

00323



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

P

FACULTAD DE CIENCIAS

UN MODELO PARA CUPRATOS SUPERCONDUCTORES BAJO PRESION

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C A

P R E S E N T A :

YESENIA ARREDONDO LEON



DIRECTOR DE TESIS DIR: DRA. MA. DE LOS ANGELES ORTIZ FLORES



FACULTAD DE CIENCIAS SECCION ESCOLAR

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

A



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
DE INGENIERÍA
1971

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

DRA. MARÍA DE LOURDES ESTEVA PERALTA
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
"Un modelo para cupratos superconductores bajo presión"

realizado por Arredondo León Yesenia

con número de cuenta 9301121-5 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

A t e n t a m e n t e

Director de Tesis

Propietario

Dra. María de los Angeles Ortíz Flores *María de los Angeles Ortíz Flores*

Propietario

Dr. Eugenio Ley Koo *E. Koo*

Propietario

Dr. Oracio Navarro Chávez *Oracio Navarro*

Suplente

Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca *Gerardo Jorge Vázquez Fonseca*

Suplente

Dra. Susana Orozco Segovia *Susana Orozco Segovia*

Consejo Departamental de ~~Estadística~~

Patricia Goldstein Menache

DRA. PATRICIA GOLDSPEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura
DEPARTAMENTO DE CIENCIAS

B

Agradecimientos

A la Dra. Ma. de los Angeles Ortíz Flores, por el gran acopio de paciencia y confianza con que aceptó ser mi principal guía académica.

Al Dr. Fernando Magaña, por haberme introducido en el mundo de los superconductores.

A la Dra. Susana Orozco, al Dr. Eugenio Ley Koo, al Dr. Oracio Navarro y al Dr. Gerardo Fonseca, por su apoyo en la conclusión de este trabajo.

A la Mstra. Mirna Villavicencio y a la Mstra. Gabriela del Valle, por haber estado presentes en momentos significativos durante mi estancia en la facultad.

Al Fís. Andrés V. Porta Contreras, por haberme brindado oportunidades para llevar a cabo mi trabajo en las mejores condiciones.

A todos los académicos y trabajadores de la UNAM que en alguna forma han contribuido a mi desarrollo académico y personal.

Índice general

Introducción	I
1. Historia de la superconductividad	1
1.1. Características de los materiales superconductores	1
1.2. Modelo de London	4
1.3. Teoría de Ginzburg-Landau	7
1.4. J. Bardeen, L. Cooper y R. Schrieffer	9
2. Modelo BCS	12
2.1. El problema de Cooper	12
2.2. Cálculo de la brecha de energía y de la temperatura crítica.	15
3. Cupratos Superconductores	23
3.1. <i>LMCO</i>	27
3.2. $A_2B_2Ca_xCu_{x+1}O_{2x+6}$	28
3.3. <i>YBaCuO</i>	30
3.4. Respuesta de los cupratos superconductores a la aplicación de altas presiones	32
3.5. Sobre la explicación de la Superconductividad de altas temperaturas críticas	35
4. Modelo con traslape de bandas	37
5. Resultados	43
Conclusiones	52
Bibliografía	54

Introducción

El fenómeno de la superconductividad fue descubierto por el holandés Heike Kamerlingh Onnes en el año de 1911. A partir de entonces el sueño del movimiento perpetuo se pudo palpar en los anillos a través de los cuales fluía una corriente eléctrica sin oponer resistencia alguna.

La superconductividad se define como la conducción perfecta de corriente eléctrica y el blindaje total a campos magnéticos externos, esto es, un superconductor se comporta como un conductor y un diamagneto perfecto. Este fenómeno ha dado lugar a revoluciones tanto en el aspecto experimental -en cuanto a la gran cantidad y diversidad de aplicaciones- como en el teórico - en cuanto a los nuevos conceptos y procesos que ha sido necesario establecer para explicar el fenómeno.

La explicación adecuada del fenómeno de la superconductividad se formuló en el año de 1957. La teoría BCS (desarrollada por John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer) asume la existencia de una interacción atractiva entre los electrones mediada por la red iónica del material, por lo que se tiene que la conducción en estos materiales se da a través de electrones apareados llamados Pares de Cooper. Esta teoría junto con el trabajo de Abrikosov sobre los superconductores, explican a partir de primeros principios éste fenómeno, el cual era hasta entonces, característico de materiales a bajas temperaturas, siendo éstas no mayores de $23K$. Por esto, se recibió con gran sorpresa el descubrimiento en 1986 de nuevos materiales superconductores llamados *cupratos*, cuyas propiedades, en especial sus temperaturas críticas, que son mucho mayores que las esperadas y hasta entonces conocidas, no pudieron ser justificadas por las teorías establecidas, las cuales se vieron rebasadas abruptamente.

Muchas han sido las propuestas para alcanzar un entendimiento de la superconductividad de altas temperaturas críticas. Se puede hablar en general de dos grandes grupos: modelos que retoman la teoría BCS con modificaciones menores y modelos que proponen algo fuera del contexto de BCS.

Durante los años que han transcurrido desde el descubrimiento de los materiales superconductores de alta temperatura, se han realizado grandes esfuerzos tanto experimentales como teóricos que han ayudado a comprender estos nuevos materiales superconductores. Sin embargo, aún quedan preguntas esenciales por responder, por ejemplo ¿cuál es (o cuáles son) los mecanismos responsables del apareamiento de los electrones?

Con estos antecedentes, se propone desarrollar en esta tesis un análisis de algunas de las propiedades de los materiales superconductores de alta T_c , a través de un modelo basado en el estudio de un gas bidimensional de electrones. Como se sabe, un parámetro importante en

la teoría BCS es el parámetro λ , que caracteriza la intensidad de la interacción electrón-fonón de los pares de Cooper y cuyos valores son menores a 0.5, por lo cual se dice que se tiene un acoplamiento débil. A fin de que el modelo empleado permanezca dentro del contexto de la teoría BCS, se tomarán en cuenta valores del parámetro en el límite mencionado.

Se trabajará con el grupo de los *cupratos superconductores*, llamados así por la presencia de planos de cobre y oxígeno, el cual ha sido uno de los que más trascendencia ha tenido tanto desde el punto de vista teórico como en el campo de las aplicaciones. Una de sus principales características es que son materiales en los cuales la conducción en el estado superconductor es anisotrópica debido a su estructura de capas; esto permite hablar de los cupratos superconductores como sistemas cuasi-bidimensionales, por lo que un modelo bidimensional del gas de electrones es aplicable en esta situación.

Para entender el origen de la superconductividad de altas temperaturas y otras propiedades anómalas en los cupratos superconductores, se revisarán algunas de sus propiedades más importantes observadas experimentalmente.

Una de las estrategias que se ha empleado a lo largo de todo este tiempo, es la de apoyarse en la búsqueda de correlaciones entre las propiedades de los estados normal y superconductor y cómo varían éstas al cambiar algunas de las propiedades básicas de estos materiales como, por ejemplo, la concentración de portadores, lo cual se ha hecho a través de la sustitución o introducción de otros elementos en el compuesto superconductor. También se ha tomado en cuenta la separación interatómica, la cual se puede modificar al aplicar presión a los materiales. En particular, esta técnica ha ofrecido resultados muy interesantes ya que se ha observado un incremento importante en la temperatura crítica al aumentar la presión.

Se ha encontrado además, que otra de las características de estos nuevos materiales es que tienen una estructura de bandas compleja, lo que genera un traslape múltiple de las mismas. Tomando esto en cuenta y, dado que el modelo que se presenta en este trabajo pretende ser sencillo, se propone tomar en cuenta el traslape de dos bandas, lo cual permitirá encontrar una ecuación para la temperatura crítica de los cupratos y que además se podrá relacionar con efectos obtenidos al aplicar presión.

Para ilustrar y verificar la validez del modelo propuesto, se trabaja con el cuprato superconductor $YBa_2Cu_3O_8$ ($Y124$), material para el cual se realizaron cálculos específicos de algunas de sus propiedades.

Literatura más extensa sobre el fenómeno de superconductividad se ha citado en los trabajos correspondientes a las referencias [1-16].

PAGINACIÓN DISCONTINUA

Capítulo 1

Historia de la superconductividad

1.1. Características de los materiales superconductores

Hacia el año de 1900, muchos de los gases raros ya habían sido licuados, permitiendo la exploración de las propiedades de los materiales en el intervalo de temperaturas de algunos cuantos kelvins. En el laboratorio de Heike Kammerlingh Onnes, en Leiden, Holanda, se llevaron a cabo estudios de la resistividad eléctrica de los metales como función de la temperatura, teniendo en mente que podría suceder una de las siguientes tres posibilidades: a) los electrones se congelarían, lo cual haría que el metal tuviera un comportamiento aislante, b) los defectos en el cristal dispersarían a los electrones resultando una resistividad residual aún a la temperatura de cero kelvins y c) la resistividad disminuiría lentamente a cero conforme la temperatura se acercara al cero absoluto. En 1911 Kammerlingh Onnes, empleando un baño térmico de helio líquido, descubrió que la resistencia del mercurio se reduce suavemente al disminuir la temperatura, pero a partir de una temperatura de 4.15 K la resistencia se reduce a cero abruptamente. Este comportamiento se observó también en otros metales y Onnes llamó a este fenómeno superconductividad.

La gran cantidad de materiales superconductores encontrados a partir de 1911, hizo necesaria su clasificación de acuerdo a las propiedades observadas. Por medio de varios experimentos se logró caracterizar a estos materiales a través de un conjunto de parámetros comunes e intrínsecos a ellos. Los parámetros más importantes son: la temperatura crítica, T_c , que es la temperatura máxima a la cual un material es superconductor, en ausencia de campos magnéticos; el campo magnético crítico máximo, H_0 , definido a una temperatura de 0K, es valor máximo de campo magnético que resiste el material, arriba del cual se pierde el estado superconductor; la densidad de corriente crítica máxima, J_0 , se define igualmente a la temperatura de 0K y es la densidad de corriente máxima que soporta un superconductor antes de que el material alcance el estado normal.

Para un superconductor, Onnes encontró que una corriente eléctrica que circule por el material, a una temperatura menor que T_c , se mantiene en él sin necesidad de aplicar un voltaje. En el caso del mercurio, la temperatura crítica es de 4.15K. Si el material superconductor se coloca en un campo magnético, se mantiene el estado superconductor hasta un valor umbral H_c de la inducción magnética mientras que, para valores mayores, se

destruye el estado superconductor. Ahora bien, sabemos que cargas eléctricas en movimiento generan campos magnéticos y un conductor perfecto no está exento de este efecto.

En 1933 Meissner y Ochsenfeld descubrieron que si la intensidad del campo aplicado está por debajo de un cierto valor crítico H_c , entonces el campo magnético aplicado origina corrientes superficiales en el material, generando así un campo que anula por completo al primero; es decir, las líneas de flujo del campo aplicado no pueden atravesar el material; a esta propiedad característica se le denominó Efecto Meissner. A partir de entonces se definió como material superconductor: un conductor perfecto que presenta el efecto Meissner, es decir, el material es, además de un conductor perfecto, un diamagneto perfecto. Si la intensidad del campo aplicado alcanza el valor de H_c el estado superconductor se destruye.

Además de estas características macroscópicas también son de interés dos longitudes microscópicas: la longitud de penetración λ , que depende de la temperatura y que está asociada con la capacidad del material para repeler los campos magnéticos aplicados, es decir, con el efecto Meissner; y la longitud de coherencia ξ , que es la distancia entre los electrones del par de Cooper. Siendo la corriente superconductor resultado del movimiento ordenado de pares de electrones, llamados pares de Cooper. Esta distancia, que también depende de la temperatura, determina la densidad de la corriente superconductor del material.

Los valores de las dos longitudes microscópicas λ y ξ son determinantes en las propiedades de un superconductor. Se encontró que si $\lambda \ll \xi$, el material presenta un comportamiento diferente al de un material para el que $\lambda \gg \xi$. Por convención se definieron como superconductores tipo I a los materiales para los cuales $\lambda \ll \xi$, y superconductores tipo II a los materiales para los cuales $\lambda \gg \xi$.

Los superconductores tipo I expelen por completo el flujo del campo magnético aplicado antes de alcanzar el estado normal, ver la figura 1.1; también se les llama superconductores "suaves" o "puros", ya que en su mayoría son metales que se pueden obtener con un alto grado de pureza. Los valores de las temperaturas críticas de los superconductores Tipo I son bajos, estando entre $\sim 0,01K$ y $10K$. Los valores de la longitud de coherencia ξ son de algunos miles de angstroms mientras que los de la longitud de penetración λ adquieren valores de cientos de angstroms; i.e., $\lambda \ll \xi$.

En el caso de los superconductores tipo II se encontró que responden en forma distinta al ser sometidos a un campo magnético, ya que se presenta un comportamiento intermedio entre los estados normal y superconductor, el cual está delimitado por la existencia de dos campos críticos máximos, H_{c1} y H_{c2} . Esto es, para $H < H_{c1}$ el material presenta el efecto Meissner y para $H_{c1} < H < H_{c2}$ existe una cierta penetración del campo, sin romper el estado superconductor; mientras que para $H > H_{c2}$ el estado superconductor se destruye. Ver figura 1.2.

Para valores de H entre H_{c1} y H_{c2} se forman en el material regiones que son superconductoras y regiones en estado normal al mismo tiempo. Para los materiales superconductores tipo II el estado de mínima energía corresponde a aquél en el que existen fronteras que separan el estado normal del estado superconductor en el interior del material, esto se da ya que el campo penetra en el material, de forma inhomogénea, perforando pequeñísimos filamentos regularmente espaciados, tal arreglo corresponde al estado de mínima energía del material. Figura 1.2.

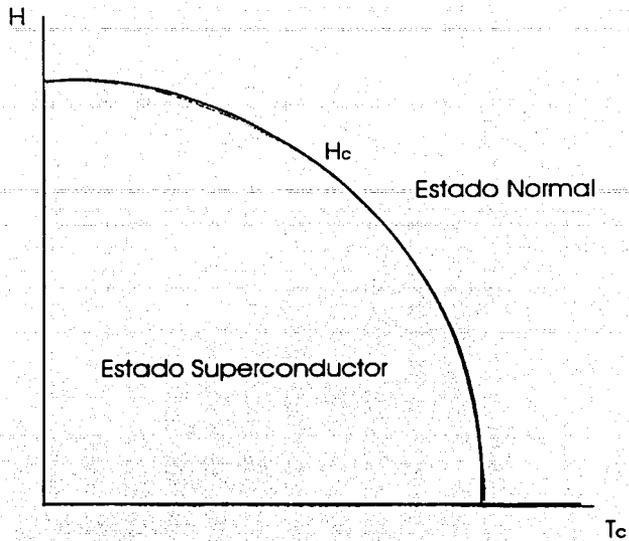


Figura 1.1. Respuesta de un superconductor tipo I a la aplicación de un campo magnético.

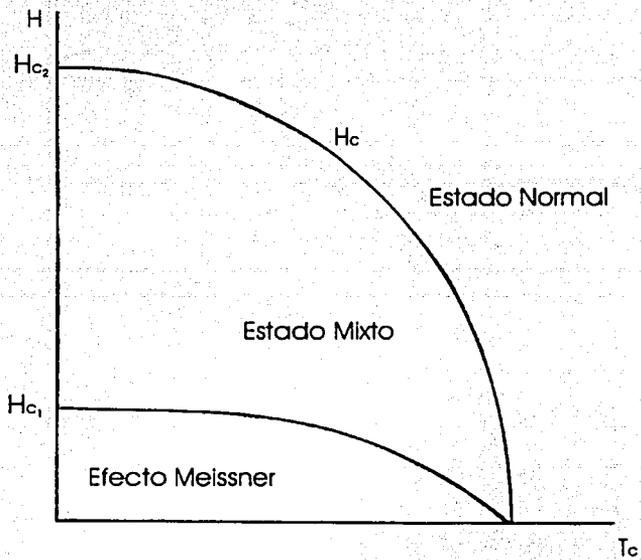


Figura 1.2. Respuesta de un superconductor tipo II a un campo magnético.

De entre todas las características de los materiales superconductores que han sido mencionadas, la temperatura crítica es quizás la más importante desde un punto de vista práctico, ya que desde 1911 el refrigerante de mayor aplicación en el uso de superconductores ha sido el helio líquido, cuya temperatura de licuefacción es de aproximadamente $4K$, así que encontrar materiales cuyas temperaturas críticas sean más altas, permitiría el empleo de materiales refrigerantes que no implicara una gran infraestructura como la que se requiere para la obtención del helio líquido.

Con lo anterior se tiene un conjunto de propiedades observadas como resultado de experimentos y, por supuesto, la inquietud por explicar estas propiedades dió origen a distintas teorías que explican uno u otro aspecto. Es necesario tomar en cuenta que en las primeras décadas del siglo XX la teoría cuántica apenas estaba siendo construida y comenzaba a ser aplicada, por lo que las primeras teorías sobre superconductividad eran clásicas y explicaban sólo algunos aspectos del fenómeno. Sin embargo, el desarrollo paralelo de la mecánica cuántica permitió identificar el carácter cuántico de este fenómeno, lo que dió lugar a una nueva teoría, básica y completa, para entender la superconductividad de bajas temperaturas.

