

21
2ej

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO



FACULTAD DE CIENCIAS

TEMPERATURAS CRITICAS SUPERCONDUCTORAS
COMO FUNCION DEL ACOPLAMIENTO ENTRE
ELECTRONES

T E S I S

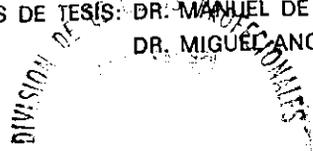
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C O

P R E S E N T A :

ALBERTO SALAZAR MARTINEZ

DIRECTORES DE TESIS: DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA
DR. MIGUEL ANGEL SOLIS ATALA



OCTUBRE DE 1999
FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR

279710

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



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 esta 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.



REPUBLICA NACIONAL
 AVISMA 11
 MEXICO

MAT. MARGARITA ELVIRA CHÁVEZ CANO
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:

"Temperaturas críticas superconductoras como función del
 acoplamiento entre electrones"

realizado por SALAZAR MARTÍNEZ ALBERTO

con número de cuenta 9251832-6 , pasante de la carrera de Física

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de tesis

Propietario Dr. Manuel de Llano de la Garza, *M de L*
 Instituto de Investigaciones en Materiales UNAM

Propietario Dr. Miguel Angel Solís Atala
 Instituto de Física UNAM

Propietario Dr. Ariel Alberto Valladares Clemente
 Instituto de Investigaciones en Materiales UNAM *A. Valladares*

Suplente Dr. Francisco Morales Leal
 Instituto de Investigaciones en Materiales UNAM *Francisco Morales Leal*

Suplente Dr. Marcelo del Castillo Mussot *Marcelo del Castillo Mussot*
 Instituto de Física UNAM

Consejo Departamental de Física

Patricia Goldstein Menache
 Dra. Patricia Goldstein Menache
 Coordinadora de Licenciatura

Resumen

En esta tesis estudiamos la superconductividad como una condensación de Bose-Einstein, CBE de pares de electrones cuando el acoplamiento entre ellos es finito. Partiendo del supuesto que la superconductividad consiste en una condensación Bose-Einstein de partículas bosónicas o parones (pares de Cooper con momento total o de centro de masa $\hbar K \neq 0$), derivamos expresiones explícitas en dos y tres dimensiones para temperaturas críticas, T_c que resultan relativamente altas. Para ello se obtienen expresiones generales para la relación de dispersión de los parones, la cual resulta lineal y con pendiente que depende de la constante de acoplamiento, λ , y el cociente de las temperaturas de Debye y Fermi, Θ_D/T_F .

Se comienza con el modelo BCS en ausencia de campos magnéticos y al calcular la energía interna del estado base se reelabora la interpretación de Davydov que ve al estado superconductor como una mezcla ideal (sin interacción) de un gas ideal de bosones y uno de fermiones, sin importar la magnitud del acoplamiento en los pares ni su extensión. La expresión para el corrimiento en la energía de condensación a $T = 0$ del estado superconductor respecto al normal, resulta ser igual a la energía total de un gas ideal de parones, cada uno con energía de amarre Δ_0 . Con el modelo de un gas ideal de cuasipartículas fermiónicas llamadas bogolones, en cuya relación de dispersión se incluye el *gap* BCS de excitación mínima, se obtienen las expresiones para la entropía $S(T)$ y la energía interna $U(T)$ de un superconductor. En base a éstas se obtienen expresiones para los calores específicos electrónicos, $C_V(T)$, y se calcula la magnitud del salto en T_c en el calor específico, $\Delta C_V = 1.3796\gamma T_c$, donde γ es la constante de Euler. Estos resultados se reconstruyen en el esquema de superconductividad como una CBE y se comparan con las propiedades calculadas con la teoría BCS tales como las expresiones para temperaturas críticas, funciones termodinámicas y salto en el calor específico. Las predicciones según CBE para T_c con $\lambda = 1/2$ están: en 2D, en el intervalo de 163 a 1629 K si utilizamos $T_F = 10^3$ a 10^4 K; en 3D, $T_c \simeq 612.94 - 6129.4$ K si utilizamos $T_F = 10^4$ a 10^5 K. La predicción correspondiente de BCS para $\lambda = 1/2$ es de $T_c \simeq 46$ K, con $\Theta_D = 300$ K, que es el llamado límite de la barrera fonónica.

Agradecimientos

Quiero expresar mi más cordial reconocimiento al Dr. Manuel de Llano de la Garza y al Dr. Miguel Angel Solís Atala por su valioso estímulo e interés en el tema de esta tesis; por su apoyo y las valiosas sugerencias y críticas a lo largo de la elaboración de la misma.

A los doctores Ariel Alberto Valladares Clemente, Francisco Morales Leal y Marcelo del Castillo Mussot quienes como miembros del jurado contribuyeron también con sus apreciaciones y comentarios de las versiones preliminares.

A la Dirección General de Asuntos de Personal Académico (DGAPA) por la beca otorgada a través del proyecto IN 102198 del PAPIIT, que he comenzado a disfrutar en la etapa final de la elaboración de mi tesis.

Al Instituto de Física y al Instituto de Investigaciones en Materiales por facilitarme el uso de sus bibliotecas para la consulta de libros y artículos necesarios durante la elaboración de esta tesis, y por el uso de sus servicios de cómputo e instalaciones en general.

Por último, quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México y a la Facultad de Ciencias por mi formación académica.

Índice General

1	Introducción	1
2	Superconductividad BCS	5
2.1	BCS y pares de Cooper	5
2.2	La energía de condensación a $T = 0$	7
2.3	Entropía	10
2.4	Energía Interna	13
2.5	Calor específico	17
2.6	La discontinuidad en el calor específico	19
2.6.1	Vía la entropía	19
2.6.2	Vía la energía interna	21
3	Condensación Bose-Einstein y Superconductividad	22
3.1	Introducción	22
3.2	Temperatura crítica	23
3.3	Energía Interna	25
3.4	Entropía	27
3.5	Calor específico	29
3.5.1	Salto en el calor específico	30
4	Acoplamiento entre electrones	32
4.1	Relación de dispersión de los pares	32
4.2	Temperaturas críticas	37
5	Discusión	43
5.1	Interpretaciones de la superconductividad	43
5.2	Calores Específicos	44
5.3	Temperaturas críticas	45
5.4	Conclusión	46
R	Referencias	48
A	Entropía para un gas ideal cuántico de fermiones	50

Índice de Figuras

2.1	El gap BCS de energía de excitación mínima como función de T/T_c , para un valor de acoplamiento $\lambda = 1/2$. Estrictamente hablando, esta curva sólo es válida en el límite cercano a T_c	6
2.2	La entropía S a partir del modelo BCS en unidades $g(E_F)k_B^2T_c$, de acuerdo con las Ecs. (2.16) y (2.18), para los estados normal y superconductor.	12
2.3	La energía interna para $T \neq 0$, en unidades $g(E_F)k_B^2T_c^2$ como función de T/T_c , de acuerdo con las Ecs. (2.22) y (2.24), para los estados normal y superconductor.	15
2.4	La energía interna U para $T \neq 0$, en unidades $g(E_F)k_B^2T_c^2$ vs T/T_c , de acuerdo con las Ecs. (2.22) y (2.24). Se puede observar claramente el punto singular en $T = T_c$, donde la derivada es discontinua.	16
2.5	El calor específico a volumen constante, C_V , graficado en unidades $g(E_F)k_B^2T_c$ como función de T/T_c , de acuerdo con las Ecs. (2.25) y (2.28). Se observa precisamente en la transición superconductor, $T = T_c$, el familiar salto en el calor específico.	18
3.1	Energía interna U vs T/T_c en el modelo CBE a partir de (3.18) y (3.19) para $d/s = 3/1$ (curva gruesa); $d/s = 2/1$ (curva punteada); $d/s = 3/2$ (discontinua). Solamente en el primer caso se observa un punto crítico.	27
3.2	Entropía S vs T/T_c en el modelo CBE a partir de (3.22) y (3.23) para $d/s = 3/1$ (curva gruesa); $d/s = 2/1$ (curva punteada); $d/s = 3/2$ (discontinua). Al igual que con la energía interna, solamente en el primer caso se observa un punto crítico.	28
3.3	Calor específico C_V como función de T/T_c a partir de (3.25) y (3.26) para $d/s = 3/1$ (línea gruesa); $d/s = 2/1$ (línea punteada); $d/s = 3/2$ (discontinua). En el primer caso se aprecia claramente la discontinuidad o salto en $T = T_c$	30
4.1	Graficamos $f_d(\lambda, \nu)$ vs λ para 2D, $\nu = 0.05$. Se puede observar que conforme λ aumenta f_d aumenta, conduciéndonos a temperaturas críticas mayores.	33

4.2	Graficamos $f_d(\lambda, \nu)$ para 3D con $\nu = 0.001$. Se puede observar cómo f_d se aproxima a la unidad para acoplamiento débil.	34
4.3	Función de acoplamiento finito, $f_2(\lambda = 1/2, \nu)$ vs $\nu \equiv \Theta_D/T_F$, a partir de la Ec. (4.3).	35
4.4	Función de acoplamiento finito, $f_3(\lambda = 1/2, \nu)$ vs Θ_D/T_F , a partir de la Ec. (4.6).	36
4.5	Temperatura crítica T_c como función del acoplamiento λ . El valor $\nu = 0.05$ es característico para superconductores en 2D. Cuando el acoplamiento se vuelve más fuerte, la temperatura crítica aumenta razonablemente.	37
4.6	Temperatura crítica CBE a partir de (4.15) para el límite de acoplamiento débil ($\lambda = 0$) y para $\lambda = 1/2$. En el rectángulo se indica la región donde se alojan los valores experimentales [29]. La curva inferior muestra la predicción BCS con $T_c \simeq 1.13\Theta_D e^{-1/\lambda}$	38
4.7	Temperatura crítica T_c como función del acoplamiento λ . El valor $\nu = 0.001$ es característico para superconductores en 3D.	39
4.8	Temperatura crítica CBE a partir de (4.16) para el límite de acoplamiento débil ($\lambda = 0$) y para $\lambda = 1/2$	40
4.9	Θ_D/T_F en el modelo CBE a partir de (4.16), como en la Fig. 4.8. En la parte inferior se muestra la predicción BCS $T_c \simeq 1.13\Theta_D e^{-1/\lambda}$	41

Capítulo 1

Introducción

Es bien conocido que a bajas temperaturas muchos materiales pueden pasar hacia un nuevo estado de la materia en el cual las corrientes eléctricas fluyen indefinidamente sin resistencia alguna, o bien se observan flujos de átomos en ausencia de viscosidad en el medio.

Estas super-propiedades se han tratado de explicar como consecuencias de la ecuación de Schrödinger para muchos cuerpos [1]. Para los superfluidos no existe una teoría microscópica al menos tan satisfactoria como la BCS [15] que existe para el estado superconductor. Ambos sistemas están caracterizados por transiciones de fase hacia estados con un ordenamiento especial, que permite la aparición de las super-propiedades, no obstante la sustancia permanece fluida (en el caso de los superconductores el fluido es un gas de electrones). Ambos fenómenos son manifestaciones a nivel macroscópico de las leyes de mecánica cuántica y en cada caso la estadística térmica de las partículas, ya sea Fermi-Dirac o Bose-Einstein, juega un papel crucial. Tanto la superfluididad como la superconductividad son fenómenos que han sido relacionados con el estudio de sistemas de bosones. Ya en 1964, London [2] conjeturaba que la discontinuidad en el calor específico para los superconductores era independiente del *gap* y sólo podía ser explicada como una condensación Bose-Einstein (CBE). La reciente obtención [3] de condensados Bose-Einstein en nubes de átomos alcalinos, así como el Nobel de 1996 por el descubrimiento de fases superfluidas en He^3 líquido [4], han hecho crecer aún más el interés en este fenómeno.

La conductividad perfecta fue la primera propiedad observada por K. Onnes en 1911, en Mercurio, y es aún la propiedad en la que están basadas muchas de las aplicaciones presentes y potenciales de los superconductores

tales como líneas de transmisión de altas corrientes o electroimanes con campos magnéticos muy intensos. La expulsión de campos magnéticos del interior del superconductor [5], conocida como diamagnetismo perfecto, es otra característica básica de los superconductores. La reversibilidad de este proceso implica que el estado superconductor puede ser destruido por un campo magnético crítico. La existencia de corrientes persistentes en anillos superconductores¹ [6] y la cuantización de flujo magnético [7] son otros ejemplos del comportamiento magnético de los superconductores.

Una propiedad térmica distintiva de los superconductores es que la transición de fase es de segundo orden en ausencia de campos magnéticos [8]. Esto implica que no hay calor latente y el calor específico presenta una discontinuidad en $T = T_c$.

Por último, aunque las propiedades cristalográficas de los superconductores son idénticas para la fase normal y la superconductora, estudios detallados de muestras isotópicamente puras muestran que la red iónica juega un papel importante en la superconductividad; la temperatura de transición varía [9] en función de la masa iónica M como

$$T_c \propto M^{-1/2}.$$

Este resultado explica la importancia de la interacción atractiva electrón-fonón como mecanismo de la formación de pares en la teoría BCS.

Pero es sin duda el descubrimiento de los superconductores cupratos de altas temperaturas lo que ha generado un gran interés en las teorías de superconductividad. En 1986 G. Bednorz y K. A. Müller [10] de los laboratorios de IBM en Suiza hallaron evidencia de superconductividad a $T \sim 30$ K en cerámicas de LaBaCuO , y posteriormente en bases $\text{La}_{2-x}\text{S}_{ax}\text{CuO}_4$ a $T \sim 38$ K. En 1987 Wu y Chu [11] hallaron en $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-a}$ temperaturas críticas de 92 K. En el año 1988, a base de Bismuto y Talio, temperaturas de 110 [12] y 125 K [13]. Más recientemente, en 1993 [14], a base de Mercurio a altas presiones, se han obtenido temperaturas de 133 K. Grandes familias de aleaciones superconductoras están basadas en sistemas de este tipo. Esto demuestra que el esfuerzo experimental por obtener materiales con temperaturas críticas altas seguramente no va a disminuir y con suerte podemos esperar la aparición de superconductores a temperatura ambiente.

Esta tesis presenta los resultados de la aplicación de la idea de que el mecanismo de la superconductividad es una condensación de Bose-Einstein

¹J. File y R.G. Mills, hallaron tiempos de vida media del orden de 10^6 años.

(CBE) de los pares excitados de electrones, cuyo mecanismo de formación sigue siendo la interacción BCS. Como aportación principal y novedosa a la teoría CBE, se introduce en las ecuaciones para temperaturas críticas la dependencia con la intensidad del acoplamiento entre los electrones que forman los pares de Cooper excitados. Además se reconstruyen las funciones termodinámicas importantes (energía interna, entropía) para el gas ideal cuántico de electrones en ausencia de campos magnéticos, para derivar de ellas el salto en el calor específico en la transición superconductor. Para este propósito primeramente se hace uso de la teoría tradicional BCS, se presentan las expresiones para estas funciones y se las resuelve numéricamente para su posterior graficación. Después se compara con el esquema que involucra a la CBE en superconductividad para el mismo propósito.

En el Capítulo 2 se presenta la teoría BCS con el mecanismo de interacción fonónica para la formación de pares y la aparición de una brecha de energía mínima de excitación como ingredientes fundamentales. Se obtienen expresiones para energías internas en el estado base y se calculan su diferencia para el estado normal y superconductor. Se desarrollan expresiones explícitas para la entropía $S(T)$ y la energía interna $U(T)$ y se grafican; estas gráficas son escasamente halladas en cursos básicos de superconductividad. A partir de ellas se obtienen los calores específicos $C_V(T)$, que también se grafican y se calcula el salto en el calor específico que ocurre en la temperatura crítica, T_c . Los resultados concuerdan con los predichos por BCS. Con lo anterior se confirma que desde el punto de vista termodinámico ocurre una transición de fase de segundo orden.

