt{1+\nu}) < \kappa < 1/\sqrt{1+\nu}.$$

El volumen asociado a los pares con momento dentro de este intervalo se obtiene por medio de una sola integral

$$V_{iii}(K) = 2 \int_0^{(\nu k_F)/(4\kappa\sqrt{1+\nu})} dz \int_{\sqrt{k_F^2 - (z-K/2)^2}}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z+K/2)^2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

Después de realizar la integral y poner el volumen en términos de  $\kappa$ , nos queda

$$V_{iii}(\kappa) = (4\pi/3) k_F^3 \left[ (3/16) \nu^2 / (\kappa \sqrt{1+\nu}) \right]. \quad (19)$$

Al evaluar (19) en los extremos en que  $\kappa = \kappa_1$  y  $\kappa = \kappa_2$ , confirmamos que  $V_{iii}(\kappa_1) = V_{ii}(\kappa_1)$  y  $V_{iii}(\kappa_2) = V_{iv}(\kappa_2)$ , cuando hacemos los siguientes límites

$$\lim_{\kappa \rightarrow \kappa_1} V_{iii}(\kappa) = (4\pi/3) k_F^3 \left[ (3/8) \nu^2 / (\sqrt{1+\nu} - 1) \right]$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow \kappa_2} V_{iii}(\kappa) = (4\pi/3) k_F^3 \left[ (3/16) \nu^2 \right],$$

y la fracción de pares está dada por

$$V_{iii}(\kappa)/V_0 = 1/[(1+\nu)^{3/2} - 1] \left[ (3/16) (\nu^2) / (\kappa \sqrt{1+\nu}) \right].$$

Caso iv) *Daga doble.*

El volumen de traslape que se genera al variar la magnitud de  $K$  dentro del intervalo

$$2k_F < K < k_F (\sqrt{1+\nu} + 1)$$

$$\text{ó} \quad 1/\sqrt{1+\nu} < \kappa < (1/2) (1 + 1/\sqrt{1+\nu}),$$

tiene una sección transversal en forma de doble daga. Para obtener el volumen asociado se requiere realizar dos integrales. Similarmente como en los casos anteriores

$$V_{iv}(K) = 2 \int_0^{K/2 - k_F} dz \int_0^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z+K/2)^2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$+ 2 \int_{K/2 - k_F}^{(\nu k_F)/(4\kappa\sqrt{1+\nu})} dz \int_{\sqrt{k_F^2 - (z - K/2)^2}}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi,$$

$$\begin{aligned} \text{ó} \quad V_{iv}(\kappa) &= (4\pi/3) k_F^3 \left[ -1 + (3/16) \nu^2 / (\kappa\sqrt{1+\nu}) + (3/2) \kappa\sqrt{1+\nu} \right. \\ &\quad \left. - (1/2) (1+\nu)^{\frac{3}{2}} \kappa^3 \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Si evaluamos (20) en los extremos del intervalo en que varía  $\kappa$ , confirmamos que,  $V_{iv}(\kappa_2) = V_{iii}(\kappa_2)$  y  $V_{iv}(\kappa_3) = V_v(\kappa_3)$ , comprobándose que el volumen como función de  $\kappa$  es una función continua.

$$\lim_{\kappa \rightarrow \kappa_2} V_{iv}(\kappa) = (4\pi/3) k_F^3 [(3/16) \nu^2],$$

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow \kappa_3} V_{iv}(\kappa) &= (4\pi/3) k_F^3 \left[ (\sqrt{1+\nu} - 3\nu(1 + \sqrt{1+\nu}) - (1+\nu)^{\frac{3}{2}} \right. \\ &\quad \left. + 7\nu + 5\nu^2) / (16(\sqrt{1+\nu} + 1)) \right]. \end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} V_{iv}(\kappa)/V_0 &= 1 / (16[(1+\nu)^{\frac{3}{2}} - 1]) \left[ -16 + 3\nu^2 / (\kappa\sqrt{1+\nu}) \right. \\ &\quad \left. + 24\kappa\sqrt{1+\nu} - 8(1+\nu)^{\frac{3}{2}} \kappa^3 \right]. \end{aligned}$$

Caso v) *Lente doblemente convexo.*

Los pares que pueden formarse cuando

$$k_F(\sqrt{1+\nu} + 1) < K < 2k_F\sqrt{1+\nu}$$

$$\text{ó} \quad (1/2)(1 + 1/\sqrt{1+\nu}) < \kappa < 1,$$

son aquellos cuyos electrones individuales tienen momentos casi colineales. El número de pares de este tipo será proporcional, en el espacio de momentos, al volumen de una lente

doblemente convexa,

$$V_v(K) = 2 \int_0^{\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - K/2} dz \int_0^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi,$$

$$\text{ó} \quad V_v(\kappa) = (4\pi/3) k_F^3 (1 + \nu)^{\frac{3}{2}} \left[ 1 - (3/2) \kappa + (1/2) \kappa^3 \right]. \quad (21)$$

Evaluando (21) en el extremo  $\kappa_3$  se obtiene que  $V_v(\kappa_3) = V_{iv}(\kappa_3)$ , es continua

$$\lim_{\kappa \rightarrow \kappa_3} V_v(\kappa) = (4\pi/3) k_F^3 \left[ (\sqrt{1 + \nu} - 3\nu(1 + \sqrt{1 + \nu}) - (1 + \nu)^{\frac{3}{2}} \right. \\ \left. 7\nu + 5\nu^2 \right] / (16(\sqrt{1 + \nu} + 1)),$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 1} V_v(\kappa) = 0.$$

La fracción de pares de electrones es

$$V_v(\kappa)/V_0 = 1/(2[(1 + \nu)^{\frac{3}{2}} - 1]) \left[ (1 + \nu)^{\frac{3}{2}} (-\kappa + 1)^2 (\kappa + 2) \right].$$

En el caso en que  $\kappa \geq 1$ , los dos cascarones serán tangentes y  $V(\kappa) = 0$  confirma lo esperado.

En el Apéndice reportamos los resultados análogos para 2D.

En la siguiente tabla se dan los tres valores de  $\kappa$ , en las fronteras de separación de los cinco intervalos de variación  $\kappa$  que generan las diferentes topologías de los volúmenes de traslape mencionadas, para cada uno de los valores de  $\nu = k_D^2/k_F^2$  mostrados.

$\nu$	$\kappa_1$	$\kappa_2$	$\kappa_3$
1	0.1464	0.7071	0.8535
$10^{-1}$	0.0233	0.9535	0.9767
$10^{-2}$	0.0025	0.9950	0.9975
$10^{-3}$	0.0002	0.9995	0.9997

## Capítulo 4

### Resultados y conclusiones.

Las fracciones de los pares de electrones con  $K > 0$  respecto a los pares con  $K = 0$ ,  $V_K/V_0$ , como función de  $\kappa \equiv K/(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2})$ , para los diferentes intervalos de  $\kappa$ , se resumen en la figura 7, para cada uno de los valores de  $\nu$  allí mostrados.

De inmediato podemos confirmar y asegurar la existencia de pares de electrones con momento total mayor que cero. La fracción  $V_K/V_0$  disminuye desde la unidad hasta cero conforme  $K$  aumenta desde  $K = 0$  hasta el máximo valor posible  $K = 2k_F\sqrt{1 + \nu}$ . Es decir, la distribución de los pares es máxima alrededor de  $K = 0$  y el número de pares con  $K > 0$  decae monotómicamente con  $K$ . Este decaimiento es más pronunciado conforme  $\nu$  disminuye. No obstante, el número de pares con una  $K$  dentro del intervalo  $0 < \kappa \equiv K/(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2}) < 10^{-4}$  es mayor que el 90% del número de pares en  $K = 0$ , para  $\nu > 0.005$  como las de los superconductores de alta  $T_c$ . Lo anterior se muestra en la figura 11, donde graficamos  $V_K/V_0$  en el intervalo  $10^{-7} < \kappa \equiv K/(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2}) < 10^{-3}$ . ¿Cuánto más importantes son los pares que se encuentran en el estado  $K = 0$  respecto a los que se encuentran con una  $K$  dentro del intervalo antes mencionado? La respuesta dependerá de la propiedad en cuestión. Para efecto de considerar la superconductividad como una condensación de Bose-Einstein, es fundamental la existencia de bosones con  $K > 0$ , aun por arriba de la temperatura crítica.

Los anteriores resultados han sido observados en 3D, sin embargo, similares resultados se obtienen en 2D y 1D, como se puede desprender de la figura 10, donde comparamos las correspondientes fracciones de pares en 3D, 2D, y 1D, para el valor de  $\nu = 1$ .