1.2. Modelo de London

Una de las principales teorías es la que presentaron en 1935 los hermanos Fritz y Heinz London[17]. La teoría London es clásica y básicamente fenomenológica, y se ocupa de explicar el efecto Meissner y la conducción perfecta.

Los hermanos London retoman de Gorter y Casimir la propuesta de visualizar a las corrientes eléctricas en un material superconductor como dos flujos (Modelo de los dos fluidos, 1934), uno superconductor y uno normal. Se define entonces n_s como la densidad volumétrica de cargas superconductoras en el material y n_n como la densidad volumétrica de cargas normales, siendo el total de cargas por unidad de volumen $n = n_s + n_n$. Cuando el material se encuentra a una temperatura mayor o igual a la temperatura crítica, la corriente superconductoras es cero, $n_s(T \geq T_c) = 0$. Conforme la temperatura disminuye, el valor de n_s aumenta, esperando que a una temperatura de $0K$, toda la densidad volumétrica de cargas sea superconductoras, $n_s(0) = n$. Entonces, la corriente debida a los electrones superconductores está dada por:

$$\mathbf{J} = -e\mathbf{v}_s n_s \quad (1.1)$$

y de la segunda ley de Newton, $m(d\mathbf{v}/dt) = -e\mathbf{E}$,

$$\mathbf{E} = \frac{\partial}{\partial t}(\Lambda\mathbf{J}) \quad (1.2)$$

donde $\Lambda \equiv m/n_s e^2$.

Combinando este resultado con la ley de Faraday, $\nabla \times \mathbf{E} = -c^{-1}(\partial\mathbf{B}/\partial t)$, se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}[c\nabla \times (\Lambda\mathbf{J}) + \mathbf{B}] = 0 \quad (1.3)$$

esta es una ecuación general para cualquier metal con densidad de electrones de conducción n_s y no explica el efecto Meissner; sin embargo, los hermanos London se dieron cuenta

que tal comportamiento se puede explicar si se restringen las soluciones de la ecuación anterior a sólo aquellas para las que:

$$c\nabla \times (\Lambda \mathbf{J}) + \mathbf{B} = 0. \quad (1.4)$$

A esta ecuación se le conoce como la ecuación de London. Aplicando el rotacional y utilizando la ecuación de Ampère, $\nabla \times \mathbf{B} = (4\pi/c)\mathbf{J}$, se obtienen el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{B} &= \mathbf{B}/\lambda_L^2 \\ \nabla^2 \mathbf{J} &= \mathbf{J}/\lambda_L^2, \end{aligned} \quad (1.5)$$

donde $\lambda_L^2 = mc^2/4\pi n_s e^2$ es la longitud de penetración de London. Las soluciones de las ecuaciones anteriores son de forma exponencial, así que si se tiene la superficie de un superconductor sobre el plano xy y tomando x positiva hacia dentro del superconductor y el campo magnético aplicado en la dirección z , las soluciones son:

$$\begin{aligned} B_z &= B_z(0) \exp(-x/\lambda_L) \\ J_y &= cB_z(0)/4\pi \exp(-x/\lambda_L), \end{aligned} \quad (1.6)$$

donde $B_z(0)$ es el valor del campo magnético en la superficie del material. Ver figura 1.3. Las soluciones indican que dentro del material el campo magnético decae hasta anularse, describiendo así, el efecto Meissner.

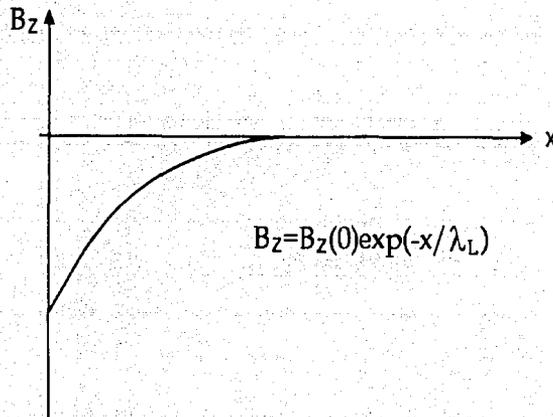


Figura 1.3. Decaimiento del campo magnético dentro de un material superconductor.

En el modelo de los dos fluidos de Gorter y Casimir la densidad de corriente total es $\mathbf{J} = -e(n_s \mathbf{v}_s + n_n \mathbf{v}_n)$, donde \mathbf{v}_s y \mathbf{v}_n son las velocidades de las componentes superconductoras y normal respectivamente. Sin embargo, en presencia del efecto Meissner, $\mathbf{v}_n = 0$, por lo tanto $\mathbf{J} = \mathbf{J}_s = -en_s \mathbf{v}_s$. Es decir, sólo se tiene una densidad de corriente superconductoras, lo cual indica que el material es un conductor perfecto.

Gorter y Casimir definieron la cantidad x como la fracción de la densidad de electrones normales de conducción y $1-x$ como la fracción que corresponde a la densidad de electrones superconductores; i.e.:

$$x = \frac{n_n(T)}{n} \quad 1 - x = \frac{n_s(T)}{n}$$

además, experimentalmente se encontró que para T fija:

$$x = \frac{n_n(T)}{n} = \left[\frac{T}{T_c} \right]^4$$

de donde

$$1 - x = 1 - \left[\frac{T}{T_c} \right]^4, \quad (1.7)$$

por lo tanto,

$$n_s(T) = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right]. \quad (1.8)$$

Substituyendo este valor en la ecuación de London para la longitud de penetración se tiene que:

$$\lambda_L^2(T) = \frac{mc^2}{4\pi e^2 n \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right]}$$

$$\lambda_L^2(0) = \frac{mc^2}{4\pi e^2 n}$$

y finalmente:

$$\lambda_L(T) = \frac{\lambda_L(0)}{\left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (1.9)$$

Al alcanzar la temperatura crítica, $T = T_c$, el valor de la longitud de penetración de London tiende a infinito, lo cual significa que el estado superconductor se rompe. Los valores que la Teoría de London predice para $\lambda_L(0)$ son de entre 100 y 1000 Å.

La teoría de London logró explicar, clásicamente y basada en los resultados experimentales, el efecto Meissner y la conducción perfecta. Introduce el parámetro de longitud de penetración λ_L y predice sus valores, pero no la relaciona con el campo magnético aplicado y la ecuación de London no describe la forma en que el número n_s varía en el espacio, lo cual nos ayudaría a comprender la transición del estado normal al superconductor.

1.3. Teoría de Ginzburg-Landau

Desarrollada en los años cincuenta, la teoría de Ginzburg-Landau [18] es, al igual que la teoría de London, completamente fenomenológica. Se construyó sobre la base de la teoría general de Landau para describir la transición entre dos fases en un sistema termodinámico. Esta teoría describe con éxito, por ejemplo, las transiciones entre fases cristalinas en un sólido, por lo cual Ginzburg y Landau decidieron aplicarla a los materiales superconductores, logrando efectivamente, formular un conjunto de ecuaciones descriptivas de la transición del estado normal al estado superconductor.

La teoría de Ginzburg-Landau nace dentro del contexto de transiciones de fase cuya teoría, como se ha mencionado, había sido desarrollada por el mismo Landau. Él consideraba que cualquier transición de este tipo podía ser descrita en términos de un parámetro de orden, como la magnetización en el caso del ferromagnetismo. En el caso de la superconductividad, Landau propone una función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ como dicho parámetro de orden, la cual cumple con que el cuadrado de su amplitud, $|\Psi(\mathbf{r})|^2$, es la densidad volumétrica de electrones superconductores en un punto \mathbf{r} . Esta función debe comportarse de tal forma que $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ sea cero arriba de la temperatura de transición T_c y distinta de cero para temperaturas menores a T_c .

Para describir este tipo de sistemas Landau asume que la energía libre de Helmholtz es una función definida de n_s y T , $\mathcal{F}(n_s, T)$, que es analítica, por lo cual se puede escribir en términos de potencias de n_s :

$$\mathcal{F}(n_s, T) = \mathcal{F}_n(T) + \alpha(T)n_s + \frac{1}{2}\beta(T)n_s^2 + \dots \quad (1.10)$$

Esta función debe presentar un mínimo para n_s mayores que cero y $T < T_c$, así que $\beta(T)$ debe ser positiva para cualquier valor de la temperatura y $\alpha(T)$ debe cambiar de un valor positivo arriba de T_c a un valor negativo para $T < T_c$, así que se propone que $\alpha = a(1 - \frac{T}{T_c})$ y a β como una constante positiva. Como esta teoría se concentra en el punto de transición entre los estados normal y superconductor las temperaturas se toman lo suficientemente cerca de T_c , lo que permite ignorar los términos en n_s^3 y mayores.

El estado de equilibrio se encuentra haciendo $d\mathcal{F}/dn_s = 0$, de donde se concluye que, para $T < T_c$:

$$\alpha + \beta n_s = 0$$

con lo que se tiene:

$$n_s = -\frac{\alpha}{\beta} \propto (1 - \frac{T}{T_c}). \quad (1.11)$$

Este resultado es coherente con lo que se había obtenido en la ec.(1.8) de la teoría de London. Si se sustituye este valor en la energía libre de Helmholtz se puede calcular la diferencia de energía entre el estado normal y el superconductor:

$$\Delta\mathcal{F} = \mathcal{F}_n - \mathcal{F}_s = \frac{\alpha^2}{2\beta} \quad (1.12)$$

Dado que al aplicar un campo magnético se incrementa la energía libre de un superconductor en una cantidad $\Delta\mathcal{F} = H_c^2/2\mu_0$, se encuentra que el campo magnético crítico

es:

$$H_c(T) = -\sqrt{\frac{\mu_0}{\beta}} \alpha(T) \propto \left(1 - \frac{T}{T_c}\right). \quad (1.13)$$

Por otra parte, esta teoría introduce además un parámetro al que llama parámetro de longitud de coherencia de Ginzburg-Landau, ξ . Este se define como sigue: dado un punto dentro del material superconductor, el parámetro de orden $\Psi(\mathbf{r})$ varía de tal forma que $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ pasa de ser cero, hasta alcanzar valores $|\Psi(\mathbf{r})|^2 \neq 0$ a lo largo de una longitud característica que es precisamente, la longitud de coherencia.

Las expresiones para estas dos longitudes, de acuerdo con esta teoría, son :

$$\begin{aligned} \lambda(t) &= \frac{\lambda_L(0)}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{1-t}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \xi(t) &= 0.74\xi_0 \left(\frac{1}{1-t}\right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (1.14)$$

donde $\lambda_L(0)$ es la longitud de penetración de la teoría de London, $t = T - T_c$ y $\xi_0 \approx \frac{h v_F}{k_B T_c}$ es la longitud de coherencia a $T = 0K$, v_F es la velocidad de Fermi y k_B es la constante de Boltzman.

Otro parámetro que se definió dentro del contexto de esta teoría, llamado parámetro de GL, es el cociente:

$$\kappa \equiv \frac{\lambda}{\xi}. \quad (1.15)$$

Cuando $\kappa \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$ el superconductor es tipo I. Hasta ese momento sólo se conocían superconductores tipo I (aunque no con este nombre) y ya antes se vió que para estos materiales $\lambda \ll \xi$ por lo que $\kappa \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$. El caso en que $\kappa \geq \frac{1}{\sqrt{2}}$ no fue apreciado sino hasta que Abrikosov, en 1957, muestra que esto conduce a la existencia de nuevos materiales superconductores: los tipo II. Basándose en el trabajo de Ginzburg y Landau, se demostró que la respuesta magnética en un superconductor tipo II, por debajo de la temperatura crítica, depende de la intensidad del campo aplicado y de la temperatura en la forma en que se señaló anteriormente. En la tabla 1 se enumeran algunos de los materiales (y sus valores correspondientes para λ y ξ) conocidos hasta 1960, que eran en su mayoría, elementos de la tabla periódica y algunas aleaciones metálicas.

La teoría de Ginzburg-Landau explica la transición entre los estados superconductor y normal, sin embargo, como se aclaró al principio, la descripción es fenomenológica, por lo cual la búsqueda de una teoría fundamental aún quedaba abierta, además se esperaba que el desarrollo paralelo de la mecánica cuántica contribuyera a la formulación de la teoría deseada. Es importante enfatizar que la teoría de transiciones de Landau por sí sola era ya una gran herramienta que permitía explicar diferentes transiciones de fase. Su aplicación a la superconductividad brindó nuevos conocimientos sobre este fenómeno, los cuales fueron imprescindibles para continuar la búsqueda de una teoría que explicara no sólo las características del estado superconductor, sino también su origen.

Tabla 1. Algunos materiales y aleaciones metálicas conocidos hasta 1960.

<i>Material</i>	$T_c(K)$	$\xi(nm)$	$\lambda(nm)$
<i>Cd</i>	0.56	760.0	110
<i>Al</i>	1.18	550.0	40
<i>In</i>	3.41	360.0	40
<i>Sn</i>	3.72	180.0	42
<i>Ta</i>	4.40	93.0	35
<i>Pb</i>	7.20	82.0	39
<i>Nb</i>	9.25	39.0	50
<i>Pb - In</i>	7.00	30.0	150
<i>Pb - Bi</i>	8.30	20.0	200
<i>Nb - Ti</i>	9.50	4.0	300
<i>Nb - N</i>	16.00	5.0	200
<i>PbMo₆S₈</i>	15.00	2.0	200
<i>V₃Ga</i>	15.00	2.5	90
<i>V₃Si</i>	16.00	3.0	60
<i>Nb₃Sn</i>	18.00	3.0	65
<i>Nb₃Ge</i>	23.20	3.0	90
<i>K₃C₆₀</i>	19.00	2.6	240

1.4. J. Bardeen, L. Cooper y R. Schrieffer

El modelo desarrollado por J. Bardeen, L.N. Cooper y R. Schrieffer parte de la existencia de una interacción atractiva entre los electrones de un superconductor. Aún sin que se conociera cuál es la naturaleza de esta interacción, a partir del modelo de Debye, se ha podido entender cuál es el mecanismo que permite tal interacción.

Leon Cooper, en el año de 1956, demostró que no se puede formar un metal normal si existe una pequeña atracción entre los electrones. En tal caso, por muy pequeña que fuese tal atracción, los electrones formarían pares, cambiando así las propiedades electrónicas del metal.

El mecanismo que propuso Cooper para explicar la atracción entre electrones se puede visualizar como sigue: un electrón moviéndose en un metal deforma y polariza la red cristalina debido a la interacción eléctrica. El desplazamiento de los iones en la red hace que el electrón se vea rodeado por una "nube" de carga positiva cuya magnitud puede exceder la carga del electrón. Entonces este electrón, junto con la "nube" que lo rodea representa un sistema cargado positivamente, el cual a su vez atraerá a otro electrón que se halle en los alrededores.

Otra de las observaciones clave que permitió el desarrollo de este modelo fue un resultado experimental conocido como Efecto Isotópico, desarrollado por H. Fröhlich en 1950, el cual aportó la idea de que en la explicación del fenómeno de superconductividad, la interacción entre electrones y la red cristalina debe ser tomada en cuenta. Fröhlich mostró que

la temperatura crítica de un superconductor tipo I es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la masa de su isótopo, a esto se le conoce como efecto isotópico. Los resultados experimentales se describían como:

$$T_c \propto M^\alpha,$$

donde M es la masa atómica y, $\alpha = -\frac{d(\ln T_c)}{d(\ln M)}$ es un parámetro por determinar. Los primeros experimentos se realizaron con mercurio, dando un resultado de $\alpha = 0.50 \pm 0.03$.

Esto se puede deducir directamente de la teoría BCS ya que se encuentra que $T_c \sim \omega_D$ y, dado que la frecuencia de Debye se puede escribir como:

$$\omega_D \sim \left(\frac{k}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$$

donde k es la constante de la red, se obtiene que $T_c \propto M^{-\frac{1}{2}}$

Aunque el valor del parámetro α no resultó ser de $\frac{1}{2}$ para todos los superconductores, el efecto isotópico sugirió que la corriente que transporta los electrones en un superconductor no es independiente de la red cristalina, sino que en alguna forma interactúa con ella. Se postuló entonces que esta interacción podría ser causante de una atracción entre los electrones del superconductor. No hay contradicción alguna entre lo anterior y el hecho de que siendo los electrones partículas con la misma carga se repelen; ya que en este caso no se está considerando dos electrones aislados sino dentro del material, por lo que la interacción coulombiana repulsiva entre ellos no es la única. La presencia de un medio puede cambiar el signo de la interacción total. Ahora, si la resistencia disminuyera todos estos pares de electrones se moverían en forma coordinada en el material, como un enjambre.

Las siguientes son las principales propiedades del fenómeno de la superconductividad que explica la teoría BCS:

- Una transición de fase de 2º orden a una temperatura crítica T_c , en ausencia de campos magnéticos.

- El efecto Meissner-Oschenfeld ($B_{int} = 0$).

- La conducción perfecta.

- El Efecto Isotópico.

- Una variación exponencial de la contribución electrónica al calor específico cerca de $T = 0K$.

