



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA
DE MATERIALES

**SUPERCONDUCTIVIDAD A PARTIR DE LA
UNIFICACIÓN DE LAS TEORÍAS BCS Y BEC**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIA E INGENIERÍA
DE MATERIALES

PRESENTA:

JUAN JOSÉ VALENCIA ACEVEDO

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

PCeIM

MÉXICO, D. F.

ABRIL DE 2008



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Agradecimientos

Quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México por permitirme realizar mis estudios de doctorado. Al pueblo de México contribuyente que hace que esta honorable casa de estudios exista.

Agradezco a los responsables directos que hicieron que esta tesis fuera posible, los Drs. Manuel de Llano, Miguel Ángel Solís y Mauricio Fortes, los cuales me dirigieron con verdadero profesionalismo. Así también agradezco a la Dra. Marcela Grether por sus asesorías y por la Figura 11.

A los doctores Héctor Octavio Murrieta Sánchez, Francisco Morales Leal, Ilya Kaplan, Miguel Ángel Solís Atala, Pablo de la Mora y Palomar Askinasy, Gerardo Vázquez Fonseca y María de los Ángeles Ortiz Flores por la revisión y comentarios de este trabajo.

Al personal de cómputo del Instituto de Investigaciones en Materiales, al personal de la Biblioteca del mismo Instituto. Al personal de la Biblioteca del Instituto de Física.

También agradezco el apoyo brindado por el Dr. Ricardo Vera coordinador del posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales, UNAM, así como a sus secretarías Gris y Lilia.

A la Dirección General de Posgrado, UNAM, por autorizar la beca de doctorado que disfruté del 2001 al 2006, gracias.

Lista de publicaciones

1. **“Ideal quantum gases with any positive-power dispersion law in any positive dimensions”**
V.C. Aguilera-Navarro, V. Fuentes, M. Grether, M.G. López- Arrieta, M. de Llano, J.J. Valencia, A. Salazar, O. Rojo & M.A. Solís
Cond. Matt. Theories **14**, Ed. David J. Ernst, 61-69 (Nova Science Publisher, Inc., N.Y., 2000).

2. **“Bose-Einstein condensation in real space”**
J.J. Valencia, M. de Llano & M.A. Solís
Rev. Mex. Fís. **50**, 84-87 (2004).

3. **“Robust statistical mechanism for phonon-driven high-Tc superconductivity”**
M. de Llano, F.J. Sevilla, M.A. Solís & J.J. Valencia
Int. J. Mod. Phys. B **19**, 17-28 (2005).

4. **“BEC, BCS and BCS-Bose crossover theories in superconductors and superfluids”**
M. de Llano, F.J. Sevilla, M.A. Solís & J.J. Valencia
Cond. Matt. Theories **20**, Ed. John W. Clark, Robert M. Panoff and Haochen Li, 273-285 (Nova Science Publisher, Inc., N.Y., 2006).

5. **“Further empirical evidence for linearly-dispersive Cooper pairs”**
M. de Llano & J.J. Valencia
Mod. Phys. Lett. B, **20**, 1-7 (2006).

6. **“The BCS-Bose crossover theory”**
S.K. Adhikari, M. de Llano, F.J. Sevilla, M.A. Solís & J.J. Valencia
Physica C **453**, 37-45 (2007).

Índice

Agradecimientos	I
Lista de publicaciones	II
Índice	III
Lista de figuras	IV
Resumen	V
Introducción	VII
1 Relación de dispersión lineal de los pares de Cooper	1
2 Modelo bosón-fermión con bosones irrompibles	6
2.1 Introducción	6
2.2 Calor específico fermiónico	8
2.3 Calor específico bosónico	10
2.4 Calor específico total	12
3 Modelo estadístico bosón-fermión ideal de la superconductividad	16
3.1 Introducción	16
3.2 IBFM en 2D	20
3.3 IBFM en 3D	27
4 Modelo estadístico bosón-fermión completo de la superconductividad	34
4.1 Introducción	34
4.2 Hamiltoniano de interacción	35
4.3 Ecuaciones de número y de gap	38
4.4 Energía de condensación	41
4.5 Interacción delta atractiva en 2D según CBFM	44
4.6 Temperatura de transición al estado condensado	49
4.7 Potencial químico fermiónico	55
4.8 Energía libre de Helmholtz	55
4.9 Temperatura de transición en $2 \leq d \leq 3$	58
4.10 CBFM con $f = 0$	61
5 Conclusiones	68
6 Bibliografía	71

Lista de figuras

Figura 1. Curvas de la fracción del condensado de BE para bosones en 3D, 2D y 1D.

Figura 2. Calor específico de un gas compuesto por un número fijo de electrones N y de bosones N_B para distintos valores de $2N_B/N$.

Figura 4. T_c/T_F como función de $\nu = \hbar\omega_D/E_F$ en 2D según IBFM.

Figura 5. La función $I_{2D}(y)$, definida en el texto, para toda $y \equiv \Delta_0(T_c)/k_B T_c$ es menor o igual a la unidad.

Figura 6. T_c/T_F vs. λ con $C_1 = (\lambda/2\pi)\hbar v_F$ en 2D.

Figura 7. Potencial químico fermiónico μ en 3D como una función de la temperatura T .

Figura 8. Temperatura de transición en 3D como una función de la temperatura de Debye, las dos en unidades de la temperatura de Fermi, para los casos $C_1 = (1/2)\hbar v_F$ y $C_1 = (\lambda/4)\hbar v_F$.

Figura 9. Forma gráfica de la función $I_{3D}(y)$ definida en el texto.

Figura 10. Diagrama de regiones donde se forman los pares 2e y 2h.

Figura 11. Diagrama de fases de la teoría CBFM.

Figura 12. Curvas de T_c/T_F vs n/n_f en 2D por medio de la teoría CBFM.

Figura 13. Curvas de T_c/T_F vs n/n_f en 3D por medio de la teoría CBFM.

Figura 14. Comportamiento del potencial químico del sistema descrito por la teoría CBFM en 2D.

Figura 15. F/NE_F vs. n/n_f en 2D.

Figura 16. Comportamiento de T_c/T_F con d a diferentes valores de n/n_f .

Figura 17. Curvas de T_c/T_F vs n/n_f en 2D por medio de la teoría CBFM con $f = 0$.

Resumen

En esta tesis proponemos varios modelos estadísticos de mezclas de fermiones y bosones que usamos para describir propiedades claves de sistemas superconductores bi- y tri-dimensionales. En uno de ellos se considera que entre los dos tipos de gases no hay interacción, el número de fermiones es independiente del número de bosones. Este modelo es llamado “Modelo bosón-fermión sin interacciones.” Con este modelo se calcula el calor específico y se justifica el comportamiento bosónico de los pares de Cooper.

Luego analizamos el “modelo estadístico boson-fermión ideal.” En esta mezcla bosón-fermión los fermiones se pueden aparear y desaparearse por lo que el número de pares, tratados como bosones, es dependiente de la temperatura. El modelo de interacción que forma los pares de Cooper es el propuesto por la teoría BCS. Restringiéndonos a dos y tres dimensiones espaciales encontramos que la relación de dispersión bosónica depende de la intensidad del acoplamiento entre fermiones.

Procurando ser más realistas en el estudio teórico de la superconductividad arribamos al “Modelo estadístico bosón-fermión completo de la superconductividad” (CBFM, por sus siglas en inglés) en el que, además de los electrones, se considera la participación de los huecos. También aquí los electrones, y los huecos, se pueden aparear y desaparearse para formar bosones. Entre las propiedades que se estudian bajo este modelo está el comportamiento de la temperatura de transición al estado superconductor como función de la asimetría entre el número de pares de electrones y huecos en el sistema. Este modelo reproduce el obtenido por BCS para cuando el número de pares de electrones es igual al de huecos. Nuestros resultados muestran que cuando el condensado consta sólo de pares de huecos la temperatura de transición es más grande que cuando consta sólo de pares de electrones. Por medio de este modelo también se calculó la energía libre de Helmholtz como una función del parámetro de asimetría para las fases puras. El resultado que obtuvimos fue que cuando la razón del número total de electrones entre el número de fermiones desapareados, en la temperatura de transición, es menor que la unidad, es más estable el condensado de los pares de huecos y cuando es mayor que la unidad es más estable el condensado de los pares de electrones. Cuando esta razón es igual a la unidad, tienen la misma estabilidad, lo que quiere decir que estamos en el caso BCS donde hay igual número de pares de electrones y huecos, tanto en el condensado de BE como en la totalidad de estados excitados. Al calcular la energía de condensación haciendo el número de pares de huecos condensados igual al número de pares de electrones condensados, se llegó al resulta-

do obtenido por medio de la teoría BCS a cualquier valor del acoplamiento fermiónico. Este resultado refuerza la idea que CBFM en simetría perfecta reproduce BCS.