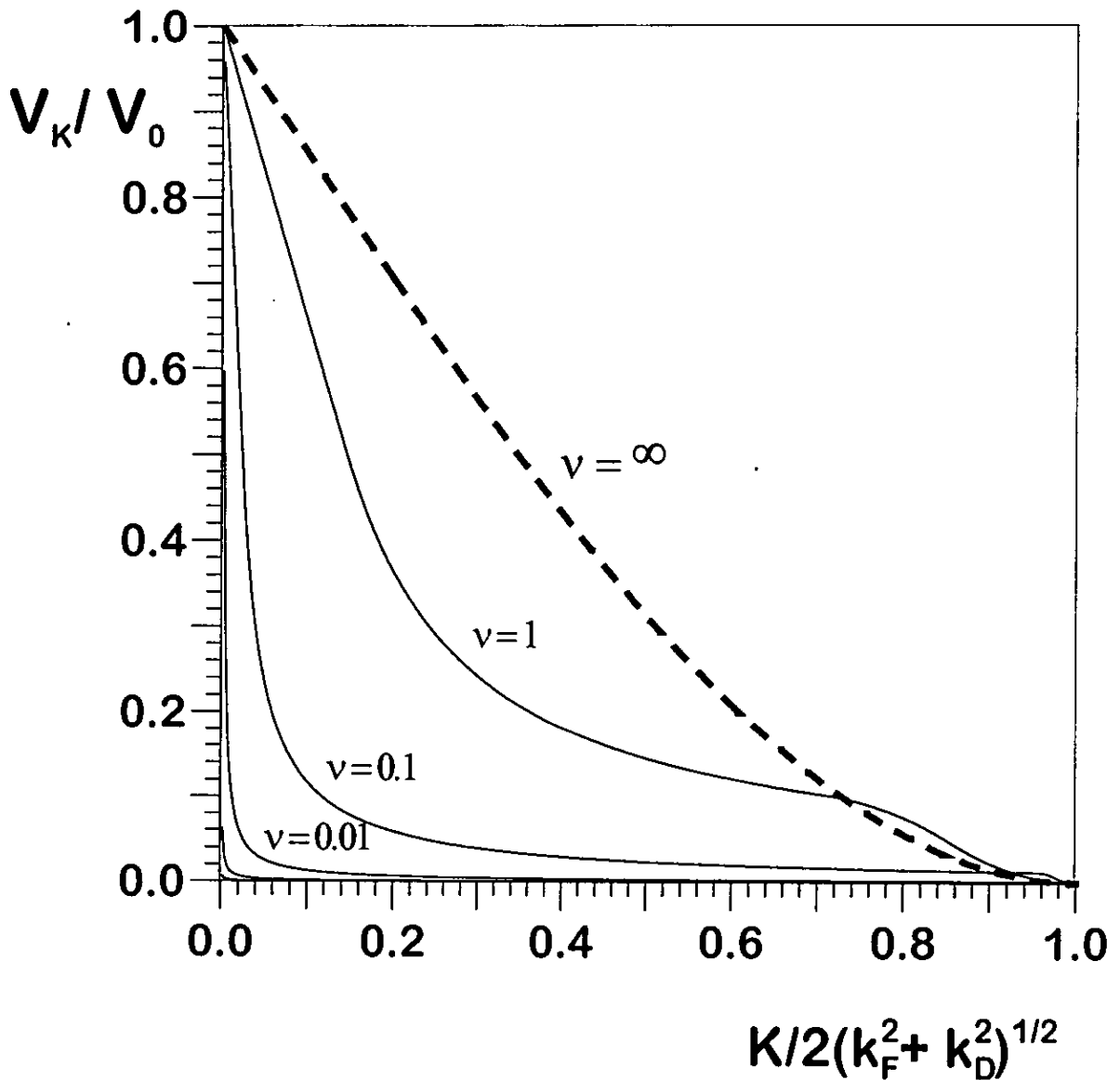


Figura 7: Fracción de pares de electrones con momento total mayor que cero  $\hbar\mathbf{K} > 0$  respecto a los pares con  $\hbar\mathbf{K} = 0$ , en 3D y para varios valores de  $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F \equiv \Theta_D/T_F = k_D^2/k_F^2$ :  $\nu = 10^{-3}$  para superconductores convencionales;  $0.03 \leq \nu \leq 0.07$  para cupratos; y el límite  $\nu = \infty$  se refiere al volumen de traslape de dos esferas sólidas.

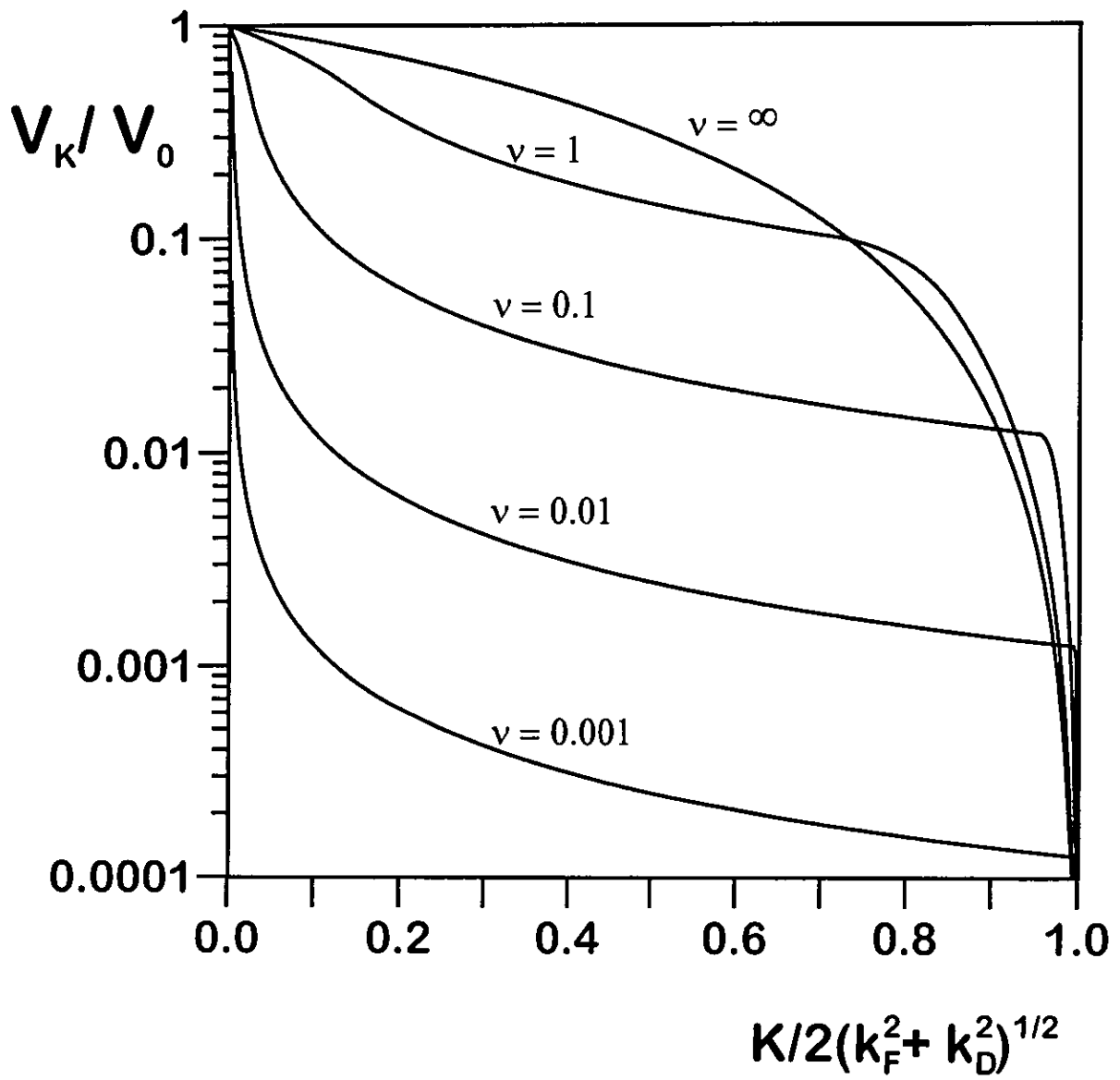


Figura 8: Como la figura 7 pero con el eje de las ordenadas en escala logarítmica.