Además de lo anterior, el modelo BCS encontró una ecuación para calcular la T_c , considerando que sólo se cuenta con la energía de los fonones de la red para establecer el estado superconductor:

$$k_B T_c = 1.14 \hbar \omega_D e^{-\frac{1}{N(E_F)V}},$$

aquí ω_D es la frecuencia de Debye, $N(E_F)$ es la densidad de estados en el nivel de Fermi y V es la interacción entre los electrones del par de Cooper. Esto determina un límite en las temperaturas críticas, prediciendo que la máxima T_c es de alrededor de $23K$. A este límite se le conoce como la barrera fonónica.

El éxito del modelo de Bardeen, Cooper y Schrieffer obedeció al hecho de que permitió explicar, de primeros principios, varios de los aspectos de la superconductividad hasta entonces conocidos. Así, con el modelo BCS y el trabajo de Abrikosov sobre superconductores tipo II, se pensó que la superconductividad estaba descrita por completo. Sin embargo, esto se vió superado por los descubrimientos de tres décadas más tarde.

Capítulo 2

Modelo BCS

2.1. El problema de Cooper

Como se mencionó en el capítulo de antecedentes, el modelo BCS fue el primer modelo que explicara, de primeros principios, el fenómeno de la superconductividad [19]. El eje central de este modelo es la formación de pares de electrones, los cuales se encargan de transportar la corriente en un material superconductor.

La existencia de una interacción atractiva entre los electrones fue una idea original de H. Fröhlich, quien demostró que a través de los fonones de la red iónica de un superconductor, se puede generar una interacción atractiva entre dos electrones, dando como resultado el que tales electrones pueden atraerse entre sí, permitiendo la formación de pares. Sin embargo Fröhlich se encontró con dificultades matemáticas, ya que no pudo aislar el problema físico en forma adecuada. La contribución de Leon Cooper al modelo BCS fue precisamente delimitar el problema.

Un año antes de la publicación de la teoría BCS, Cooper demostró que el estado base de un gas de electrones es inestable respecto a la formación de pares de electrones ligados [20]. Para un metal normal, se tiene que los electrones libres se acomodan en los estados permitidos hasta alcanzar el nivel de Fermi. Cooper propone agregar un par de electrones exactamente sobre el nivel de Fermi, los cuales poseen momentos de la misma magnitud y signos opuestos, además de espines también opuestos, i.e. se tiene un electrón e^- con (\mathbf{k}, \uparrow) y un segundo electrón e^- con $(-\mathbf{k}, \downarrow)$. Estos electrones no interaccionan con todos aquellos que se encuentran en el mar de Fermi, ya que por el principio de exclusión de Pauli, los únicos estados que les son permitidos (en el espacio de momentos) son aquellos para los cuales $k > k_F$. Sin embargo, entre los dos electrones extra, Cooper parte de la existencia de un potencial de dos cuerpos $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, que es atractivo. En esta forma logra reducir un problema de muchos cuerpos a uno de sólo dos partículas. Al resolver el problema, se encuentra con un par ligado cuya energía es menor que si se tuvieran a los dos electrones por separado y se da cuenta de que esto genera una inestabilidad alrededor del nivel de Fermi, lo cual hace que se reacomoden los electrones formándose más pares de Cooper. Como se piensa en la interacción fonónica como la única interacción que genera la atracción entre los electrones, la máxima energía disponible para esto, se limita a aquella que los mismos

fonones puedan proporcionar, la cual está determinada por la energía de Debye $\hbar\omega_D$.

Para comenzar a resolver el problema de Cooper se considera la ecuación de Schrödinger para dos electrones que se encuentran exactamente sobre el nivel de Fermi y que interactúan a través del potencial $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. A partir de esto se desea encontrar la forma de la función de onda Ψ y el eigenvalor de la energía del par de electrones $\delta E + 2E_F$, donde E_F es la energía en el nivel de Fermi. La ecuación de Schrödinger es la siguiente:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right\} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\delta E + 2E_F) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.1)$$

Dado que se tiene un problema de dos cuerpos, se define la coordenada del centro de masa como:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$$

y la coordenada relativa:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

en términos de estas coordenadas la ec. (2.1) se convierte en:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - 2\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = (\delta E + 2E_F) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (2.2)$$

Empleado el método de separación de variables se puede escribir:

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \mathcal{R}(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}),$$

de donde resulta que $\mathcal{R}(\mathbf{R})$ corresponde a una onda plana:

$$\mathcal{R}(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}$$

y para la coordenada relativa \mathbf{r} :

$$\left\{ -2\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = (\delta E + 2E_F - \frac{\hbar^2 q^2}{4m}) \psi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

En los desarrollos siguientes no se tomará en cuenta el movimiento traslacional del centro de masa, por lo que, para la ec. anterior, $\mathbf{q} = 0$.

Expresando $\psi(\mathbf{r})$ como una suma sobre todos los estados con momento $\mathbf{k} > \mathbf{k}_F$,

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_F} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.4)$$

y sustituyendo esta expresión de $\Psi(\mathbf{r})$ en la ec. (2.3) se obtiene la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos:

$$[2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_F) - \delta E] a(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_F} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a(\mathbf{k}') = 0, \quad (2.5)$$

donde

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \text{con } \mathbf{k} > \mathbf{k}_F$$

y

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{v} \int d^3 \mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}).$$

Para simplificar la solución de la ec.(2.5) se realiza la siguiente aproximación:

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0 & E_F \leq \varepsilon_{\mathbf{k}} \leq E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{cualquier otro valor.} \end{cases} \quad (2.6)$$

En la ec. (2.6), $\hbar\omega_D$ es la máxima energía fonónica, lo cual refleja la idea de que la atracción entre los electrones está mediada por la red de iones.

Con el potencial propuesto en la ec. (2.6), el término de interacción en la ec. (2.5) se convierte en:

$$\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a(\mathbf{k}') = -V_0 A \Theta(\hbar\omega_D - \varepsilon_{\mathbf{k}}),$$

donde $\Theta[\hbar\omega_D - (\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_F)]$ es una función escalón y

$$A = \sum_{\mathbf{k}'} a(\mathbf{k}') \quad (2.7)$$

es una constante. Resolviendo la ec. (2.5) para $a(\mathbf{k})$ se tiene:

$$a(\mathbf{k}) = \frac{V_0 A}{2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_F) - \delta E} \Theta(\hbar\omega_D - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (2.8)$$

de las ecs. (2.7) y (2.8) se obtiene la siguiente ecuación autoconsistente en A :

$$A = V_0 A \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_F) - \delta E} \Theta(\hbar\omega_D - \varepsilon_{\mathbf{k}}),$$

si $A \neq 0$ se tendrá una ecuación en términos del eigenvalor de la energía δE :

$$1 = V_0 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_F) - \delta E} \Theta(\hbar\omega_D - \varepsilon_{\mathbf{k}}).$$

En el límite, la suma se puede expresar como una integral en las energías, en términos de la densidad de estados $N(\varepsilon)$:

$$1 = V_0 \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{N(\varepsilon)}{2(\varepsilon - E_F) - \delta E} d\varepsilon. \quad (2.9)$$

Como $\hbar\omega_D \ll E_F$, $N(\varepsilon)$ se puede aproximar dentro de la integral por su valor en la superficie de Fermi $N(E_F)$. En esta forma se obtiene:

$$1 = \frac{1}{2} V_0 N(E_F) \ln \left(\frac{\delta E - 2\hbar\omega_D}{\delta E} \right) \quad (2.10)$$

resolviendo para δE se encuentra que:

$$\delta E = -\frac{2\hbar\omega_D}{e^{N(E_F)V_0} - 1}. \quad (2.11)$$

En el límite de acoplamiento débil $N(E_F)V_0 \ll 1$, por lo que, en la ec.(2.11) domina el término exponencial y δE se puede aproximar como:

$$\delta E \cong -2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{N(E_F)V_0}}.$$

De lo anterior, la energía de amarre de un par de Cooper es:

$$\Delta_0^c = 2E_F + \delta E. \quad (2.12)$$

Una de las primeras observaciones que se pueden hacer, es que el estado de par que se ha construido siempre tendrá una energía menor que la correspondiente a tener dos electrones no apareados, esto sin importar lo pequeña que sea la interacción $V_{kk'}$, mientras que sea atractiva. Es por esto que el estado base normal es inestable respecto a la formación de los pares de Cooper.

2.2. Cálculo de la brecha de energía y de la temperatura crítica.

En la sección anterior, la discusión del problema de Cooper se aplica a dos electrones que se encuentran exactamente por encima del nivel de Fermi y se supone que la única interacción entre los pares de Cooper con los electrones del mar de Fermi, se da através del principio de exclusión de Pauli al limitar los estados en que un par de electrones que interactúan, puedan ser dispersados.

Ya se ha dicho que el mar de Fermi es inestable a la formación de un solo par de Cooper -suponiendo que exista una interacción atractiva- así que es de esperarse que la energía total del sistema sea aún menor si se forma más de un sólo par. Se tiene entonces un problema de muchos cuerpos para lo cual, la herramienta matemática más natural para emplear en este caso es la de segunda cuantización, donde los observables se expresan en términos de operadores de creación y aniquilación c_i^\dagger y c_i respectivamente, los cuales se definen como:

$$c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} |n_1, \dots, n_{i+1}, \dots\rangle,$$

$$c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} |n_1, \dots, n_{i-1}, \dots\rangle,$$

donde,

$$(-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} = (-1)^{(n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_{i-1})}.$$

Entre las propiedades más importantes de estos operadores se tiene que con la aplicación repetida del operador c_i^\dagger al estado vacío se pueden generar todos los estados posibles, es decir:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots |000\dots\rangle,$$

además el operador c_i^\dagger es el hermitiano adjunto de c_i , esto es, $c_i^\dagger = (c_i)^\dagger$ y, aunque los operadores c_i^\dagger y c_i no son hermitianos, su producto sí lo es y se define como el operador de número:

$$\hat{n}_i = c_i^\dagger c_i$$

$$\hat{N}_i = \sum_i c_i^\dagger c_i.$$

Aquí \hat{n}_i es el operador de número de una partícula y \hat{N}_i es el operador total de número. Los operadores c_i^\dagger y c_i satisfacen las reglas de anticonmutación para fermiones:

$$\{c_i, c_k^\dagger\} = c_i c_k^\dagger + c_k^\dagger c_i = \delta_{ik}$$

$$\{c_i, c_k\} = 0$$

$$\{c_i^\dagger, c_k^\dagger\} = 0.$$

Con este lenguaje, el modelo BCS desarrolla una teoría microscópica completa al construir una función de onda del estado base para el cual todos los electrones forman pares de Cooper.

El modelo BCS propone el siguiente hamiltoniano:

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}) - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad (2.13)$$

donde la primer suma es la energía cinética del sistema y la segunda suma es la interacción entre los electrones del par de Cooper a través del potencial $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Un valor positivo de $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ indica una interacción atractiva neta entre los electrones. Para hacer más sencilla la notación se trabajará con las siguientes definiciones que incluyen la dirección del espín: $k \equiv \mathbf{k} \uparrow$ y $-k \equiv -\mathbf{k} \downarrow$.

Para encontrar la energía del estado base se realiza un conjunto de transformaciones canónicas y unitarias conocidas como transformaciones de Bogoliubov-Valatin, que se definen como sigue:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad \gamma_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger$$

y sus respectivos conjugados,

$$\gamma_{\mathbf{k}}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}} \quad \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}},$$

donde $u_{\mathbf{k}}^2$ es la probabilidad de que el estado de par esté vacío y $v_{\mathbf{k}}^2$ es la probabilidad de que esté ocupado y cumplen que:

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1.$$

Los operadores gama obedecen las reglas de anticonmutación para los fermiones heredadas de los operadores c_i^\dagger y c_i :

$$\{\gamma_{\mathbf{k}}, \gamma_{\mathbf{k}'}\} = \{\gamma_{\mathbf{k}}, \gamma_{-\mathbf{k}'}\} = \{\gamma_{\mathbf{k}}^\dagger, \gamma_{-\mathbf{k}'}\} = 0$$

$$\{\gamma_k^\dagger, \gamma_{k'}\} = \{\gamma_{-k}^\dagger, \gamma_{-k'}\} = \delta_{kk'}.$$

Al sustituir los operadores c_k por los γ_k se puede reescribir el término de energía cinética del hamiltoniano como sigue:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_T = \sum_k \varepsilon_k (u_k^2 \gamma_k^\dagger \gamma_k + v_k^2 \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} + u_k v_k [\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k] \\ + u_k^2 \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} + v_k^2 \gamma_k^\dagger \gamma_k - u_k v_k [\gamma_{-k}^\dagger \gamma_k^\dagger + \gamma_k \gamma_{-k}]). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Ahora, para simplificar este hamiltoniano, se define un nuevo par de operadores:

$$m_k = \gamma_k^\dagger \gamma_k \quad (2.15)$$

$$m_{-k} = \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k}, \quad (2.16)$$

finalmente, para la energía cinética se tiene:

$$\mathcal{H}_T = \sum_k \varepsilon_k \{2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(m_k + m_{-k}) + 2u_k v_k (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k)\}. \quad (2.17)$$

Para el término de interacción:

$$\mathcal{H}_v = - \sum_{kk'} V_{kk'} c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger c_{-k} c_{k'}, \quad (2.18)$$

en términos de los operadores γ_k y m_k , se convierte en la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_v = - \sum_{kk'} V_{kk'} \{u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (1 - m_{-k} - m_k) \\ + u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (u_k^2 - v_k^2) (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger)\} \end{aligned} \quad (2.19)$$

Con lo que el hamiltoniano de BCS completo es:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{BCS} = \sum_k \varepsilon_k \{2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(m_k + m_{-k}) + 2u_k v_k (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k)\} \\ - \sum_{kk'} V_{kk'} \{u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (1 - m_k - m_{-k}) \\ + u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (u_k^2 - v_k^2) (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger)\}, \end{aligned}$$

este hamiltoniano se puede reescribir como :

$$\mathcal{H}_{BCS} = E_0 + H_0 + H_1, \quad (2.20)$$

donde E_0 es el término de energía constante:

$$E_0 = \sum_k 2\varepsilon_k v_k^2 - \sum_{kk'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k, \quad (2.21)$$

H_0 es la parte diagonal del hamiltoniano:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k (u_k^2 - v_k^2) (m_k + m_{-k}) + \sum_{kk'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (m_k + m_{-k}) \quad (2.22)$$

y H_1 es la parte no diagonal,

$$H_1 = \sum_k \{ 2\varepsilon_k u_k v_k - \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (u_k^2 - v_k^2) \} (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger). \quad (2.23)$$

Con el fin de encontrar los valores de u_k y v_k adecuados en la transformación de Bogoliubov-Valatin, se realiza la siguiente aproximación: asumir que para el estado de mínima energía de un sistema de fermiones independientes en el estado base ($T = 0$), los números de ocupación $m_{k'}$ y $m_{-k'}$ son cero.

Ahora, para anular el término no diagonal H_1 se toma:

$$2\varepsilon_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} = 0. \quad (2.24)$$

Se define entonces la siguiente cantidad:

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'},$$

esta cantidad es importante porque indica que para el estado base de momento k se genera una brecha Δ_k en el espectro de energías.

Ya que u_k y v_k no son independientes, se pueden escribir en términos de un sólo parámetro x_k :

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} - x_k} \quad \text{y} \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} + x_k}$$

con lo que:

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{kk'} \left(\frac{1}{4} - x_{k'}^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.25)$$

La ec. (2.24) se puede reescribir como:

$$2\varepsilon_k \left(\frac{1}{4} - x_k^2 \right)^{\frac{1}{2}} + 2x_k \Delta_k = 0, \quad (2.26)$$

para lo cual se tiene que la solución x_k es:

$$x_k = \pm \frac{\varepsilon_k}{2(\Delta_k^2 + \varepsilon_k^2)^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.27)$$

Sustituyendo este valor en la ec.(2.25):

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + \varepsilon_{k'}^2}}. \quad (2.28)$$

Al pasar a la forma integral, se introduce la densidad de estados $N(\varepsilon_{k'})$

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} N(\varepsilon_{k'}) V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + \varepsilon_{k'}^2}} d\varepsilon_{k'}. \quad (2.29)$$

La ecuación anterior se puede resolver en forma exacta para Δ_k si se toman en cuenta las siguientes aproximaciones:

- i) En forma análoga a la situación en el problema de Cooper, se considera un potencial de interacción entre los electrones del par $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ como sigue:

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} V_0 & E_F \leq \varepsilon_{\mathbf{k}} \leq \hbar\omega_D + E_F \\ 0 & \text{cualquier otro valor.} \end{cases}$$

De esta forma se restringe la integral en todo el espacio de momentos y la ec. (2.29) se transforma en:

$$\Delta_k = \frac{1}{2} V_0 \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} N(\varepsilon_{k'}) \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + \varepsilon_{k'}^2}} d\varepsilon_{k'}.$$

- ii) Se aproxima el valor de la densidad de estados $N(\varepsilon_{k'})$ como la densidad de estados en el nivel de Fermi $N(E_F)$ y, por lo tanto, se considera constante.
- iii) De la ec. (2.25) se tiene que, una vez realizada la aproximación sobre el valor de $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ en el primer inciso, se puede aproximar el valor de Δ_k por una constante Δ_0 .