En el Capítulo 3 se expone el modelo CBE. Se parte de la idea de que la superconductividad se origina por la condensación de un gas de partículas cuasi-bosónicas sin interacción. Este conjunto está formado por pares ligados de electrones con un momento $\hbar K$ del centro de masa distinto de cero, llamados parones, además de los originales pares de Cooper con momento total cero. En el límite de momentos del centro de masa pequeños, los pares tienen una relación de dispersión lineal [16], en vez de cuadrática. Se obtienen expresiones para las temperaturas críticas del condensado a partir de su dependencia con el número de bosones en el condensado, para cualquier relación de dispersión y dimensionalidad, D . Estas temperaturas son superiores en todos los casos estudiados a los valores correspondientes predichos por la BCS.

En el Capítulo 4, se introduce en la relación de dispersión lineal para las partículas bosónicas la dependencia funcional con λ , la constante de acopla-

miento de los pares, y $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F$, la energía de los fonones característicos de la red relativa al nivel de Fermi. Se obtienen expresiones generales nuevas para la relación de dispersión de los pares y a partir de ellas, nuevas expresiones para las temperaturas críticas, T_c , para una relación de dispersión lineal y dimensionalidad cualquiera. Las fórmulas obtenidas son presentadas y graficadas para 2D y 3D; se grafican como función de ν en los límites de acoplamiento débil ($\lambda = 0$) y valores intermedios ($\lambda = 1/2$), y como función de $0 < \lambda \leq 1$ para valores típicos de ν (0.05 en 2D y 0.001 en 3D).

En el Capítulo 5 se evalúan los resultados al comparar los modelos de superconductividad BCS y CBE mediante las gráficas de funciones termodinámicas y temperaturas críticas. La predicción teórica en el modelo CBE nos da la inexistencia en el salto en C_V en 2D, mientras que en 3D se obtiene un salto del orden correcto. Finalmente se dan las predicciones basadas en CBE para T_c en 2D y 3D.

En el Apéndice A se obtiene la expresión de entropía para un gas cuántico de fermiones en términos de su función de distribución.

Capítulo 2

Superconductividad BCS

2.1 BCS y pares de Cooper

La parte medular de la teoría BCS habla de la existencia de pares de Cooper cuyo mecanismo de formación es la interacción atractiva electrón-fonón. El modelo se refiere a aquellos electrones del superconductor con energías cercanas a E_F , la energía de Fermi. El sólido superconductor se aproxima por un fluido de electrones más los iones puntuales en la red. Sólo al tomar en cuenta el movimiento de los iones que forman la red, es posible obtener los términos que dan origen a la superconductividad. Estos términos fonónicos, debidos a la vibración de la red, son los mismos que se consideran al estudiar la elasticidad del sólido. Se supone que la presencia de un electrón en el medio dominado por un ion da origen a una polarización capaz de atraer a otro electrón hacia él. Si el efecto neto entre los términos de atracción fonónica y la repulsión coulombiana de los electrones da como resultado una fuerza atractiva, sin importar qué tan débil pueda ser ésta, hay posibilidad de que se formen pares de partículas, y por tanto, la aparición de la superconductividad.

La posibilidad de formación de pares se explica debido a que el mar de Fermi de los electrones de conducción es inestable ante la formación de los mismos. Originalmente, a temperatura cero, todos los estados de momento $k \leq k_F$ están ocupados. Una vez que los pares comienzan a formarse los nuevos estados hacia los cuales son dispersados los electrones ($k \rightarrow k'$) tendrán $k' \geq k_F$. Este proceso tiende a incrementar la energía cinética del sistema y por lo tanto lo vuelve inestable. Sin embargo, este incremento en energía

cinética es compensado por la aparición de la fuerza atractiva, dando lugar a una energía de amarre, Δ_0 , necesaria para la formación del par. Esta energía aparece como eigenvalor de la ecuación de Schrödinger para un par de electrones que interaccionan sobre el mar de Fermi vía la interacción BCS.

Debido a la inestabilidad del sistema ante la formación de pares, podemos esperar que dichos pares continúen formándose hasta que se alcance un punto de equilibrio en el mar de Fermi. Cuando esto sucede, el estado del sistema habrá cambiado tanto que la energía de enlace para la formación de nuevos pares se va a cero.

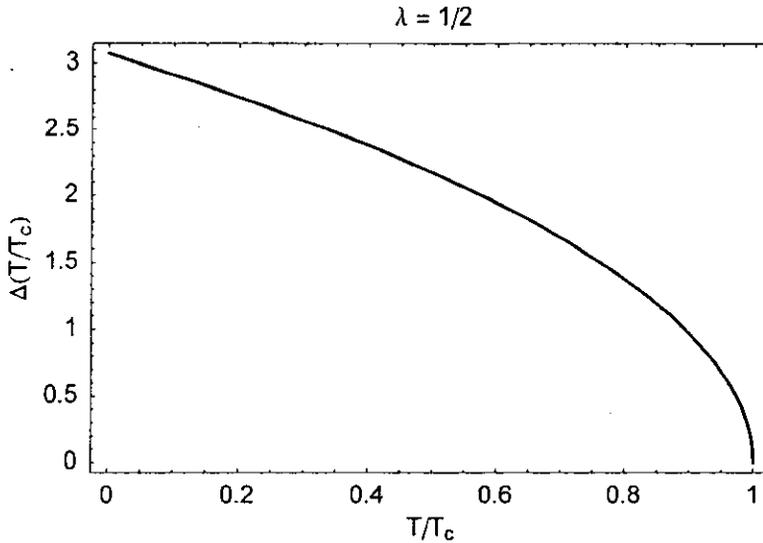


Figura 2.1: El gap BCS de energía de excitación mínima como función de T/T_c , para un valor de acoplamiento $\lambda = 1/2$. Estrictamente hablando, esta curva sólo es válida en el límite $T \simeq T_c$.

En la teoría BCS, los pares de Cooper están formados por electrones con momentos y espines opuestos, $(k \uparrow, -k \downarrow)$, de modo que el momento del centro de masa del par, $\hbar K = 0$. En una capa alrededor de la superficie de Fermi del orden de la energía de Debye, el número de electrones con $K = 0$ que están posibilitados para intercambiar fonones es máximo [15]. Sin

embargo existen además pares excitados con $K \neq 0$, cuyo comportamiento es distinto al de un par libre [16], como se verá más adelante.

2.2 La energía de condensación a $T = 0$

Para encontrar la energía de condensación o del estado base del superconductor se usa el método variacional. Se propone primero una función de onda para este estado y luego se calcula el valor esperado del hamiltoniano, que deberá minimizarse.

En la teoría de Landau sobre el mar de Fermi, la interacción entre electrones, crea y dispersa partículas sobre la superficie del mar de Fermi y hoyos por debajo de ella. El espacio fase disponible para estos eventos está restringido por el principio de exclusión de Pauli de modo que hay excitaciones que se vuelven extremadamente estables cerca de la superficie de Fermi y se convierten en cuasipartículas llamadas bogolones. Estas excitaciones elementales se comportan como si no hubiera ninguna otra interacción entre ellas, formando un gas ideal.

Consideremos [15] el sistema de cuasipartículas (bogolones¹) con energías de excitación.

$$E_k = (\xi_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}, \quad (2.1)$$

donde $\xi_k = \epsilon_k - E_F$, representa la energía cinética de la partícula referida al mar de Fermi y Δ_k es un *gap* de energía o excitación mínima.

En [15] la aproximación utilizada por BCS para el potencial de interacción entre las partículas es

$$V_{kl} = \begin{cases} -V & \text{si } |\xi_k|, |\xi_l| \leq \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.2)$$

En el estado base la función de onda del sistema es

$$|\Psi_G\rangle = \sum_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^* c_{-k\downarrow}^*)$$

donde $c_{k\sigma}$ y $c_{k\sigma}^*$ representan los operadores de aniquilación y creación, respectivamente, de un estado con momento k y espín σ ; v_k , u_k son, respectivamente, las amplitudes de probabilidad de que un estado esté ocupado o no lo esté.

¹Bogoliubov [17], usando operadores de ascenso-descenso, desarrolló las transformaciones que diagonalizan el hamiltoniano de este sistema y describen a estas cuasipartículas.

Partimos con un hamiltoniano que omite los términos que involucran a electrones no apareados y aquellos apareados con $K \neq 0$, pero que, presumiblemente, incluye a aquellos términos decisivos para la superconductividad. Este es el llamado hamiltoniano *reducido o de apareamiento*

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k n_k + \sum_{kl} V_{kl} c_{k\uparrow}^* c_{-k\downarrow}^* c_{-l\downarrow} c_{l\uparrow},$$

donde el número total de partículas es $N = \sum_k n_k$. Para el estado base BCS, calculamos el valor esperado de la energía usando, como anticipamos, el método variacional, es decir

$$\delta \langle \Psi_G | H - \mu N_{op} | \Psi_G \rangle = 0. \quad (2.3)$$

Para regular el valor promedio del número total de partículas, se incluye el término μN_{op} , donde μ es el potencial químico y $N_{op} = \langle N \rangle$, es el operador de número de partículas. La inclusión del término $-\mu N_{op}$ es matemáticamente equivalente a fijar el cero de la energía cinética en el valor μ (o bien E_F). Manipulando formalmente las dos expresiones anteriores se puede ver que el primer término, correspondiente a la energía cinética, queda

$$\langle \Psi_G | \sum_k \xi_k n_k | \Psi_G \rangle = 2 \sum_k \xi_k |\nu_k|^2 \quad (2.4)$$

y el término de interacción

$$\langle V \rangle = \sum_{kl} V_{kl} u_k v_k^* u_l^* v_l. \quad (2.5)$$

Basado en los resultados de BCS [15], se tiene la siguiente ecuación para la energía de excitación mínima Δ_k

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{E_k} = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{(\xi_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}}. \quad (2.6)$$

Sabemos que v_k y u_k deben cumplir la condición de normalización $|v_k|^2 + |u_k|^2 = 1$. Tomamos de [17] los coeficientes Bogoliubov-Valatin para las amplitudes de probabilidad v_k y u_k que cumplen con esta condición

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right) \quad (2.7)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right) = 1 - v_k^2 \quad (2.8)$$

con las cuales quedan completamente especificados tanto $|\Psi_G\rangle$ como la energía del estado base

$$\langle \Psi_G | H - \mu N_{op} | \Psi_G \rangle = \sum_k \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta_k^2}{V}.$$

Ahora, el estado normal para $T = 0$ corresponde a tomar $\Delta_k = 0$; $E_k = |\xi_k|$ para los estados con $k \leq k_F$ y $E_k = \xi_k$, para aquellos con $k \geq k_F$. De modo que el valor esperado para este estado queda

$$\langle \Psi_G | H - \mu N_{op} | \Psi_G \rangle_n = - \sum_{k \leq k_F} 2 |\xi_k| = 2 \sum_{k \leq k_F} \xi_k$$

Escribamos los valores esperados simplemente como $\langle U_0 \rangle_{s,n}$; s, n indicando los estados superconductor y normal. La diferencia entre las energías internas del estado base superconductor y normal, queda determinada por

$$\langle U_0 \rangle_s - \langle U_0 \rangle_n = \sum_{k \geq k_F} \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \sum_{k \leq k_F} \left(\xi_k + \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta_k^2}{V}$$

de donde, usando la simetría de los estados k respecto al nivel de Fermi:

$$\langle U_0 \rangle_s - \langle U_0 \rangle_n = 2 \sum_{k \geq k_F} \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta_k^2}{V}.$$

Ahora, cambiando la suma sobre los estados k por una integración sobre ξ^2 , y recordando que $E_k = (\xi^2 + \Delta_k^2)^{\frac{1}{2}}$ obtenemos [17]

$$\langle U_0 \rangle_s - \langle U_0 \rangle_n = g(E_F)(\hbar\omega_D)^2 \left[1 - \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^2} \right]. \quad (2.9)$$

En la ecuación anterior, $g(E_F)$ es la densidad de estados en el nivel de Fermi y hemos usado que $\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi/E = \sinh^{-1}(\hbar\omega_D/\Delta)$ y la identidad $\ln|x + \sqrt{a^2 + x^2}| = \sinh^{-1}(x/a)$. Podemos escribir [18] (2.9) de otra manera, haciendo uso de la expresión BCS para $\Delta = \hbar\omega_D/\sinh(1/\lambda)$, donde $\lambda \equiv g(E_F)V$ es la constante del acoplamiento electrón-fonón

$$\langle U_0 \rangle_s - \langle U_0 \rangle_n = -g(E_F)\hbar\omega_D \left[\frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/\lambda} - 1} \right]. \quad (2.10)$$

²Usamos $\sum_k \rightarrow g(E_F) \int d\xi$, la cual es exacta en 2D y $g(\epsilon) \sim g(E_F)$ en la franja de interacción fonónica para 1D y 3D.

Usando de [20] que el número de pares a temperatura cero, $N_{B,0}(0)$, con momento lineal cero, es $g(E_F)\hbar\omega_D$, siempre y cuando $\hbar\omega_D \ll E_F$, y que la energía de amarre del par (nótese que es distinta a la *gap* de energía BCS) puede expresarse como $\Delta_0 = 2\hbar\omega_D/(e^{2/\lambda} - 1)$, se puede escribir la Ec. (2.10) como

$$\langle U_0 \rangle_s - \langle U_0 \rangle_n = -N_{B,0}\Delta_0. \quad (2.11)$$

Es decir, la diferencia de energías para el estado base es simplemente la energía total del gas ideal de bosones con energías de amarre Δ_0 , para cualquier valor de acoplamiento λ . Esta es una propiedad sorprendente de la teoría BCS para $T = 0$, que nos induce a pensar que el estado base superconductor consiste precisamente en una mezcla binaria de un gas ideal de bosones (pares de Cooper) y otro gas ideal de fermiones, sin acoplar.

La imagen de un gas ideal parón-fermión complementa la interpretación común de los estados excitados BCS como un gas ideal de las excitaciones fermiónicas llamadas "bogolones", como se ha mencionado aquí, teniendo en cuenta que esta última interpretación es válida únicamente en el límite de acoplamiento débil. De la ecuación (2.11) podemos llegar [20] a la expresión para acoplamiento débil, haciendo $\lambda \rightarrow 0$

$$\langle U_0 \rangle_s - \langle U_0 \rangle_n \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{2}g(E_F) [2\hbar\omega_D e^{-1/\lambda}]^2 \quad (2.12)$$

o bien

$$\langle U_0 \rangle_s - \langle U_0 \rangle_n \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{2}g(E_F)\Delta^2. \quad (2.13)$$

Al pasar de (2.12) a (2.13) de nuevo aparece Δ , el *gap* de excitación mínima para los bogolones.