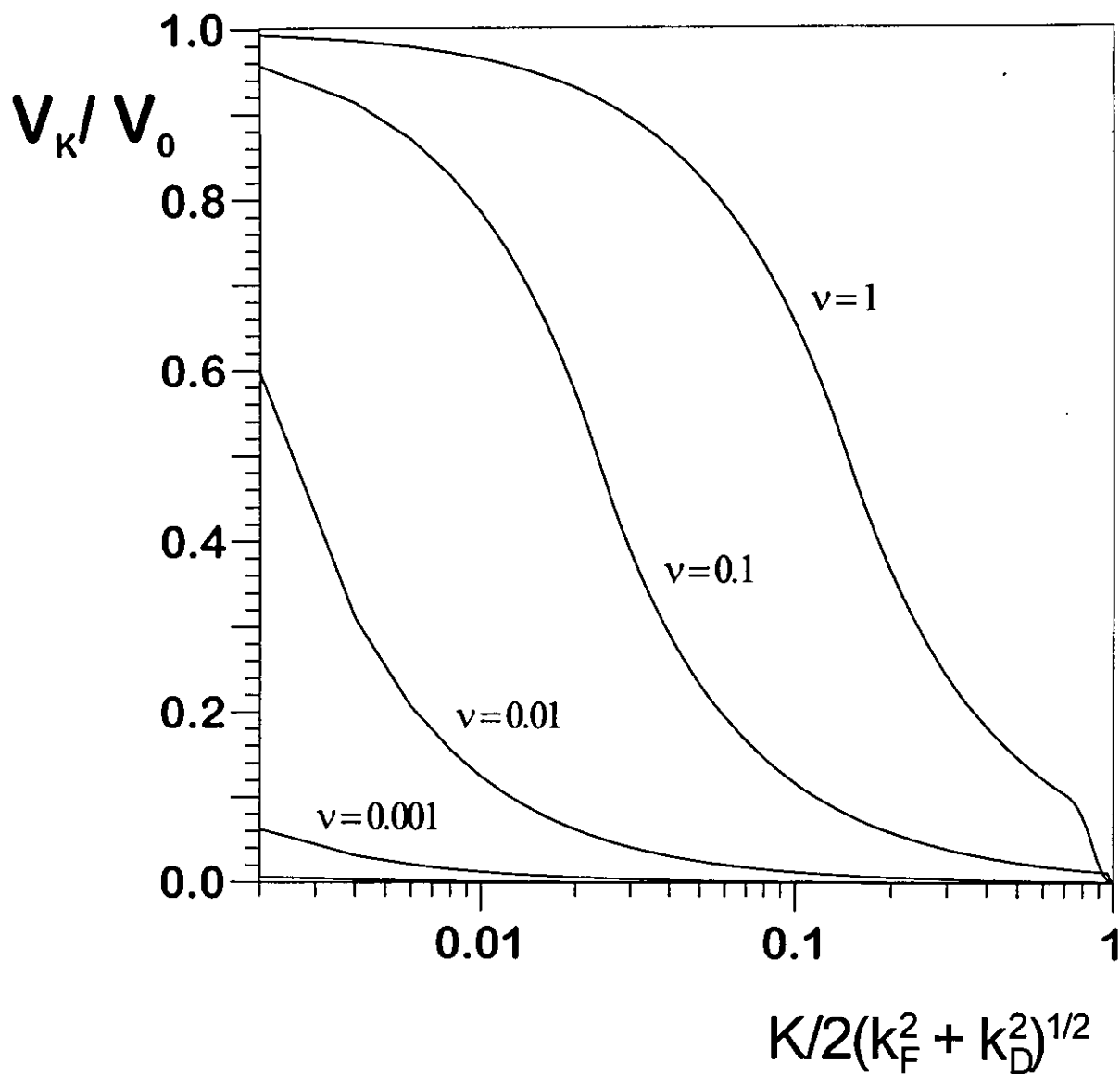


Figura 9: Como la figura 7 pero con el eje de las abscisas en escala logarítmica.

La aproximación que hemos utilizado aquí para la función de distribución de Fermi, podría parecer demasiado burda si comparamos las funciones en la figura 3; la aproximación estaría considerando más del doble de fermiones que los existentes. Sin embargo, si mejoramos la aproximación dividiendola por 2, en el intervalo  $k_F < k < k_F + \hbar\omega_D$ , es decir

$$n_k^1 = \begin{cases} 1 & \text{si } \varepsilon < E_F \\ 1/2 & \text{si } E_F < \varepsilon < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{si } \varepsilon > E_F + \hbar\omega_D, \end{cases}$$

nos acercaría más a la función de distribución exacta pero la fracción de pares  $V_K/V_0$  quedaría intacta. Claro, el número de pares con una  $K$  cualquiera ( $K = 0$  ó  $K > 0$ ), se vería disminuido a la mitad, pero sin cambiar la fracción.

Antes de proceder a considerar la FDFD exacta y realizar el cálculo en forma numérica, hemos iniciado el cálculo analítico simulando la FDFD con una función lineal cuyo valor es 1/2 en  $k_F$  y 0 en  $k_F + \hbar\omega_D$ . El algebra se complica grandemente y los resultados preliminares coinciden con los reportados dentro de un 10%. El considerar la FDFD exacta traería consigo, además de una mayor precisión del resultado para una  $T$  dada, el conocimiento del comportamiento de la fracción  $V_K(T)/V_0(T)$ , como función de la temperatura. Este cálculo es parte de un proyecto futuro.

Para completar la descripción de los pares de electrones existentes en los superconductores BCS, faltaría evaluar el número de pares con  $K = 0$ ,  $N_0$ . Una forma de evaluarla se plantea enseguida. Como para una temperatura  $T$  dada se cumple que el número total de pares  $N_0 + N_{k>0}$  es igual a la mitad del número de electrones en la franja energética de ancho  $\hbar\omega_D$  alrededor de  $E_F$ , se tiene que

$$2N_0 + 2N_{K>0} = 2 \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon = 2 \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - E_F)} + 1} \simeq 2\hbar\omega_D g(E_F),$$

donde además

$$N_{K>0} = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{k} n_{k_1} n_{k_2} = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{1}{4\pi} V_K = A_3 V_K,$$

con

$$A_3 = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{1}{4\pi}.$$

Entonces

$$N_0 = A_3 \left( \frac{\hbar\omega_D g(E_F)}{A_3} - V_K \right) = A_3 V_0,$$

con

$$V_0 = \frac{\hbar\omega_D g(E_F)}{A_3} - V_K.$$

De aquí arribamos a la igualdad

$$\frac{N_K}{N_0} = \frac{V_K}{V_0},$$

que hemos usado en nuestros cálculos.  $2\hbar\omega_D g(E_F)$  es el número total de electrones alrededor del nivel de Fermi con la posibilidad de aparearse. A  $T = 0$  todos están apareados y  $N_0(0) = \hbar\omega_D g(E_F)$ .

En conclusión, para un superconductor BCS, hemos calculado la fracción de pares de electrones con momento total no nulo, respecto a los pares con momento igual a cero. Lo anterior nos permite confirmar y asegurar su existencia. Se mostró también, que para  $\kappa < 10^{-4}$  y  $\nu > 0.005$ , la separación de la fracción respecto a la unidad es menor del 10%. Lo anterior nos lleva a preguntarnos el papel que juegan los pares con momento total no nulo, en la superconductividad. Éstos podrían ser los causantes de suavizar la transición superconductora abrupta.

Esperamos que un cálculo, que está en proceso, en el que se considere los efectos de la temperatura nos conduzca a resultados más precisos pero con un comportamiento cualitativo similar.