Dadas las consideraciones anteriores, la ec.(2.29) se simplifica quedando como:

$$1 = \frac{1}{2} N(E_F) V_0 \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{(\Delta_0^2 + \varepsilon^2)^{\frac{1}{2}}} d\varepsilon. \quad (2.30)$$

Esta ecuación es una integral que se puede resolver fácilmente y así obtener una solución para Δ_0 que es:

$$\Delta_0 = \frac{\hbar\omega_D}{\text{senh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{N(E_F)V_0}\right)},$$

como la función $\text{senh}(x)$ se puede expresar en términos de exponenciales:

$$\text{senh}\left(\frac{1}{N(E_F)V_0}\right) = \frac{e^{N(E_F)V_0} - e^{-N(E_F)V_0}}{2}$$

al realizar la aproximación de acomplamiento débil: $N(E_F)V_0 \ll 1$, entonces $e^{\frac{1}{N(E_F)V_0}} \rightarrow 0$, por lo que:

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{N(E_F)V_0}}. \quad (2.31)$$

Ahora bien, la anterior es la ecuación para la brecha de energía de BCS que se genera alrededor del nivel de Fermi e indica que a $T=0$ la energía mínima para un electrón por encima del nivel de Fermi es $E_F + \Delta_0$. En forma análoga, la máxima energía para un electrón por debajo del nivel de Fermi es $E_F - \Delta_0$. De esta manera, se necesita una energía de al menos $2\Delta_0$ para sacar a un electrón del nivel de Fermi. Esto es, la interacción electrón-fonón cambia el espectro de energías y, por lo tanto, la distribución de estados en el nivel de Fermi generando una brecha de energía, precisamente en este nivel.

Temperatura crítica

Para calcular la brecha de energía, se anuló el término no diagonal del hamiltoniano de BCS, tomando en cuenta que para el estado base $T = 0$; sin embargo, para temperaturas distintas a cero, los operadores de número m_k y m_{-k} ya no se pueden aproximar a cero, por lo que se tomarán en cuenta.

$$2\varepsilon_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) = 0. \quad (2.32)$$

Para un sistema de fermiones a temperatura T , el promedio de la ocupación de cada estado -de la estadística de Fermi-Dirac- es:

$$\bar{m}_k = \bar{m}_{-k} = f(E_k) = \frac{1}{e^{\frac{E_k}{k_B T}} + 1},$$

sustituyendo este valor en la ec. (2.32), se obtiene:

$$2\varepsilon_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} (1 - 2f(E_k)) = 0$$

sustituyendo en esta ecuación los valores de u_k y v_k en términos de x_k :

$$2\varepsilon_k \left(\frac{1}{4} - x_k^2\right)^{\frac{1}{2}} + 2x_k \sum_{k'} V_{kk'} \left(\frac{1}{4} - x_k^2\right)^{\frac{1}{2}} (1 - 2f(E_k)) = 0 \quad (2.33)$$

se define entonces la siguiente función:

$$\Delta_k(T) = \sum_{k'} V_{kk'} \left(\frac{1}{4} - x_k^2\right)^{\frac{1}{2}} (1 - 2f(E_k)), \quad (2.34)$$

con lo cual la ec. (2.33) se puede reescribir como:

$$2\varepsilon_k \left(\frac{1}{4} - x_k^2\right)^{\frac{1}{2}} + 2x_k \Delta_k(T) = 0,$$

de donde se tiene que la solución es:

$$x_k = \pm \frac{\varepsilon_k}{2(\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2(T))^{1/2}},$$

sustituyendo este valor en la cc.(2.34):

$$\Delta_k(T) = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \left(\frac{\Delta_{k'}(T)}{(\varepsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2(T))^{1/2}} \right) (1 - 2f(E_k)). \quad (2.35)$$

Por otra parte,

$$(1 - 2f(E_k)) = 1 - \frac{2}{\frac{e^{E_k/k_B T} + 1}} = \frac{e^{E_k/k_B T} - 1}{e^{E_k/k_B T} + 1} = \tanh\left(\frac{E_k}{2k_B T}\right) = \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}}{2k_B T}\right),$$

sustituyendo la ecuación anterior en la cc. (2.35) se obtiene:

$$\Delta_k(T) = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \left(\frac{\Delta_{k'}(T)}{(\varepsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2(T))^{1/2}} \right) \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}}{2k_B T}\right). \quad (2.36)$$

Realizando la misma aproximación sobre el potencial $V_{kk'}$

$$V_{kk'} = \begin{cases} V_0 & E_F \leq \varepsilon_k \leq \hbar\omega_D + E_F \\ 0 & \text{cualquier otro valor,} \end{cases}$$

y sobre $\Delta_{k'}(T)$ para el cual se asume un valor constante Δ , la cc.(2.36) queda como:

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_0 \left(\frac{\Delta}{(\varepsilon_{k'}^2 + \Delta^2)^{1/2}} \right) \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{k'}^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right)$$

por lo que, finalmente se tiene:

$$1 = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_0 \left(\frac{1}{(\varepsilon_{k'}^2 + \Delta^2)^{1/2}} \right) \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{k'}^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right)$$

y pasando a la forma integral:

$$1 = \frac{1}{2} V_0 N(E_F) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\varepsilon \left(\frac{1}{(\varepsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}} \right) \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right). \quad (2.37)$$

A partir de la cc. (2.37), se puede encontrar el valor de la temperatura crítica, T_c . La brecha de energía depende de la temperatura y para el valor de T_c , se tiene que $\Delta(T_c) = 0$. Para resolver la cc. (2.37), se toma en cuenta esto y se hace el siguiente cambio de variable:

$$x = \frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \implies \frac{\varepsilon}{2k_B T_c}$$

con lo que, la ec. (2.37) se transforma en:

$$1 = V_0 N(E_F) \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} dx \frac{\tanh x}{x} \quad (2.38)$$

resolviendo la integral por partes, se tiene:

$$1 = V_0 N(E_F) \left\{ L n x \tanh x \Big|_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} - \int_0^{\infty} dx L n x \operatorname{sech}^2 x \right\}.$$

Dado que se busca un máximo, se puede aproximar $\tanh\left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}\right)$ por la unidad y extender la integral en todo el espacio, con esto se obtiene:

$$\frac{1}{V_0 N(E_F)} = L n \left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c} \right) - L n 0.44$$

de lo cual, se tiene finalmente que:

$$k_B T_c = 1.14 \hbar\omega_D e^{-\frac{1}{V_0 N(E_F)}}. \quad (2.39)$$

Con la ecuación anterior se puede calcular la temperatura crítica de un material en términos de la constante de acoplamiento $\lambda = V_0 N(E_F)$.

Por otra parte, recordando que la brecha de energía en el estado base es:

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{N(0)V_0}},$$

la ec. (2.39) se puede reescribir como:

$$k_B T_c = 1.14 \frac{\Delta_0}{2}$$

de donde:

$$\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = 3.54. \quad (2.40)$$

Se ha encontrado que este valor, el cual se conoce como R , es una constante para la mayoría de los superconductores convencionales.

En la década de los sesenta, con el modelo BCS, se pensaba que la superconductividad estaba apropiadamente descrita, más aún, se predecía que las máximas temperaturas críticas que se podrían encontrar eran del orden de $23K$, tomando en cuenta que la única interacción entre los electrones del par de Cooper se da a través de los fonones de la red iónica del material, como se mencionó, este límite es conocido como la barrera fonónica.

Capítulo 3

Cupratos Superconductores

A pesar de las restricciones impuestas por la barrera fonónica, se realizaron esfuerzos por encontrar materiales superconductores con mayores T_c ; éstos se vieron recompensados cuando en 1986 se reportó un nuevo material con una $T_c > 30K$.

Desde la década de los sesenta se empezaron a conocer algunos óxidos superconductores cuyas temperaturas críticas eran muy pequeñas, debido principalmente al bajo número de portadores de carga. Fue en abril de 1986 cuando George Bednorz y Alex Müller (IBM-Zurich) dieron a conocer el descubrimiento de un material cerámico que presentaba una temperatura crítica muy por encima de las conocidas. Bednorz y Müller observaron que una fracción de una muestra de $LaBaCuO$ existía en estado superconductor a una temperatura crítica de aproximadamente $30K$ [21]. Una búsqueda sistemática de nuevos superconductores entre óxidos metálicos, condujo a Bednorz y Müller al descubrimiento del $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) con una $T_c \sim 38K$. Iniciando una nueva etapa en el desarrollo de la superconductividad.

En la Universidad de Houston el grupo de trabajo dirigido por el doctor Paul Chu encontró que la temperatura crítica del $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ podía ser aumentada a $57K$ aplicando presión [22]. El cambio tan drástico en la T_c debido a la presión hizo que Chu y colegas comenzaran a buscar alguna forma de simular una "presión interna" lo cual lograron al reemplazar el lantano con iones de itrio, obteniendo así un nuevo compuesto que fue anunciado a fines de febrero de 1987: el $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ también llamado compuesto Y123, con una $T_c = 92K$ [23]. Un baño de nitrógeno líquido ($T_e \sim 77K$, temperatura de ebullición del nitrógeno) era ya suficiente para lograr superconductividad en este material.

Los dos materiales mencionados, fueron los primeros que presentaron resultados interesantes en el campo de la superconductividad de altas temperaturas, pero no son los únicos, ya que pertenecen a un grupo mayor de materiales llamados *cupratos* debido a su contenido de cobre y oxígeno.

Además de las altas temperaturas críticas, todos los cupratos tienen el mismo arreglo ordenado de planos *ab* paralelos entre sí apilados a lo largo de un eje vertical *c*. Tales planos están compuestos de átomos de cobre y oxígeno (CuO_2) separados entre sí por planos que contienen otros materiales, en su mayoría, tierras raras. De evidencia experimental y de resultados teóricos, se ha podido determinar que la superconductividad y el transporte de

carga se llevan a cabo principalmente en los planos de CuO_2 . Las regiones entre estos planos de conducción se conocen como reservorios de carga y, al parecer, el cobre juega dos papeles ya que se tiene que mientras dos átomos de cobre, por celda unitaria, se encuentran en el plano de conducción, e intervienen en la superconducción; un tercer átomo de cobre se encuentra en las cadenas (CuO) a los lados de los planos de conducción, las cuales controlan la cantidad de carga que hay en los planos de CuO_2 y, por lo tanto, determinan la T_c del material. La estructura descrita se muestra en la figura 3.1.

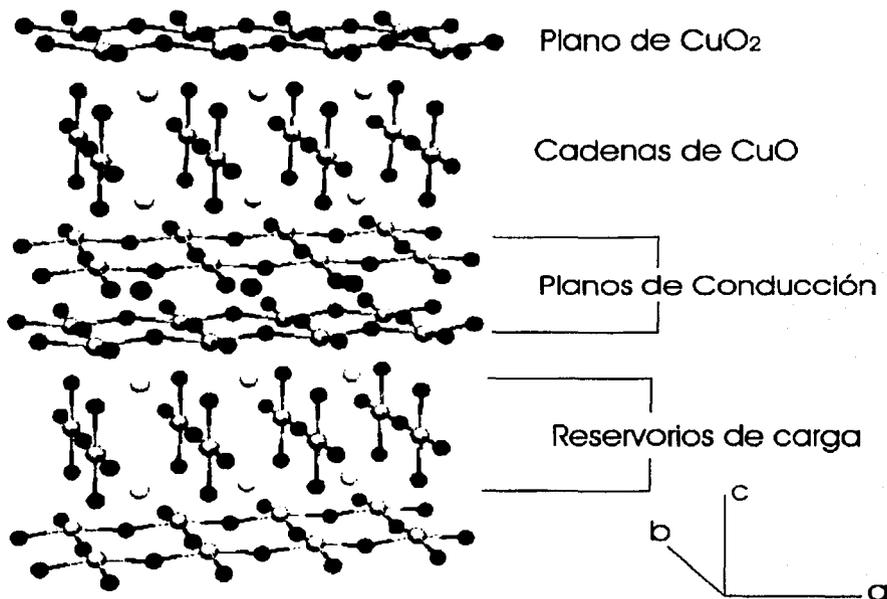


Figura 3.1. Estructura general de los cupratos. En este caso se muestra el Y123.

Se ha encontrado además que el número n de planos de CuO_2 que posee cada compuesto juega un papel importante en la temperatura crítica del material, ya que entre más grande sea n , mayor será la T_c , al menos esto se ha observado para valores de $n \leq 3$, valor para el cual se encuentra una saturación en la temperatura crítica y después del cual la T_c disminuye[24], como se observa en la figura 3.2.

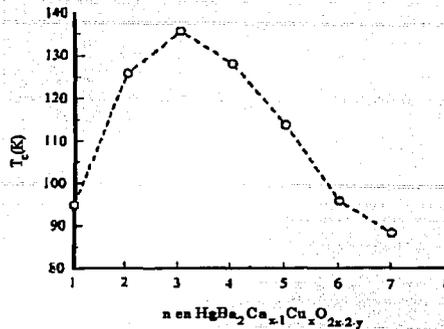


Figura 3.2. Se muestra la saturación de la temperatura crítica al aumentar el número de planos.

Desde que se comenzó a estudiar a los cupratos, se relacionó su estructura con la de una perovskita. Las perovskitas se encuentran en materiales tan diversos como silicatos -los más abundantes- semiconductores, aislantes, ferro- y piezoeléctricos, entre otros. Una perovskita ideal tiene la estructura ABX_3 , mostrada en la figura 3.3. Los átomos en A y en B son cationes metálicos, mientras que los átomos en X corresponden a aniones no metálicos. El catión A es el más grande de los dos metales y se encuentra en el centro del cubo. El catión B ocupa las esquinas y los aniones X se encuentra en la mitad de las doce aristas. En un principio se pensó que esta estructura era básica en la creación de los nuevos superconductores, sin embargo, ahora se sabe que lo importante es la naturaleza bidimensional de los cupratos.

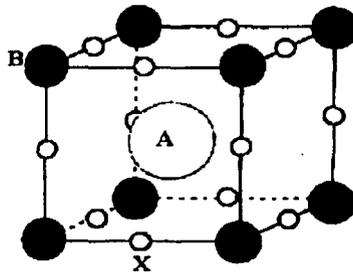


Figura 3.3. Estructura básica de la perovskita.

La anisotropía en estos materiales no sólo se refleja en su estructura, sino también en la mayoría de sus propiedades físicas del estado normal, especialmente en lo que se refiere a la resistividad eléctrica. Su resistividad es altamente anisotrópica, siendo unos cuantos órdenes mayor en la dirección c que en el plano ab . La resistividad en el plano ab presenta un comportamiento lineal con la temperatura, pero en la dirección c presenta un

comportamiento semejante al de un semiconductor. Los portadores de carga en la mayoría de los cupratos son positivos, es decir, la corriente eléctrica es transportada por huecos, por lo que, en el estado superconductor, los pares de Cooper son pares de huecos.

Debido a las características expuestas, cualquier descripción de los cupratos superconductores debe tomar en cuenta el aspecto tan importante de que la superconductividad está determinada fuertemente por un carácter bidimensional.

El dopaje es otro aspecto importante para estos materiales, ya que muchos de ellos pueden pasar de ser aislantes a tener propiedades metálicas si se les añade carga extra al sustituir algunos de sus átomos o si se modifica la cantidad de oxígeno. Por ejemplo, el $YBa_2Cu_3O_6$ es aislante, pero al aumentar en el contenido de oxígeno se obtiene el material $YBa_2Cu_3O_7$, que es superconductor.

Los cupratos superconductores hasta ahora descubiertos están restringidos a un número limitado de sistemas los cuales están determinados por su composición y estructura cristalina. Estos sistemas contienen generalmente familias extensas de compuestos que se diferencian entre sí por sustituciones elementales, pero cuyas estructuras son similares. Cada una de estas familias posee una estructura química compleja y, en muchos casos, la mayoría de los problemas que se presentan, están relacionados con la estequiometría imperfecta y la presencia de fases semejantes en cada compuesto.

Algunas de las familias que se han estudiado son: $LMCO$, donde M puede ser Sr , Ba o Ca ; $A_2B_2Ca_xCu_{x+1}O_{2x+6}$, donde A puede ser bismuto (Bi), talio (Tl) o mercurio (Hg) y B puede ser estroncio (Sr) o bario (Ba), y la familia de $YBaCuO$. Tabla 2.

Tabla 2. Temperatura crítica de algunos cupratos superconductores representativos de las distintas familias.

Material	$T_c(K)$
$(La_{2-x}Sr_x)CuO_4$	31
$(La_{2-x}Sr_x)CaCu_2O_6$	60
$Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$	110
$Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$	80
$Bi_2Sr_2CuO_6$	10
$Tl_2Ba_2Ca_3Cu_4O_{12}$	107
$Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10}$	125
$Tl_2Ba_2CaCu_2O_8$	98
$Tl_2Ba_2CuO_6$	80
$TlBa_2Ca_4Cu_5O_{13-x}$	105
$TlBa_2Ca_3Cu_4O_{11-x}$	121
$TlBa_2Ca_2Cu_3O_{9-x}$	120
$TlBa_2CaCu_2O_{7-x}$	78
$Hg_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{8+x}$	133
$YBa_2Cu_3O_{7-x}$	93
$YBa_2Cu_4O_8$	81

3.1. LMCO

Estos materiales presentan una red cristalina tetragonal centrada en el cuerpo (*bct*). Esta estructura básica, mostrada en la figura 3.4, se generaliza en la fórmula K_2NiF_4 la cual, al ser contaminada, da lugar a otro material no muy distinto del original, que en el campo de altas temperaturas se conoce como la estructura T dada por la fórmula $La_{2-x}M_xCuO_4$, con $x < 0.5$ y $M = Ba, Na, Sr$ o Ca .