2.3 Entropía

Los bogolones que intervienen en la formación de pares obedecen la función de distribución de Fermi, $f(E_k) \equiv f_k = (1 + e^{\beta E_k})^{-1}$, donde T es la temperatura absoluta y $\beta = 1/k_B T$, con k_B la constante de Boltzmann. Para estos bogolones $E_k \geq \Delta$. La entropía (ver Apéndice A), $S(T)$, puede obtenerse para el gas ideal de bogolones en función de f_k :

$$S = -2k_B \sum_k [(1 - f_k) \ln(1 - f_k) + f_k \ln(f_k)]. \quad (2.14)$$

Para $T \geq T_c$; $E_k = |\xi_k|$ y, usando la simetría respecto al nivel de Fermi, tenemos

$$\begin{aligned} S_n &= -4k_B g(E_F) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi [\beta\xi e^{\beta\xi} f(\xi) + \ln f(\xi)] \\ &= -4k_B g(E_F) [I_{1n} + I_{2n}], \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} I_{1n} &\equiv \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \beta\xi e^{\beta\xi} f(\xi) \\ &= \frac{1}{\beta} \left[\frac{\pi^2}{12} + \beta\hbar\omega_D \ln(1 + e^{\beta\hbar\omega_D}) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-e^{\beta\hbar\omega_D})^m}{m^2} \right] \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} I_{2n} &\equiv \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \ln(1 + e^{\beta\xi})^{-1} = \\ &= \frac{1}{\beta} \left[\frac{\pi^2}{12} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-e^{\beta\hbar\omega_D})^m}{m^2} \right]. \end{aligned}$$

De modo que

$$S_n = -4k_B g(E_F) \frac{1}{\beta} \left[\frac{\pi^2}{6} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-e^{\beta\hbar\omega_D})^m}{m^2} + \beta\hbar\omega_D \ln(1 + e^{\beta\hbar\omega_D}) \right]. \quad (2.15)$$

En unidades $k_B T_c$ para la energía³, tenemos

$$\frac{S_n(T/T_c)}{g(E_F)k_B^2 T_c} = -4 \frac{1}{b} \left[\frac{\pi^2}{6} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-e^{b\bar{\nu}})^m}{m^2} + b\bar{\nu} \ln(1 + e^{b\bar{\nu}}) \right], \quad (2.16)$$

donde $b \equiv T_c/T$, y $\bar{\nu} \equiv \hbar\omega_D/k_B T_c$ son variables adimensionales. Al usar de [1], [15] la expresión BCS para la temperatura crítica

$$T_c^{BCS} = \frac{2e^\gamma}{\pi} \Theta_D e^{-1/\lambda} \approx 1.13 \Theta_D e^{-\lambda}$$

³podríamos usar igualmente unidades γT_c , como en [21], con lo que tendríamos un factor adicional $3/\pi^2$ en las expresiones.

donde Θ_D es la temperatura de Debye, se tiene $\bar{\nu} = (1/1.13)e^{1/\lambda}$.

ENTROPÍA BCS

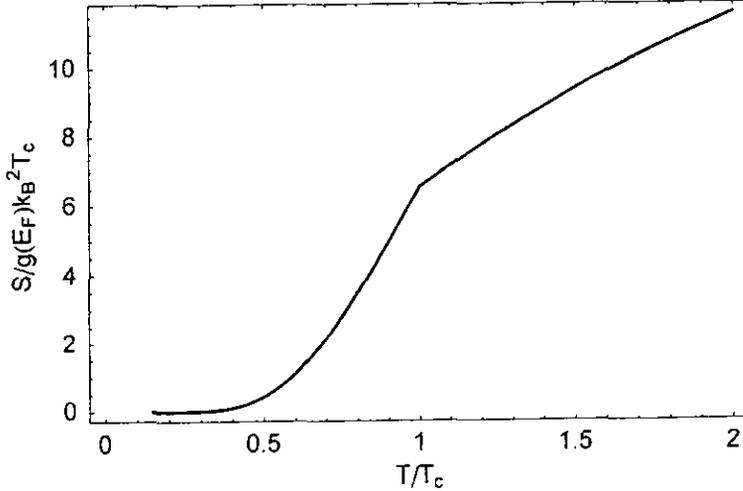


Figura 2.2: La entropía S a partir del modelo BCS en unidades $g(E_F)k_B^2 T_c$, de acuerdo con las Ecs. (2.16) y (2.18), para los estado normal y superconductor.

Ahora, para $T \leq T_c$,

$$S_s = -2k_B g(E_F) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} [\beta E_k e^{\beta E_k} f(E_k) + \ln f(E_k)] d\xi,$$

con $E_k = (\xi_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}$. Cambiando la variable de integración por E_k

$$S_s = -4k_B g(E_F) \int_{\Delta}^H dE \left[\beta E^2 e^{\beta E} \left(\frac{1}{1 + e^{\beta E}} \right) + E \ln \left(\frac{1}{1 + e^{\beta E}} \right) \right] \frac{1}{(E^2 - \Delta^2)^{1/2}}, \quad (2.17)$$

donde hemos usado $d\xi = E dE/\xi$, y $H \equiv (\hbar^2 \omega_D^2 + \Delta)^{1/2}$. En unidades $k_B T_c$

$$\frac{S_s(T/T_c)}{g(E_F)k_B^2 T_c} = -4 \int_{\bar{\Delta}}^{\bar{H}} d\bar{E} \left[\bar{E}^2 e^{\beta \bar{E}} \left(\frac{1}{1 + e^{\beta \bar{E}}} \right) + \bar{E} \ln \left(\frac{1}{1 + e^{\beta \bar{E}}} \right) \right] \frac{1}{(\bar{E}^2 - \bar{\Delta}^2)^{1/2}}, \quad (2.18)$$

con $\bar{E} = E/k_B T_c$, $\bar{H} \equiv H/k_B T_c$ y $\bar{\Delta} \equiv \Delta/k_B T_c$ como variables adimensionales. Al usar de [21] la aproximación

$$\Delta = \Delta_0 \frac{\pi}{e^\gamma} (1 - T/T_c)^{1/2} \approx \Delta_0 1.764 (1 - T/T_c)^{1/2}$$

con $\pi/e^\gamma \approx 1.764$, $\Delta_0 = 1.74 k_B T_c$, y (2.16), podemos expresar $\bar{\Delta} = 3.06(1 - T/T_c)^{1/2}$, y por consiguiente $\bar{H} = (\bar{v}^2 + \bar{\Delta}^2)^{1/2}$. La integral (2.18) no puede ser resuelta analíticamente para dar una expresión explícita de $S(T)$ en el estado superconductor. Usando para el estado normal (2.16) y, mediante integración numérica de (2.18) para el estado superconductor, se obtiene la Fig. 2.2. En ella podemos apreciar como la entropía del sistema disminuye más rápidamente en el estado superconductor, por debajo de T_c , indicando que el sistema se halla en un estado de ordenamiento mayor.

2.4 Energía Interna

Para tratar con estados excitados, $T \neq 0$, en vez de usar métodos variacionales usaremos el hamiltoniano (llamado *modelo*) que considera una superposición de estados para muchos cuerpos considerando a los pares, ocupados o no, como unidades. Un operador como $c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}$ puede tener valores de expectación distintos de cero, contrario a lo que sucedería en un metal normal; debido al alto número de partículas involucradas, las fluctuaciones alrededor de estos valores de expectación serán pequeñas. Con esta aproximación, el hamiltoniano de apareamiento se verá modificado y de hecho ya no conserva el número de partículas, a menos que se asigne una fase fija al valor promedio de dichos operadores. La transformación que diagonaliza a este hamiltoniano está dada [17] por

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow} &= u_k^* \gamma_{0k} + v_k \gamma_{1k}^* \\ c_{k\downarrow}^* &= -v_k^* \gamma_{0k} + u_k \gamma_{1k}^* \end{aligned}$$

que son los operadores con los que se crean o destruyen pares; $n_{k,\sigma} = c_{k,\sigma}^* c_{k,\sigma}$, es el promedio de partículas con espín σ para cada estado k , de modo que $N_{prom} = \sum_k n_{k,\sigma}$. El hamiltoniano modelo puede escribirse [21]

$$\begin{aligned} H_M &= \sum_k \epsilon_k n_{k,\sigma} + \sum_k \xi_k (|u_k|^2 - |v_k|^2) (\gamma_{0k}^* \gamma_{0k} - \gamma_{1k}^* \gamma_{1k}) - \\ &\quad - \sum_{k,k'} V_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} (1 - \gamma_{0k}^* \gamma_{0k} - \gamma_{1k}^* \gamma_{1k}) (1 - \gamma_{0k'}^* \gamma_{0k'} - \gamma_{1k'}^* \gamma_{1k'}) \end{aligned}$$

donde se observa que el nuevo operador γ_{0k} , hace decrecer el momento del sistema en k y γ_{1k} lo aumenta en la misma cantidad. El número de ocupación es $\gamma_k^* \gamma_k$.

La energía interna, $U(T)$, se calcula como el promedio térmico de H_M , es decir

$$U(T) = \langle \xi_k (c_{k1}^* c_{k1} + c_{k1}^* c_{k1}) \rangle + \sum_k \xi_k (|u_k|^2 - |v_k|^2) \langle \gamma_{0k}^* \gamma_{0k} + \gamma_{1k}^* \gamma_{1k} \rangle - \sum_k u_k v_k \langle 1 - \gamma_{0k}^* \gamma_{0k} - \gamma_{1k}^* \gamma_{1k} \rangle \Delta_k,$$

donde

$$\Delta_k = \sum_k V_{k,k'} u_{k'} v_{k'} \langle 1 - \gamma_{0k}^* \gamma_{0k} - \gamma_{1k}^* \gamma_{1k} \rangle.$$

Ahora, $\langle \gamma_{0k}^* \gamma_{0k} + \gamma_{1k}^* \gamma_{1k} \rangle = 2f_k$ y $\langle 1 - \gamma_{0k}^* \gamma_{0k} - \gamma_{1k}^* \gamma_{1k} \rangle = 1 - 2f_k$, de modo que

$$U(T) = \sum_k [2\xi_k |v_k|^2 + \xi_k (|u_k|^2 - |v_k|^2) 2f_k - u_k v_k (1 - 2f_k) \Delta_k].$$

Usando de nuevo de [17] el resultado de que $|u_k|^2 = 1 - |v_k|^2 = \frac{1}{2} (1 + \xi_k/E_k)$ y $u_k v_k = \Delta_k/2E_k$, tenemos [18]

$$U(T) = \sum_k \xi_k - (1 - 2f_k) \left(E_k - \frac{\Delta_k^2}{2E_k} \right). \quad (2.19)$$

En el estado normal, $T > T_c$, $\Delta_k = 0$ y $E_k = |\xi_k|$; podemos escribir

$$\begin{aligned} U_n(T) &= g(E_F) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\xi [\xi - |\xi| \tanh(\beta|\xi|/2)] \\ &= 2g(E_F) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi [\xi - \xi \tanh(\beta\xi/2)], \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde hemos usado la simetría de la integral respecto al nivel de Fermi y el hecho de que $1 - 2f_k = \tanh(\beta\xi_k/2)$. Con ξ en unidades de $k_B T_c$ tenemos

$$\frac{U_n(T/T_c)}{g(E_F) k_B^2 T_c^2} = 2 \int_0^{\bar{v}} d\bar{\xi} [\bar{\xi} - \bar{\xi} \tanh(b\bar{\xi}/2)]. \quad (2.21)$$

Integrando,

$$\frac{U_n(T/T_c)}{g(E_F)k_B^2T_c^2} = \frac{2}{b^2} \left[\bar{v}^2 b^2 - \frac{\pi^2}{6} - 2 \sum_m \frac{(-e^{\bar{v}b})^m}{m^2} - 2b\bar{v} \ln [1 + e^{\bar{v}b}] \right]. \quad (2.22)$$

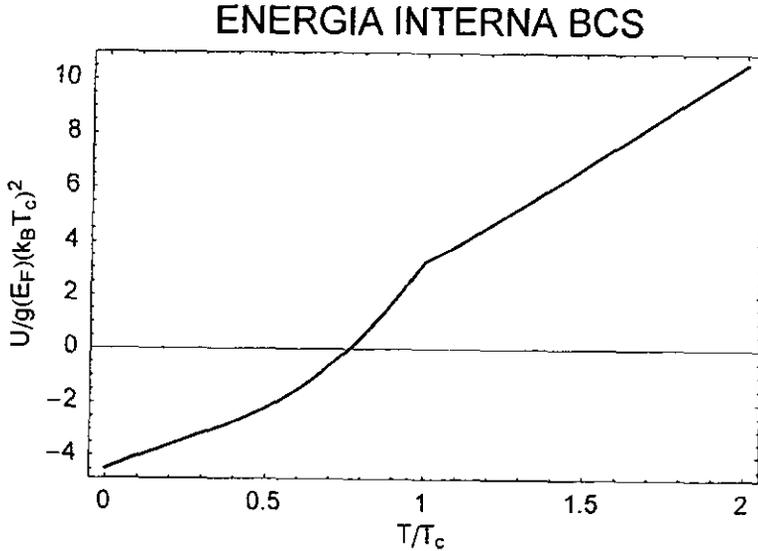


Figura 2.3: La energía interna U para $T \neq 0$ en unidades $g(E_F)k_B^2T_c^2$, como función de T/T_c de acuerdo con las Ecs. (2.22) y (2.24), para los estados normal y superconductor.

En el miembro de la derecha, el primero es una constante que representa a $U_n(0)$, al sustituir numéricamente \bar{v} ; el segundo es proporcional a T^2 y da origen a la conocida expresión $C_V \equiv (\partial U/\partial T)_V = \gamma T$ para el estado normal, como se demostrará en el apartado siguiente. De (2.19), para el estado superconductor $T \leq T_c$

$$U_s(T) = g(E_F) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\xi \left[\xi - \tanh(\beta E/2) \left(E - \frac{\Delta^2}{2E} \right) \right],$$

que, al cambiar la variable de integración por E ,

$$U_s(T) = 2g(E_F) \int_{\Delta}^H dE \left[E - \frac{2E^2 - \Delta^2}{2(E^2 - \Delta^2)^{1/2}} \tanh(\beta E/2) \right]. \quad (2.23)$$

Con E en unidades de $k_B T_c$

$$\frac{U_s(T/T_c)}{g(E_F)k_B^2 T_c^2} = 2 \int_{\bar{\Delta}}^{\bar{H}} d\bar{E} \left[\bar{E} - \frac{2\bar{E}^2 - \bar{\Delta}^2}{2(\bar{E}^2 - \bar{\Delta}^2)^{1/2}} \tanh(b\bar{E}/2) \right]. \quad (2.24)$$

Al igual que en el caso de la entropía, la expresión (2.24) contiene una función no analítica. Sin embargo, llevando a cabo la integración numérica de ésta y usando (2.22) para el estado normal, se puede obtener la Fig. 2.3. La Fig. 2.4 es una ampliación de Fig. 2.3 alrededor del punto de inflexión en $T = T_c$.

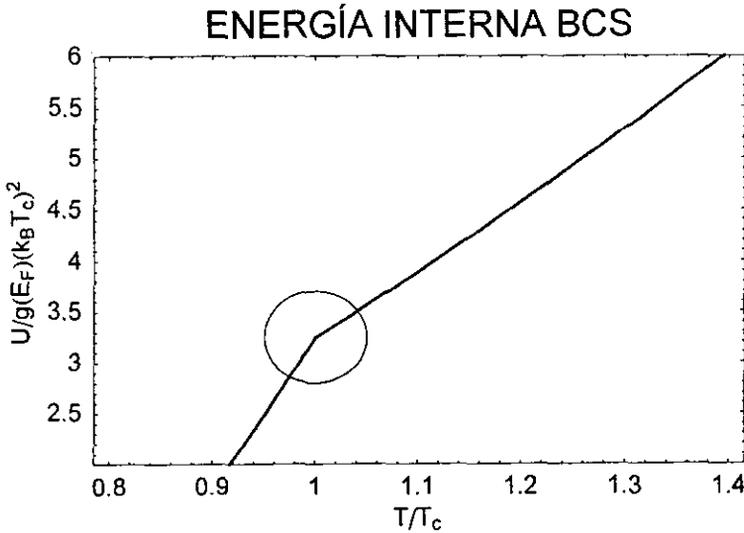


Figura 2.4: La energía interna en unidades $g(E_F)k_B^2 T_c^2$ de acuerdo con (2.22) y (2.24). Se puede observar claramente el punto singular en $T = T_c$, donde la derivada es discontinua.