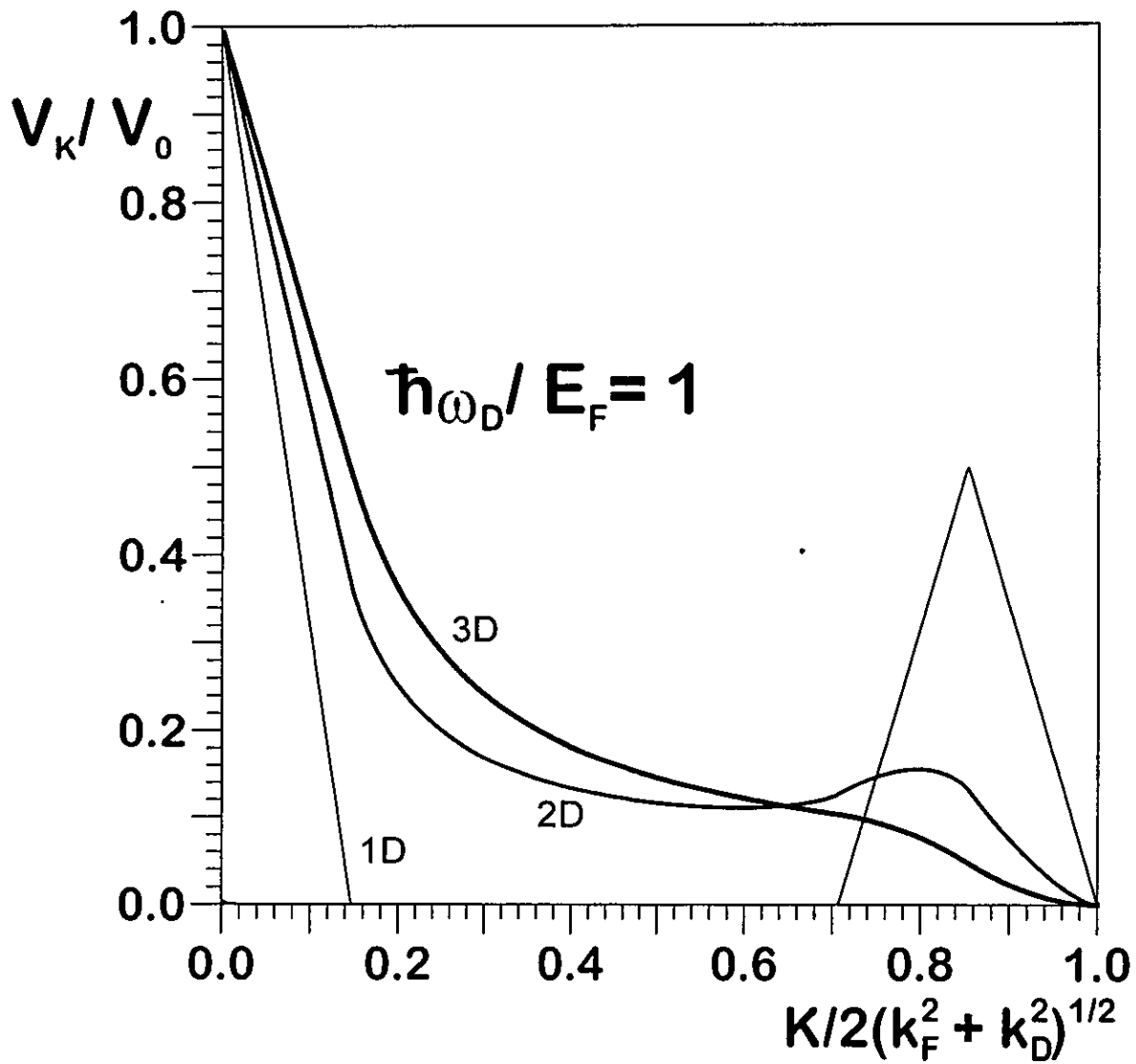


Figura 10: Fracción de pares de electrones con momento total mayor que cero  $\hbar\mathbf{K} > 0$  respecto a los pares con  $\hbar\mathbf{K} = 0$ , para 1D, 2D, 3D, con  $\nu = 1$ .

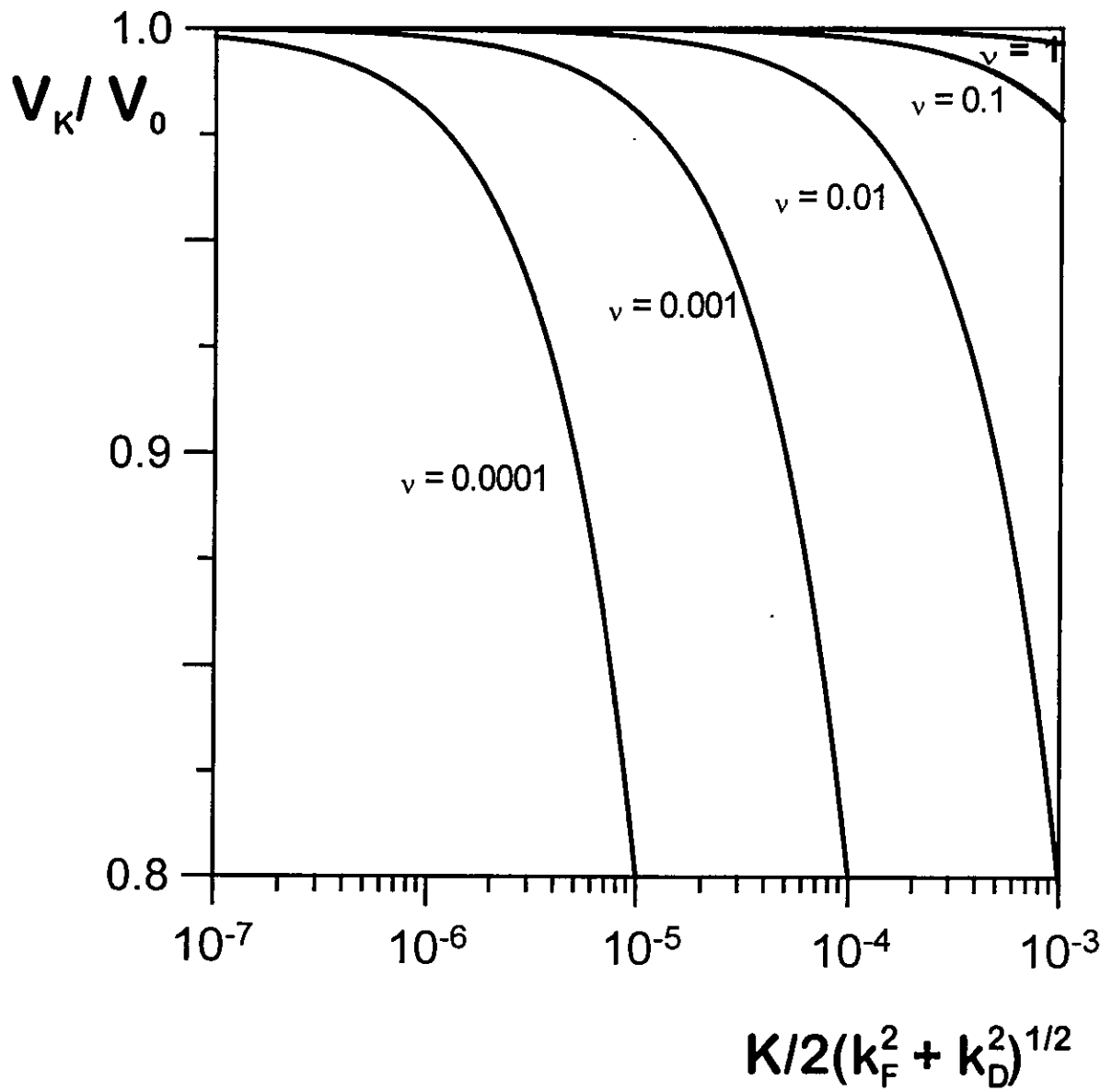


Figura 11: Ampliación de la figura 7 en el intervalo  $10^{-7} \leq K/2\sqrt{k_F^2 + k_D^2} \leq 10^{-3}$ .

# Referencias

- [1] W. Meissner and R. Ochsenfeld, *Naturwissenschaft* **21**, 787 (1933).
- [2] H. Fröhlich, *Phys. Rev.* **79**, 845 (1950).
- [3] L. N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [4] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [5] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys.* **B 64**, 189 (1986).
- [6] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987); J. R. Schrieffer, X. G. Wen and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Letters* **60**, 944 (1988); R. Friedberg and T. D. Lee, *Phys. Rev.* **B 42**, 6745 (1989); R. Friedberg, T. D. Lee and H. C. Ren, *Phys. Lett.* **A 152**, 417 y 423 (1990); A. S. Alexandrov and N. F. Mott, *Rep. Prog. Phys.* **57**, 1197 (1994) y Refs. allí citadas; J. Ranninger, en *Bose-Einstein Condensation*, ed. por A. Griffin, D. F. Snoke and S. Stringari (Cambridge, 1995).
- [7] Y. J. Uemura *et al.*, *Phys. Rev. Letters* **62**, 2317 (1989); Y. J. Uemura *et al.*, *ibid* **66**, 2665 (1991); Y. J. Uemura and G. M. Luke, *Physica B* **186-188**, 223 (1993).
- [8] D. E. Farrell *et al.*, *Phys. Rev.* **B 42**, 6758 (1990).
- [9] R. M. May, *Phys. Rev.* **135**, A 1515 (1964); V. Aguilera-Navarro, M. de Llano and M. A. Solís, (to be published).
- [10] S. Fujita and S. Watanabe, *J. Supercond.* **5**, 219 (1992) y Refs. S. Fujita and S. Godoy, *Quantum Statistical Theory of Superconductivity* (Plenum Press, NY., 1996).