En esta estructura, los planos de CuO_2 perpendiculares al eje c , se encuentran entre los planos de $La - O$, seguidos por otro plano de $La - O$ que está desplazado en $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, causando que un átomo de lantano esté centrado en el cuerpo, a lo que le sigue otro plano de CuO_2 .

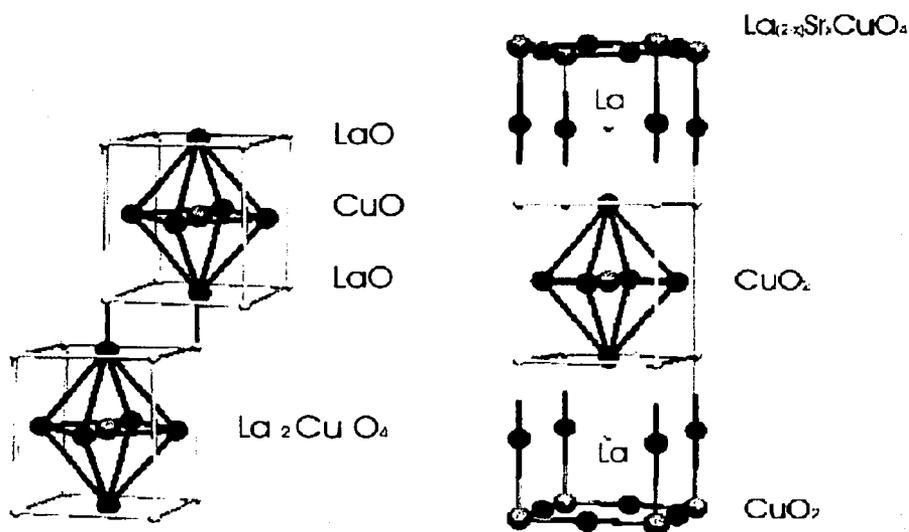


Figura 3.4. a) Estructura K_2NiF_4 b) Estructura del compuesto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$.

La T_c depende del valor de x y se ha encontrado que esta aumenta cuando el material se prepara en una atmósfera de oxígeno, ya que se incrementa la presencia de portadores de carga. Para $T > T_c$, la resistividad del material como función de la temperatura presenta un comportamiento metálico.

Dependiendo del valor de x , se tiene que a altas temperaturas, existe una transición a una fase ortorrómbica, cuyos parámetros de red se modifican ligeramente de aquellos de la fase tetragonal.

3.2. $A_2B_2Ca_xCu_{x+1}O_{2x+6}$

Las más altas temperaturas críticas registradas hasta el momento se han encontrado entre los compuestos con la fórmula $A_2B_2Ca_xCu_{x+1}O_{2x+6}$, donde $x = 0, 1, 2, 3$ o 4 , $A = Hg, Bi$ o Tl y $B = Sr$ o Ba . La estructura genérica se muestra en la figura 3.5. El compuesto de talio $Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10}$ (*Tl2223*) tiene una $T_c = 125K$ y, aunque este material es tóxico y volátil debido a la presencia del talio, se ha estudiado al igual que el compuesto de estructura similar: $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ (*Bi2223*) con $T_c = 110K$.

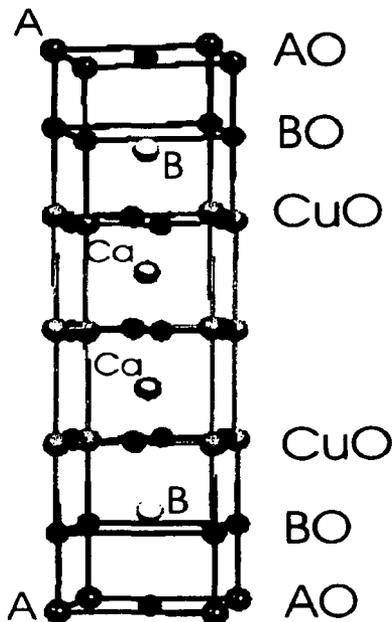


Figura 3.5. Estructura básica de los compuestos *Tl2223* y *Bi2223*.

Estos materiales, cuya red cristalina también es tetragonal centrada en el cuerpo, consisten de n planos de CuO_2 con un plano de Ca entre cada uno de ellos para $n \geq 2$, esto es, dos planos de CuO_2 tienen un plano de Ca , tres planos de CuO_2 tienen dos planos de Ca , etc. En seguida se tiene que los planos de CuO_2 (y de Ca) están separados por un plano de $Ba - O$, dos planos de Bi (o Tl) y otro más de $Ba - O$ antes de volver a encontrar otro plano de CuO_2 .

Como una extensión de esta familia se tiene otro grupo de materiales que resultan del proceso de la sustitución de materiales con distinta valencia o distinto tamaño atómico (al igual que en el caso del Y123). Este grupo está formado por compuestos de mercurio. La superconductividad en estos materiales fue descubierta por primera vez en el compuesto $HgBa_2CuO_4$ (Hg1201) por Putlin et al.[25] con una $T_c = 94K$. Más tarde, Schilling et al.[26] reportaron otros dos compuestos, $HgBa_2CaCu_2O_{6+x}$ (Hg1212) y $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+x}$ (Hg1223). Este último con una $T_c = 133K$, siendo el más alto valor reportado a presión ambiente. Su estructura se muestra en la figura 3.6.

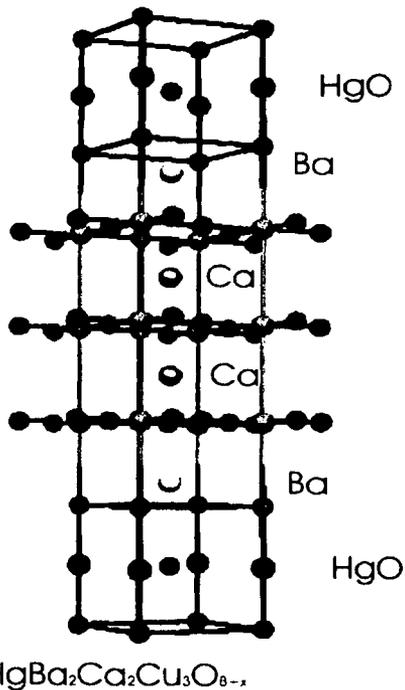


Figura 3.6. Estructura del cuprato Hg1223.

3.3. $YBaCuO$

El primer cuprato conocido de la familia de los compuestos de itrio es el $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ que, como se mencionó al principio, fue descubierto al sustituir el lantano en el material descubierto por Bednorz y Müller. La estructura de este material se muestra en la figura 3.7.

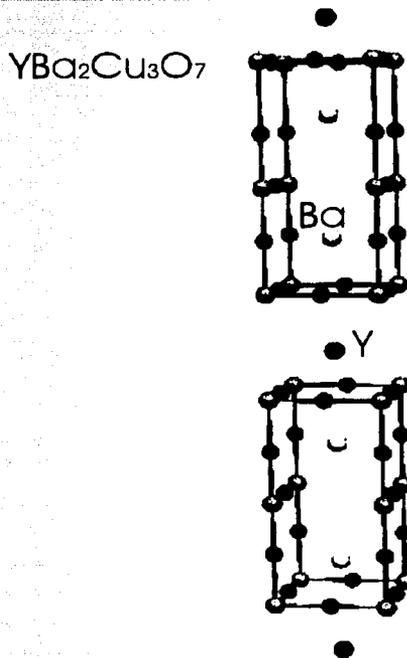


Figura 3.7. Estructura del Y123.

Los átomos de cobre ocupan dos sitios a cada lado de los planos de $Ba - O$ y se tienen planos de CuO_2 colocados por encima y por debajo del itrio donde los átomos de cobre forman pirámides con los átomos de oxígeno. Para $x = 0$, los átomos de cobre y oxígeno forman cadenas lineales y el material es superconductor a $T_c = 93K$, con lo que se tiene una red cristalina ortorrómbica con parámetros $a = 0.328$, $b = 0.389$ y $c = 1.168nm$. Cuando $x = 1$, el compuesto no es superconductor y la red cristalina es tetragonal. Las propiedades de este compuesto dependen altamente del método de preparación.

El segundo miembro de esta familia es el cuprato superconductor $YBa_2Cu_4O_8$ (Y124), el cual presenta algunas propiedades de mayor estabilidad sobre el Y123. La celda unitaria del Y124 se puede derivar de la celda unitaria del compuesto Y123 introduciendo una cadena

extra de CuO . Comparada con la celda unitaria del Y123 la nueva celda es más grande en la dirección c en 1.9 \AA , ya que al intercalar una segunda cadena, las pirámides de $Cu(2) - O$ arriba de las cadenas se desplazan una distancia igual a la mitad del parámetro b de la celda original. La estructura del Y124 se muestra en la figura 3.8.

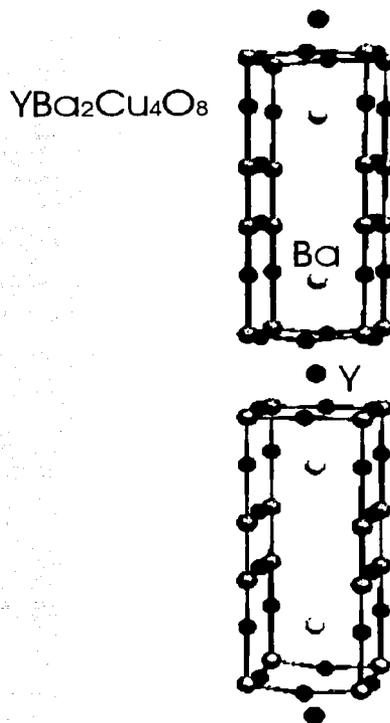


Figura 3.8. Estructura del Y124.

Algunas de las características más sobresalientes del Y124 son las siguientes:

- Al contrario del Y123, el Y124 no forma "Twins"; esto es, el patrón de difracción que se obtiene, no presenta puntos divididos.
- El oxígeno es más estable que en el Y123, ya que se encuentra más fuertemente unido.
- El contenido del oxígeno es casi independiente de las condiciones de preparación.

3.4. Respuesta de los cupratos superconductores a la aplicación de altas presiones

El esfuerzo teórico y experimental que promovió el descubrimiento de los superconductores de altas temperaturas ha resultado en un considerable avance en la comprensión de estos materiales. Como se mencionó en la introducción, parte de este conocimiento se ha logrado al estudiar la relación que existe entre las propiedades de los estados normal y superconductor y cómo varían éstas al cambiar algunas de las características básicas de estos materiales como, por ejemplo, la concentración de portadores, lo cual se ha hecho a través de la sustitución o introducción de otros elementos en el compuesto superconductor; o la separación interatómica, que se ha modificado al aplicar altas presiones. Comparada con la sustitución química, donde son varios los parámetros que se modifican simultáneamente, los efectos en el material debido a la aplicación de una presión hidrostática son variaciones "suaves" que son perfectamente cuantificadas. Esto contribuye en parte a la demanda de tener resultados experimentales inequívocos con los cuales lograr una mejor caracterización de estos materiales.

Existen tres técnicas básicas de altas presiones que se emplean en la actualidad: *i*) aplicación de presión hidrostática que es transmitida a través de un fluido o un gas que comprime la muestra sin deformarla plásticamente, *ii*) esfuerzos uniaxiales que se obtienen al someter la muestra, generalmente un cristal simple, a una compresión o tensión uniaxial pequeña, y *iii*) aplicación de presión cuasihidrostática donde la muestra se rodea con un medio sólido que le transmite esfuerzos tanto hidrostáticos como uniaxiales, causando deformaciones plásticas y generando defectos en el cristal. Esta última técnica es una de las más recomendadas debido a su sencillez y a la posibilidad de alcanzar presiones del orden de 200 GPa.

El estudio de los efectos de la presión en las propiedades de los materiales es un método importante en el proceso de comprensión de la física de los distintos sistemas. La aplicación de presión causa, entre otros efectos, interacciones magnéticas, variaciones en la interacción fonónica así como en el traslape de los orbitales.

En el estudio del estado superconductor, el uso de altas presiones como un parámetro, ha contribuido en varios aspectos, siendo uno de los más importantes el rápido cambio en la T_c (en cualquier dirección) con la presión. Esto indica que el sistema en estudio es capaz de alcanzar valores más grandes de T_c a presión ambiente si se modificara dicho sistema en forma adecuada. Un ejemplo de esto es el caso del Y124, cuya T_c cambia con la presión a razón de 5.5 K/GPa y además, se ha encontrado que al sustituir 10 % del Y^{3+} con Ca^{2+} modifica la T_c de 75 a 90K.

Otro aspecto que ha resaltado con la aplicación de altas presiones es que éstas pueden generar transformaciones estructurales en las fases cristalinas de las muestras de estudio, haciendo posible la creación de nuevas fases que podrían presentar propiedades superconductoras o mejorar las que ya poseen. Como ejemplo de lo anterior se tienen los elementos no superconductores a presión ambiente que son superconductores al aplicar altas presiones. Algunos de ellos se muestran en la Tabla 3. De esta forma, las primeras investigaciones de los elementos bajo presión mostraron que la compresión en su celda unitaria generaba

cambios importantes. Por ejemplo, la mayor temperatura de transición para un elemento bajo presión, es la que presenta el litio con $T_c = 20K$ a $48GPa$ [27]. La presión puede cambiar también semimetales como el bismuto y semiconductores como el silicio en materiales superconductores (Bi : $T_c = 8K$ a $8GPa$ y Si : $T_c = 6K$ a $15GPa$) [28].

Tabla 3. Elementos superconductores bajo presión

Elemento	Presión (GPa)	T_c (K)	$\frac{dT_c}{dP}$ (K/GPa)
Li	48	20	-
Al	0.1	1.14	-0.29
Ti	1.4	0.40	0.6
V	2.5	5.40	6.3
Zr	2.0	0.61	15
Nb	2.5	9.25	-2.0
Mo	2.5	0.92	-1.4
Tc	1.5	7.9	-12.5
Ru	1.8	0.49	-2.3
Sn	4.5	3.73	-0.482
Hf	1.0	0.13	-2.6
Re	1.8	1.70	-2.3
Pb	4.5	7.20	-0.365

Hasta ahora no ha sido posible inducir una transición aislante-metal con la sola aplicación de altas presiones, al menos en los rangos accesibles de presión. Sin embargo, como se sabe, esta transición sí es posible mediante un dopaje adecuado. Además, la aplicación de altas presiones puede deformar la estructura de los materiales y reforzar el efecto del dopaje obtenido por sustitución química.

Los efectos de las altas presiones no son siempre los mismos para los distintos materiales, ejemplos de cómo se modifica la T_c con la aplicación de altas presiones se muestran en la tabla 4 y en la figura 3.9.

Tabla 4. Datos de cupratos superconductores bajo presión.

Material	T_c (K)	Presión(GPa)	$\frac{dT_c}{dP}$ (K/GPa)
$(La_{1.85}Sr_{0.15})CuO_4$	36	1.2	3.0
$Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$	110	8	1.1
$Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$	90	0.6	1.5
$Tl_2Ba_2CaCu_2O_8$	109	0.4	1.2
$Tl_2Ba_2CuO_{6.10}$	90	0.6	0.9
$YBa_2Cu_3O_{6.9}$	89	0.7	0.7
$YBa_2Cu_4O_8$	105.8	~10	5.5
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+x}$	164	31	0.9

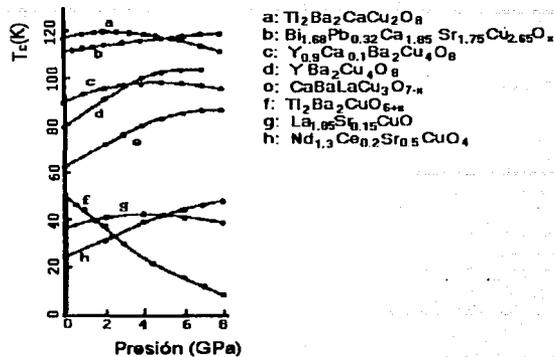


Figura 3.9. Cambio de la T_c respecto a la presión para distintos materiales.

Para el compuesto $La_{1.8}Sr_{0.2}CuO_4$, la temperatura crítica aumenta de 31 a 36K a 0 y 1.2GPa [29] respectivamente, aunque, en general, no se ha encontrado una respuesta importante al aplicar altas presiones a este material. Para el compuesto $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, el principal efecto de la presión en la T_c se debe a la eliminación de distorsiones en la red.

En el caso de los compuestos de talio Tl_{2223} y Tl_{2234} (que se sintetizan fácilmente al ser sobredopados), su T_c se satura al aplicar presión, como se muestra en la figura 3.10.