2.5 Calor específico

El comportamiento del calor específico de un superconductor se deriva de las funciones termodinámicas asociadas a él y su dependencia con la temperatura en los estados normal y superconductor. A partir de la expresión (2.14) para la entropía se puede calcular el calor específico a volumen constante, C_V ,⁴ en los estados normal y superconductor, usando

$$C_V = T \frac{dS}{dT} = -\beta \frac{dS}{d\beta}.$$

Operando sobre $S(T)$ tenemos

$$C_V = -2\beta^2 k_B \sum_k^\infty E_k \frac{\partial f_k}{\partial \beta}.$$

Si pasamos esta sumatoria a una integración sobre ξ y hacemos $E_k = |\xi|$, tenemos, para $T > T_c$,

$$C_n = -2\beta k_B g(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{\partial f}{\partial |\xi|} \right) \xi^2.$$

El valor de esta integral es conocido [21]. Por encima de la temperatura crítica, el calor específico del sólido sigue la teoría de Debye, en la cual, la contribución debida al gas de electrones es una función lineal de la temperatura.

$$C_n(T) = 2g(E_F) k_B^2 \frac{\pi^2}{3} T, \quad (2.25)$$

o bien

$$C_n = \gamma T$$

donde γ es la llamada constante de Euler. Para el estado superconductor tenemos

$$C_s = -2\beta k_B \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial E} \left(E^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{d}{d\beta} \Delta^2 \right) \quad (2.26)$$

donde usamos que $\partial f_k / \partial \beta = df_k / d(\beta E) (E + \beta dE/d\beta)$. Llevando la suma a integración sobre ξ

$$C_s(T) = 2\beta k_B g(E_F) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\xi \frac{\beta e^{\beta E}}{(1 + e^{\beta E})^2} \left(E^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{d}{d\beta} \Delta^2 \right),$$

cambiando la integración ahora sobre E

$$C_s(T) = 4\beta k_B g(E_F) \int_{\Delta}^H dE \frac{\beta E e^{\beta E}}{(1 + e^{\beta E})^2} \left(E^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{d}{d\beta} \Delta^2 \right) \frac{1}{(E^2 - \Delta^2)}$$

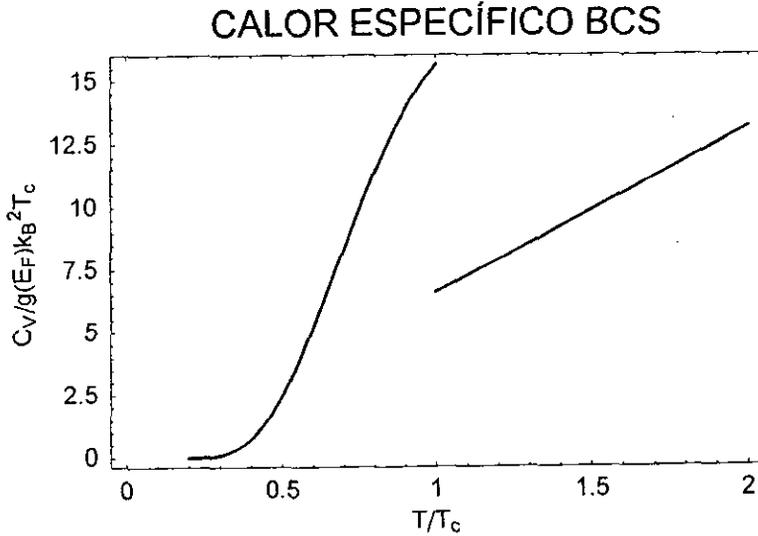


Figura 2.5: El calor específico a volumen constante, C_V en unidades $g(E_F)k_B^2T_c$ vs T/T_c , de acuerdo con las Ecs. (2.25) y (2.28). Se observa precisamente en $T = T_c$ el familiar salto en el calor específico.

Ahora, sabemos que, por debajo de T_c , pero muy cerca, $T = T_c^-$ [21]

$$\Delta(T) = 1.74 \frac{\pi}{e^{\gamma}} k_B T_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Por lo tanto

$$\Delta^2(T) = (1.74 \frac{\pi}{e^{\gamma}})^2 k_B^2 T_c (T_c - T),$$

de donde

$$\beta \frac{d\Delta^2}{d\beta} = -T \frac{d\Delta^2}{dT} = (3.06)^2 k_B^2 T_c T.$$

De modo que tenemos, finalmente

$$C_s(T) = 4k_B g(E_F) \int_{\Delta}^{\hbar} dE \frac{\beta E e^{\beta E}}{(1 + e^{\beta E})^2} \left(\beta E^2 + \frac{1}{2} (3.06)^2 k_B T_c \right) \frac{1}{(E^2 - \Delta^2)}. \quad (2.27)$$

O bien, en unidades $k_B T_c$

$$\frac{C_s(T)}{g(E_F) k_B^2 T_c} = 2 \int_{\bar{\Delta}}^{\bar{\hbar}} d\bar{E} \frac{b \bar{E} e^{b \bar{E}}}{(1 + e^{b \bar{E}})^2} (2b \bar{E}^2 + (3.06)^2) \frac{1}{(\bar{E}^2 - \bar{\Delta}^2)}. \quad (2.28)$$

Es posible obtener soluciones numéricas de esta integral como en los apartados anteriores para graficar C_V vs T y observar la discontinuidad característica en $T = T_c$. En la Fig. 2.5 graficamos el calor específico a volumen constante, C_V , en unidades $g(E_F) k_B^2 T_c$, como función de T/T_c . En ella se observa claramente que existe una discontinuidad en la transición del estado normal al superconductor, la cual discutimos a continuación.

2.6 La discontinuidad en el calor específico

Con la teoría BCS (para un campo magnético externo nulo) se predice la existencia de la discontinuidad o salto en los valores de calor específico que ocurre en la transición superconductor ($T = T_c$). La determinación específica de ésta se sigue partiendo de la entropía y la energía interna.

2.6.1 Vía la entropía

Partiendo de (2.26)

$$C_V = -2\beta k_B \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial E} \left(E^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{d}{d\beta} \Delta^2 \right).$$

Cerca de la temperatura crítica, por encima de T_c , en estado normal, con $\Delta = 0$ y $E = |\xi|$

$$C_n = -2\beta k_B \sum_k \frac{\partial f}{\partial E} \xi^2.$$

Si pasamos esta sumatoria a una integración sobre ξ

$$C_n = -2\beta k_B g(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{\partial f}{\partial |\xi|} \right) \xi^2.$$

Ahora, para $T = T_c^-$, en estado superconductor, $E \rightarrow |\xi|$ y

$$C_s = -2\beta k_B g(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{\partial f}{\partial |\xi|} \right) \left(\xi^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{d}{d\beta} \Delta^2 \right).$$

De modo que podemos escribir, para $T \approx T_c$ [21]

$$\begin{aligned} \Delta C_V &= C_s - C_n = -2\beta k_B g(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{2} \beta \frac{d}{d\beta} \Delta^2 \left(\frac{\partial f}{\partial |\xi|} \right) \\ &= -g(E_F) \left. \frac{d\Delta^2}{dT} \right|_{T=T_c}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Donde se usa el hecho de que $\partial f / \partial \xi$ es una función par de ξ . Cerca de T_c , $\Delta(T)$ va hacia cero con una tangente vertical, siguiendo la forma de $(T - T_c)^{1/2}$. Este hecho implica que $d\Delta^2/dT$ es muy grande en $T = T_c^-$, pero cero por encima de ella, dando lugar a una discontinuidad de C_V en T_c . La existencia de un salto en los valores del calor específico implica que en el estado superconductor, para pequeñas pérdidas de calor se tiene un enfriamiento mayor.

Como hemos visto [21], para $T = T_c^-$

$$\Delta(T) = 1.74 \frac{\pi}{e^\gamma} k_B T_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{1}{2}}$$

por lo tanto:

$$\begin{aligned} \Delta^2(T) &= (1.74 \frac{\pi}{e^\gamma})^2 k_B^2 T_c (T_c - T) \\ \Rightarrow \frac{d\Delta^2}{dT} &= -(3.06)^2 k_B^2 T_c. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Sustituyendo en (2.29)

$$\Delta C_V = (3.06)^2 g(E_F) k_B^2 T_c.$$

de donde

$$\frac{\Delta C_V}{C_n} = \frac{(3.06)^2 g(E_F) k_B^2 T_c}{(2\pi^2/3) g(E_F) k_B^2 T_c} = 1.43.$$

Finalmente, si escribimos $C_n = \gamma T_c$:

$$\Delta C_V = 1.43 \gamma T_c, \quad (2.31)$$

que es un resultado conocido [21] de la BCS⁵.

⁵en [15] se tiene $\Delta C_V = 1.52 \gamma T_c$.

2.6.2 Vía la energía interna

Se tenía (2.19)

$$U(T) = \sum_k \left[\xi_k - (1 - 2f_k) \left(E_k - \frac{\Delta^2}{2E_k} \right) \right].$$

De esta expresión se puede calcular el calor específico, $C_V = dU(T)/dT = -\beta^2 k_B dU/d\beta$, para dar

$$C_V = -\beta^2 k_B \sum_k 2E_k \frac{df_k}{d\beta}, \quad (2.32)$$

donde usamos al derivar el hecho de que

$V_{kl}^{-1} = \sum_k (1 - 2f_k)/E_k$, es una constante en la aproximación BCS. El calor específico puede ser llevado a una forma distinta

$$C_V = -2\beta k_B \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial E} \left(E^2 + \frac{1}{2}\beta \frac{d}{d\beta} \Delta^2 \right),$$

que es la misma expresión (2.26), a partir de la cual se obtuvo en el apartado anterior [21] el salto en el calor específico como

$$\Delta C_V = 1.43\gamma T_c.$$

Por otra parte, precisamente para $T = T_c$, la integración numérica de (2.27) da $C_s(T_c) = 15.6394g(E_F)k_B^2 T_c$, que, con $C_n(T_c) = 2\frac{\pi^2}{3}g(E_F)k_B^2 T_c$, hace posible calcular el salto en el calor específico como

$$\frac{C_s - C_n}{C_n} \Big|_{T=T_c} = \frac{15.6394 - 6.5797}{6.5797} = 1.3769.$$

Es decir

$$\Delta C_V = 1.3769\gamma T_c. \quad (2.33)$$

El resultado obtenido es del orden adecuado [21], [23] y podemos atribuir la diferencia ($\approx 0.04\%$) con (2.31) a la precisión en la integración numérica que hemos hecho y a las aproximaciones de constantes como γ , π , etc. Por ejemplo, al integrar hemos tomado $1.74\frac{\pi}{e^{\gamma}} = 3.06796$ en lugar de 3.06^6 .

⁶Todos los cálculos numéricos de integración y para hallar raíces de ecuaciones, se han realizado con Mathematica[®] 3.0.

Capítulo 3

Condensación Bose-Einstein y Superconductividad

3.1 Introducción

La teoría BCS toma en cuenta la naturaleza colectiva del apareamiento de electrones. Para una temperatura elevada, los electrones con momento $\hbar k$ ocupan estados excitados en el espacio k . Debido al principio de exclusión de Pauli, los estados con el mismo número cuántico de espín no están posibilitados para la formación de pares. Como hemos visto, un par está constituido por los estados ($k \uparrow$, $k' \downarrow$); si $k' = -k$ tendremos los originales pares de Cooper con momento del centro de masa $\hbar K = 0$. Por otra parte, sin dejar de lado el mecanismo de interacción BCS para la formación de pares, [?] en el estado superconductor los pares de electrones con momento del centro de masa, $\hbar K \neq 0$ (pares de Cooper excitados o parones, con $k' = -k + K$), se comportan como cuasi-bosones¹ con una relación de dispersión lineal en la superficie de Fermi; a medida que la temperatura disminuye, la brecha de excitación mínima se hace más grande, de manera que la formación de pares estimula la formación de otros más, aumentando así el número de partículas condensadas. Análogamente a lo que sucede en un condensado de Bose-Einstein (CBE), todos los miembros del sistema en el estado base (estado condensado) comparten una misma función de onda cuántica [4]. Esto

¹Aunque no cumplen con las relaciones de conmutación de Bose, su función de distribución térmica es precisamente la de BE. (S. Fujita y S. Godoy, *Quantum Statistical Theory of Superconductivity*, Plenum, N.Y., 1996), Cap. 9.

le da al sistema propiedades de coherencia especiales con las que se explica la nula probabilidad de que ocurra una dispersión de los pares portadores de corriente eléctrica, causada por iones individuales de la red.

Para la formación de un condensado se requiere de la existencia y participación de los bosones con momento del centro de masa, $\hbar K$ mayor que cero. Una vez que se alcanza la temperatura crítica, estos pares excitados se anidarán mayoritariamente en el estado base de momento igual a cero.

3.2 Temperatura crítica

Consideremos [24] un gas ideal de bosones con una relación de dispersión general

$$\varepsilon_k = c_s k^s, \quad \text{donde } s > 0. \quad (3.1)$$

Para bosones ordinarios de masa m^* , en el vacío, $s = 2$ y $c_s = \hbar^2/2m^*$.

La densidad de bosones en d dimensiones se define como $n_B \equiv N_B/L^d$, donde

$$N_B = N_{B,0}(T) + \sum_{k \neq 0} [e^{\beta(\varepsilon_k - \mu_B)} - 1]^{-1}, \quad (3.2)$$

es el número total de partículas (bosones), el cual se conserva. En esta expresión, $\mu_B \leq 0$ es el potencial químico, $\beta \equiv 1/k_B T$, con k_B la constante de Boltzmann. En vista de que la distribución de Bose-Einstein es sumada sobre todos los estados k del sistema, $N_{B,0}(T)$ representa el número de bosones con momento cero, condensados, existentes a la temperatura T . Para temperaturas por encima de T_c , $N_{B,0}(T)$ es despreciable comparada con N_B . Justamente en $T = T_c$, $N_{B,0}(T) \simeq 0$. En el estado superconductor, con T por debajo de T_c , esta cantidad llega a ser comparable con N_B . Por último, $N_{B,0}(0) = N_B$.

La sumatoria en el espacio k en (3.2), en el límite de alta densidad, puede ser llevada a una integración

$$N_B = N_{B,0}(T) + \int_0^\infty dk [e^{\beta(\varepsilon_k - \mu_B)} - 1]^{-1} g(k) \quad (3.3)$$

donde $g(k)$ es la densidad de estados por unidad de número de onda². La

²en general se tendrá $g(k) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{\pi^{d/2} d k^{d-1}}{\Gamma(1+d/2)}$, [22].

evaluación de (3.3) involucra las llamadas integrales de Bose [22, p. 506]:

$$g_\sigma(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1}e^x - 1} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^\sigma} \rightarrow \zeta(\sigma). \quad (3.4)$$

En la expresión anterior $\zeta(\sigma)$ es la función Zeta de Riemann de orden σ . La identificación $g_\sigma(1) = \zeta(\sigma)$ es válida para toda $\sigma \geq 1^3$. Si $\sigma < 1$, $g_\sigma(1) \rightarrow \infty$. Más adelante, al hacer uso de esta integral para calcular la temperatura crítica, identificaremos σ con d/s , de modo que los resultados obtenidos serán válidos sólo para $d > s$.