En la misma teoría CBFM, al considerar la interacción atractiva entre los electrones (o huecos) como el de una sola partícula de masa reducida en el centro de masa que está en un potencial delta atractivo, obtenemos una generalización de las ecuaciones de Miyake al sistema en que se considera no sólo electrones sino también huecos.

Otro tema que se toca en este trabajo es el comportamiento de la relación de dispersión bosónica. Recopilamos datos experimentales para materiales considerados en 1, 2 y 3 dimensiones espaciales; encontramos que la relación de dispersión puede aproximarse a una función lineal en el vector de onda.

Introducción

Al paso de una corriente eléctrica, los metales ofrecen una resistencia por lo que parte de la electricidad se transforma en calor; esto permite innumerables aplicaciones tecnológicas tales como la plancha, la tostadora o el calefactor eléctrico. En otros usos de la electricidad, sobre todo en su transmisión a través de cables, no resulta económico que se pierda energía en forma de calor. En el año 1911 el físico holandés Heike Kamerlingh Onnes descubrió que ciertos metales conducen la electricidad sin resistencia siempre y cuando se les enfríe a temperaturas cercanas al cero absoluto, unos 273 grados centígrados bajo cero. Dado que conseguir temperaturas tan bajas resulta muy costoso, uno de los grandes objetivos de la ciencia de materiales es encontrar superconductores que operen a temperaturas más altas.

En el año 1986 la comunidad científica recibió con entusiasmo la noticia de que los físicos K. A. Müller y J. G. Bednorz habían encontrado un material completamente nuevo que no es aleación metálica sino cerámica hecha a base de óxido de cobre mezclado con bario y lantano. Este material (BaLaCuO) podía ser superconductor a una temperatura de 240 grados centígrados bajo cero. Desde entonces se han encontrado varios tipos de superconductores cerámicos, compuestos de cuatro tipos diferentes de átomos, entre ellos el oxígeno y el cobre, con temperatura de transición al estado superconductor cada vez mayores. En 1993 se alcanzó el récord actual de temperatura crítica superconductora, ésta la tienen los cupratos superconductores basados en elemento mercurio y dopados con flúor, que alcanzan los $-135\text{ }^{\circ}\text{C}$ a presión ambiente y los $-107\text{ }^{\circ}\text{C}$ bajo presiones cercanas a las 20,000 atmósferas. No obstante, se tiene la esperanza de encontrar superconductores que trabajen como tal a temperatura del medio ambiente, la cual está alrededor de 20 grados centígrados.

Los superconductores cerámicos cuyo núcleo de su composición es formado con átomos de cobre y oxígeno disponen sus átomos en capas alternas dentro del material, permitiendo que un cierto número de electrones puedan desplazarse entre los mismos sin resistencia alguna. Tal arreglo genera un comportamiento bidimensional de las propiedades de estos materiales. En el presente trabajo hacemos énfasis en los modelos teóricos de superconductores bidimensionales.

A la fecha se han desarrollado varias teorías que intentan explicar el fenómeno de la superconductividad. En 1935 F. London introdujo un conjunto de ecuaciones para estudiar fenomenológicamente la superconductividad, sin embargo aún en 1950, 39 años después del descubrimiento de este fenómeno, no existía una adecuada teoría microscópica. No fue sino hasta 1957 que J. Bardeen, L.N. Cooper y J.R. Schrieffer [1] publicaron sus trabajos sobre la superconductividad

donde propusieron la teoría que en su honor es conocida como teoría BCS. Ésta nos dice que los portadores de la supercorriente son pares de electrones (llamados pares de Cooper) que se enlazan por medio de fonones en una red periódica de iones oscilantes.

Paralelamente en 1925 se predijo la llamada Condensación de Bose-Einstein (BEC, por sus siglas en inglés) la cual fue introducida por Satyendra Nath Bose y Albert Einstein (Pág. v de [2]). La BEC propone un estado del sistema de muchas partículas en el cual hay una cantidad macroscópica de ellas en el nivel de mínima energía, denominado estado fundamental. El condensado es una propiedad que viola el Principio de Exclusión de Pauli, el cual rige la distribución de partículas llamadas fermiones (entre ellas los electrones) en sus niveles cuánticos de energía. Por tanto, sólo partículas llamadas bosónicas pueden acceder al estado condensado.

Existe una conexión entre el tipo de estadística que obedecen las partículas y su espín. Los fermiones tienen espines semienteros y los bosones enteros. Como los electrones tienen espín semientero, los pares de electrones propuestos en la teoría BCS, vistos como una sola partícula tienen espín entero. Además, puede haber un número indeterminado de pares de Cooper con energía total cero. De aquí que dichos pares pueden ser tratados como bosones y se puedan dar teorías que unifiquen BCS con BEC para explicar el fenómeno de la superconductividad.

La primera vez que se propuso que una condensación de Bose-Einstein de pares de electrones fuera la causante de la superconductividad fue en 1946. Esta propuesta se le debe al químico experimental R. Ogg (Pág. v de [2]). Formalmente esta idea fue estudiada por J.M. Blatt, et al. a mediados de los 50's [2], poco antes de la publicación de la teoría BCS.

En esta tesis discutiremos diferentes modelos que suponen mezclas de bosones (pares de electrones) y fermiones (electrones libres). En el Capítulo 2 se discute el modelo teórico más simple que lleva el nombre de “Modelo Bosón-fermión sin interacciones.” En éste se considera un gas ideal de fermiones y un gas ideal de bosones sin interacción entre sí en dimensión espacial dos. El número de fermiones es independiente del número de bosones. Así, tanto el número de electrones desapareados como el de bosones permanece constante a cualquier temperatura. Trabajando este modelo obtuvimos el comportamiento del calor específico como función de la temperatura. Reprodujimos la discontinuidad de la primera derivada que exhiben materiales superconductores bidimensionales.

En el Capítulo 1, por medio de una recopilación de datos experimentales se argumenta que la relación de dispersión que describe bosones moviéndose en un mar de Fermi es lineal en lugar de cuadrática como se supone usualmente.

La teoría BCS propone un parámetro que nos dice que tan acoplados están los pares enlazados. Es de esperarse que la temperatura de transición al estado condensado de Bose disminuya si el parámetro de acoplamiento disminuye hasta llegar a cero donde los pares se rompen y, por lo tanto, la T_c de BEC se hace cero. Sin embargo, el “Modelo estadístico boson-fermión ideal,” modelo en el cual los fermiones se pueden aparear y desaparecer, nos lleva a un valor finito en la temperatura de transición cuando el parámetro de acoplamiento se va a cero. Lo anterior resulta cuando la relación entre la energía bosónica y el momento no depende del acoplamiento. En el Capítulo 3, al introducir el parámetro de acoplamiento en la relación energía-momento encontramos el comportamiento físicamente esperado.

Continuando con el estudio de la temperatura de transición, en el Capítulo 4 se analizará el “Modelo estadístico bosón-fermión completo de la superconductividad” (CBFM, por sus siglas en inglés). Se le llama completo en el sentido que considera, además de los pares de electrones, la participación de los pares de huecos. Se calculó la temperatura de transición al estado superconductor como una función de la simetría en cuanto al número de electrones y huecos en el ensamble. En todas nuestras gráficas vemos que cuando el condensado consta sólo de pares de huecos la temperatura de transición es más grande que cuando el condensado consta únicamente de pares de electrones. Esto es de esperarse por que la superconductividad por huecos en cupratos tiene más alta T_c que la superconductividad por electrones.