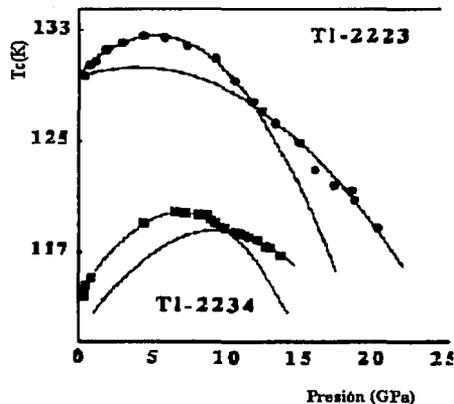


Figura 3.10. Se muestra la saturación de T_c con la presión para Tl_{2234} y Tl_{2223} .

En el compuesto de mercurio $Hg1223$, la T_c de $133K$ se puede aumentar hasta $157K$ con la aplicación de altas presiones ($23.5GPa$). Este compuesto ostenta el mayor valor de T_c bajo presión, siendo ésta de $164K$ a $31GPa$ [30].

Para los compuestos de itrio, la variación de la T_c está controlada por la transferencia de carga bajo presión y se ha encontrado que el $Y124$ presenta una de las mayores respuestas en el cambio de temperatura crítica debido a la aplicación de presión, a razón de $5.5K/GPa$.

De medidas de susceptibilidad ac hechas hasta $1.4GPa$ de presión hidrostática, Bucher et al. [31] encontraron que T_c aumenta bajo presión a una razón de $5.5K/GPa$ tanto en el material sinterizado como en muestras cristalinas. En estudios de resistividad, van Eenige et al. [32] y más tarde Scholtz et al. [33] extendieron los estudios de este material al aplicar presiones cuasiestáticas de $12GPa$ y $15GPa$ respectivamente, con lo cual demostraron que $T_c(P)$ alcanza valores tan altos como $107K$ antes de alcanzar un punto de saturación y comenzar a disminuir al sobrepasar un límite de $9 - 10GPa$.

La presión tiene una fuerte influencia en la T_c , ya sea a través de sus efectos sobre la estructura de los cristales, o a través de la transferencia de carga inducida por la presión, lo cual aumenta el dopaje y, dependiendo de que la muestra está sub- o sobredopada, puede producir un incremento (como en el caso del $Y123$) o un decremento de T_c (en el caso del $Tl2223$). En cualquier caso, los resultados que la aplicación de altas presiones arroja, brinda información contundente sobre la física de los cupratos superconductores.

3.5. Sobre la explicación de la Superconductividad de altas temperaturas críticas

El modelo BCS, que con tanto éxito explicó la superconductividad de bajas temperaturas críticas, no gozó del mismo triunfo para explicar los superconductores de altas temperaturas críticas. Uno de los principales inconvenientes era el límite establecido en la temperatura crítica. Cabe aquí hacer la siguiente aclaración. El modelo BCS introduce una interacción atractiva entre los electrones, de la cual son responsables los fonones, así que se tiene una restricción sobre la energía involucrada en el proceso de formación de pares de Cooper. La energía de que disponemos es, a lo más, la energía de los fonones. Pero los autores de este modelo establecieron que existe una distinción entre lo que son el Modelo BCS y la Teoría BCS. El modelo BCS implica una interacción electrón-fonón y un acoplamiento débil, $\lambda < 0.5$, y la teoría BCS abre la posibilidad a un mecanismo de formación de pares de Cooper, en el cual, los fonones no son el único elemento mediador entre los electrones que da lugar a la formación de tales pares.

Por lo anterior es posible usar el término de superconductor BCS sin importar cuál es el mecanismo de formación de pares que permita justificar los valores de las temperaturas de transición, ya que las ecuaciones de la teoría BCS consideran un acoplamiento mediado no necesariamente por fonones. Así que se ha hablado de varios mecanismos, dentro de la misma teoría BCS, que podrían explicar la superconductividad de altas temperaturas.

Se cree que el mismo mecanismo microscópico opera en todos los nuevos óxidos superconductores, pero no hay aún consenso acerca de cuál es este mecanismo. La mayoría de las ideas enfatizan la importancia de los planos CuO_2 y el dopaje, pero la principal controversia

surge al pensar en el origen de la atracción que da lugar a la formación de pares de Cooper.

La comprensión de la naturaleza del estado normal de los compuestos de altas temperaturas críticas es primordial e imprescindible para la construcción de una teoría de la superconductividad en estos materiales y es un hecho que con el descubrimiento de los superconductores de alta temperatura surgieron tantas preguntas como propiedades observadas. De estas propiedades es importante subrayar las siguientes:

1. El carácter anisotrópico de la conductividad en los cupratos.
2. La existencia de pares de Cooper formados no por electrones sino por huecos.
3. Los cupratos deben ser contaminados para presentar superconductividad y, por supuesto, conocer el nivel óptimo de contaminación es importante.

Sin embargo, los nuevos superconductores de alta T_c presentan varias propiedades superconductoras familiares: por ejemplo la presencia de una brecha energética y la estructura de vórtices hallada en los superconductores tipo II. Aún cuando existen propiedades en común con los superconductores convencionales, se tienen otras propiedades novedosas, en especial las altas temperaturas críticas, que quedan fuera del alcance del modelo BCS.

Hasta el momento no existe una teoría completa para explicar la superconductividad de altas temperaturas críticas, así que la libertad de proponer no se ha visto amedrentada. Como se mencionó, las propuestas dadas a conocer se pueden dividir en dos grandes grupos: aquellas que se desarrollan dentro de un contexto BCS y las que proponen algo fuera de este modelo.

Capítulo 4

Modelo con traslape de bandas

En esta tesis se propone un modelo dentro del contexto de BCS para explicar la superconductividad de altas temperaturas. Por supuesto, el desarrollo de dicho modelo obedece a la necesidad de tomar en cuenta las características principales de los cupratos.

El modelo que se propone utilizar ya ha permitido obtener resultados válidos para el cálculo de temperaturas críticas y del efecto isotópico para algunos materiales en trabajos previos [34][35].

A continuación se enumeran los aspectos importantes de este modelo:

- i) Como se mencionó, el modelo se desarrolla dentro del formalismo de BCS. Entre otras cosas, esto implica que se tienen dos restricciones importantes: la constante de acoplamiento λ está restringida al intervalo $0.1 \leq \lambda \leq 0.5$ y la energía máxima disponible para establecer el estado superconductor, es la energía de Debye, $E_D = \hbar\omega_D$.
- ii) El punto de partida es la ecuación (2.9) de Cooper-Schrödinger.
- iii) Dado que para los cupratos superconductores de alta T_c una de sus principales características es su estructura de planos de CuO_2 , que afecta sus propiedades tanto en el estado normal como en el superconductor, ya que la superconductividad se lleva a cabo principalmente en estos planos. La interacción entre planos adyacentes se considera lo suficientemente pequeña como para tratarla mediante el método de perturbaciones, por lo que, en una primera aproximación no se tomará en cuenta. Así, es precisamente la naturaleza anisotrópica lo que hace plausible la idea de que estos materiales se puedan modelar a través de un gas bidimensional de electrones.
- iv) De cálculos para determinar estructuras de bandas para estos materiales se ha encontrado que es frecuente la participación de varias bandas cerca del nivel de Fermi. Además, se tiene evidencia experimental que confirma el incremento de la densidad de estados (DE) cerca del nivel de Fermi. Este incremento ha tratado de explicarse de distintas formas, una de ellas se basa en la cercanía entre el nivel de Fermi y una singularidad de van Hove cuasi-bidimensional de tipo logarítmica en la DE . Se tomará en cuenta que se puede tener un aumento en la densidad de estados que es generado

por el traslape de bandas, que puede pensarse como una singularidad en la DE no tan extrema, como en el caso de una singularidad de van Hove. Para este modelo se considerará el traslape de dos de ellas. El traslape de un mayor número de bandas ha sido contemplado, sin embargo la inclusión de una tercera banda no ofrece modificaciones importantes a los resultados obtenidos con dos bandas [36].

Atendiendo a estos aspectos, el modelo propone topologías generalizadas de la superficie de Fermi. Esto es, se propone la participación de una segunda banda a través de una nueva topología de la superficie de Fermi $n_k \neq n_k^0$, donde $n_k^0 = \Theta(k_F - k)$ es la distribución de ocupación normal.

Con estas hipótesis, este trabajo se concentrará principalmente en reproducir las altas temperaturas de los cupratos en el caso de que se encuentren a presión ambiente y de que se sometan a altas presiones.

Como se ha revisado, dentro del modelo *BCS*, la existencia de una interacción atractiva neta entre pares de electrones, conduce a una inestabilidad en el gas de electrones, encontrando que la ecuación (2.9) de eigenvalores de Cooper-Schrödinger para la energía δE es:

$$1 = V_0 \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{N(\varepsilon)}{2(\varepsilon - E_F) - \delta E} d\varepsilon. \quad (4.1)$$

Esta ecuación es consistente con el principio de exclusión de Pauli para un sistema de Fermi que interactúa, satisface que $n_k = 0, 1$, indicando si el estado está ocupado o no y $\sum_k n_k = N$, donde N es el número total de electrones; además, para una ocupación normal, $n_k^0 = \Theta(k_F - k)$. Como es sabido, la interacción atractiva de *BCS* es distinta de cero sólo para orbitales desocupados cerca del nivel de Fermi. Además la suma restringe los estados a sólo aquéllos que se encuentran en el intervalo $E_F < E_k < E_F + E_D$, es decir, la energía de Debye, $E_D = \hbar\omega_D$, que es la máxima energía que la red puede transmitir a un electrón al ser dispersado.

Como un caso particular de distribución que incluya una segunda banda, se propone el siguiente mar de Fermi generalizado:

$$n_k = \Theta(\alpha k_F - k) + \Theta(\gamma k_F - k)\Theta(k - \beta k_F), \quad (4.2)$$

donde se cumple que $0 < \beta < \gamma \leq \alpha$.

La ocupación se propone no sólo en el espacio de momentos, sino también en el de energía, ya que se requiere que $E_\beta < E_\gamma \leq E_\alpha$ para las energías superficiales, donde $E_\mu = \mu^2 E_F$, con $\mu = \alpha, \beta, \gamma$ y E_F es la energía del nivel de Fermi para una ocupación normal. Así, el mar de Fermi generalizado que se propone, consiste en una serie de cascarones concéntricos separando los orbitales ocupados.

Por otra parte, para mantener constante el número de estados electrónicos, estos parámetros también deben satisfacer que¹:

$$\alpha^3 + \gamma^3 - \beta^3 = 1. \quad (4.3)$$

¹La presentación del modelo se ha hecho en general en 3D, la restricción a dos dimensiones se realiza un poco más adelante.

Para el estado base a $T = 0$, se tiene que los electrones ocupan todos los estados -en una sola banda- hasta el nivel de Fermi, pero si participara una segunda banda que iniciara en el nivel $E_\beta < E_F$ con un valor límite en el nivel $E_\alpha < E_F$, entonces los electrones cerca del nivel de Fermi comenzarían a ocupar los estados de esta nueva banda hasta un valor máximo $E_\gamma < E_\alpha$. Esto generaría un aumento en la densidad de estados. En la figura 4.1 se presenta un esquema del traslape de bandas propuesto para el caso en que $\alpha = \gamma$.

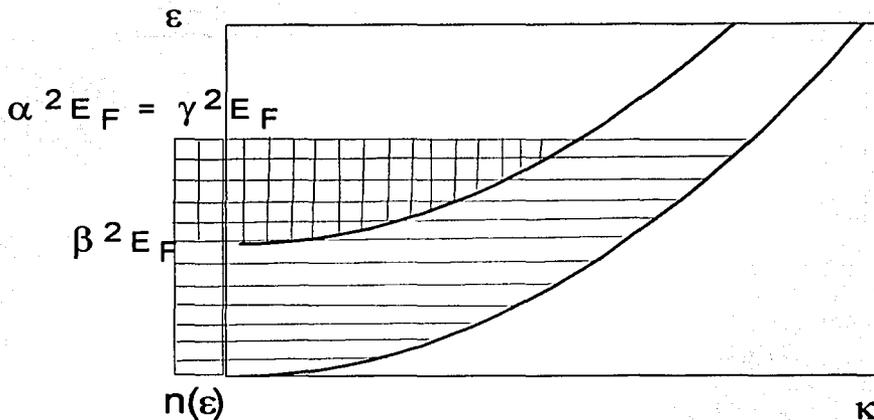


Figura 4.1. Relación de dispersión para dos bandas propuestas.

En el caso de un sistema bidimensional, que es el caso de interés de acuerdo a lo que se explicó en el punto iii), el equivalente a una esfera de Fermi, es un círculo de radio $k_F = \sqrt{2\pi n}$, donde n es la densidad $2D$ de fermiones; además, se tiene que para un sistema bidimensional la densidad de estados en el nivel de Fermi es una constante, esto es, $N(\epsilon) = N(E_F)$. Por lo que, en vez de tener cascarones concéntricos, se tienen círculos concéntricos separando los orbitales ocupados y la relación (4.3) entre los parámetros se modifica, transformándose en:

$$\alpha^2 + \gamma^2 - \beta^2 = 1.$$

Retomando la ec. (4.1) y dado que la interacción atractiva es distinta de cero sólo para orbitales vacíos cerca del nivel de Fermi, la integración para la superficie E_α está restringida a los estados en el intervalo $E_\alpha \leq E_k \leq E_\alpha + E_D$. La superficie que corresponde a E_β no contribuye con una integral debido a que no se encuentran estados desocupados disponibles en esta superficie. Para la superficie E_γ los límites de integración están restringidos al

intervalo $E_\gamma \leq E_k \leq E_F$. Finalmente se tiene la siguiente integral:

$$1 = \lambda \left[\int_{E_\alpha}^{E_\alpha + E_D} \frac{1}{2\varepsilon - \delta E} d\varepsilon + \int_{E_\gamma}^{E_F} \frac{1}{2\varepsilon - \delta E} d\varepsilon \right]. \quad (4.4)$$

donde λ es la constante de acoplamiento electrón-fonón, $\lambda = N(E_F)V$, y de donde se desea conocer los valores del parámetro α y de δE . Resolviendo la integral se tiene:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \text{Ln} \left(\frac{2E_\alpha + 2E_D - \delta E}{2E_\alpha - \delta E} \right) + \frac{1}{2} \text{Ln} \left(\frac{2E_F - \delta E}{2E_\gamma - \delta E} \right). \quad (4.5)$$

En particular, si además se asume que la segunda banda está ocupada en su totalidad, es decir $\gamma = \alpha$, la relación anterior queda como:

$$2\alpha^2 - \beta^2 = 1. \quad (4.6)$$

Como $E_\alpha = \alpha^2 E_F = \gamma^2 E_F = E_\gamma$, si se divide el argumento del logaritmo entre $2E_F$ para obtener un término adimensional, la ecuación anterior se convierte en:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \text{Ln} \left(\frac{\alpha^2 + \frac{E_D}{E_F} - \frac{\delta E}{2E_F}}{\alpha^2 - \frac{\delta E}{2E_F}} \right) + \frac{1}{2} \text{Ln} \left(\frac{1 - \frac{\delta E}{2E_F}}{\alpha^2 - \frac{\delta E}{2E_F}} \right). \quad (4.7)$$

Se definen las siguientes cantidades:

$$2\nu = \frac{E_D}{E_F} = \frac{\theta_D}{T_F} \quad (4.8)$$

que es la razón de Migdal, y

$$\epsilon = \frac{\delta E}{2E_F} \quad (4.9)$$

con lo que la ec.(4.7) se convierte en:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \text{Ln} \left(\frac{\alpha^2 + 2\nu - \epsilon}{\alpha^2 - \epsilon} \right) + \frac{1}{2} \text{Ln} \left(\frac{1 - \epsilon}{\alpha^2 - \epsilon} \right), \quad (4.10)$$

lo cual se puede reescribir en la siguiente forma:

$$\frac{2}{\lambda} = \text{Ln} \left[\left(\frac{\alpha^2 + 2\nu - \epsilon}{\alpha^2 - \epsilon} \right) \left(\frac{1 - \epsilon}{\alpha^2 - \epsilon} \right) \right],$$

tomando la exponencial en ambos lados de la ecuación y resolviendo para $e^{-\frac{2}{\lambda}}$, se obtiene:

$$e^{-\frac{2}{\lambda}} = \left[\frac{\alpha^2 - \epsilon}{1 - \epsilon} \right] \left[\frac{\alpha^2 - \epsilon}{\alpha^2 + 2\nu - \epsilon} \right] \\ (1 - \epsilon)(2\nu - \epsilon)e^{-\frac{2}{\lambda}} + \alpha^2(1 - \epsilon)e^{-\frac{2}{\lambda}} = \epsilon^2 - 2\epsilon\alpha^2 + \alpha^4. \quad (4.11)$$

La ecuación anterior es válida para cualquier cuprato superconductor del que se conozcan sus correspondientes valores de ϵ , de λ y de ν . Dado que el modelo plantea un traslape de bandas, es deseable saber si existen soluciones de α^2 que sean consistentes con la ec. (4.11). Como la energía disponible es $E_F - E_\alpha = E_F - \alpha^2 E_F = (1 - \alpha^2) E_F$ y debe cumplir con ser menor que la energía de Debye; es decir, $(1 - \alpha^2) < E_D / E_F$, se espera encontrar como solución a la ecuación anterior, valores de α^2 muy próximos, pero menores que 1. En esta forma, una vez conocidos los datos de un cuprato, se pueden calcular los valores de α^2 .