Cuando la temperatura disminuye por debajo del valor crítico T_c , y el número $N_{B,0}(T)$ comienza a ser comparable con N_B , al mismo tiempo $\mu_B \simeq 0$; introduciendo la fugacidad $z \equiv e^{\beta\mu_B}$, tenemos $z \simeq 1$. De acuerdo con (3.4) [24]

$$g_{d/s}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{d/s}} = \begin{cases} \zeta(d/s); & d/s > 1 \\ \rightarrow \infty, & d/s \leq 1 \end{cases} \quad (3.5)$$

La fracción del condensado para $0 < T < T_c$ en d dimensiones es $N_{B,0}(T)/N_{B,0}(0)$. Como $N_B = N_{B,0}(T) + N_{B,k>0}(T)$ y $N_B = N_{B,0}(0)$, podemos escribir⁴

$$\frac{N_{B,0}(T)}{N_{B,0}(0)} = 1 - \left[2^{d-1} \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(d/2) n_B \right]^{-1} \int_0^\infty dk \frac{k^{d-1}}{e^{\beta c_s k^s} - 1}. \quad (3.6)$$

Al evaluar ésta en términos de las integrales de Bose, se obtiene

$$\frac{N_{B,0}(T)}{N_{B,0}(0)} = 1 - \left[2^{d-1} \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(d/2) n_B \right]^{-1} \frac{\Gamma(d/s) g_{d/s}(1)}{s (\beta C_s)^{d/s}}. \quad (3.7)$$

Como esta expresión debe hacerse cero para $T = T_c$, obtenemos una simple ecuación algebraica para la temperatura crítica, la cual da la ecuación general para T_c [25]

$$T_c = \frac{C_s}{k_B} \left[\frac{s (2\pi)^d \Gamma(d/2)}{2\pi^{d/2} \Gamma(d/s) g_{d/s}(1)} n_B \right]^{s/d}. \quad (3.8)$$

La forma explícita de (3.7) para T finita es

$$\frac{N_{B,0}(T)}{N_{B,0}(0)} = 1 - T^{d/s} \left[2^{d-1} \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(d/2) n_B \right]^{-1} \frac{\Gamma(d/s) g_{d/s}(1)}{s (C_s/k_B)^{d/s}}; \quad (3.9)$$

³El único polo de $\zeta(\sigma)$ es $\sigma = 1$.

⁴La conversión $\sum_k \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2) \int k^{d-1} dk$ es usada comunmente en mecánica estadística en el límite de alta densidad de estados ver [22], p. 159.

sustituyendo (3.8), se obtiene [25] la fracción del condensado como

$$\frac{N_{B,0}(T)}{N_{B,0}(0)} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s}. \quad (3.10)$$

De acuerdo con (3.5) y (3.8), toda $d \leq s$ implica $T_c = 0$. Esto implica que la condensación BE a una temperatura crítica $T_c \neq 0$, no es posible para un sistema d -dimensional con bosones con relación de dispersión s , si $d \leq s$. Obsérvese entonces que los cupratos, con temperaturas críticas hasta de 120K, son sistemas bidimensionales para los cuales no es posible obtener $T_c \neq 0$ con la relación de dispersión cuadrática usual, $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m^*$. Para que haya una condensación BE, el movimiento de los pares de Cooper en el superconductor deben ser descrito con una relación de dispersión lineal.

Por tanto, si consideramos una relación de dispersión lineal para estos cuasi-bosones (3.1) queda

$$\epsilon_k = c_1 K,$$

aún más, con $c_1 = a(d)\hbar v_F$,

$$\epsilon_k = a(d)\hbar v_F K, \quad (3.11)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi y los coeficientes $a(1) = 1, a(2) = 2/\pi, a(3) = 1/2$, para 1D, 2D y 3D, respectivamente. De modo que la fórmula (3.8) para T_c , en el caso lineal ($s = 1$), se reduce a [24]

$$T_c = \frac{a(d)\hbar v_F}{k_B} \left[\frac{(2\pi)^d \Gamma(d/2)}{2\pi^{d/2} \Gamma(d) g_d(1) n_B} \right]^{1/d}, \quad (3.12)$$

y de aquí que se tenga una temperatura crítica de CBE para toda $d > 1$.

3.3 Energía Interna

La energía interna de un gas ideal de bosones es [25]

$$U(L^d, T) = \sum_k \epsilon_k [e^{\beta(\epsilon_k - \mu_B)} - 1]^{-1},$$

la cual a su vez puede ser escrita⁵

$$U(L^d, T) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d c_s \int_0^\infty \frac{dk k^{d+s-1}}{e^{\beta(c_s k - \mu_B)} - 1}, \quad (3.13)$$

⁵ver nota 2

donde hemos hecho uso de (3.1). Introduciendo la variable $x = \beta c_s k^s$ podemos hacer uso de (3.4) para obtener

$$U(L^d, T) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{\Gamma(d/s+1) g_{d/s+1}(z)}{s c_s^{d/s} \beta^{d/s+1}} \equiv B_d \frac{g_{d/s+1}(z)}{\beta^{d/s+1}}, \quad (3.14)$$

donde se ha definido el coeficiente B_d .

Con los cálculos hechos en la sección anterior para el número total de partículas, N_B puede ser escrita de la manera siguiente

$$N_B = N_{B,0}(T) + \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{1}{s} \left(\frac{1}{\beta c_s}\right)^{d/s} \Gamma(d/s) \zeta(d/s).$$

De aquí podemos ver que

$$N_B = N_{B,0}(T) + \frac{s}{d} B_d \frac{g_{d/s}(z)}{\beta^{d/s}}. \quad (3.15)$$

Para $T = T_c$, $N_{B,0}(T_c) = 0$ y $z = 1$, de modo que la anterior queda

$$\frac{B_d}{N_B \beta_c^{d/s}} = \frac{d/s}{\zeta(d/s)}, \quad (3.16)$$

de modo que podemos eliminar B_d de (3.14) para obtener una expresión válida para todas las temperaturas [25]

$$\frac{U(L^d, T)}{N_B k_B T} = \frac{d g_{d/s+1}(z)}{s \zeta(d/s)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s}. \quad (3.17)$$

Ahora, para el estado superconductor (por debajo de T_c), $\mu = 0$ y $z = 1$ por lo que

$$\frac{U_s(L^d, T)}{N_B k_B T} = \frac{d g_{d/s+1}(1)}{s \zeta(d/s)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s},$$

o bien

$$\frac{U_s(L^d, T)}{N_B k_B T_c} = \frac{d g_{d/s+1}(1)}{s \zeta(d/s)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s+1}. \quad (3.18)$$

Por otra parte, en el estado normal $N_{B,0}(T)$ en (3.15) es despreciable y

$$\zeta(d/s) = g_{d/s}(z) \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s},$$

donde se usa (3.16). De modo que [25]

$$\frac{U_n(L^d, T)}{N_B k_B T_c} = \frac{d}{s} \frac{g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(z)} \left(\frac{T}{T_c} \right) \quad (3.19)$$

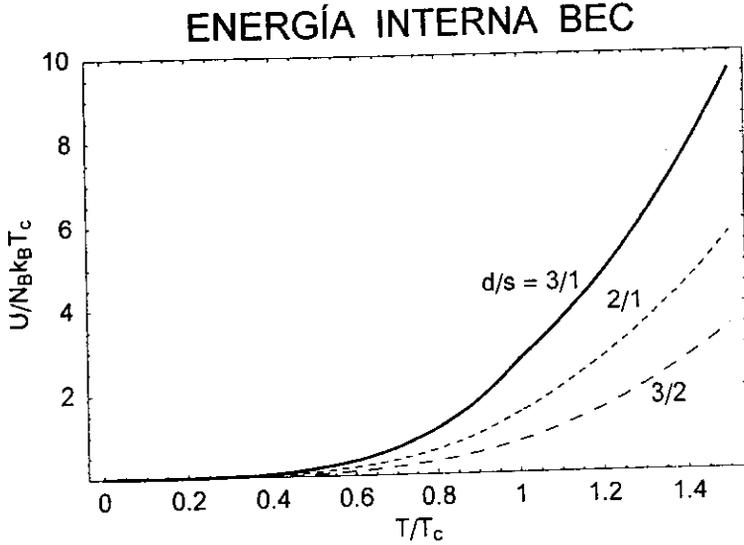


Figura 3.1: Energía interna U vs T/T_c en el modelo CBE, a partir de (3.18) y (3.19) para $d/s = 3/1$ (curva gruesa); $d/s = 2/1$ (curva punteada); $d/s = 3/2$ (discontinua). Solamente en el primer caso se observa un punto crítico en $T = T_c \neq 0$.

3.4 Entropía

Partiendo de la definición termodinámica de la energía libre de Gibbs para un sistema de N partículas idénticas en d -dimensiones,

$$G \equiv N\mu_B \equiv U + PL^d - TS,$$

en donde la presión, P , puede eliminarse utilizando la relación

$$PL^d = \frac{s}{d}U,$$

válida en el límite no relativista, tenemos [25]

$$\frac{S}{Nk_B} = (1 + s/d) \frac{U}{Nk_B T} - \frac{\mu_B}{k_B T}. \quad (3.20)$$

ENTROPIA BEC

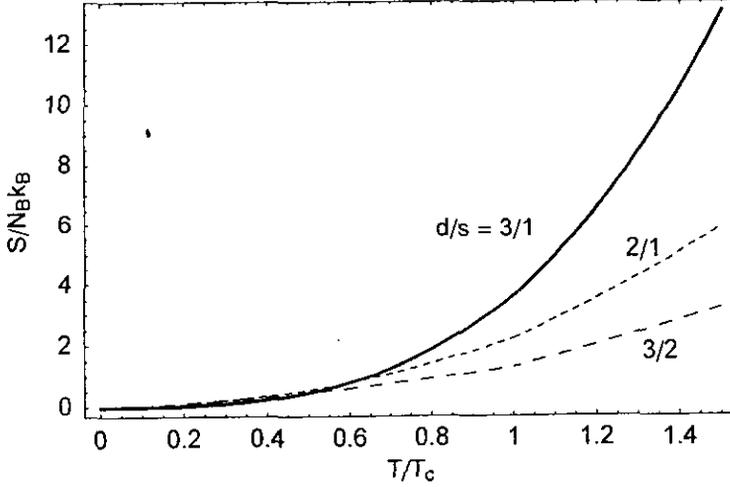


Figura 3.2: Entropía S vs T/T_c a partir de (3.22) y (3.23) para $d/s = 3/1$ (curva gruesa); $d/s = 2/1$ (curva punteada); $d/s = 3/2$ (discontinua). Al igual que en la energía interna, solamente en el primer caso se observa un punto crítico en $T = T_c \neq 0$.

Podemos eliminar asimismo U usando (3.17) para obtener

$$\frac{S}{Nk_B} = (d/s + 1) \frac{g_{d/s+1}(z)}{\zeta(d/s)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s} - \frac{\mu_B}{k_B T}, \quad (3.21)$$

expresión válida para toda T . Para el estado superconductor, (3.21) queda [25]

$$\frac{S_s}{Nk_B} = (d/s + 1) \frac{g_{d/s+1}(1)}{\zeta(d/s)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s} \quad (3.22)$$

y para el estado normal tenemos [25]

$$\frac{S_n}{Nk_B} = (d/s + 1) \frac{g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(z)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s} - \frac{\mu_B}{k_B T}. \quad (3.23)$$

3.5 Calor específico

A partir de la Ec. (3.14), y haciendo uso de las integrales de Bose, el calor específico, $C_V(T) = \partial U / \partial T$, está dado por [25]

$$C_V = B_d \left[\frac{(d/s + 1) k_B g_{d/s+1}(z)}{\beta^{d/s}} + \frac{g_{d/s}(z)}{z \beta^{d/s+1}} \frac{\partial z}{\partial T} \right]. \quad (3.24)$$

Para el estado superconductor, $T \leq T_c$, el último término es despreciable, de modo que

$$C_s = B_d \frac{(d/s + 1) k_B g_{d/s+1}(1)}{\beta^{d/s}} = Nk_B \frac{(d/s) (d/s + 1) g_{d/s+1}(1)}{\zeta(d/s)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s}. \quad (3.25)$$

No obstante, para hallar la expresión en el estado normal, diferenciaremos primero

$$\frac{\partial}{\partial T} g_{d/s}(z) = \frac{g_{d/s-1}(z)}{z} \frac{\partial z}{\partial T}$$

para obtener

$$\frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} = \frac{-(d/s) g_{d/s}(1)}{g_{d/s-1}(z)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{-d/s-1},$$

que, al sustituir en (3.24) nos lleva a

$$C_n = Nk_B \left[\frac{(d/s) (d/s + 1) g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(z)} - \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(z)}{g_{d/s-1}(z)} \right] \quad (3.26)$$

Como puede observarse en la Fig.3.3, con el modelo CBE el comportamiento de C_V para el estado normal no corresponde a los hechos experimentales [23], donde C_V vs T es una función lineal y creciente, como se muestra en la Fig. 2.5. Para tener un condensado, se ha supuesto la existencia de parones por encima de T_c , pero para la representación correcta de C_V en el estado normal, será necesario considerar la contribución de los electrones no apareados, cuya función de distribución térmica es Fermi-Dirac. Al usar el modelo CBE

hacemos énfasis la presencia del condensado el estado superconductor y en la magnitud calculada del salto en C_V , que ocurre en las cercanías de T_c , como expondremos en seguida.

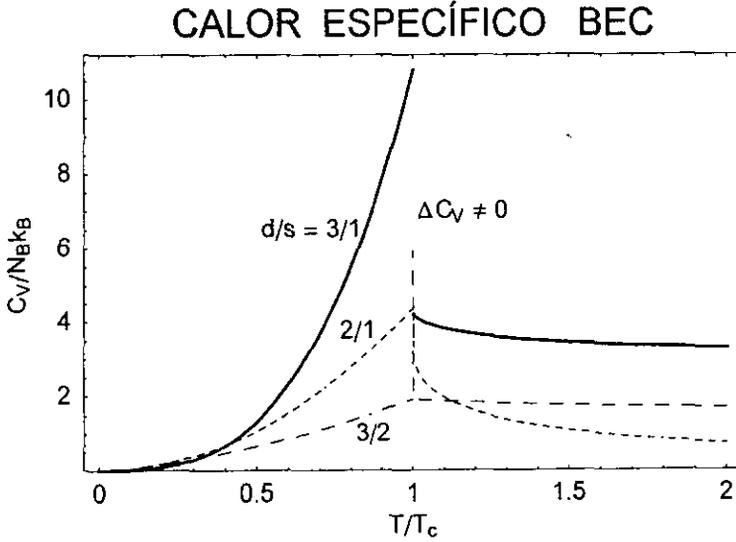


Figura 3.3: Calor específico C_V vs T/T_c a partir de (3.25) y (3.26) para $d/s = 3/1$ (curva gruesa); $d/s = 2/1$ (curva punteada); $d/s = 3/2$ (discontinua). En el primer caso se aprecia claramente la discontinuidad o salto de C_V en $T = T_c$.