Después se simplificó la teoría CBFM quitando la interacción entre fermiones y bosones. Al introducir la relación de dispersión cuadrática para bosones se obtiene una temperatura de transición igual a cero, resultado que concuerda con la teoría de la condensación de Bose-Einstein.

En el presente trabajo se defiende la idea de que si consideramos simetría perfecta entre pares de partículas y de huecos, nuestro modelo CBFM reproduce BCS. Siguiendo con las propiedades termodinámicas del gas descrito por CBFM, al introducir simetría perfecta se calculó la energía de condensación llegando al mismo resultado obtenido por BCS.

Por otro lado, considerando los dos electrones (o huecos) en interacción BCS como una sola partícula, de masa reducida en el centro de masa, en un potencial delta atractivo bajo la descripción CBFM, obtenemos una generalización de las ecuaciones de Miyake [3] al sistema en que se considera, no sólo los electrones y pares de electrones, sino también huecos y pares de huecos.

Finalmente, el Capítulo 5 contiene nuestras conclusiones.

Capítulo 1

Relación de dispersión lineal de los pares de Cooper

A lo largo de esta tesis se utiliza el caso que a momento lo suficientemente pequeño, de modo que $\hbar^2 K^2 \ll 4m_e$, donde \hbar es la constante de planck dividida entre 2π , K es el vector de onda bosónico y m_e la masa de un electrón, la relación de dispersión bosónica cuando los bosones se encuentran en un mar de Fermi puede ser aproximadamente lineal. Demostraciones teóricas se encuentran en [4], [5], [6] y [7]. En este capítulo se justifica la relación de dispersión lineal por medio del análisis de datos experimentales.

Un modelo de condensación de Bose-Einstein es aplicado por Rosencwaig [8] en siete superconductores cupratos con temperaturas de transición que van desde $22K$ hasta $133K$: $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO), $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO), $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ (Y123), $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-y}$ (Bi2212), $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-y}$ (Bi2223), $\text{HgBa}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{7-y}$ (Hg1212) y $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{9-y}$ (Hg1223).

Este modelo parte del conocido hecho de que BEC ocurre bajo la temperatura T tal que el diámetro de la cuasi-partícula bosónica, $\lambda = h/\sqrt{2\pi mk_B T}$, se hace más grande que la separación promedio interfermiónica (o distancia de interacción), con $m = 2m_e$ la masa del bosón, h , la constante de Planck y k_B la constante de Boltzmann. Más específicamente, BEC aparece cuando

$$n_B \lambda^3 = 2.612, \quad (1)$$

donde n_B es la densidad de número bosónica. Esto lleva a la temperatura crítica T_c dada por la fórmula familiar

$$T_c = \frac{2\pi \hbar^2 n_B^{2/3}}{(2.612)^{2/3} m k_B} \simeq \frac{3.31 \hbar^2 n_B^{2/3}}{m k_B} \quad (2)$$

de la teoría convencional BEC, ver ecuación (13.32) de [9]. La fracción del condensado está dada por

$$\frac{N_0(T)}{N_0(0)} = \begin{cases} 1 - (T/T_c)^{3/2} & \text{para } T \leq T_c, \\ 0 & \text{en otro caso;} \end{cases} \quad (3)$$

donde $N_0(T)$ es el número de pares a temperatura T en el estado de energía más bajo con número de onda de centro de masa $\mathbf{K} = 0$; notemos que $N_0(0) = N$ es el número total de bosones.

Hablemos de la energía de un bosón. Como los fermiones se aparean cerca de $\mu(T)$, la energía que hay en los dos electrones que se aparean es $2\mu(T)$, como se ocupa una energía $\Delta_{\mathbf{K}}(T)$ en el enlace, al aparearse el par tiene una energía $E_{\mathbf{K}}(T)$ dada por

$$E_{\mathbf{K}}(T) = 2\mu(T) - \Delta_{\mathbf{K}}(T), \quad (4)$$

Definiendo la energía bosónica a partir de $E_{\mathbf{0}}(T)$

$$\varepsilon_{\mathbf{K}}(T) \equiv E_{\mathbf{K}}(T) - E_{\mathbf{0}}(T) = \Delta_0(T) - \Delta_{\mathbf{K}}(T) \quad (5)$$

Rosencwaig propone su modelo en 3D con energías de excitación dada por

$$\varepsilon_{\mathbf{K}} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}, \quad (6)$$

que es lo que tendríamos si los bosones se movieran en el vacío. Sin embargo, en la presencia del mar de Fermi la relación de dispersión es lineal (ver Ref. [5], [7], [10] y [11]). Un ejemplo de la discusión de dispersión lineal contra cuadrática se da en Ref. [5] en 2D suponiendo un potencial delta atractivo entre los electrones. Este potencial se supone regularizado [12] para obtener un sólo estado de enlace de energía $-B_2$ con lo cual se obtiene un acoplamiento constante, con $0 \leq B_2 < \infty$ para el intervalo de acoplamiento débil al fuerte. Esta interacción interfermiónica simula el efecto neto de repulsión coulombiana más la atracción debida a la interacción electrón-fonón. En vez de (6) en Ref. [5] Ec. (8) se llega a la expresión analítica

$$\varepsilon_{\mathbf{K}} = \Delta_0(T) - \Delta_{\mathbf{K}}(T) = \frac{2}{\pi} \hbar v_F K + \left[1 - \left\{ 2 - \left(\frac{4}{\pi} \right)^2 \right\} \frac{E_F}{B_2} \right] \frac{\hbar^2 K^2}{2(2m_e)} + O(K^3), \quad (7)$$

donde $\Delta_{\mathbf{K}}$ es la energía de amarre del par de electrones que forman un bosón con momento total dado por \mathbf{K} , así, $\varepsilon_{\mathbf{K}}$ es la energía del par de electrones que se mide a partir de la energía de amarre del par con momento total cero; v_F es la velocidad de Fermi definida a través de la superficie de Fermi $E_F \equiv \frac{1}{2} m_e v_F^2$ y m_e la masa efectiva del electrón; el símbolo $O(K^3)$ significa que siguen términos con K de orden mayor e igual a tres.

Si \mathbf{K} es lo suficientemente pequeña para que K^2 , y K 's de orden mayor, puedan ser despreciadas, la relación (7) se puede considerar lineal. En el límite del vacío donde $E_F \rightarrow 0$, tenemos $v_F \rightarrow 0$ y así la relación de dispersión se puede considerar cuadrática como en (6) con $m = 2m_e$.

Propogamos la relación de dispersión

$$E = C_s K^s, \quad (8)$$

donde K es el vector de onda, s el orden de la relación de dispersión y C_s una constante que depende del orden de la relación de dispersión. Utilizando esta forma de la energía se obtienen expresiones generales para T_c y para la fracción del condensado a cualquier dimensión $d > 0$ y cualquier s [13]. Éstas son

$$T_c = \frac{C_s}{k_B} \left[\frac{s\Gamma(d/2)2^{d-1}\pi^{d/2}n_B}{\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)} \right]^{s/d}; \quad (9)$$

y

$$\frac{N_0(T)}{N_0(0)} = \begin{cases} 1 - (T/T_c)^{d/s} & \text{para } T \leq T_c, \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (10)$$

donde n_B es la densidad de partículas bosónicas; $g_\sigma(1)$ son las integrales de Bose, para $\sigma > 1$ éstas coinciden con la función zeta de Riemman $\zeta(\sigma)$ y diverge para $\sigma \leq 1$; $\Gamma(\sigma)$ es la función gamma. La divergencia de $g_\sigma(1)$ para $\sigma \leq 1$ asegura, de (9), que $T_c = 0$ para todo $d < s$. Cuando la relación de dispersión bosónica es lineal, es decir, $s = 1$, ver Ec. (8), BEC puede ocurrir para toda $d > 1$. Esto concuerda con el hecho de que los superconductores de más baja dimensión que han sido encontrados son casi unidimensionales, éstos son los orgánicos que consisten de cadenas paralelas de moléculas [14, 15].

En $d = 3$ y una relación de dispersión cuadrática $s = 2$ y $C_2 = \hbar^2/2m$, (9) y (10) se reducen a (2) y (3) respectivamente, ya que $g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) \simeq 2.612$.