Se tiene de la ec. (4.11) una expresión cuadrática precisamente en α^2 de donde su puede despejar este término:

$$A^2 - \left[2\epsilon + (1 - \epsilon)e^{-\frac{2}{\lambda}} \right] A - (1 - \epsilon)(2\nu - \epsilon)e^{-\frac{2}{\lambda}} + \epsilon^2 = 0, \quad (4.12)$$

donde $A \equiv \alpha^2$ y para la cual se tienen las siguientes soluciones:

$$\alpha^2 = \frac{1}{2} \left\{ 2\epsilon + (1 - \epsilon)e^{-\frac{2}{\lambda}} \pm \left[(2\epsilon + (1 - \epsilon)e^{-\frac{2}{\lambda}})^2 + 4(1 - \epsilon)(2\nu - \epsilon)e^{-\frac{2}{\lambda}} - 4\epsilon^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}. \quad (4.13)$$

Se tomará la solución positiva, ya que el signo negativo arroja datos que nos son físicamente consistentes con el modelo.

Para calcular los valores de α^2 , los parámetros que son necesarios se pueden introducir en la ec. (4.13) a través de la ec. (2.40) para la constante R de BCS:

$$R = \frac{2\Delta_0}{k_B T_c},$$

donde Δ_0 es la brecha de energía de BCS, la cual se puede expresar a la vez como:

$$\Delta_0^2 = 2E_D \Delta_0^c,$$

Δ_0^c es la energía de amarre del par de Cooper expresada en la ec. (2.12).

De la ec. (4.9) y dado que $\Delta_0^c = 2E_F - \delta E$ se tiene para $1 - \epsilon$ que:

$$1 - \epsilon = \frac{\Delta_0^c}{2E_F}$$

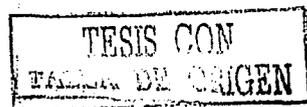
$$1 - \epsilon = \frac{R^2 T_c^2}{16\theta_D T_F}. \quad (4.14)$$

Introduciendo las ecs. (4.8) y (4.14) en la ec. (4.13) se obtendrán valores de $\alpha^2 = \alpha^2(\lambda, R)$, además de que también dependerán de los parámetros específicos, T_c , T_F y θ_D , de cada cuprato. Esto significa que la intensidad del traslape de las dos bandas propuestas se cuantifica a través del valor de α^2 para cada cuprato, en términos de sus características. Un valor de $\alpha^2 = 1$ indica que no existe traslape alguno y, dado que se propone un incremento en la DE cerca del nivel de Fermi, se esperarían valores de α^2 sólo un poco menores, es decir, $\alpha^2 \lesssim 1$.

En la ec. (4.11) se contempla cualquier cuprato superconductor cuyas propiedades permitan obtener soluciones de α^2 consistentes con el modelo. El caso en que se sometan los

cupratos a la aplicación de altas presiones cambian los valores de T_c , T_F y θ_D y por lo tanto, cambian los valores de ϵ y de ν ; estos nuevos datos pueden ser sustituidos en las ecuaciones para verificar si este modelo describe también el comportamiento de los cupratos bajo presión.

Una consecuencia inmediata del modelo es que, en principio, es posible obtener valores para las temperaturas críticas que sobrepasan los valores restringidos por la barrera fonónica, esto sin descartar la posibilidad de otro tipo de contribuciones a la interacción, distintas a la fonónica.



Capítulo 5

Resultados

En este capítulo, el modelo que ha sido descrito, se empleará para reproducir las altas temperaturas en términos del parámetro de traslape de bandas, α^2 . De entre los cupratos superconductores que se mencionaron en el capítulo anterior se ha escogido el material Y124 para realizar los cálculos. Se seleccionó este material debido a la estabilidad de sus características y a que se pueden encontrar datos experimentales confiables en la literatura, de los cuales se seleccionaron los que a continuación se resumen en la tabla 5.

Tabla 5. Algunos datos del material Y124.

$T_c = 76.0K$ [37]	Parámetros de red [40]
$\theta_D = 382K$ [38]	a=3.841Å
$T_F = 1549.24K$	b=3.872Å
$n_{2D} = 5.5721 \times 10^{13} cm^{-2}$ [39]	c=27.280Å

El valor de la temperatura de Fermi T_F se obtuvo a partir del modelo de un gas bidimensional de fermiones.

Se estudiará el efecto del traslape de bandas a través del parámetro α^2 , tomando en cuenta la variación del parámetro λ en el límite de acoplamiento débil, $0.1 \leq \lambda \leq 0.5$. También se observarán los cambios debido a la variación de la constante R , cuyos valores se tomarán en el intervalo de $4 \leq R \leq 7$. Este intervalo se eligió tomando en cuenta que el valor de la constante R de BCS es precisamente de 3.54 y que, para el caso de los cupratos, se han reportado valores de R mayores. En algunos casos se incluyó específicamente el valor de $R = 6.8$, pues se encontró que para el Y124 se ha reportado este valor que fue calculado teóricamente [41].

En la figura 5.1 se presenta el comportamiento de $\alpha^2 = \alpha^2(\lambda)$ para valores fijos de R que aumentan en la gráfica de arriba hacia abajo. El caso en que $R = 6.8$ se resalta con la línea discontinua.

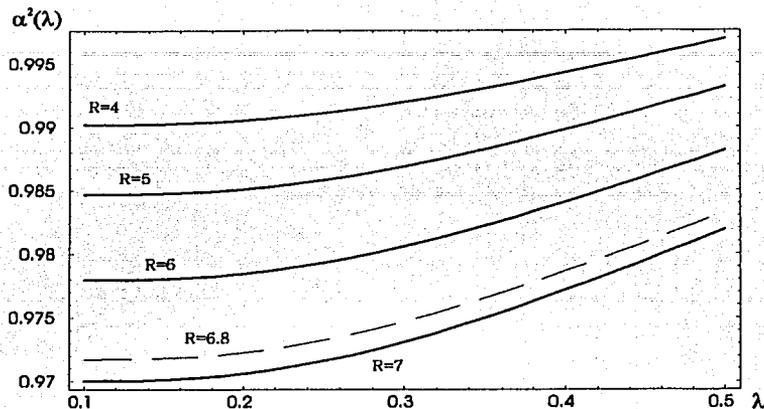


Figura 5.1. Gráfica de α^2 Vs. λ . $R=4,5,6,6.8$, y 7 .

Los resultados indican que los valores de α^2 aumentan conforme λ aumenta, encontrando que se tiene un traslape de bandas que va disminuyendo en cada caso al acercarse al límite de acoplamiento débil. Sin embargo, es notable que en todas las situaciones se obtienen valores de α^2 que son consistentes con el modelo; más aún, en el caso de $R=6.8$, los resultados indican que el traslape es significativo, ya que se obtienen valores de α^2 entre 0.971709 y 0.983271 para $\lambda = 0.1$ y $\lambda = 0.5$ respectivamente.

También se puede observar que las distintas líneas, correspondientes a cada valor de R , se separan entre sí una distancia cada vez mayor para el caso de λ pequeña, mientras que al acercarse a $\lambda=0.5$ esta distancia disminuye respecto a las primeras.

Separación entre las líneas de $\alpha^2(\lambda)$ para los distintos valores de R .

	$\lambda=0.1$	$\lambda=0.5$
$\Delta\alpha^2(R=4, R=5)$	0.00550673	0.0037939
$\Delta\alpha^2(R=5, R=6)$	0.00673058	0.00500625
$\Delta\alpha^2(R=6, R=7)$	0.00795442	0.00621854

En la figura 5.2 se muestra $\alpha^2 = \alpha^2(R)$ para valores fijos de λ , los cuales aumentan de abajo hacia arriba en la gráfica.

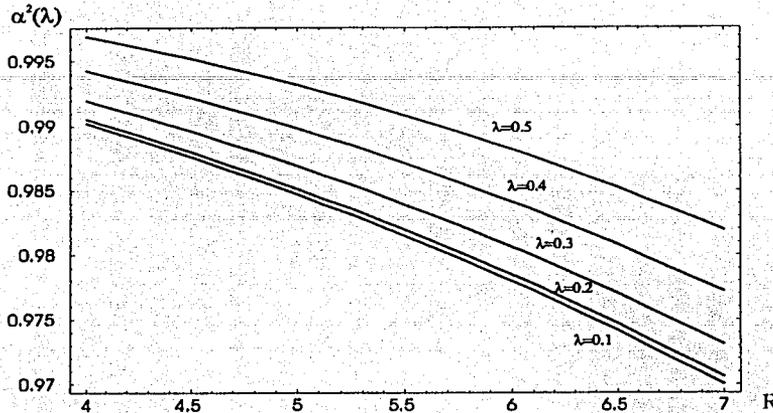


Figura 5.2. Gráfica de α^2 Vs. R . $\lambda = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ y 0.5 . λ aumenta de abajo hacia arriba.

En este caso, se tiene que el valor de α^2 disminuye conforme R aumenta; esto significa que cada vez se requiere un traslape de bandas mayor.

Se puede notar además que la distancia entre las líneas obtenidas aumenta con λ , siendo menor para valores pequeños de R que para R mayores.

Separación entre las líneas de $\alpha^2(R)$ para los distintos valores de λ .

	$R=4$	$R=7$
$\Delta\alpha^2(\lambda=0.1, \lambda=0.2)$	0.000329052	0.000576134
$\Delta\alpha^2(\lambda=0.2, \lambda=0.3)$	0.00142776	0.0025065
$\Delta\alpha^2(\lambda=0.3, \lambda=0.4)$	0.00230723	0.00407321
$\Delta\alpha^2(\lambda=0.4, \lambda=0.5)$	0.00267353	0.00475477

En forma consistente con los resultados obtenidos en la primer gráfica, se tiene que para $R=6.8$, los valores de α^2 disminuyen sobre la vertical, esto es, disminuyen conforme λ aumenta.

En ambos grupos de resultados, α^2 como función de λ y α^2 como función de R , se encontraron comportamientos regulares. Las correspondientes gráficas son contínuas y univalueadas en cada caso y todos los valores obtenidos para α^2 se encuentran dentro de lo esperado, pues se encontró que, en general, $0.97002 < \alpha^2 < 1$, lo cual indica que en todos los casos es necesario un traslape de bandas.

Resultados bajo presión

Se ha enfatizado ya la relevancia de la aplicación de altas presiones como un método que genera cambios importantes en la estructura de los cupratos superconductores, y se ha comprobado que para el caso de los cupratos, tales cambios provocan, inicialmente, una modificación a favor del aumento de su temperatura crítica, la cual se eleva hasta alcanzar un valor de saturación, después del cual comienza a disminuir.

Debido a que los efectos de la presión en los materiales superconductores han sido tan importantes, es necesario que cualquier esquema que modele la superconductividad -o algunos de sus aspectos- en estos materiales, justifique también dichos efectos. Por lo tanto, es imprescindible verificar la validez del modelo presentado en esta tesis en el caso en que los cupratos son sometidos a altas presiones.

El material de estudio, el cuprato Y124, es uno de los materiales para los cuales, la T_c se ve altamente modificada con la aplicación de altas presiones. En este aspecto se tienen resultados experimentales de varios grupos de trabajo que coinciden [37]. Ver figura 5.3.

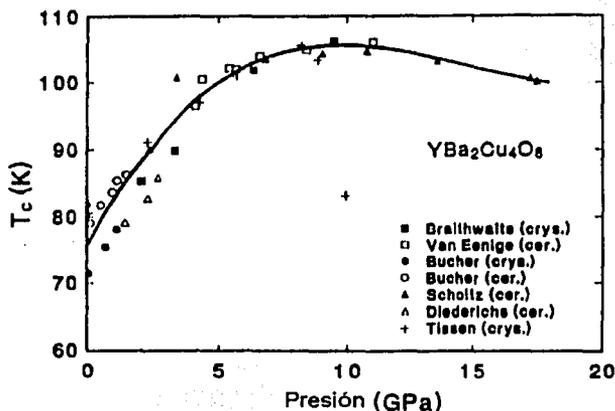


Figura 5.3. Distintos valores reportados del cambio de la T_c al variar la presión [37].

La gráfica anterior muestra el cambio de la T_c respecto a la presión para el Y124. Se puede observar que las distintas mediciones llevadas a cabo se acercan entre sí, ilustrando el rápido cambio de la T_c (a una razón de 5.5K/GPa) y la existencia de un punto de saturación, a partir del cual, la T_c comienza a decaer. De este conjunto de datos, se escogieron los reportados por van Eenige et al.

Los efectos de aplicar altas presiones se observan también en el cambio en los parámetros de la red del material [40] (como se ve en la figura 5.4) y, por lo tanto, en la densidad de portadores de carga, por lo que finalmente, tales efectos se reflejan en una modificación de la temperatura de Fermi y de la T_c .

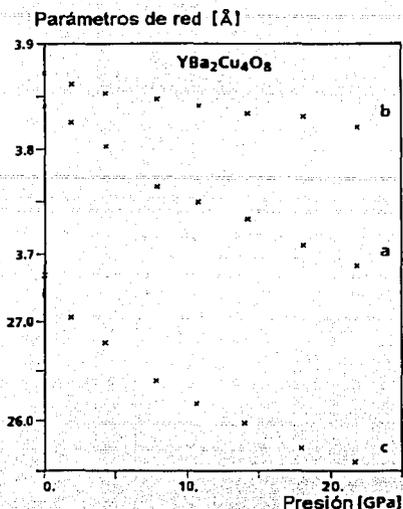


Figura 5.4. Los parámetros de la red se modifican al aplicar presión [40].

Dados los cambios en la celda unitaria al someter al material a altas presiones, se espera que también se vea modificada la temperatura de Debye. Se ha reportado que esta temperatura se modifica de acuerdo a la siguiente ecuación [42]:

$$\frac{\partial \ln \theta_D}{\partial P} = 1.225 \times 10^{-2} \text{ GPa}^{-1}.$$

Los datos del Y124 bajo presión que se emplearán en este trabajo se presentan en la siguiente tabla.

Tabla 6. Variación de los datos del Y124 respecto a la presión.

Presión (GPa)	T_c (K)	θ_D (K)	T_F (K)	a (Å)	b (Å)	c (Å)
0	76.12	382	1549.24	3.841	3.872	27.280
1.69	86.43	389.95	1535.61	3.826	3.862	27.040
4.27	97.77	402.39	1520.85	3.804	3.854	26.780
7.9	104.68	420.57	1499.27	3.765	3.848	26.400
10.81	105.81	435.74	1486.77	3.750	3.841	26.180

En el caso en que se tienen los resultados sin presión, la T_c permanece fija en 76.12K pero, naturalmente, esto se modifica al aplicar altas presiones. En este trabajo se describirá el comportamiento de los cupratos en el intervalo de presiones para el cual la temperatura

crítica aumenta cuando se incrementa la presión, en esta forma el comportamiento de α^2 respecto al cambio en la presión es también una forma de estudiar el comportamiento de α^2 respecto a la T_c . Precisamente, los resultados que se presentarán adelante, muestran el parámetro de traslape α^2 como función de λ , R y de la presión, sin perder nunca de vista que el aumento en la presión implica un aumento en la temperatura crítica.

Con los datos de la tabla 6, es posible obtener los parámetros necesarios en la ec. (4.13) para determinar el comportamiento de α^2 para los diferentes valores de la presión. Los resultados se presentan en las siguientes gráficas.

En la figura 5.5 se muestran los resultados para $\alpha^2(\lambda)$ con $R=4$ y para los valores de la presión mencionados en la tabla 6, los cuales aumentan en la gráfica de arriba hacia abajo.

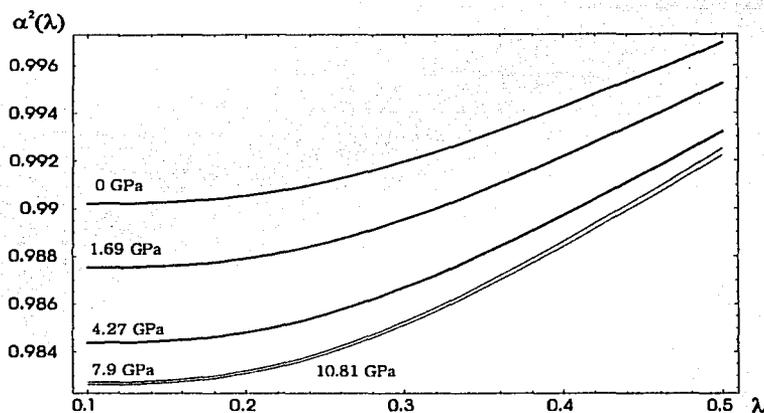


Figura 5.5. Gráfica de α^2 Vs. λ . $R=4$.

En cada caso, los valores de α^2 aumentan al aumentar el valor de λ ; sin embargo, tomando en cuenta un movimiento sobre la vertical, se observa que al aumentar la presión los valores de α^2 disminuyen, indicando que a mayor presión, se requiere un mayor traslape de bandas.