3.5.1 Salto en el calor específico

Para $T \approx T_c$, (3.24) y (3.25) quedan como

$$\frac{C_s(T_c^-)}{Nk_B} = \frac{d(d/s+1)g_{d/s+1}(1)}{s \zeta(d/s)} \quad (3.27)$$

y

$$\frac{C_n(T_c^+)}{Nk_B} = \frac{(d/s)(d/s+1)g_{d/s+1}(1)}{\zeta(d/s)} - \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(1)}{g_{d/s-1}(1)}. \quad (3.28)$$

Con las expresiones anteriores, el salto en el calor específico sería [25]

$$\frac{C_s(T_c^-) - C_n(T_c^+)}{Nk_B} = \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(1)}{g_{d/s-1}(1)}. \quad (3.29)$$

Ahora, como $g_{d/s}(1) \rightarrow \infty$ para $d/s \leq 1$. La Ec. (3.28) muestra que *no habrá discontinuidad o salto* en el calor específico mientras $d/s \leq 2$. El estudio de los tres casos, $d/s = 3/1, 3/2$ y $2/1$, para los cuales es posible CBE con $T_c \neq 0$, muestra que sólo en el primero hay posibilidad de la existencia del salto. El uso de la relación de dispersión lineal para los parones nos asegura un salto en C_V de los superconductores parecido al observado experimentalmente, como se ilustra en la Fig. 3.3.

Para un sistema de parones con $d/s = 3/1$, usando (3.28) es posible calcular la magnitud del salto

$$\Delta C_V = \frac{C_s(T_c^-) - C_n(T_c^+)}{C_n(T_c^+)} = 1.555. \quad (3.30)$$

Este resultado está dentro del orden de los valores experimentales [1], [23].

Capítulo 4

Acoplamiento entre electrones

4.1 Relación de dispersión de los pares

La ecuación de eigenvalores de Cooper [26] para un par de fermiones acoplados a través de la interacción BCS sobre una superficie de Fermi esférica, es

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}} [2\varepsilon_{\mathbf{k}} - (E_K - \hbar^2 K^2/4m^*)]^{-1}, \quad (4.1)$$

donde $E_K = 2E_F - \Delta_K$ es la energía total del par. Si la energía de amarre, Δ_K , es positiva, se dirá que el par estará ligado. En caso contrario se espera simplemente $E_K = 2E_F$.

Para un material bidimensional ($d = 2$), tras convertir la suma en una integración,¹ la ecuación de Cooper (4.1) se lleva a [24]

$$1 = \frac{4\lambda}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\phi \int_{l_i(\kappa, \phi)}^{l_s(\kappa, \phi)} d\xi \xi [\Delta_{\kappa} + 2(1 + \nu)\kappa^2 - 2 + 2\xi^2]^{-1} \quad (4.2)$$

donde $g(E_F) \equiv L^2 m^*/2\pi\hbar^2$ es la densidad de en 2D; $\xi \equiv k/k_F$; $\kappa \equiv K/2(k_F^2 + k_D^2)^{1/2}$; $\Delta_{\kappa} \equiv \Delta_K/E_F$ y de nuevo $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F = \Theta_D/T_F$. Los límites de integración en (4.2) son las funciones $l_s(\kappa, \phi) = [1 + \nu - \kappa^2(1 + \nu)\sin^2\phi]^{1/2} - \kappa(1 + \nu)^{1/2}\cos\phi$ y $l_i(\kappa, \phi) = [1 - \kappa^2(1 + \nu)\sin^2\phi]^{1/2} + \kappa(1 + \nu)^{1/2}\cos\phi$. Estas funciones denotan las condiciones sobre k_1 y k_2 en el espacio \mathbf{k} para que exista la interacción BCS atractiva entre los fermiones. Una vez obtenida esta

¹ usando $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (L/2\pi)^d [2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2) \int dk k^{d-1}]$

ecuación integral se la resuelve respecto a Δ_K para obtener la aproximación lineal [24]

$$\Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \Delta_0 - \frac{2(1+\nu)^{1/2} + e^{2/\lambda}}{\pi} \frac{\hbar v_F K}{e^{2/\lambda} - 1} + O(K^2),$$

donde Δ_0 es la energía de amarre del par con $K = 0$. Si identificamos la función adimensional

$$f_2(\lambda, \nu) = \frac{(1+\nu)^{1/2} + e^{2/\lambda}}{e^{2/\lambda} - 1} \quad (4.3)$$

tendremos

$$\Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \Delta_0 - \frac{2}{\pi} f_2(\lambda, \nu) \hbar v_F K + O(K^2),$$

donde ésta a su vez puede ser reescrita para obtener la relación de dispersión del par

$$\varepsilon_K \equiv \Delta_0 - \Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \frac{2}{\pi} f_2(\lambda, \nu) \hbar v_F K. \quad (4.4)$$

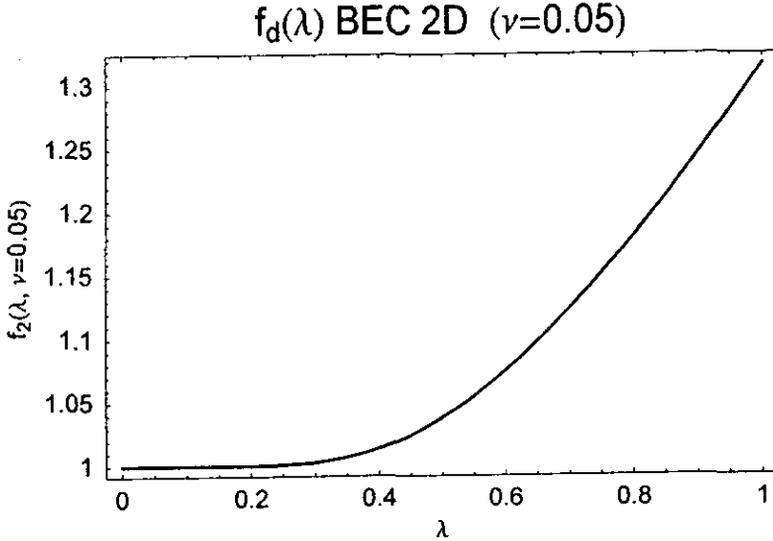


Figura 4.1: Graficamos $f_2(\lambda, \nu)$ vs λ para $\nu = 0.05$. Se puede observar que conforme λ aumenta f_2 aumenta, conduciéndonos a temperaturas críticas mayores.

En el límite de acoplamiento débil $f_2(\lambda, \nu) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 1$, para dar

$$\epsilon_K \equiv \Delta_0 - \Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \frac{2}{\pi} \hbar v_F K. \quad (4.5)$$

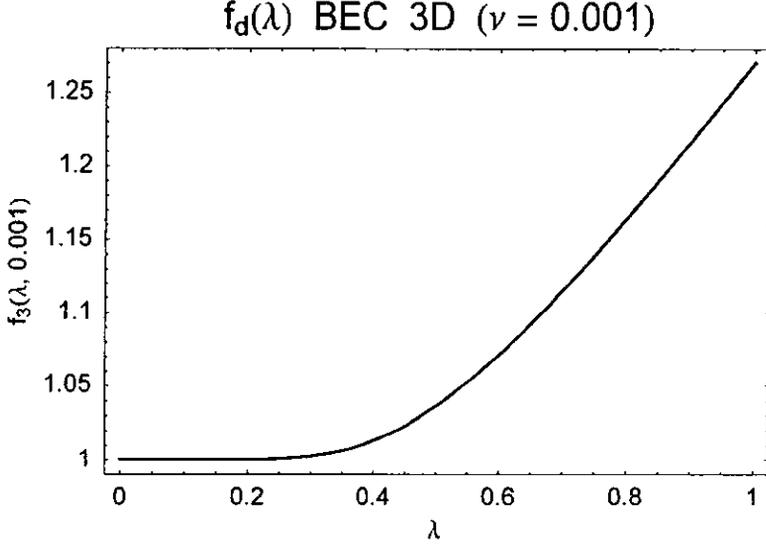


Figura 4.2: Graficamos $f_3(\lambda, \nu)$ vs λ para $\nu = 0.001$. Se puede observar cómo f_3 se aproxima a la unidad para acoplamiento débil.

Para el caso tridimensional, con $a(3) = 1/2$, y de manera análoga a la anterior, la ecuación de Cooper (4.1) toma la forma

$$1 = 2\lambda \int_0^{\pi/2} d\phi \sin \phi \int_{i_1(\kappa, \phi)}^{i_2(\kappa, \phi)} d\xi \xi^2 [\Delta_\kappa + 2(1 + \nu)\kappa^2 - 2 + 2\xi^2]^{-1}, \quad (4.6)$$

de donde se obtiene la aproximación lineal [24]

$$\Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \Delta_0 - \frac{e^{4/\lambda} \sqrt{1 - \nu e^{-2/\lambda}} (2e^{-2/\lambda} + \nu e^{-2/\lambda} + 1)}{e^{2/\lambda} \nu (\ln A + \ln B) + \nu \ln AB + 2e^{2/\lambda} \sqrt{1 - \nu e^{-2/\lambda}}} \frac{1}{e^{2/\lambda} + 1 - \sqrt{1 + \nu}} \hbar v_F K + O(K^2),$$

aquí, $A \equiv \frac{\sqrt{1+\nu} - \sqrt{1-\nu e^{-2/\lambda}}}{\sqrt{1+\nu} + \sqrt{1-\nu e^{-2/\lambda}}}$, y $B \equiv \frac{1 + \sqrt{1-\nu e^{-2/\lambda}}}{1 - \sqrt{1-\nu e^{-2/\lambda}}}$. De modo que, en este caso podemos interpretar

$$f_3(\lambda, \nu) = \frac{2e^{4/\lambda} \sqrt{1 - \nu e^{-2/\lambda}} (2e^{-2/\lambda} + \nu e^{-2/\lambda} + 1)}{e^{2/\lambda} \nu (\ln A + \ln B) + \nu \ln AB + 2e^{2/\lambda} \sqrt{1 - \nu e^{-2/\lambda}} e^{2/\lambda} + 1 - \sqrt{1 + \nu}} \quad (4.7)$$

y poner

$$\Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \Delta_0 - \frac{1}{2} f_3(\lambda, \nu) \hbar v_F K + O(K^2).$$

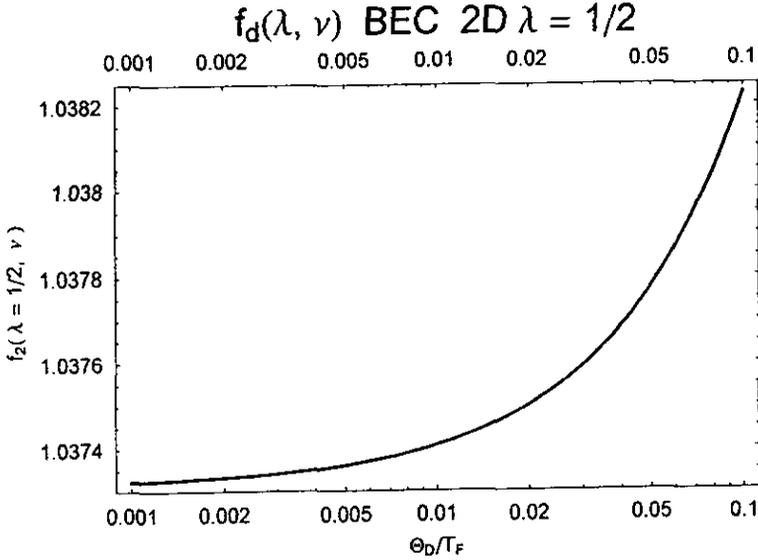


Figura 4.3: Función de acoplamiento finito $f_2(\lambda = 1/2, \nu)$ vs $\nu \equiv \Theta_D/T_F$, a partir de la Ec. (4.3).

Por lo tanto

$$\epsilon_K \equiv \Delta_0 - \Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \frac{1}{2} f_3(\lambda, \nu) \hbar v_F K \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{2} \hbar v_F K, \quad (4.8)$$

ya que, en el límite para acoplamiento débil² $f_3(\lambda, \nu) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 1$, de modo que

$$\varepsilon_K \equiv \Delta_0 - \Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \frac{1}{2} \hbar v_F K. \quad (4.9)$$

Por último, tomemos la relación de dispersión lineal (3.11), e introduzcamos en ella una dependencia en λ , la constante de acoplamiento del par, y $\nu \equiv \hbar \omega_D / E_F$, escribiendo lo siguiente

$$c_s = f_d(\lambda, \nu) a(d) \hbar v_F. \quad (4.10)$$

De donde tenemos la relación de dispersión lineal dependiente del acoplamiento λ

$$\varepsilon_k = f_d(\lambda, \nu) a(d) \hbar v_F k, \quad (4.11)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi.

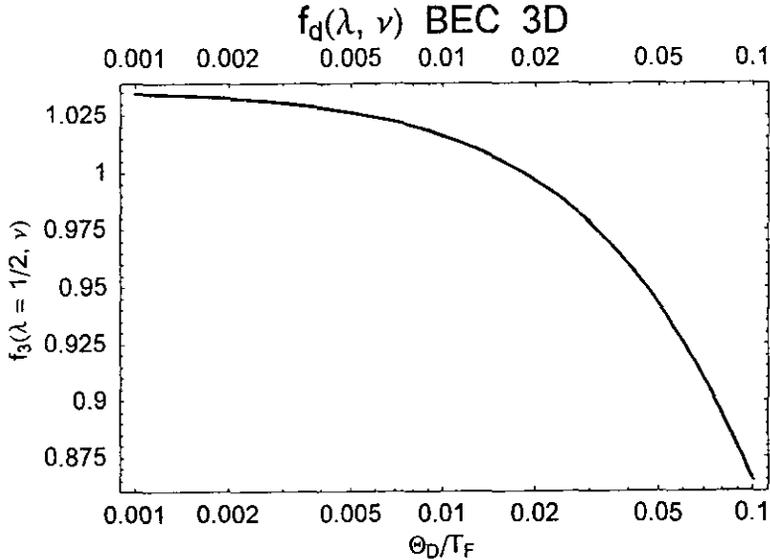


Figura 4.4: Función de acoplamiento finito $f_3(\lambda = 1/2, \nu)$ vs $\nu \equiv \Theta_D / T_F$, a partir de la Ec. (4.6).

²Nótese que $\lim_{\nu \rightarrow 0} f_3(\lambda, \nu) = 1 + 2e^{-2/\lambda} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 1$.

4.2 Temperaturas críticas

Para obtener las temperaturas críticas para un gas de parones con una relación de dispersión lineal, como función del acoplamiento finito λ , introduzcamos (4.11) en la fórmula (3.12) para la T_c en el caso lineal ($s = 1$)

$$T_c = \frac{f_d(\lambda) a(d) \hbar v_F}{k_B} \left[\frac{(2\pi)^d \Gamma(d/2)}{2\pi^{d/2} \Gamma(d) g_d(1)} n_B \right]^{1/d} \quad (4.12)$$

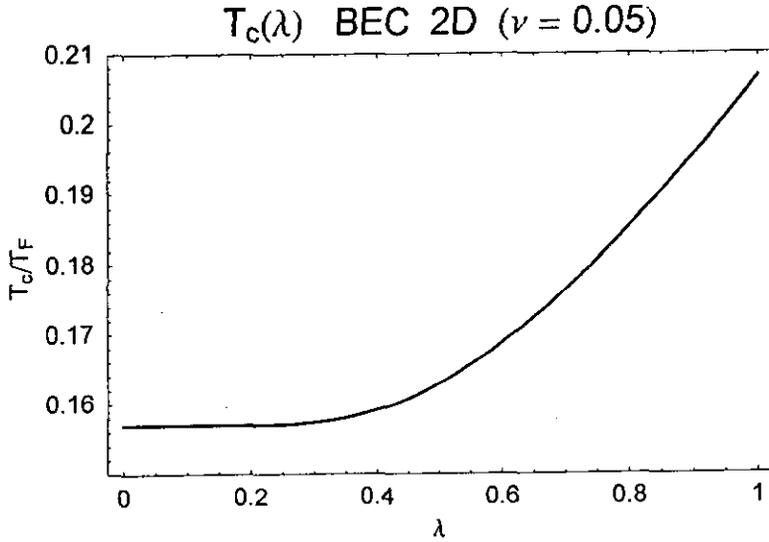


Figura 4.5: Temperatura crítica T_c vs λ . El valor $\nu = 0.05$ es característico para los superconductores en 2D. Cuando el acoplamiento se vuelve más fuerte, la temperatura crítica aumenta razonablemente.