Wilson [16] por medio de evidencias empíricas aboga por la naturaleza de dispersión lineal de los pares de Cooper (CP's) en BSCCO. Esto también ha sido sugerido por datos de dispersión en *scanning tunneling microscope conductance* obtenidos por Davis y colaboradores [17], [18]. En el presente trabajo mostramos evidencias adicionales, ver Figura 1. Ésta contiene datos experimentales para dos superconductores en 3D [19], [20], dos cuasi-2D [21], [22] y [23] y uno cuasi-1D [24]. Los datos están de acuerdo, al menos para $T > 0.5T_c$, con la fórmula (10) de la fracción del condensado en su fase pura (sólo $2e^-$ o $2h^-$ CP) para $d = 3, 2$ y 1 , suponiendo $s = 1$. Para más bajos valores de T 's uno puede argumentar que una fase mixta de BEC conteniendo $2e^-$ y $2h^-$ CP's es más estable (es decir, tiene una energía libre de Helmholtz más baja) tanto que la fórmula de fase simple (10) no es estrictamente válida.

En la Figura 1 se muestran curvas de la fracción del condensado de BE para bosones en 3D, 2D y 1D suponiendo la relación de dispersión (8) para $s = 2$ y 1 , para una fase pura de $2e^-$ o $2h^-$ CP's comparadas con datos empíricos para superconductores 3D (Nb/Cu y Sn), cuasi-2D (Y123 y Bi2212 con $T_c \simeq 93K$ y $91K$, respectivamente) y cuasi-1D (nanotubos de 4\AA de ancho con $T_c \simeq 15K$). También se graficaron datos tomados de [25] para $[\Delta(T)/\Delta]^2$ lo cual

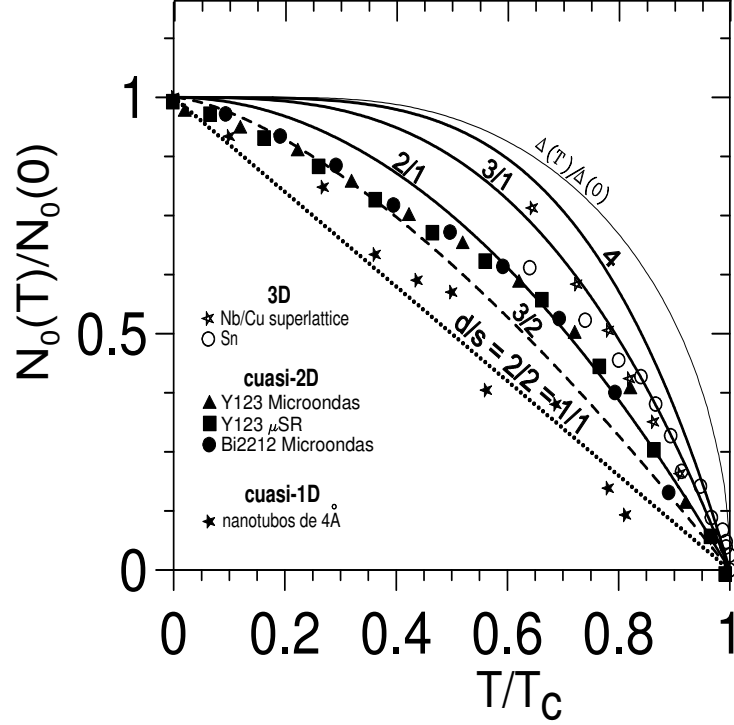


Figura 1: Curvas de la fracción del condensado de BE para bosones en 3D, 2D y 1D.

equivale a $m_0(T)/m_0(0)$ de acuerdo con la relación $\Delta(T) = f\sqrt{m_0(T)}$, donde $\Delta(T)$ es el gap fermiónico a temperatura T , Δ es el gap fermiónico a temperatura cero, $m_0(T)$ es el número de pares de Cooper de huecos por unidad de volumen en el estado condensado a la temperatura T y f es la constante de acoplamiento bosón-fermión. En la Figura 1 también se muestra la curva $1 - (T/T_c)^4$ que surge del modelo de dos fluidos [27]. En la misma figura, para efecto de comparación con los datos experimentales, se incluye la curva de la Fig. 6 de Ref. [8] etiquetada por $d/s = 3/2$.

En la figura 1 los datos para materiales en 3D claramente se acomodan sobre la curva teórica de la fracción del condensado en 3D con relación de dispersión lineal y se encuentran demasiado alejados de la curva en 3D con relación de dispersión cuadrática.

En el caso 2D los valores experimentales se acercan más a $d/s = 2/1$ que a $d/s = 2/2$, aunque por abajo de $T/T_c = 0.5$ se acercan a $d/s = 3/2$.

Para el caso 1D tengamos en mente que, según (9) cuando $d/s = 1/1$ se tiene $T_c = 0$. Los datos experimentales que rodean a la curva $d/s = 1/1$ se consideran en la dimensión $d = (1 + \epsilon)$

donde ϵ es muy pequeño pero distinto de cero tal que sea posible la BEC.

Podemos concluir que el orden de la relación de dispersión bosónica está más próximo a uno que a dos. Sin embargo, debemos mencionar que, para $T/T_c < 0.5$, los cupratos mostrados en la figura 1 tienen un comportamiento tridimensional si son descritos con una relación de dispersión cuadrática.

Los resultados experimentales que se muestran en este capítulo muestran que la relación de dispersión de bosones inmersos en un mar de Fermi es lineal.

Capítulo 2

Modelo bosón-fermión con bosones irrompibles

2.1 Introducción

Antes de analizar los sistemas teóricos de mezclas binarias de bosones y fermiones compartiendo el mismo volumen, usando el modelo bosón-fermión completo (CBFM, por sus siglas en inglés) y modelo ideal bosón-fermión (IBFM, por sus siglas en inglés), en los cuales se toma en cuenta la interacción entre fermiones y bosones, veamos la forma del calor específico para un sistema simplificado. Este sistema está formado de un gas ideal de electrones libres y pares de electrones, tratados como bosones. No hay interacción entre fermiones y bosones. Supondremos que estos dos gases son independientes uno del otro y que la existencia del sistema bosónico no afecta al sistema fermiónico. Así, tanto el número de electrones desapareados N_f como el de bosones N_B permanece constante a cualquier temperatura.

Se quiere mostrar que con esta simplificación se pueden obtener propiedades termodinámicas de materiales superconductores. Para esto, se calcula el calor específico y se compara con la forma del calor específico experimental. Los dos muestran una discontinuidad en su derivada al pasar por la temperatura de transición. Ésta tiende a desaparecer conforme el número de bosones se acerca a cero, lo que equivale a extinguir la fase superconductora.

Si N es el número total de electrones de conducción, entonces, $N = N_f + 2N_B$, o bien,

$$N_f = (1 - 2N_B/N)N \quad (11)$$

Si $f_e(\epsilon)$ y $f_B(\epsilon)$ son la función de distribución de los fermiones y de los bosones, respectivamente, la energía interna del sistema tiene la forma

$$U = 2 \int_0^\infty d\epsilon g_e(\epsilon) f_e(\epsilon) \epsilon + \int_0^\infty d\epsilon g_B(\epsilon) f_B(\epsilon) \epsilon, \quad (12)$$

donde $g_e(\epsilon)$ y $g_B(\epsilon)$ son la densidad de estados de los fermiones y de los bosones, respectivamente. El factor 2 de la suma en los fermiones es la degeneración de espín. Aquí estamos considerando bosones con espín total cero por lo que no tienen degeneración.

Para poder escribir más explícitamente la energía interna de nuestro sistema nos hace falta conocer la densidad de estados de los fermiones y de los bosones.