- [11] J. M. Williams *et al.*, *Science* **252**, 1501 (1991); D. Jerome, *ibid*, pág. 1509; A. Khurana, *Phy. Today* **45** [9], 17 (1990).
- [12] A. Beiser, *Concepts of Modern Physics*, (McGraw-Hill 1973) pág. 287.
- [13] N. W. Aschcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, (Holt Rinehart and Winston, N.Y., 1976) pág. 31.
- [14] A. J. G. Hey and P. Walters, *The Quantum Universe*, (Cambridge University, Cambridge 1987) pág. 13.
- [15] K. S. Krane, *Modern Physics*, (John Wiley and Sons. Inc. N.Y., 1996).
- [16] P. C. W. Chu, *Investigación y Ciencia*, (Nov., 1995) pág. 90.
- [17] M. Fortes, *Ciencia y Desarrollo* **74**, 19 (1987).
- [18] R. A. Barrios, *Ciencia y Desarrollo* **122**, (1995) pág. 84.
- [19] V.C. Aguilera-Navarro, M. de Llano, J. Pineda, O. Rojo, *Revista Brasileira de Física*, Vol. 10, N<sup>o</sup>. 3, (1980) pág. 417.
- [20] S. Lubomir, *Structure and properties of solids*, (Czechoslovakia, 1967) págs. 106-117.
- [21] L. F. Magaña, *Los superconductores*, (Fondo de Cultura Económica, 1991).

# APÉNDICE

## Fracción de pares de Cooper en dos dimensiones.

Aquí, como se mencionó en el Capítulo 3, se calcula el área del traslape de dos cintas circulares de ancho  $\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - k_F$ , de radios iguales cuyos centros  $C_1$  y  $C_2$  están separados una distancia  $K$ .

Consideremos ahora un par de cintas circulares de grueso  $\hbar\omega_D$ , cuyos centros están separados una distancia  $K = |\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2|$ , donde  $\mathbf{k}_1$  es el vector de onda del primer electrón,  $\mathbf{k}_2$  el vector de onda del segundo electrón, mismos que se aparean cabeza y cola para formar el par de Cooper. Análogamente como en el caso de 3D, aquí el número de pares será proporcional al área de traslape de dos cintas. Se utilizará coordenadas polares circulares debido a la simetría del área, misma que facilitará la realización del cálculo.

Retomando lo que se mencionó en el Capítulo 3 para coordenadas cilíndricas, ahora a cada punto  $(x, y)$  en coordenadas cartesianas le asociamos las correspondientes coordenadas polares circulares  $(r, \theta)$ . La transformación entre una y otra es

$$x = r \cos \theta,$$

$$y = r \operatorname{sen} \theta,$$

$$\text{ó} \quad r^2 = x^2 + y^2,$$

$$\theta = \tan^{-1}(y/x),$$

donde  $0 \leq \theta < 2\pi$ , y  $r = \rho \geq 0$ .

Caso i) *Cinta circular.*

Sean  $C_1$  y  $C_2$  los centros de las dos cintas circulares de ancho  $\hbar\omega_D$ . Cuando el número de



onda del centro de masa del par de electrones es igual a  $K = 0$  ó  $\kappa = 0$ , ambos,  $C_1$  y  $C_2$ , estarán situados en el origen de nuestro sistema de coordenadas. Implica que  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$  encontrándose al par de electrones en la cinta circular de radio interno  $k_F$  y radio externo  $\sqrt{k_F^2 + k_D^2}$ , equidistantes del centro y diametralmente opuestos. El área del traslape es definido también por la integral (17), pero ahora restringida a 2D. Los pares de electrones del espacio  $k$  contenidos en la cinta circular es proporcional al área de traslape

$$A_0 \equiv A_i = \pi k_F^2 \nu.$$

En los casos en que  $K > 0$ , consideramos que el vector de onda  $\mathbf{k}_1$  estará en una cinta circular con centro en  $C_1$ , y el vector de onda  $\mathbf{k}_2$  en otra cinta circular con centro en  $C_2$ , ambos centros separados una distancia  $K$ . En el área de traslape en el espacio  $k$  de las dos cintas de forma circular, se encontrarán los momentos  $\mathbf{k}_1$  y  $\mathbf{k}_2$  de los electrones con la posibilidad de aparearse. Aquí identificamos cuatro posibilidades.

Caso ii) *Cinta no circular.*

Esta área se genera cuando el número de onda del centro de masa  $K$ , o para la magnitud normalizada  $\kappa$ , toma los valores en el intervalo

$$0 < K < k_F (\sqrt{1 + \nu} - 1)$$

$$\text{ó} \quad 0 < \kappa < (1/2) (1 - 1/\sqrt{1 + \nu}).$$

Situamos los centros  $C_1$  y  $C_2$  equidistantes del origen y separados una distancia  $K > 0$  sobre el eje  $z$ . El área se obtiene de la integral (17) para 2D,

$$A_{ii}(K) = 4 \int_0^{k_F + K/2} dz \int_{\sqrt{k_F^2 - (z - K/2)^2}}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} d\rho$$

$$+ 4 \int_{k_F + K/2}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - K/2}} dz \int_0^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} d\rho,$$

el área de traslape como función de  $\kappa$  y  $\nu$ , queda así.

$$\begin{aligned}
A_{ii}(\kappa) &= \pi k_F^2 (1 + \nu) [1 - (2/\pi) \text{sen}^{-1}(\kappa) - (2/\pi) \kappa \sqrt{1 - \kappa^2} \\
&\quad - (1 + \nu)^{-1} - (2/\pi) \kappa (1 + \nu)^{-\frac{1}{2}} \sqrt{1 - (\kappa \sqrt{1 + \nu})^2} \\
&\quad - (2/\pi) (1 + \nu)^{-1} \text{sen}^{-1}(\kappa \sqrt{1 + \nu})].
\end{aligned} \tag{22}$$

Evaluando (22) en los extremos del intervalo en que  $\kappa$  varía, obtenemos que  $A_{ii}(0) = A_i(0) = A_0$  y  $A_{ii}(\kappa_1) = A_{iii}(\kappa_1)$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} A_{ii}(\kappa) = \pi k_F^2 (\nu)$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\kappa \rightarrow \kappa_1} A_{ii}(\kappa) &= \pi k_F^2 [\nu - (2/\pi) (1 + \nu) \text{sen}^{-1}((\sqrt{1 + \nu} - 1)/(2\sqrt{1 + \nu})) \\
&\quad - (2/\pi) \sqrt{1 + \nu} (\sqrt{1 + \nu} - 1) / 2 \sqrt{1 - ((\sqrt{1 + \nu} - 1)/(2\sqrt{1 + \nu}))^2} \\
&\quad - (2/\pi) (\sqrt{1 + \nu} - 1) / 2 \sqrt{1 - ((\sqrt{1 + \nu} - 1)/2)^2} \\
&\quad - (2/\pi) \text{sen}^{-1}((\sqrt{1 + \nu} - 1)/2)].
\end{aligned}$$

La fracción de pares de electrones con  $K > 0$  con respecto a  $K = 0$  se obtiene dividiendo  $A_{ii}$  entre  $A_0$  como se muestra a continuación,

$$\begin{aligned}
A_{ii}(\kappa)/A_0 &= (1 + \nu)/\nu [1 - (2/\pi) \text{sen}^{-1}(\kappa) - (2/\pi) \kappa \sqrt{1 - \kappa^2}] \\
&\quad - 1/\nu [(2/\pi) \kappa \sqrt{1 + \nu} \sqrt{1 - (\kappa \sqrt{1 + \nu})^2} + 1 \\
&\quad + (2/\pi) \text{sen}^{-1}(\kappa \sqrt{1 + \nu})].
\end{aligned}$$

Para mostrar el comportamiento de esta fracción cerca de  $K = 0$ , se desarrolla la expresión anterior en términos de  $\kappa$ , muy cercano al cero,

$$\begin{aligned}
A_{ii}(\kappa)/A_0 &\simeq 1 - [(4(1 + \nu) + 2\pi\sqrt{1 + \nu})/(\pi\nu)]\kappa \\
&\text{para } \kappa \ll 1.
\end{aligned}$$

En la figura 14 se muestra una ampliación de la figura 12 para valores de  $\kappa$  cercanos a 0.