En d dimensiones el número total de fermiones es $N = 2 \sum_k \Theta(k_F - k)$, donde $\Theta(x)$ es la función escalón de Heaviside. De modo que³, la densidad

³ver nota 1

de fermiones, n , queda [27]

$$n \equiv \frac{N}{L^d} = \frac{k_F^d}{2^{d-2} d \pi^{d/2} \Gamma(d/2)}. \quad (4.13)$$

Por otra parte, el número total de bosones o pares de Cooper que se forman a $T = 0$ con el modelo de interacción BCS, es justamente $g(E_F) \hbar \omega_D$, donde $g(E_F)$ es la densidad de estados en el nivel de Fermi. En general⁴

$$g(\epsilon) \equiv \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{d^d k}{d\epsilon} = \left(\frac{m^*}{2\pi \hbar^2}\right)^{d/2} \frac{L^d \epsilon^{d/2-1}}{\Gamma(d/2)}$$

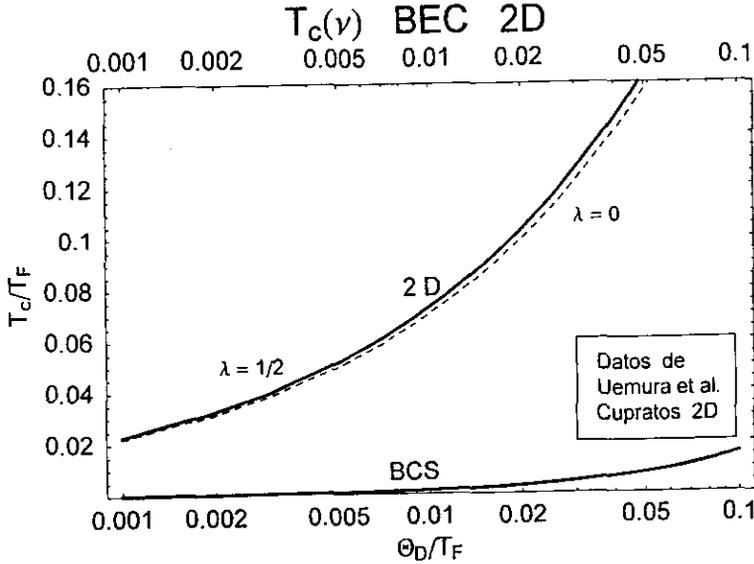


Figura 4.6: Temperatura crítica CBE a partir de (4.15) para el límite de acoplamiento débil ($\lambda = 0$) y medio ($\lambda = 1/2$). En el rectángulo se indica la región de los valores experimentales [29]. La curva inferior muestra la predicción BCS para acoplamiento $\lambda = 1/2$.

⁴En [22], p.501, se calcula el volumen de la esfera d -dimensional $V_d(k) = \pi^{d/2} k^d / \Gamma(1 + d/2)$, y de ahí, introduciendo $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, calculamos $g(\epsilon)$ en la red periódica, .

Si todos los fermiones estuviesen apareados $n_B/n = 1/2$. Sin embargo, como $n_B = N_{B,0}(0)/L^d = g(E_F) \hbar\omega_D/L^d$, obtenemos, con la ya definida $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F$,

$$n_B/n = d\hbar\omega_D/4E_F \equiv \nu d/4,$$

la cual es una fracción mucho menor que $1/2$ puesto que típicamente $\hbar\omega_D \ll E_F$ ($\nu \ll 1$). Usando esto último y (4.13) la densidad de bosones será

$$n_B = \frac{\nu k_F^d}{2^d \pi^{d/2} \Gamma(d/2)}. \quad (4.14)$$

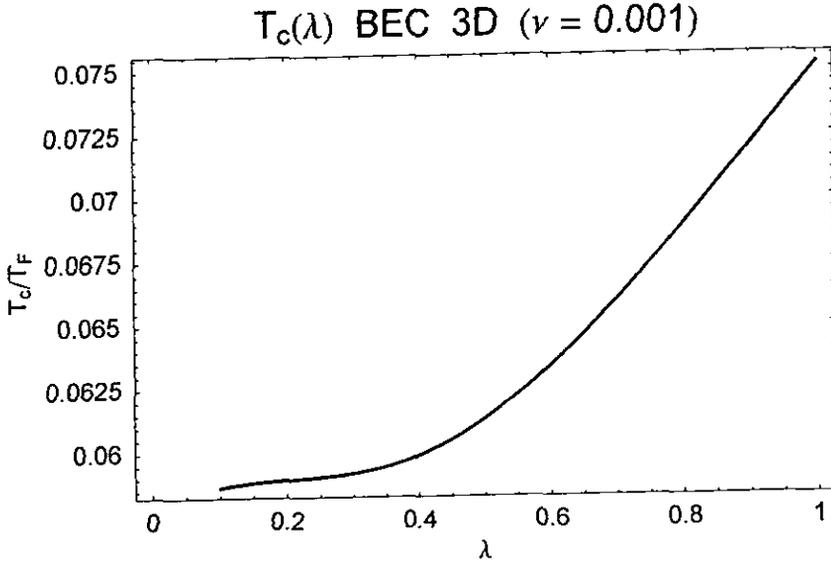


Figura 4.7: Temperatura crítica T_c vs λ en 3D; el valor $\nu = 0.001$ es característico para superconductores tridimensionales.

De modo que podemos escribir

$$\begin{aligned} T_c &= \frac{f_d(\lambda, \nu) a(d) \hbar v_F k_F}{k_B} \left[\frac{\nu}{2\Gamma(d) \zeta(d)} \right]^{1/d} = \\ &= \frac{2f_d(\lambda, \nu) a(d) E_F}{k_B} \left[\frac{\nu}{2\Gamma(d) \zeta(d)} \right]^{1/d}, \end{aligned}$$

o bien

$$\frac{T_c}{T_F} = 2f_d(\lambda, \nu) a(d) \left[\frac{\nu}{2\Gamma(d)\zeta(d)} \right]^{1/d} \quad (4.15)$$

(4.15) es, en general, la *nueva* forma que toma la expresión (3.12), del capítulo anterior, para cualquier dimensión d , del sistema, al introducir la dependencia en el acoplamiento λ . Recordemos que $a(1) = 1$, $a(2) = 2/\pi$ y $a(3) = 1/2$. En la Fig. 4.5 graficamos T_c/T_F como función de λ para 2D y $\nu = 0.05$.

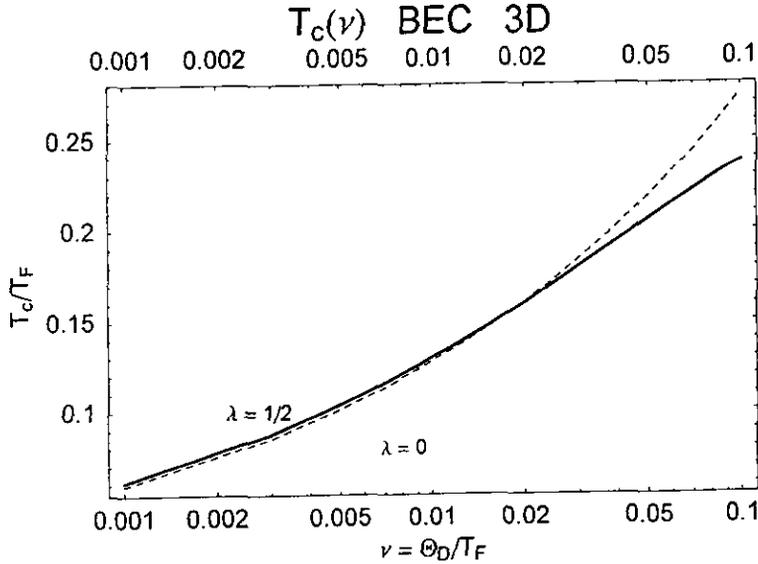


Figura 4.8: Temperatura crítica CBE vs Θ_D/T_F en 3D a partir de (4.16), para el límite de acoplamiento débil ($\lambda = 0$) y $\lambda = 1/2$. Se aprecia un punto ν_1 a partir del cual las temperaturas críticas son menores para un acoplamiento finito que para $\lambda = 0$.

Caso bidimensional

Introduciendo $f_2(\lambda, \nu)$ de (4.3) explícitamente en (4.14),

$$\frac{T_c}{T_F} = \frac{4(1+\nu)^{1/2} + e^{2/\lambda}}{\pi(e^{2/\lambda} - 1)} \left[\frac{\nu}{2\Gamma(2)\zeta(2)} \right]^{1/2}$$

$$= \frac{4\sqrt{3}(1+\nu)^{1/2} + e^{2/\lambda}}{\pi^2 e^{2/\lambda} - 1} \nu^{1/2}, \quad (4.16)$$

ya que $\zeta(2) = \pi^2/6$ y $\Gamma(2) = 1$. Las temperaturas críticas se grafican para $\nu = 0.05$, un valor característico para superconductores bidimensionales, con $0 \leq \lambda \leq 1$. Con los valores de $\lambda = 1/2$ y el límite de acoplamiento débil $\lambda = 0$, en la Fig. 4.6 se grafica T_c/T_F para $0 \leq \nu \leq 0.1$. Estos resultados se comparan a su vez con el resultado BCS [1] $T_c = 1.13\Theta_D e^{-1/\lambda}$, con $\lambda = 1/2$.

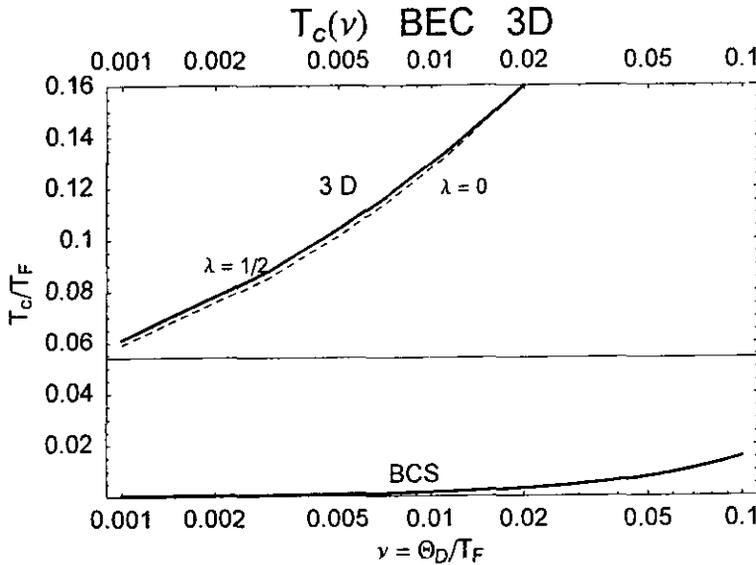


Figura 4.9: T_c/T_F vs Θ_D/T_F en 3D en el modelo CBE a partir de (4.16). En comparación, la curva inferior muestra la predicción BCS [1], [15].

Caso tridimensional

Introduciendo $f_3(\lambda, \nu)$ de (4.7) explícitamente en (4.14), se obtiene

$$\frac{T_c}{T_F} = f_3(\lambda, \nu) \left[\frac{\nu}{2\Gamma(3)\zeta(3)} \right]^{1/3},$$

o bien,

$$\frac{T_c}{T_F} = \frac{2e^{A/\lambda} \sqrt{1 - \nu e^{-2/\lambda}} (2e^{-2/\lambda} + \nu e^{-2/\lambda} + 1)}{e^{2/\lambda} \nu (\ln A + \ln B) + \nu \ln AB + 2e^{2/\lambda} \sqrt{1 - \nu e^{-2/\lambda}} e^{2/\lambda} + 1 - \sqrt{1 + \nu}} \frac{1}{\left[\frac{\nu}{2\Gamma(3)\zeta(3)} \right]^{1/3}} \quad (4.17)$$

Donde $\zeta(3) = 1.202$, $\Gamma(3) = 2$, y A, B han sido definidas anteriormente al obtener la aproximación lineal de (4.6).

En la Fig. 4.7 se grafican las temperaturas críticas para $\nu = 0.001$, un valor característico para superconductores tridimensionales, en el rango de acoplamiento $0 \leq \lambda \leq 1$. Aproximadamente desde valores $\lambda \geq 0.4$, T_c aumenta de manera considerable. Con los valores de $\lambda = 1/2$ y el límite de acoplamiento débil $\lambda = 0$ se grafica igualmente T_c para $0 \leq \nu \leq 0.1$ en la Fig. 4.8.

Capítulo 5

Discusión

5.1 Interpretaciones de la superconductividad

A partir de los resultados obtenidos en el primer apartado del Capítulo 2, donde se obtiene el corrimiento en la energía interna de “condensación” del estado base, se concluye que es posible ver a este estado del superconductor como una mezcla ideal (sin interacción) de gases ideales de fermiones y bosones. Si bien este resultado no es enteramente nuevo, hallado ya en [19, 20], hay que resaltar la importancia de esta propiedad de la teoría BCS para el entendimiento de la fase superconductora. La Ec. (2.11) muestra que el corrimiento en la energía para el estado base no es más que una superposición de $N_{B,0}(0)$ pares excitados o parones con energías de amarre Δ_0 . Este resultado, válido *para cualquier acoplamiento* λ , nos sugiere el desarrollo posterior de la BCS, generalizándola, al incluir los pares con $K \neq 0$, que al comportarse, como cuasi-bosones pueden sufrir una CBE. Irónicamente, tanto (2.10) como (2.13) se hallan en [15], pero no se habla de la posibilidad de una CBE en superconductividad, como ya lo había conjeturado London en [2]. Más aún, la importancia del hecho de que el corrimiento no dependa del acoplamiento λ reside en que en el límite de acoplamiento débil, los pares se superponen, mientras que para el límite de acoplamiento infinito, los pares son puntuales. Estos dos extremos corresponden a las interpretaciones BCS y CBE, respectivamente.

5.2 Calores Específicos

Aunque no ha sido posible dar funciones explícitas para el estado superconductor para $U(T)$ y $S(T)$ las figuras obtenidas en el Capítulo II son escasas en la literatura a excepción de [21]. En cuanto a la comparación de las funciones termodinámicas $U(T)$, $S(T)$ y $C_V(T)$ con los modelos BCS y CBE, tenemos que observar, por una parte, que la *dimensionalidad no* juega ningún papel en la teoría BCS; los resultados y predicciones obtenidos en el segundo capítulo son equivalentes para cualquier dimensión mayor que cero. En CBE, el cálculo del salto ΔC_V refuerza la idea de considerar una relación de *dispersión lineal* para los parones del condensado; al menos en 3D, donde la teoría lo predice. El valor $\Delta C_V/C_n$ obtenido en (3.29) es del orden de los valores experimentales citados en [25] para superconductores elementales en 3D, donde con $\Delta C_V/C_s = (1 + C_n/\Delta C_V) = 0.609$; se obtiene un porcentaje de error (en promedio 5.31%) menor en todos los casos al correspondiente a la predicción del modelo BCS, para el gas ideal de bogolones. Usando (3.29), en base al modelo CBE, tenemos $\Delta C_V/C_s = 0.609$, y error en promedio de 5.28%; como se aprecia los errores son muy similares a los que se mencionan de [25]. En BCS $\Delta C_V/C_s = 0.588$ y el error en promedio para los mismos materiales citados en [25] es de 7.5%. Al usar (2.33), obtenida siguiendo el modelo BCS, obtenemos $\Delta C_V/C_s = 0.579$, dando porcentajes de error mayores aún. Por lo tanto llegamos a idéntica conclusión que en [25] para el sistema CBE comparado con BCS; es decir, el error promedio es menor *en todos los casos* usando el modelo CBE que usando la BCS. Con lo anterior se reivindica la conjetura hecha por London en 1964, ya mencionada, sobre la explicación del salto en C_V como una CBE.