En [28] se utilizó la relación de dispersión dada en (8) para llegar a la densidad de estados en su forma generalizada

$$g(E) = \left(\frac{L}{2\sqrt{\pi}} \right)^d \frac{d}{s} \frac{(E)^{d/s-1}}{\Gamma(1 + d/2)C_s^{d/s}}, \quad (13)$$

donde s es el orden de la relación de dispersión y d nos da la dimensión espacial. En capítulos posteriores utilizaremos una relación de dispersión que contenga un estado base B distinto de cero. Por tanto, consideremos la relación de dispersión como sigue

$$E = B + C_s K^s. \quad (14)$$

Con esta nueva relación de dispersión la Ec. (13) se reescribe como

$$g(E) = \left(\frac{L}{2\sqrt{\pi}} \right)^d \frac{d}{s} \frac{(E - B)^{d/s-1}}{\Gamma(1 + d/2)C_s^{d/s}}. \quad (15)$$

En este trabajo queremos estudiar en especial la dimensión espacial $d = 2$ ya que nos interesa buscar un modelo teórico de superconductores cupratos que son considerados en dos dimensiones espaciales. Estos materiales son los que, hasta el momento, han obtenido la más alta temperatura de transición. Los cupratos superconductores basados en elemento mercurio y dopados con flúor, tienen una temperatura de transición al estado superconductor de -135 °C a presión ambiente. Este resultado experimental se obtuvo en 1993 y no se ha superado.

Procedamos a encontrar la densidad de estados fermiónica. La relación de dispersión que describe a los fermiones tiene la forma

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (16)$$

Notemos que para llegar de (14) a (16) se debe hacer $B = 0$, $C_s = \hbar^2/2m$ y $s = 2$. Sustituyendo estos valores en (15), para una dimensión espacial $d = 2$, obtenemos la densidad de estados fermiónica g_e

$$g_e = \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2}, \quad (17)$$

donde se utilizó $\Gamma(2) = (2 - 1)! = 1$. La densidad de estados por unidad de área es

$$N(\epsilon) = \frac{g_e(\epsilon)}{L^2} = \frac{m}{2\pi \hbar^2}, \quad (18)$$

es independiente de la energía.

Ahora calculemos la densidad de estados bosónicos, $g_B(E_{\mathbf{K}})$. Para \mathbf{K} pequeña, en (7), podemos despreciar los términos de orden mayor a uno

$$\varepsilon_{\mathbf{K}} \cong \frac{2}{\pi} \hbar v_F K. \quad (19)$$

Por tanto, según (14), $C_s = 2\hbar v_F/\pi$, con $s = 1$. Así, la Ec. (15) en 2D se reduce a

$$g_B(\varepsilon_{\mathbf{K}}) = \frac{\pi L^2}{8\hbar^2 v_F^2} \varepsilon_{\mathbf{K}} \quad (20)$$

que es la densidad de estados para bosones en 2D con relación de dispersión lineal.

Para calcular el calor específico también necesitaremos las funciones de distribución fermiónica y bosónica, estas son, respectivamente,

$$f_e(\epsilon) = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon(T) - \mu_e(T))] + 1} \quad (21)$$

y

$$f_B(\varepsilon) = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu_B)] - 1} \quad (22)$$

donde μ_e es el potencial químico fermiónico y μ_B es el potencial químico bosónico.

Para toda temperatura T , $f_e(\mu_e) = 1/2$, esto es, el estado con energía μ_e tiene igual probabilidad de estar ocupado o desocupado.

Ahora fijémonos en $f_B(\varepsilon)$. Si μ_B fuera positivo el estado orbital $\varepsilon = \mu_B$ tendría un número de ocupación infinito. Entonces, para que un gas tenga un número acotado de partículas el potencial molar de Gibbs es siempre negativo. Con esto, sólo tendríamos divergencia cuando $\mu_B \rightarrow 0$. Dicho límite se tiene para $T \leq T_c$ donde hay una gran cantidad de bosones en el estado base; esto es la condensación de Bose Einstein.

2.2 Calor específico fermiónico

Lo que queremos es calcular la forma del calor específico C_V del modelo bosón-fermión descrito en el presente capítulo. Como C_V es la primera derivada de la energía interna respecto a la temperatura, entonces, de la Ec. (12) podemos decir que C_V es simplemente la suma del calor específico de un gas ideal bosónico y un fermiónico por separado. Encontremos primero C_V para los electrones.

Introduciendo $\tilde{U}_e = U_e/E_F$, $\tilde{\epsilon} \equiv \epsilon/E_F$, $\tilde{\mu}_e \equiv \mu_e/E_F$ y $\tilde{T} \equiv T/T_F$ la energía de los electrones se reescribe como

$$\tilde{U}_e = 2gE_F \int_0^\infty \frac{d\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}}{z_e^{-1} \exp[\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{T}}] + 1}. \quad (23)$$

la fugacidad z_e tiene la forma

$$z_e = \exp[\tilde{\mu}_e/\tilde{T}]. \quad (24)$$

En el Apéndice E de [29] se demuestra la siguiente integral

$$\int_0^\infty \frac{x^{\eta-1} dx}{z_e^{-1} e^x + 1} = \Gamma(\eta) f_\eta(z_e). \quad (25)$$

donde

$$f_\eta(z_e) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} \frac{z_e^l}{l^\eta}, \quad (26)$$

para el caso de (23) $\eta = 2$. El potencial químico fermiónico μ_e en 2D está dado por

$$\mu_e = \frac{1}{\beta} \ln [\exp(\beta E_F) - 1], \quad (27)$$

[28] Ec. (17). Combinando (24) y (27) se tiene

$$z_e = e^{1/\tilde{T}} - 1. \quad (28)$$

Al resolver la integral de (23) por medio de (25) y recordando que $\Gamma(2) = 1$, la energía interna del gas de electrones se reescribe como

$$\tilde{U}_e = 2g_e E_F \tilde{T}^2 f_2(z_e). \quad (29)$$

Ahora, calculemos N . Para simplificar el problema, y suponiendo que el número total de electrones no cambia con la temperatura, calculemos N en $T = 0$, el resultado va a ser válido a cualquier T . En $T = 0$ la distribución de Fermi vale uno desde cero hasta E_F y cero desde E_F hasta infinito. Como la densidad de estados es constante, resulta que

$$N = 2 \int_0^{E_F} g_e(\epsilon) d\epsilon = 2g_e E_F, \quad (30)$$

el factor 2 nos da la degeneración debida al espín. Derivando U_e con respecto a T obtenemos el calor específico de los electrones. Así, sustituyendo (30) y (28) en la derivada con respecto a T de (29) obtenemos

$$\frac{C_{Ve}}{Nk_B} = 2\tilde{T} f_2(z_e) + \frac{f_1(z_e)}{e^{-1/\tilde{T}} - 1}. \quad (31)$$

Cambiamos la variable $\tilde{T} = T/T_F$ por $t = T/T_c$. En la Ec. (9) se encuentra la forma para T_c para un sistema bosónico cuya relación de dispersión es de orden s en una dimensión espacial d . Donde n_B es la densidad de partículas bosónicas; C_s es la constante de proporcionalidad entre la energía y el vector de onda de las partículas bosónicas, para este caso $C_1 = (2/\pi)\hbar v_F$, ver Ec. (19). Sustituyendo $s = 1$ y $d = 2$ en (9) tenemos

$$T_c = \frac{4\sqrt{3}}{\pi^{3/2}} \frac{\hbar v_F}{k_B} \sqrt{n_B}. \quad (32)$$

Como $t = \tilde{T}T_F/T_c$, de la ecuación anterior tenemos

$$t = \frac{\tilde{T}E_F}{(4\sqrt{3}/\pi^{3/2})\hbar v_F \sqrt{n_B}}. \quad (33)$$

Por otra parte, dividamos (30) entre L^2 ,

$$n \equiv \frac{N}{L^2} = 2N(\epsilon)E_F, \quad (34)$$

donde $N(\epsilon) \equiv g_e/L^2$ está dada en la Ec. (18). Combinando (18) y (34) se obtiene

$$E_F = \frac{\pi\hbar^2 n}{m}. \quad (35)$$

Sustituyendo la expresión anterior en (33) obtenemos

$$\tilde{T} = \frac{4\sqrt{6}}{\pi^2} \sqrt{\frac{N_B}{N}} t. \quad (36)$$

Con esto podemos reescribir (28) como sigue

$$z_e = \exp \left[\frac{\pi^2}{4\sqrt{6N_B/N}} \frac{1}{t} \right] - 1. \quad (37)$$