Caso iii) *Anillo con sección transversal rómbica.*

Esta topología es generada por la variación de la magnitud  $K$  en el intervalo

$$\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - k_F < K < 2k_F$$

$$\text{ó} \quad (1/2)(1 - 1/\sqrt{1+\nu}) < \kappa < 1/\sqrt{1+\nu}.$$

Aquí el área asociada está dada por la integral

$$A_{iii}(K) = 4 \int_0^{(\nu k_F)/(4\kappa\sqrt{1+\nu})} dz \int_{\sqrt{k_F^2 - (z-K/2)^2}}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z+K/2)^2}} d\rho.$$

Al efectuar la integral el área queda expresada en términos de  $\kappa$ , como

$$\begin{aligned} A_{iii}(\kappa) = & \pi k_F^2 \{ (1+\nu) (2/\pi) [\text{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa(1+\nu)) + \kappa) - \kappa\sqrt{1-\kappa^2}] \\ & + (\nu/(4\kappa(1+\nu)) + \kappa)\sqrt{1 - (\nu/(4\kappa(1+\nu)) + \kappa)^2} - \text{sen}^{-1}(\kappa) \\ & - (\nu/(4\kappa(1+\nu)) - \kappa)(1+\nu)^{-\frac{1}{2}}\sqrt{1 - (\nu/(4\kappa\sqrt{1+\nu}) - \kappa\sqrt{1+\nu})^2} \\ & - \kappa(1+\nu)^{-\frac{1}{2}}\sqrt{1 - (\kappa\sqrt{1+\nu})^2} - (1+\nu)^{-1}\text{sen}^{-1}(\kappa\sqrt{1+\nu}) \\ & - (1+\nu)^{-1}\text{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa\sqrt{1+\nu}) - \kappa\sqrt{1+\nu}) \}. \end{aligned} \quad (23)$$

Al evaluar (23) en los extremos en que  $\kappa = \kappa_1$  y  $\kappa = \kappa_2$ , confirmamos que  $A_{iii}(\kappa_1) = A_{ii}(\kappa_1)$  y  $A_{iii}(\kappa_2) = A_{iv}(\kappa_2)$ , cuando hacemos los siguientes límites

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow \kappa_1} A_{iii}(\kappa) = & \pi k_F^2 [\nu - (2/\pi)(1+\nu)\text{sen}^{-1}((\sqrt{1+\nu}-1)/(2\sqrt{1+\nu})) \\ & - (2/\pi)\sqrt{1+\nu}(\sqrt{1+\nu}-1)/2\sqrt{1 - ((\sqrt{1+\nu}-1)/(2\sqrt{1+\nu}))^2} \\ & - (2/\pi)(\sqrt{1+\nu}-1)/2\sqrt{1 - ((\sqrt{1+\nu}-1)/2)^2} \\ & - (2/\pi)\text{sen}^{-1}((\sqrt{1+\nu}-1)/2)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\kappa \rightarrow \kappa_2} A_{iii}(\kappa) &= \pi k_F^2 \left[ (2/\pi) \sqrt{1+\nu} (\nu+4) / 4 \sqrt{1 - ((\nu+4)/(4\sqrt{1+\nu}))^2} \right. \\
&\quad + (2/\pi) (1+\nu) \operatorname{sen}^{-1}((\nu+4)/(4\sqrt{1+\nu})) - 1 \\
&\quad - (2/\pi) (1+\nu)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\nu/(1+\nu)} - (2/\pi) \operatorname{sen}^{-1}((\nu-4)/4) \\
&\quad - (2/\pi) (1+\nu) \operatorname{sen}^{-1}((1+\nu)^{-\frac{1}{2}}) \\
&\quad \left. - (2/\pi) (\nu-4) / 4 \sqrt{1 - ((\nu-4)/4)^2} \right].
\end{aligned}$$

La fracción está dada por

$$\begin{aligned}
A_{iii}(\kappa)/A_0 &= (1+\nu)/\nu \left[ \operatorname{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa(1+\nu)) + \kappa) - \kappa \sqrt{1-\kappa^2} - \operatorname{sen}^{-1}(\kappa) \right. \\
&\quad \left. + (\nu/(4\kappa(1+\nu)) + \kappa) \sqrt{1 - (\nu/(4\kappa(1+\nu)) + \kappa)^2} \right] \\
&\quad - 1/\nu \left[ \operatorname{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa\sqrt{1+\nu}) - \kappa\sqrt{1+\nu}) + \operatorname{sen}^{-1}(\kappa\sqrt{1+\nu}) \right. \\
&\quad \left. + (\nu/(4\kappa\sqrt{1+\nu}) - \kappa\sqrt{1+\nu}) \sqrt{1 - (\nu/(4\kappa\sqrt{1+\nu}) - \kappa\sqrt{1+\nu})^2} \right. \\
&\quad \left. + \kappa\sqrt{1+\nu} \sqrt{1 - (\kappa\sqrt{1+\nu})^2} \right].
\end{aligned}$$

Caso iv) *Daga doble.*

Aquí el intervalo de variación de  $K$  es

$$2k_F < K < k_F(\sqrt{1+\nu} + 1)$$

$$\text{ó} \quad 1/\sqrt{1+\nu} < \kappa < (1/2)(1 + 1/\sqrt{1+\nu}),$$

y el área de traslape tiene forma de una daga doble. Para obtener su área se requiere de dos integrales,

$$A_{iv}(K) = 4 \int_0^{K/2 - k_F} dz \int_0^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} \rho d\rho$$

$$+ 4 \int_{K/2 - k_F}^{(\nu k_F)/(4\kappa\sqrt{1+\nu})} dz \int_{\sqrt{k_F^2 - (z - K/2)^2}}^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} \rho d\rho,$$

$$\begin{aligned} A_{iv}(\kappa) = & \pi k_F^2 \{ (1 + \nu) (2/\pi) [-\kappa \sqrt{1 - \kappa^2} - \text{sen}^{-1}(\kappa) \\ & + (\nu/(4\kappa(1 + \nu)) + \kappa) \sqrt{1 - (\nu/(4\kappa(1 + \nu)) + \kappa)^2} \\ & + \text{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa(1 + \nu)) + \kappa) - (\pi/2) (1 + \nu)^{-1} \\ & - (\nu/(4\kappa(1 + \nu)) - \kappa) (1 + \nu)^{-\frac{1}{2}} \sqrt{1 - (\nu/(4\kappa\sqrt{1 + \nu}) - \kappa\sqrt{1 + \nu})^2} \\ & - (1 + \nu)^{-1} \text{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa\sqrt{1 + \nu}) - \kappa\sqrt{1 + \nu}) ] \}. \end{aligned} \quad (24)$$

Evaluando (24) en los extremos del intervalo en que varía  $\kappa$  se obtiene que  $A_{iv}(\kappa_2) = A_{iii}(\kappa_2)$  y  $A_{iv}(\kappa_3) = A_v(\kappa_3)$ , comprobándose que el área como función de  $\kappa$  es una función continua.

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow \kappa_2} A_{iv}(\kappa) = & \pi k_F^2 [ (2/\pi) \sqrt{1 + \nu} (\nu + 4) / 4 \sqrt{1 - ((\nu + 4)/(4\sqrt{1 + \nu}))^2} \\ & - (2/\pi) \text{sen}^{-1}((\nu - 4)/4) + (2/\pi) (1 + \nu) \text{sen}^{-1}((\nu + 4)/(4\sqrt{1 + \nu})) - 1 \\ & - (2/\pi) (1 + \nu) \sqrt{1 + \nu} \sqrt{\nu/(1 + \nu)} - (2/\pi) (1 + \nu) \text{sen}^{-1}(1/\sqrt{1 + \nu}) \\ & - (2/\pi) (\nu - 4) / 4 \sqrt{1 - ((\nu - 4)/4)^2} ], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow \kappa_3} A_{iv}(\kappa) = & \pi k_F^2 [ (1 + \nu) - (2/\pi) (1 + \nu) \text{sen}^{-1}((\sqrt{1 + \nu} + 1)/(2\sqrt{1 + \nu})) \\ & - (2/\pi) \sqrt{1 + \nu} (\sqrt{1 + \nu} + 1) / 2 \sqrt{1 - ((\sqrt{1 + \nu} + 1)/(2\sqrt{1 + \nu}))^2} ]. \end{aligned}$$

La fracción queda expresada de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
A_{iv}(\kappa)/A_0 &= (1 + \nu)/\nu[(\nu/(4\kappa(1 + \nu)) + \kappa)\sqrt{1 - (\nu/(4\kappa(1 + \nu)) + \kappa)^2} \\
&\quad - \kappa\sqrt{1 - \kappa^2} - \text{sen}^{-1}(\kappa) + \text{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa(1 + \nu)) + \kappa)] \\
&\quad - 1/\nu[(\pi/2) + \text{sen}^{-1}(\nu/(4\kappa\sqrt{1 + \nu}) - \kappa\sqrt{1 + \nu}) \\
&\quad + (\nu/(4\kappa\sqrt{1 + \nu}) - \kappa\sqrt{1 + \nu})\sqrt{1 - (\nu/(4\kappa\sqrt{1 + \nu}) - \kappa\sqrt{1 + \nu})^2}].
\end{aligned}$$