La predicción teórica de la CBE en 2D nos lleva a la inexistencia del salto en el calor específico, contradiciendo a los hechos experimentales, aun para una relación de dispersión lineal. Ésto hará tomar con cuidado la generalización de BCS que hemos hecho, pero de ninguna manera descartarla, pues además se tienen resultados interesantes en cuanto a los valores altos del parámetro T_c . Las fórmulas que se obtienen para T_c se derivan precisamente del modelo de CBE en un gas ideal de parones.

Temperatura crítica, T_c	2D	3D
	$10^3 K \leq T_F \leq 10^4 K$	$10^4 K \leq T_F \leq 10^5 K$
CBE $\lambda = 0$	$156.97 K \leq T_c \leq 1569.74 K$	$592.48 K \leq T_c \leq 5924.81 K$
CBE $\lambda = 1/2$	$162.896 K \leq T_c \leq 1628.96 K$	$612.94 K \leq T_c \leq 6129.4 K$
BCS $\lambda = 1/2$	$T_c \lesssim 46 K$ con $\Theta_D \leq 300 K$	(No hay dependencia en la dimensionalidad)

Tabla 5.1: Predicciones para temperaturas críticas en 2D y 3D

5.3 Temperaturas críticas

Como se ha explicado, con una relación de dispersión lineal para los parones es posible una $T_c \neq 0$ para toda $d > 1$, un resultado que puede tener relevancia para el estudio de los superconductores orgánicos $(1 + \epsilon)$ dimensionales (cadenas paralelas de átomos), como las sales de Bechgaard; superconductores $(2 + \epsilon)$ dimensionales orgánicos (ET) y cupratos de alta T_c y tridimensionales como son los fullerenos alcalinotérreos [28]. Una relación de dispersión cuadrática da $T_c > 0$ sólo para $d > 2$.

La temperatura crítica es un parámetro fundamental de la superconductividad. En general, los valores T_c/T_F obtenidos a partir de este modelo son relativamente altos, incluso para $\lambda \rightarrow 0$. En 2D, con $\nu = 0.05$, $T_c/T_F \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 0.15697$; en 3D, con $\nu = 0.001$, $T_c/T_F \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 0.05925$, pero no es cero ($\nu \ll 1$), como sucedería con una relación de dispersión cuadrática. Ambos límites, como era de esperarse, están de acuerdo con [24], donde no hay dependencia en λ . Si se comparan los valores T_c/T_F obtenidos en el Capítulo IV para $\lambda \neq 0$, de nuevo con los obtenidos en [24], observamos que, en 2D hay un ligero aumento de los primeros, sin mayor acercamiento a los valores experimentales [29] de los cupratos $(2 + \epsilon)$ dimensionales; en 3D, T_c disminuye para $\nu \geq 0.018$. En [29] $0.01 \lesssim T_c/T_F \lesssim 0.06$ para todos los exóticos en 2D y 3D.

Cuando λ varía más allá de cero (Fig. 4.5), los valores de T_c/T_F en 2D permanecen estables aproximadamente en $0 \leq \lambda \leq 0.3$; en $0 \leq \lambda \leq 1$ la variación es de 0.05. Para 3D (Fig. 4.7) el comportamiento es mucho más estable: en el rango $0 \leq \lambda \leq 1$, la variación de T_c/T_F es de 0.01.

El efecto de introducir el acoplamiento finito (en aproximación lineal, i.e.,

$K \ll 1$) es pequeño. Como puede apreciarse en las Figs. 4.6 y 4.8, las curvas para $\lambda = 0$ y $\lambda = 1/2$, en 2D y 3D, respectivamente, se mantienen muy cerca una de la otra.

En 2D, la curva correspondiente a $\lambda = 0$, correspondiente a [24], se mantiene siempre por debajo de $\lambda = 1/2$; es decir, T_c/T_F es mayor con $\lambda \neq 0$ porque $f_2(\lambda, \nu = \text{const.}) \geq 1$, y $f_2(\lambda, \nu) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 1$, como se ilustra en las Figuras 4.1 y 4.3.

En 3D, T_c/T_F con $\lambda = 0$ [24], es menor que T_c/T_F con $\lambda = 1/2$ hasta un valor $\nu_l = 0.018$, donde $f_3(\lambda, \nu_l) = 1$; ésto se observa en la Fig. 4.8. A partir de este valor, para un valor dado de acoplamiento se reduce T_c , pues $f_3(\lambda, \nu \geq \nu_l) \leq 1$, como puede observarse en las figuras 4.4 y 4.8. Para valores distintos de λ obtendremos la correspondiente ν_l .

En la Tabla 5.1 presentamos nuestra predicción para T_c en 2D y 3D, con $\lambda = 1/2$ y $\lambda = 0$, y la predicción correspondiente de BCS con $\lambda = 1/2$. Como se mencionaba arriba, para las predicciones correspondientes a los mismos rangos de T_F coinciden con los valores de [25]. En ambos casos, T_c/T_F tiene valores sustancialmente más altos que los predichos por BCS.

5.4 Conclusión

El modelo CBE de superconductividad predice temperaturas críticas verdaderamente altas. Hemos confirmado lo anterior con nuestros resultados obtenidos a partir de las nuevas expresiones CBE para T_c , una vez introducida la dependencia en el acoplamiento de los electrones; las temperaturas ambiente están de hecho incluidas en el rango de predicciones para 2D e incluso por debajo del correspondiente a 3D. Un modelo deseable de alta T_c deberá incluir tanto a los materiales conocidos hasta ahora como aquellos buscados de temperaturas críticas ambiente. Podemos sugerir algunos refinamientos al modelo CBE, con los que esperamos predicciones de T_c menores que las nuestras, a saber: si a) se reduce n_B , usando expresiones distintas a (4.12), al considerar en lugar de las superficies de Fermi totalmente esféricas otras más realistas, como las hiperbólicas [25]; b) se considera una interacción entre los parones, los cuales en el presente modelo CBE forman un gas ideal y c) consideramos interacciones entre los parones y fermiones desacoplados en el mar de Fermi.

Por último, al desarrollar las teorías microscópicas BCS y CBE hemos hallado similitudes en el comportamiento de $U(T)$, $S(T)$ y el cálculo del

salto en el calor específico (los resultados con ambos modelos son del mismo orden). Esto nos lleva a sugerir que los modelos Fermi-Dirac y Bose-Einstein pueden o pudieran ser dos facetas distintas de una teoría subyacente para una descripción completa del fenómeno de la superconductividad, en la que deberán considerarse tanto las propiedades de sistemas de fermiones, introduciendo nuevas interacciones (en los límites *mesoscópicos* de muchas partículas), como las propiedades de condensación, dimensionalidad y linealidad de la relación de dispersión de los sistemas de bosones.

Bibliografía

- [1] A. L. Fetter & J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, 1971).
- [2] F. London, *Superfluids*, Vol. II (Dover, NY, 1964) p. 55.
- [3] M. H. Anderson *et al.*, *Science* **269**, 198 (1995); J. R. Ensher *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4984 (1996).
- [4] *Phys. Today* **49** [12], 17 (1996); *Sci. Am.* **276** [1], 11 (1997).
- [5] W. Meissner & R. Ochsenfeld, *Naturwiss* **21**, 787 (1933).
- [6] J. File & R.G. Mills, *Phys. Rev. Letters* **10**, 93 (1963).
- [7] B. S. Deaver Jr, & W. M. Fairbank, *Phys. Rev. Letters* **7**, 43 (1961).
- [8] W. H. Keesom & J.A. Kok, *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden*, **221e**, (1932).
- [9] H. Frohlich, *Phys. Rev. Letters* **79**, 487 (1950).
- [10] J. G. Bednorz & K. A. Muller, *Z. Phys. B. Cond. Matt.* **64**, 189 (1986).
- [11] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torny, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. G. Wang & C. W. Chu, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 908 (1987).
- [12] H. Maeda, Y. Tanaka, M. Kukutomi & T. Asano, *Jpn. J. Appl. Phys.* **27**, L209 (1988).
- [13] Z. Z. Sheng & A. M. Hermann, *Nature* **332**, 138 (1988).
- [14] A. Shilling, M. Cantoni, J. D. Guo & H. R. Ott, *Nature* **363**, 56 (1993).

- [15] J. Bardeen, L. N. Cooper & J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [16] M. Casas, S. Fujita, M. de Llano, A. Puente, A. Rigo y M. A. Solís, *Physica C* **245**, 93 (1998).
- [17] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958); J. G. Valatin, *Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).
- [18] D. R. Tilley & J. Tilley, *Superfluidity and Superconductivity* (A. Hilger, Bristol, 1986).
- [19] A. S. Davydov, *Phys. Repts.* **190**, 191 (1990).
- [20] V. C. Aguilera-Navarro, M. Casas, A. Rigo, N. J. Davidson, R. M. Quick, S. Fujita, M. de Llano, M. G. López, A. Valladares, O. Rojo y M. A. Solís, *Can BEC and BCS be Syntesized? Condensed Matter Theories* **12**, 213 (1997).
- [21] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity* (McGraw-Hill, NY, 1996).
- [22] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1996) p. 177, 211 y 501.
- [23] C. P. Poole, H. A. Farach & R. J. Creswick, *Superconductivity* (Academic Press, NY, 1995) p. 94.
- [24] M. Casas, A. Rigo, J. M. Getino, H. Rubio, M. de Llano, O. Rojo y M. A. Solís, *Simple Statistical Model of Superconductivity Condensed Matter Theories* **13** (1998); *Phys. Lett. A*, (1998).
- [25] V. C. Aguilera-Navarro, M. de Llano y M. A. Solís, *Bose Einstein Condensation for General Dispersion Relation Bosons*, *Eur. J. Phys.* **20**, 177 (1999).
- [26] L. N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [27] R. M. Ziff *et al.*, *Phys. Repts.* **32**, 169 (1997).
- [28] A. Hebard, *Phys. Today* **45** [11], 26 (1992).
- [29] Y. J. Uemura *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 266 (1991); *Nature* **352**, 605 (1991); *Physica B* **186-188**, 223 (1993).

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Apéndice A

Entropía para un gas ideal cuántico de fermiones

Partimos¹ de la expresión de entropía, S , para un gas ideal de fermiones

$$S = k_B \left[1 - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} - \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \right] \ln \Xi(N, T, \mu), \quad (\text{A.1})$$

donde $\alpha = \beta\mu$, la actividad, $\beta = 1/k_B T$, y $\Xi(N, T, \mu) = \prod_k (1 + e^{\alpha - \beta E_k})$ es la función de partición del ensemble. $N = \sum_k n_k$ es el número total de partículas.

Para hallar Ξ observemos que para el operador de densidad, ρ_G ,

$$e^{(\mu N - H)\beta} = \rho_G \Xi(N, T, \mu), \quad (\text{A.2})$$

donde $H = \sum_i \hbar^2 k^2 / 2m_i$, es el hamiltoniano del sistema.

La ecuación de valores propios para el hamiltoniano es

$$H |\{n\}\rangle = \sum_k \epsilon_k n_k |\{n\}\rangle = E(\{n\}) |\{n\}\rangle,$$

donde $\{n\}$ es el número de ocupación. De modo que en (A.2)

$$e^{(\mu N - H)\beta} |\{n\}\rangle = e^{(\mu N - E(\{n\}))\beta} |\{n\}\rangle. \quad (\text{A.3})$$

Ahora, Ξ está dado por la traza

$$TR \{ e^{(\mu N - H)\beta} \},$$

¹S. Fujita, *Statistical and Thermal Physics*, (R. E. Krieger, Malabar, Fl., 1986)

sumando los elementos de la diagonal sobre todos los estados posibles $\{n\}$.
Regresando a (A.3)

$$e^{(\mu N - E(\{n\}))\beta} = e^{\beta \sum_k (\mu - \epsilon_k) n_k} = \prod_k e^{\beta(\mu - \epsilon_k) n_k},$$

por lo tanto

$$\Xi(N, T, \mu) = \sum_n \prod_k e^{\beta(\mu - \epsilon_k) n_k}.$$

Para el sistema de bogolones el número de ocupación $\{n\}$ es el doble que para una distribución de electrones. Un estado $(k \uparrow, k' \downarrow)$ no puede ser ocupado por un solo electrón; o bien, un electrón puede ocupar ya sea el estado $k \uparrow$ o el $k' \downarrow$, pero no ambos. De modo que $\{n\} = 0, 2$ y

$$\Xi(N, T, \mu) = \prod_k e^{2\beta(\mu - \epsilon_k) n_k}. \quad (\text{A.4})$$

Por otra parte, el número promedio de partículas,

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \frac{\partial}{\partial \beta \mu} \ln \Xi = \frac{\partial}{\partial \beta \mu} \ln \left(\prod_k e^{2\beta(\mu - \epsilon_k) n_k} \right) = \\ &= 2 \sum_k e^{\beta(\mu - \epsilon_k)} / (1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_k)}) = \\ &= 2 \sum_k 1 / (1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}) = 2 \sum_k f_k. \end{aligned}$$

a partir de (A.4)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi(N, T, \mu) &= \sum_k \ln(1 + e^{2\beta(\mu - \epsilon_k)}) = \\ &= -2 \sum_k \frac{\epsilon_k e^{\beta(\mu - \epsilon_k)}}{1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_k)}} = -2 \sum_k \epsilon_k f_k, \end{aligned}$$

y de igual manera

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Xi(N, T, \mu) = 2\beta \mu \sum_k f_k.$$

Ahora, sustituyendo cada uno de los términos de (A.1)

$$S = 2k_B \sum_k [\ln(1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_k)}) + \beta \epsilon_k f_k - \beta \mu f_k] =$$

$$\begin{aligned}
&= 2k_B \sum_k \left[\ln \left(\frac{1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right) + (\beta\epsilon_k - \beta\mu) f_k \right] = \\
&= -2k_B \sum_k \ln \left(\frac{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}}{1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right) - \beta(\epsilon_k - \mu) f_k = \\
&= -2k_B \sum_k \ln \left(\frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right) + \beta(\epsilon_k - \mu) - \beta(\epsilon_k - \mu) f_k = \\
&= -2k_B \sum_k \ln f_k + \beta(\epsilon_k - \mu)(1 - f_k);
\end{aligned}$$

pero

$$\ln(1 - f_k) = \ln(e^{\beta\epsilon_k} f_k) = \beta\epsilon_k - \ln f_k,$$

de modo que

$$\beta\epsilon = \beta(\epsilon_k - \mu) = \ln(1 - f_k) - \ln f_k.$$

Empleando esta última

$$\begin{aligned}
S &= -2k_B \sum_k \ln f_k + (\ln(1 - f_k) - \ln f_k)(1 - f_k) = \\
&= -2k_B \sum_k f_k \ln f_k + (1 - f_k) \ln(1 - f_k). \tag{A.5}
\end{aligned}$$