Sustituyamos (36) y (37) en (31) para llegar a

$$\frac{C_{Ve}}{Nk_B} = 8\sqrt{6N_B/N} \frac{t}{\pi^2} f_2(z_e) - \exp \left[\frac{\pi^2}{4\sqrt{6N_B/N}} \frac{1}{t} \right] \frac{f_1(z_e)}{z_e}. \quad (38)$$

2.3 Calor específico bosónico

El calor específico para un gas ideal de bosones se calcula en Ref. [30]. Utilizando el hecho que la fugacidad bosónica, $z_B = \exp[\mu_B/k_B T]$, es aproximadamente la unidad para $T \leq T_c$ (ver Cap. 7 de Ref. [29]), para este intervalo de temperaturas C_{VB} está dado por

$$C_{VB} = N_B k_B \frac{(d/s)(d/s+1)g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} t^{d/s}, \quad (39)$$

donde $t \equiv T/T_c$, d la dimensión del sistema, s el orden de la relación de dispersión y $g_{d/s}(z_B)$ la función de Bose que tiene la forma

$$g_{d/s}(z_B) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z_B^l}{l^{d/s}}, \quad (40)$$

ver Apéndice E de [29]. Se puede demostrar que

$$g_{d/s}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{d/s}} \longrightarrow \infty \text{ cuando } d/s \leq 1, \quad (41)$$

y que para $d/s > 1$ $g_{d/s}(1)$ es igual a la función Zeta de Riemann representada por $\zeta(d/s)$, es decir,

$$\zeta(d/s) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{d/s}}, \quad (d/s > 1). \quad (42)$$

Como ya mencionamos, nos interesa estudiar teóricamente la superconductividad bidimensional, $d = 2$, donde los pares de Cooper sean tratados como bosones con relación de dispersión lineal, $s = 1$. Con dichos valores de d y s la ecuación (39) se reduce a

$$\frac{C_{VB}}{N_B k_B} = \frac{6\zeta(3)}{\zeta(2)} t^2 = 4.384 t^2, \quad t \leq 1, \quad (43)$$

ya que $\zeta(3) = 1.202$ y $\zeta(2) = 1.645$ (ver Apéndice D de Ref. [29]). Utilizando la idea de que el número de bosones condensados es cero en comparación con N_B para $T \geq T_c$ en la Ref. [30] se demuestra que

$$C_{VB} = N_B k_B \left[\frac{(d/s)(d/s + 1)g_{d/s+1}(z_B)}{g_{d/s}(z_B)} - \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(z_B)}{g_{d/s-1}(z_B)} \right], \quad t \geq 1. \quad (44)$$

Haciendo $d = 2$ y $s = 1$

$$\frac{C_{VB}}{N_B k_B} = \frac{6g_3(z_B)}{g_2(z_B)} - \frac{4g_2(z_B)}{g_1(z_B)}, \quad t \geq 1. \quad (45)$$

Escribamos la forma del calor específico bosónico en unidades de Nk_B a cualquier temperatura.

De (43) y (45)

$$\frac{C_{VB}}{Nk_B} = \frac{N_B}{N} \frac{C_{VB}}{N_B k_B} = \frac{N_B}{N} \times \begin{cases} 4.384 t^2 & \text{si } t \leq 1 \\ 6g_3(z_B)/g_2(z_B) - 4g_2(z_B)/g_1(z_B) & \text{si } t \geq 1, \end{cases} \quad (46)$$

donde $t = T/T_c$. La fugacidad bosónica la podemos obtener de la expresión para el número de bosones

$$N_B = \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon g_B(\varepsilon)}{z_B^{-1} \exp[\beta\varepsilon] - 1}; \quad (47)$$

en esta expresión no tomamos en cuenta el número de bosones condensados, por lo que solamente es válida para temperaturas mayores que la de transición. Insertando la densidad de estados bosónicos dada en (20) y adimensionalizando las variables de energía con E_F (47) se reescribe como

$$N_B = \frac{\pi m L^2 E_F}{16 \hbar^2} \int_0^\infty \frac{d\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}}{z_B^{-1} \exp[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}] - 1} \quad (48)$$

donde $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/E_F$ y $\tilde{T} = T/T_F$. Con el objetivo de simplificar la ecuación anterior sustituyamos la densidad de estados fermiónicos (17) en (30) para obtener la siguiente forma del número total de fermiones, N ,

$$N = \frac{m L^2 E_F}{\pi \hbar^2}; \quad (49)$$

recordemos que este es el número de electrones libres mas dos veces el número de pares de electrones. Por medio de esta expresión podemos modificar la apariencia de (48) como sigue

$$\frac{2N_B}{N} = \frac{\pi^2}{8} \int_0^\infty \frac{d\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}}{z_B^{-1} \exp[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}] - 1}. \quad (50)$$

De esta ecuación podemos calcular la fugacidad bosónica, en forma numérica, como función de la temperatura para un valor de $2N_B/N$ dado.

2.4 Calor específico total

El calor específico C_V del sistema bidimensional del gas ideal de fermiones y bosones que no interactúan entre sí es la suma de los calores específicos, por tanto de (38) y (46) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{N k_B} &= 8 \sqrt{6N_B/N} \frac{t f_2(z_e)}{\pi^2} - \exp \left[\frac{\pi^2}{4 \sqrt{6N_B/N}} \frac{1}{t} \right] \frac{f_1(z_e)}{z_e} \\ &+ \frac{N_B}{N} \times \begin{cases} 4.384 t^2 & \text{si } t \leq 1 \\ 6g_3(z_B)/g_2(z_B) - 4g_2(z_B)/g_1(z_B) & \text{si } t \geq 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (51)$$

Cuando $t \gg 1$ en (37) vemos que z_e se hace pequeña por lo que podemos despreciar los términos de (26) de orden mayor que uno, es decir, $f_n(z_e) \cong z_e$ para toda n . Algo similar pasa con la función $g_{d/s}(z_B)$. Como $z_B = \exp[\mu_B/tT_c]$ cuando $t \gg 1$ z_B se hace pequeña y de (40) vemos que $g_{d/s}(z_B) \cong z_B$ para toda d/s . Para escribir (51) en dicho límite, reemplacemos $f_1(z_e)$

y $f_2(z_e)$ por (37), así como $g_{d/s}(z_B)$ por z_B ,

$$\frac{C_V}{Nk_B} = 8\sqrt{6N_B/N} \frac{t}{\pi^2} \left(\exp \left[\frac{\pi^2}{4\sqrt{6N_B/N}} \frac{1}{t} \right] - 1 \right) - \exp \left[\frac{\pi^2}{4\sqrt{6N_B/N}} \frac{1}{t} \right] + 2N_B/N. \quad \text{para } T \gg T_c \quad (52)$$

Expandiendo, en potencias de $1/t$, hasta primer orden

$$\frac{C_V}{Nk_B} = 1 + \frac{2N_B}{N}. \quad \text{para } T \gg T_c \quad (53)$$

Cuando tenemos puros fermiones, es decir, $N_B \rightarrow 0$,

$$\frac{C_V}{Nk_B} \rightarrow 1 \quad \text{para } T \gg T_c \quad (54)$$

lo cual es la ley de Dulong-Petit que nos dice que para $t \gg 1$ $C_V/Nk_B \rightarrow d/s$ (recordemos que $d = 2$ y $s = 2$).

Cuando tenemos puros bosones, es decir, $2N_B \rightarrow N$,

$$\frac{C_V}{Nk_B} \rightarrow 2 \quad \text{para } T \gg T_c, \quad (55)$$

también se satisface la ley de Dulong-Petit, ya que en este caso $d = 2$ y $s = 1$. Este comportamiento se exhibe en las gráficas de la Figura 2. Para el caso de puros bosones $N_B = 0,5N$ el cociente C_V/Nk_B tiende a 2 para $T > T_c$. Cuando se disminuye el número de bosones $N_B = 0,05N$, es decir, al acercarnos al extremo de sólo fermiones, el cociente C_V/Nk_B tiende a 1 para $T > T_c$.