Caso v) *Lente doblemente convexa.*

Dos electrones con momentos casi colineal serán los que forman el par con  $K$  dentro del intervalo

$$k_F(\sqrt{1 + \nu} + 1) < K < 2k_F\sqrt{1 + \nu}$$

$$\text{ó} \quad (1/2)(1 + 1/\sqrt{1 + \nu}) < \kappa < 1.$$

El área de la lente doblemente convexa, proporcional al número de posibles pares es

$$A_v(K) = 4 \int_0^{\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - K/2} dz \int_0^{\sqrt{(k_F^2 + k_D^2) - (z + K/2)^2}} d\rho,$$

$$A_v(\kappa) = \pi k_F^2 (1 + \nu) \left[ 1 - (2/\pi)\kappa\sqrt{1 - \kappa^2} - (2/\pi)\text{sen}^{-1}(\kappa) \right]. \quad (25)$$

Al evaluar (25) en el extremo se obtiene  $A_v(\kappa_3) = A_{iv}(\kappa_3)$ , es decir, es continua

$$\begin{aligned}
\lim_{\kappa \rightarrow \kappa_3} A_v(\kappa) &= \pi k_F^2 \left[ (1 + \nu) - (2/\pi)(1 + \nu)\text{sen}^{-1}((\sqrt{1 + \nu} + 1)/(2\sqrt{1 + \nu})) \right. \\
&\quad \left. - (2/\pi)\sqrt{1 + \nu}(\sqrt{1 + \nu} + 1)/2\sqrt{1 - ((\sqrt{1 + \nu} + 1)/(2\sqrt{1 + \nu}))^2} \right],
\end{aligned}$$

además,

$$\lim_{\kappa \rightarrow 1} A_v(\kappa) = 0.$$

Finalmente, la fracción de pares con  $K$  en esta región, está dada por

$$A_v(\kappa)/A_0 = 1/\nu \left[ 1 - (2/\pi)\kappa\sqrt{1 - \kappa^2} - (2/\pi)\text{sen}^{-1}(\kappa) \right].$$

Para el caso en que  $\kappa \geq 1$  las dos cintas serán tangentes y  $A(\kappa) = 0$  que confirma lo esperado.

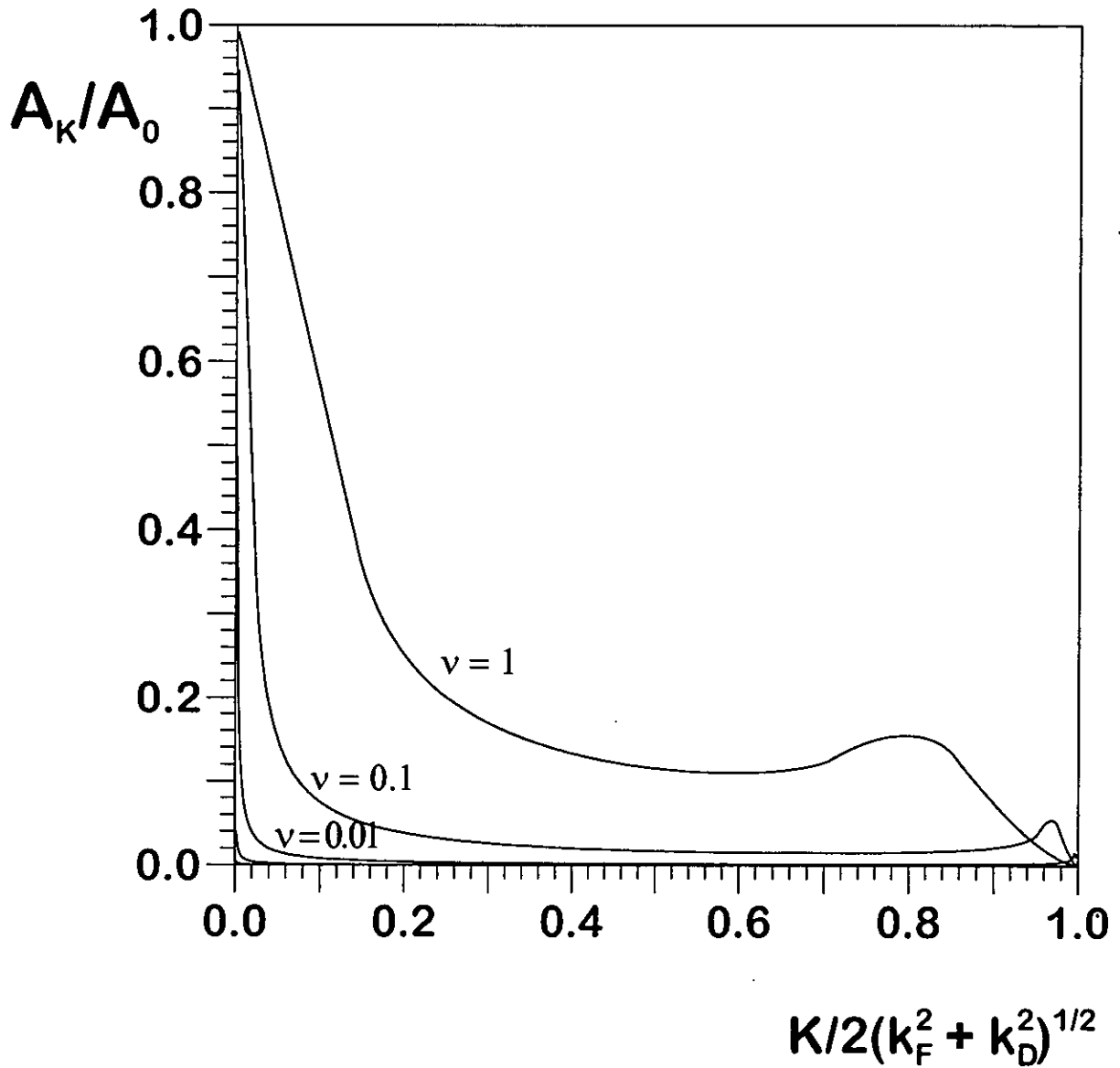


Figura 12: Fracción de pares de electrones con momento total mayor que cero  $\hbar\mathbf{K} > 0$  respecto a los pares con  $\hbar\mathbf{K} = 0$ , en 2D y para valores de  $\nu$  mostrados.