Si se observan los distintos valores de la presión, se tiene que para un cambio inicial de 1.69 GPa, la variación en α^2 es mucho mayor que en el caso en que la presión cambió de 7.9 a 10.81 GPa, en que el cambio total es de 2.82 GPa, esto para λ y R fija. Las diferencias entre los valores de α^2 son: 0.0026839 para un cambio de 1.69 GPa y 0.0000969102 para el cambio de 7.9 a 10.81 GPa, con $\lambda=0.1$ y $R=4$ en este caso. Esto muestra que el modelo está indicando que existe un punto de saturación en la temperatura crítica, al aumentar la presión, lo cual se observa de la proximidad entre las curvas de α^2 .

En la siguiente gráfica se muestra el comportamiento de $\alpha^2(\lambda)$ para $R=6.8$.

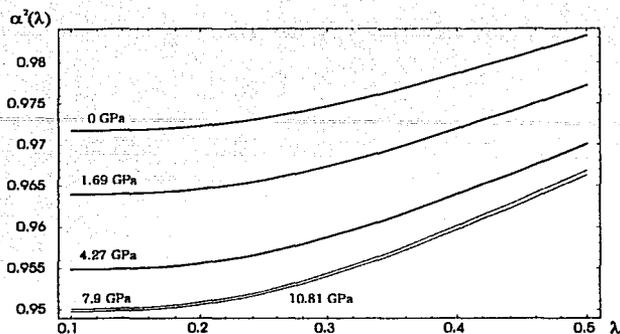


Figura 5.6. Gráfica de α^2 Vs. λ bajo presión. $R = 6.8$.

Se obtiene un comportamiento que es cualitativamente equivalente al caso de la figura 5.5. Observándose igualmente que α^2 aumenta con λ para una presión fija y que disminuye al aumentar la presión, aumentando también el traslape de bandas. El cambio en $\alpha^2(\lambda)$ es de 0.00775685 y de 0.000279998 cuando la presión cambia 1.69 GPa y cuando cambia de 7.9 a 10.81 GPa respectivamente, con $\lambda=0.1$ y $R=6.8$, indicando nuevamente la existencia de un punto de saturación.

De estos resultados se tiene que α^2 disminuye conforme el valor de R aumenta, esto indica que el traslape de bandas aumenta al aumentar la R para λ fija. Este resultado es análogo al obtenido en la gráfica 5.1 del material a presión ambiente. Con esto, se tiene que en el modelo presentado, el traslape de bandas es un aspecto fundamental para explicar la superconductividad de altas temperaturas.

En la figura 5.7 se muestran los resultados para $\alpha^2(R)$ para $\lambda = 0.1$ y para los valores de la presión señalados.

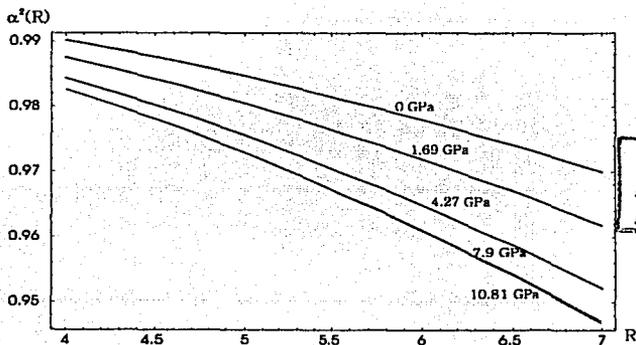


Figura 5.7. Gráfica de α^2 Vs. R bajo presión. $\lambda = 0.1$.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Estos resultados muestran que para $\alpha^2(R)$, los valores de este parámetro disminuyen con R para una presión fija (en forma análoga al comportamiento en la figura 5.2). Al observar el comportamiento sobre la vertical, esto es al incrementar la presión se tiene que, para R fija, el valor de α^2 disminuye al aumentar la presión. Esto indica nuevamente que el traslape de bandas se incrementa con la presión.

Al igual que para $\alpha^2(\lambda)$, el cambio inicial en la presión implica un mayor cambio en el valor de $\alpha^2(R)$, que en el caso en que la presión cambie de 7.9 a 10.81 GPa; como se tiene que para ambos casos $\lambda=0.1$ y $R=4$, los valores del cambio en $\alpha^2(R)$ son los mismos: 0.00775685 para el cambio inicial de 1.69 GPa y 0.000279998 cuando la presión cambia de 7.9 a 10.81 GPa.

En la siguiente gráfica se muestra el comportamiento de $\alpha^2(R)$ para $\lambda=0.5$.

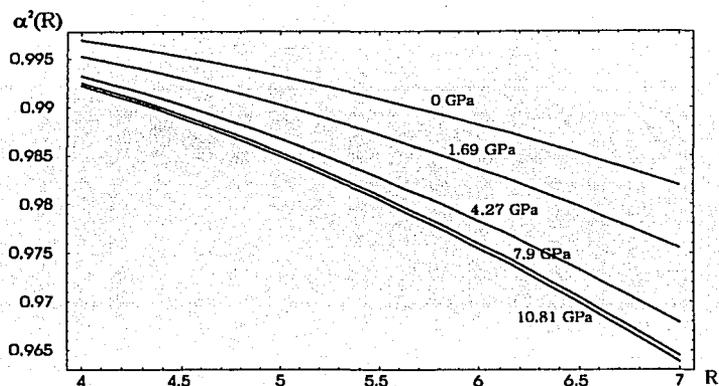


Figura 5.8. Gráfica de α^2 Vs. R bajo presión. $\lambda = 0.5$.

Se tiene un comportamiento que es equivalente al caso de la figura 5.7. Se puede observar que igualmente α^2 disminuye con R para una presión fija y que disminuye al aumentar la presión, aumentando también el traslape de bandas. El cambio en $\alpha^2(R)$ es de 0.00169173 y de 0.000278226 cuando la presión cambia 1.69 GPa y cuando cambia de 7.9 a 10.81 GPa respectivamente, con $\lambda=0.5$ y $R=4$.

Se encuentra en general que los casos bajo presión presentan un comportamiento regular; más aún, todos los valores de α^2 que se encontraron están dentro de lo esperado, pues en todos los casos se obtuvo $\alpha^2 \lesssim 1$. Esto quiere decir que para cualquier valor del parámetro λ en el límite de acoplamiento débil y para valores de R que corresponden a aquellos de los cupratos, siempre se requiere un traslape de bandas que permite justificar las altas temperaturas críticas de estos materiales.

Por otra parte, de los resultados bajo presión hay dos observaciones importantes que se deben resaltar. La primera es que al aumentar la presión el valor de α^2 disminuye para una R fija, esto se esperaba ya que, al aplicar presión, se incrementa el traslape de bandas. La segunda observación se refiere a que, para los dos últimos datos de presión, las curvas

obtenidas están muy cercanas una de la otra. Así, se tiene que el modelo con traslape de bandas permite obtener resultados que reflejan el hecho de que existe un límite al aplicar presión, a partir del cual la T_c se satura y comienza a disminuir, como se observa en la figura 5.3.

Conclusiones

Se ha partido de un modelo sencillo para un gas de electrones con traslape de bandas que se desea aplicar a los cupratos superconductores para justificar sus altas temperaturas críticas. Dada la característica anisotrópica de estos materiales, debido a su configuración en planos, se ha podido acotar el problema físico de tal forma que el modelo asume una reducción de dimensiones y contempla sólo un gas bidimensional de electrones. El traslape de bandas, patente de los cálculos reportados, también se toma en cuenta al proponer una configuración de estados electrónicos que introduce una segunda banda cerca del nivel de Fermi. Esto se realiza dentro del contexto de BCS, es decir, se mantienen las consideraciones sobre la máxima energía disponible para generar el estado superconductor, que es la energía de Debye, además se considera un acoplamiento débil para la interacción entre los electrones del par de Cooper.

Con lo anterior y retomando la ecuación de Cooper-Schrödinger se encontró una ecuación, en términos del parámetro de ocupación α^2 , para la T_c . Dicho parámetro indica qué tanto traslape de bandas se da en los cupratos en correspondencia con sus propiedades específicas como son la θ_D y la T_F . Además, este parámetro se puede obtener para los distintos valores de la constante de acoplamiento λ y de la constante R de la muestra de estudio.

Para ilustrar los resultados de este modelo se seleccionó el cuprato superconductor $YBa_2Cu_4O_8$ (Y124), representativo de este grupo de materiales y del cual se tienen varias publicaciones con datos confiables de sus propiedades. Lo que se encontró con este modelo es que en todos los casos se requiere de la participación de dos bandas y que el traslape de éstas es suficiente para explicar las altas temperaturas de estos materiales; ésto se concluye de revisar los valores obtenidos de α^2 para el Y124. En todos los casos que se calcularon, al variar λ y R , se obtuvo que $0.97002 < \alpha^2 < 1$ ($\alpha^2 = 1$ implica un traslape de bandas nulo), los cuales son valores esperados dentro del modelo. Esto implica que el traslape de bandas es un factor imprescindible en la explicación de las altas temperaturas críticas de los cupratos.

En este trabajo, además de reproducir las temperaturas críticas de los cupratos, se abordan los efectos de la aplicación de altas presiones sobre la temperatura crítica. Como se sabe, someter un material a altas presiones genera efectos importantes que van desde hacer que un material no superconductor lo sea bajo la aplicación de presión o que la T_c de un material superconductor se incremente considerablemente. Para el Y124 se presentan los datos de algunas de sus propiedades más importantes que se modifican al aplicar altas presiones. Con esto, se realizaron nuevos cálculos con el modelo propuesto y se encontró nuevamente que los valores de α^2 obtenidos al variar λ , R y la presión (lo cual implica variar la T_c), satisfacen lo predicho por el modelo, teniendo que $0.94708 < \alpha^2 < 1$. Además,

el modelo es capaz de señalar la saturación de la T_c al aumentar la presión como se hizo notar en las gráficas correspondientes.

Dados los resultados se pueden formular las siguientes conclusiones: la idea del traslape de bandas es consistente con el formalismo de BCS, no sólo para el caso de cupratos a presión atmosférica, sino también bajo la aplicación de altas presiones. Con esto se ha logrado salvar la barrera fonónica establecida por el modelo BCS para las temperaturas críticas en el límite de acoplamiento débil y en un amplio intervalo de valores de R , como son los reportados para los distintos cupratos superconductores, ya que el traslape de bandas permite varias posibilidades para la ocupación de los estados electrónicos de los cupratos que está en concordancia con sus temperaturas críticas.

Finalmente lo que se pretende es ofrecer conocimiento sobre los aspectos fundamentales responsables de la superconductividad de altas temperaturas y este modelo ha brindado resultados consistentes con el comportamiento y propiedades de los cupratos superconductores.

Bibliografía

- [1] Burns, Gerald. *Solid State Physics*. Academic Press. E.U. 1985.
- [2] Cyrot, Michel; Davor, Pavuna. *Introduction to Superconductivity and High Temperature Materials*. World Scientific Publishing. 1989.
- [3] Ginsberg, Donald M. *Physical Properties of High Temperature Superconductors*. vol. I. World Scientific. 1989.
- [4] Poole, Charles; Farach Horacio. *Superconductivity*. Academic Press. E.U. 1995.
- [5] Rickayzen, G. *Theory of Superconductivity*. Interscience Publishers. E.U. 1965.
- [6] Schrieffer, R.J. *Theory of Superconductivity*. W.A. Benjamin, Inc. E.U. 1964.
- [7] Taylor, Philip, Heinonen, Olle. *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press. Reino Unido. 2002.
- [8] Tinkham, Michael. *Introduction to Superconductivity*. 2a. ed. McGraw-Hill. E. U. 1996.
- [9] V.L. Ginzburg, P.N. Lebedev. High-temperature superconductivity: its possible mechanisms. *Physica C* **209**, 1 (1993).
- [10] Waldram, J.M. *Superconductivity of Metals and Cuprates*. Institute of Physics Publishing. Inglaterra. 1996.
- [11] Ziman, J.M. *Principles of the Theory of Solids*. 2a ed. Cambridge University Press. Inglaterra. 1972.
- [12] David Pines. Understanding high temperature superconductors: progress and prospects. *Physica C* **282-287**, 273 (1997).
- [13] Y. Yamada, J.D. Jorgensen, et al. Structural changes of superconducting $Y_1Ba_2Cu_4O_8$ under high pressure. *Physica C* **173**, 185 (1991).
- [14] R. Wijngaarden, D. Tristan Jover, R. Griessen. Intrinsic and carrier density effects on the pressure dependence of T_c of high-temperature superconductors. *Physica B* **265**, 128 (1999).

- [15] E. Kaldis, P. Fisher, et al. Low temperature anomalies and pressure effects on the structure and T_c of the superconductor $Y_1Ba_2Cu_4O_8$ ($T_c = 80K$). *Physica C* **159**, 668 (1989).
- [16] P.J. Ford, G.A. Saunders. High-temperature superconductivity -ten years on. *Contemporary Physics* **38**, no. 1, 63 (1997)
- [17] Burns, Gerald. *High Temperature Superconductivity -An Introduction*. Academic Press. E.U. 1992.
- [18] Navarro, Oracio. *Introducción a la Superconductividad*. Aula Magna. vol. II. México. 1997.
- [19] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.* **108**, 1175-1204 (1957).
- [20] L.N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.* **106**, 1189-90 (1956)
- [21] G. Bednorz, A. Müller. Possible high temperature superconductivity in $La_{1.85}Ba_{0.15}CuO_4$. *Zeitschrift für Physik B* **64**, 189 (1986).
- [22] C.W. Chu. Evidence for superconductivity above 40K in the La-Ba-Cu-O compound system. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 405 (1987).
- [23] Wu et al. Superconductivity at 93K in a new mixed-phase $Y - Ba - Cu - O$ compound system. *Phys. Rev. Lett.* **58**, no. 9, 908 (1987).
- [24] Poole, Charles Jr. *Handbook of Superconductivity*. Academic Press. E.U. 2000.
- [25] Putlin et al. Superconductivity at 94K in $HgBa_2CuO_{4+d}$. *Nature* **362**, 226 (1993).
- [26] Schilling et al. *Nature* **363**, 56 (1993).
- [27] N. W. Aschcroft. Putting the squeeze on lithium. *Nature* **419**, 569 (2002).
- [28] Manuel Nuñez-Requeiro, Carlos Acha. High pressure measurements on mercury cuprates. *Studies of High Temperature Superconductor* **24**, 203 (1997).
- [29] Bourdillon, A; Bourdillon N.X. *High Temperature Superconductors: Processing and Science*. Academic Press. E.U.1994.
- [30] Gao et al. Superconductivity up to 164 K in $HgBa_2Ca_{m-1}Cu_mO_{2m+2+d}$ ($m=1,2$, and 3) under quasihydrostatic pressures. *Phys. Rev. B.* **50**, no. 6, 4260 (1994).
- [31] Bucher et al. *Physica C.* **157**, 478 (1989)
- [32] E. N. van Eeinige, R. Griessen, R. Wijngaarden, et al. Superconductivity at 108K in $Y_1Ba_2Cu_4O_8$ at pressures up to 12GPa. *Physica C* **168**, 482 (1990).

- [33] J.J. Scholtz, E. N. van Eenige, R. Wijngaarden, R. Griessen. Pressure dependence of T_c and H_{c2} of $Y_1Ba_2Cu_4O_8$. Phys.Rev. B **45**, 3077 (1992).
- [34] M. Moreno, et al. Energy band overlapping in high- T_c superconductors. Mod. Phys. Lett. B, **10**, no. 30, 1483 (1996).
- [35] M. A. Ortíz, et al. A model for high T_c superconductors with energy band overlapping. Revista Mexicana de Física. **48**, Septiembre (1992).
- [36] M. Moreno et al. The isotope effect in an overlapping band model for high- T_c superconductors. Science and Engineering of HTC Superconductivity. Proceedings of Topical Symposium VI of the Forum on New Materials of the 9th CIMTEC-World Ceramics Congress and Forum on New Materials. Florencia, Italia Junio 14-19, 1998.
- [37] J. S. Schilling, S. Klotz. *Physical Properties of High Temperature Superconductors*. vol. III. Editado por Donald M. Ginsberg. World Scientific. p.59. 1992.
- [38] H Ledbetter. Physica C, **235-240**, 1495 (1994).
- [39] R. Wijngaarden, E. N. van Eenige, J.J. Scholtz, R. Griessen. High pressure changes the charge carrier concentration in high- T_c superconductors: experiments to 50GPa. Physica C. **185-189**, 787 (1991).
- [40] H.A. Ludwig, W.H. Fietz, M.R. Dietrich, H. Wühl, et al. X-ray investigations of $Y_1Ba_2Cu_4O_8$ under high pressure. Physica C **167**, 335 (1990).
- [41] E. Schachinger, J.P. Carbolte. Coupling to spin fluctuations from conductivity scattering rates. Phys. Rev. B. **62**, no. 13, 9054 (2000)
- [42] Sujit Sarkar, Pressure coefficient of the superconducting transition temperature: Nonadiabatic superconductivity. Phys. Rev. B **57**, 11661 (1998).