Otra cosa importante que observamos en las gráficas de la Figura 2 es que hay una cúspide en las curvas del calor específico al pasar por T_c . En gráficas experimentales del calor específico contra la temperatura para superconductores considerados por algunos autores en 2D, como por ejemplo los cupratos, aparece la cúspide al pasar por la temperatura de transición al estado superconductor (ver [32] página 113); este pico va desapareciendo al ir desapareciendo la fase superconductora, es decir, cuando disminuye el número de pares de Cooper. Para el presente trabajo dicha cúspide disminuye conforme se disminuye el número de bosones. Esto podría indicarnos que la transición superconductora es producto de una condensación a la Bose-Einstein de los pares de Cooper tratados como bosones.

Los materiales superconductores llamados cupratos, y considerados teóricamente en 2D, han alcanzado las más altas temperaturas de transición superconductora. En estos materiales

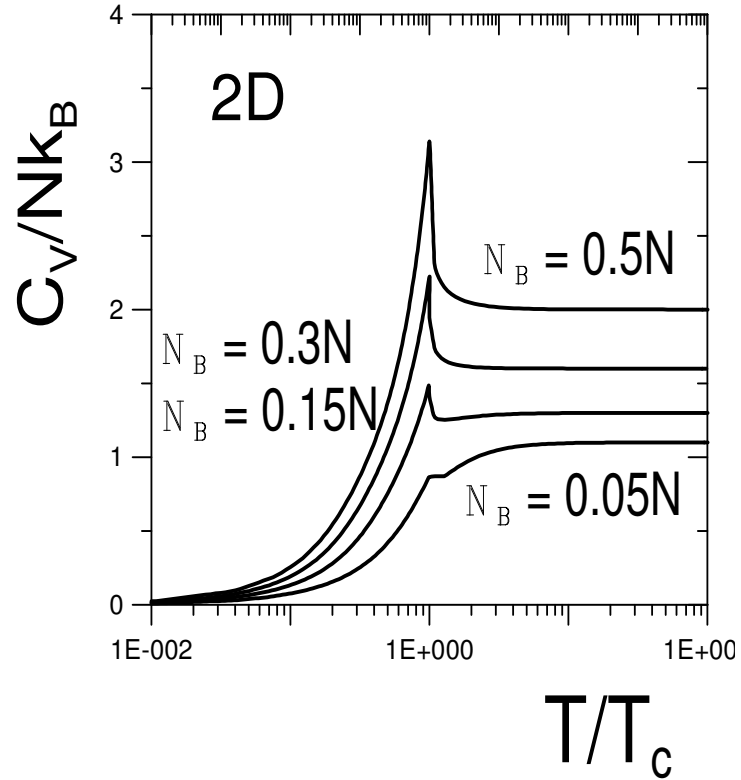


Figura 2: Calor específico de un gas compuesto con un número fijo de electrones (N) y de bosones (N_B) para distintos valores de $2N_B/N$.

se desplazan átomos con mayor aportación de electrones para la conducción por átomos con menor aportación de electrones. A este proceso se le llama dopaje. Así, se introducen huecos entre láminas de cobre-óxido. En la figura 3 se muestran tres curvas del calor específico del cuprato $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_3O_{7x}$ dividido por la temperatura como una función de la temperatura. Cada curva muestra un “pico” en su temperatura de transición. Aunque estas curvas no son del todo igual a las curvas obtenidas por el modelo descrito en el presente capítulo, Fig. 2, si hay importantes similitudes. En las dos figuras se muestra un pico en las curvas del calor específico al pasar por la temperatura de transición. En la figura 3 la curva de pico más pronunciado se obtuvo con dopaje óptimo, es decir, el cuprato se encuentra en un estado tal que puede tener más pares de Cooper. La curva con el pico más pequeño se obtuvo con el mismo cuprato mencionado anteriormente pero con un dopamiento bajo, es decir, poca posibilidad de formación de pares de Cooper. Esta es otra similitud entre las curvas de las figuras 2 y 3.

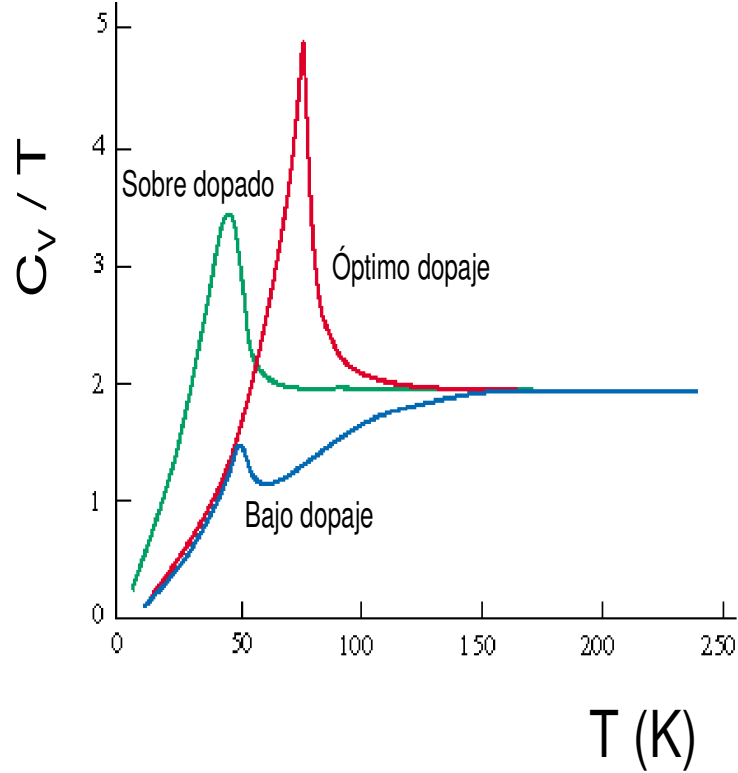


Figura 3: Calor específico dividido por la temperatura en función de la temperatura para una muestra de $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_3O_{7-x}$. La curva de menor pico representa una muestra con bajo dopamiento; la curva con el pico más pronunciado representa una muestra con dopamiento óptimo. La curva con pico intermedio se obtuvo con un sobre dopamiento [31].

En los próximos capítulos veremos a los pares de Cooper como bosones y, como ya se discutió en el Capítulo 1, los describiremos por medio de una relación de dispersión lineal.

En este capítulo se estudió la forma del calor específico de un gas ideal de fermiones y bosones sin interacción entre sí. Se encontró que dicho calor específico tiene un comportamiento similar al de un material superconductor en la temperatura de transición.

Capítulo 3

Modelo Estadístico Bosón-Fermión Ideal de la Superconductividad

3.1 Introducción

En esta sección estudiaremos un ensamble de pares de Cooper en d -dimensiones, sin interacción, en equilibrio químico y térmico con fermiones desapareados. Esta teoría recibe el nombre de Modelo Estadístico Boson-Fermión Ideal (IBFM, por sus siglas en inglés). La diferencia con el modelo estudiado en el Capítulo 2 es que aquí los fermiones se pueden aparear y desaparecer formando y destruyendo pares de Cooper, que trataremos como bosones, conforme variamos la temperatura. Por tanto, el número de bosones es dependiente de la temperatura. El modelo de interacción que forma los pares de Cooper es el propuesto por la teoría BCS

$$v_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{si } \mu(T) - \hbar\omega_D < \epsilon_{\mathbf{k}_1}, \epsilon_{\mathbf{k}_1} < \mu(T) + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (56)$$

donde $\hbar\omega_D$ es la energía de Debye. El número total de electrones N se divide en dos grupos: el número de partículas fermiónicas apareables $N_2(T)$ y el número de partículas fermiónicas no apareables $N_1(T)$. Así,

$$N = N_1(T) + N_2(T).$$

Los electrones apareables están en los estados de energía comprendidos entre las energías $\mu(T) - \hbar\omega_D$ y $\mu(T) + \hbar\omega_D$. Las energías de electrones no apareables están fuera de dicho intervalo.

Denotemos con $N_{20}(T)$, $N_{B,0}(T)$ y $N_{B,0 < \mathbf{K} < \mathbf{K}_0}(T)$ al número de fermiones desapareados pero apareables, al número de bosones en estado condensado y al número de bosones en estados excitados, respectivamente. El número de electrones apareables resulta

$$N_2(T) = N_{20}(T) + 2[N_{B,0}(T) + N_{B,0 < \mathbf{K} < \mathbf{K}_0}(T)] \quad (57)$$

donde \mathbf{K}_0 es el número de onda del par al cual se rompe el enlace.