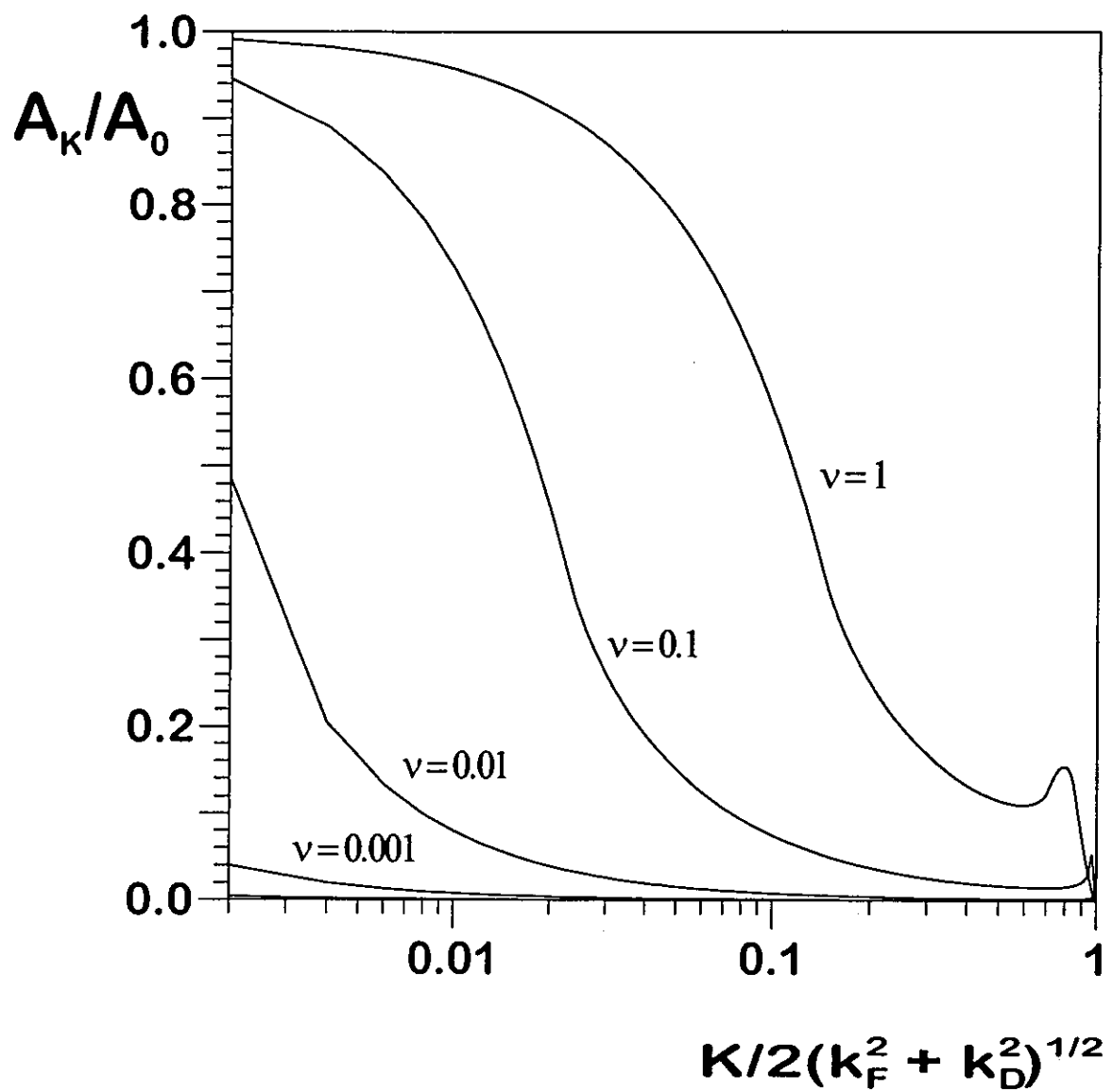


Figura 13: Como la figura 12 pero con el eje de las abscisas en escala logarítmica.

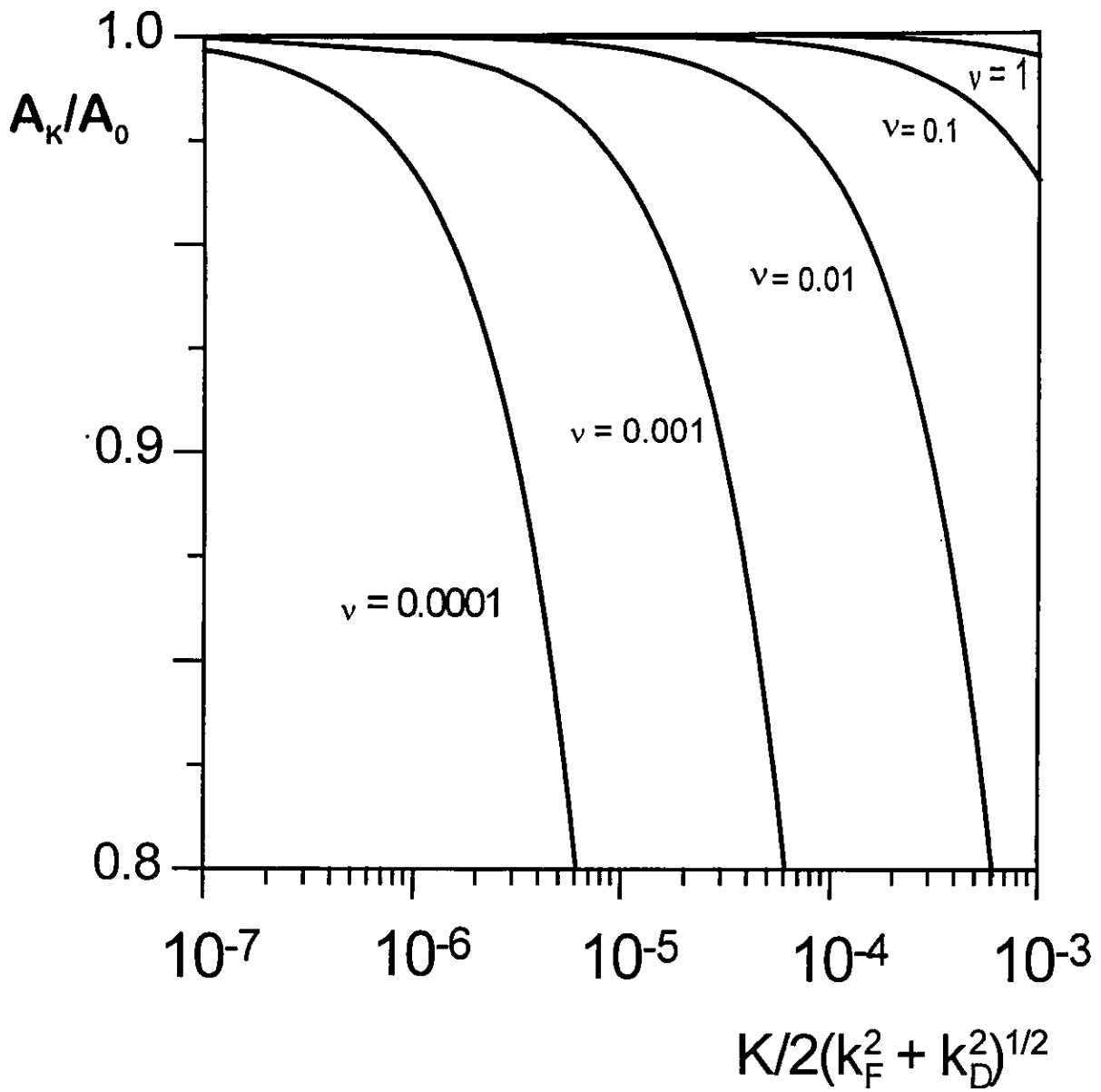


Figura 14: Ampliación de la figura 12 en el intervalo  $10^{-7} \leq K/2\sqrt{k_F^2 + k_D^2} \leq 10^{-3}$

## Lista de figuras

**Figura 1:** Temperaturas críticas  $T_c$ , en unidades de la temperatura de Fermi  $T_F$ , como función de la dimensión  $d$ , para sistemas de bosones cuya energía es proporcional al cuadrado del momento (curva llena) y proporcional al momento (curva a trazos).

**Figura 2:** Diagrama llamado de Feymann da una idea de la interacción atractiva entre dos electrones en una red iónica en vibración (a través del intercambio virtual de un fonón, que constituye la interacción electrón-fonón de Fröhlich).

**Figura 3:** Corte transversal del volumen de traslape (cuadriculado) de dos cascarones esféricos de grueso  $\hbar\omega_D$ , cuyos centros están separados una distancia igual a la magnitud del vector de onda total  $\mathbf{K}$  del par. El par asociado interactúa vía el modelo de interacción BCS (14).

**Figura 4:** Función de distribución de Fermi-Dirac (FDFD) para diferentes  $T$ , como función del número de onda  $k$  normalizado al número de onda  $k_\mu$  asociado al potencial químico  $\mu$ . La función escalón (línea gruesa) es la aproximación a la FDFD usada en los cálculos.

**Figura 5:** Topologías de los volúmenes de traslape de dos cascarones esféricos, que se generan dependiendo de la magnitud del vector  $\mathbf{K}$ .

**Figura 6:** Sistema de coordenadas cilíndricas  $(\rho, \varphi, z)$  usadas para calcular el volumen de traslape (zona cuadrículada).

**Figura 7:** Fracción de pares de electrones con momento total mayor que cero  $\hbar\mathbf{K} > 0$  respecto a los pares con momento igual a cero  $\hbar\mathbf{K} = 0$ , en 3D y para varios valores de  $\nu = k_D^2/k_F^2$ ;  $\nu = 10^{-3}$  para superconductores convencionales;  $0.03 \leq \nu \leq 0.07$  para cupratos; y el límite  $\nu = \infty$  se refiere al volumen de traslape de dos esferas sólidas.

**Figura 8:** Como la Fig. 7 pero con el eje de las ordenadas en escala logarítmica.

**Figura 9:** Como la Fig. 7 pero con el eje de las abscisas en escala logarítmica.

**Figura 10:** Fracción de pares de electrones con momento total mayor que cero  $\hbar\mathbf{K} > 0$  respecto a los pares con  $\hbar\mathbf{K} = 0$ , para 1D, 2D, 3D, donde  $\nu = 1$ .

**Figura 11:** Ampliación de la Fig. 7 en el intervalo  $10^{-7} \leq k/[2\sqrt{k_F^2 + k_D^2}] \leq 10^{-3}$ .

**Figura 12:** Fracción de pares de electrones con momento total mayor que cero  $\hbar\mathbf{K} > 0$  respecto a los pares con  $\hbar\mathbf{K} = 0$ , en 2D y para los valores de  $\nu$  mostrados.

**Figura 13:** Como la Fig. 12 pero con el eje de las abscisas en escala logarítmica.

**Figura 14:** Ampliación de la Fig. 12 en el intervalo  $10^{-7} \leq k/[2\sqrt{k_F^2 + k_D^2}] \leq 10^{-3}$ .