Denotando con ϵ la variable de energía de cada estado, el número total de partículas fermiónicas apareables está dado por

$$N_2(T) = 2g(\mu) \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} d\epsilon \frac{1}{\exp[\beta\{\epsilon - \mu\}] + 1}, \quad (58)$$

estamos integrando sobre un intervalo pequeño, así, podemos tratar como constante a la densidad de estados g ; por esta razón la hemos sacado de la integral.

Para resolver la integral de (58) definamos

$$u \equiv \exp [\beta(\epsilon - \mu)] + 1 \quad (59)$$

derivando respecto a ϵ

$$du = \beta \exp [\beta(\epsilon - \mu)] d\epsilon,$$

dividiendo entre βu en ambos lados de la igualdad

$$\frac{1}{\beta} \frac{du}{u} = \left(1 - \frac{1}{\exp [\beta(\epsilon - \mu)] + 1} \right) d\epsilon,$$

Integrando y reordenando

$$\int_a^b d\epsilon \frac{1}{\exp [\beta(\epsilon - \mu)] + 1} = \int_a^b d\epsilon - \frac{1}{\beta} \int_{u(a)}^{u(b)} \frac{du}{u}.$$

Sustituyendo u por su valor dado en (59), después de integrar tenemos

$$\int_a^b d\epsilon \frac{1}{\exp [\beta\{\epsilon - \mu\}] + 1} = b - a - \frac{1}{\beta} \ln [\exp [\beta\{b - \mu\}] + 1] + \frac{1}{\beta} \ln [\exp [\beta\{a - \mu\}] + 1]. \quad (60)$$

Aplicando este resultado en (58) se obtiene

$$N_2(T) = 2g(\mu) \left[2\hbar\omega_D - \frac{1}{\beta} \ln (\exp [\beta\hbar\omega_D] + 1) + \frac{1}{\beta} \ln (\exp [-\beta\hbar\omega_D] + 1) \right]. \quad (61)$$

Reagrupando términos

$$N_2(T) = 2g(\mu)\hbar\omega_D, \quad (62)$$

es decir, el número total de fermiones apareables es independiente de la temperatura, $N_2(T) = N_2$.

Llamemos μ_2 al potencial químico del número de fermiones desapareados pero apareables N_{20} . Así,

$$N_{20}(T) = 2g(\mu) \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} d\epsilon \frac{1}{\exp [\beta\{\epsilon - \mu_2\}] + 1}. \quad (63)$$

Como los fermiones apareables pero desapareados siguen estando en el intervalo de energías que va de $\mu - \hbar\omega_D$ hasta $\mu + \hbar\omega_D$, los límites de integración y la energía en que se evalúa la

densidad de estados son los mismos que en el caso de N_2 . Obtengamos $N_{20}(T)$ con la ayuda de (60) cambiando μ por μ_2 en el integrando. Así,

$$N_{20}(T) = 2g(\mu) \left[2\hbar\omega_D - \frac{1}{\beta} \ln (\exp [\beta\{\mu + \hbar\omega_D - \mu_2\}] + 1) + \frac{1}{\beta} \ln (\exp [\beta\{\mu - \hbar\omega_D - \mu_2\}] + 1) \right]. \quad (64)$$

Colocando todos los términos en un sólo logaritmo

$$N_{20}(T) = \frac{2g(\mu)}{\beta} \ln \left[\frac{1 + \exp [-\beta\{\mu - \hbar\omega_D - \mu_2\}]}{1 + \exp [-\beta\{\mu + \hbar\omega_D - \mu_2\}]} \right]. \quad (65)$$

El número de bosones en los estados excitados está dado por

$$N_{B,0 < \mathbf{K} < \mathbf{K}_0}(T) = \sum_{\mathbf{K} > 0}^{\mathbf{K}_0} \frac{1}{\exp [\beta\{E_{\mathbf{K}}(T) - 2\mu_2\}] - 1}, \quad (66)$$

donde $E_{\mathbf{K}}(T)$ es la energía del par de fermiones.

Para obtener la siguiente ecuación, restemos en ambos miembros de (4) la cantidad $2\mu_2$, además de sumar y restar $\Delta_0(T)$ en su segundo miembro,

$$E_{\mathbf{K}}(T) - 2\mu_2 \equiv \varepsilon_{\mathbf{K}}(T) - 2[\mu_2(T) - \mu(T)] - \Delta_0(T). \quad (67)$$

Definamos el potencial químico de los bosones, $\mu_B(T)$, como

$$\mu_B(T) \equiv 2[\mu_2(T) - \mu(T)] + \Delta_0(T). \quad (68)$$

Con (67) y (68) el número de bosones en estados excitados (66) se reescribe de la siguiente manera

$$N_{B,0 < \mathbf{K} < \mathbf{K}_0}(T) = \sum_{\mathbf{K} > 0}^{\mathbf{K}_0} \frac{1}{\exp [\beta\{\varepsilon_{\mathbf{K}}(T) - \mu_B(T)\}] - 1}, \quad (69)$$

Con (62), (65) y (69) la ecuación de número (57) toma la forma

$$\begin{aligned} 2g(\mu)\hbar\omega_D &= \frac{2g(\mu)}{\beta} \ln \left(\frac{1 + \exp [-\beta\{\mu(T) - \mu_2(T) - \hbar\omega_D\}]}{1 + \exp [-\beta\{\mu(T) - \mu_2(T) + \hbar\omega_D\}]} \right) \\ &+ 2N_{B,0}(T) + 2 \sum_{\mathbf{K} > 0}^{\mathbf{K}_0} \frac{1}{\exp [\beta\{\varepsilon_{\mathbf{K}}(T) - \mu_B(T)\}] - 1} \end{aligned} \quad (70)$$

La energía libre de Helmholtz $F = U - TS$, donde U es la energía interna y S la entropía, para

la mezcla ideal binaria bosón-fermión es,

$$\begin{aligned}
F_2 = & 2 \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} d\epsilon g_e(\epsilon) \{f_e(\epsilon)\epsilon + k_B T [f_e(\epsilon) \ln f_e(\epsilon) + \{1 - f_e(\epsilon)\} \ln \{1 - f_e(\epsilon)\}]\} \\
& [2\mu(T) - \Delta_0(T)] N_{B,0}(T) + \sum_{\mathbf{K} > 0}^{\mathbf{K}_0} \{[2\mu(T) - \Delta_{\mathbf{K}}(T)] N_{B,\mathbf{K}}(T) \\
& + k_B T [N_{B,\mathbf{K}}(T) \ln N_{B,\mathbf{K}}(T) - \{1 + N_{B,\mathbf{K}}(T)\} \ln \{1 + N_{B,\mathbf{K}}(T)\}]\},
\end{aligned}$$

ver Ec. (14) de [33]. El término de la integral es la contribución de los fermiones desapareados pero apareables por eso es que sus límites de integración son los extremos del intervalo de energías donde hay interacción BCS. En este término $f_e(\epsilon)$ es el promedio del número de fermiones desapareados pero apareables con energía ϵ ; el factor 2 de la integral nos da la degeneración de espín fermiónico. El segundo término da la energía libre de los bosones con momento de centro de masa cero $\mathbf{K} = 0$ para los cuales su entropía es despreciable en el límite termodinámico; aquí $N_{B,0}(T)$ es el número de bosones con $\mathbf{K} = 0$ a la temperatura T . El término de la sumatoria representa la energía libre de los bosones con $\mathbf{K} \neq 0$.

De la energía libre F_2 obtenemos el gran potencial Ω_2 para la mezcla de fermiones desapareados pero apareables y bosones,

$$\Omega_2 = F_2 - \mu_2 N_2.$$

Minimizando Ω_2 con respecto a $N_{B,0}(T)$ [33] se obtiene

$$\mu(T) - \mu_2(T) = \Delta_0(T)/2 \quad (T < T_c), \quad (71)$$

relación válida sólo en el intervalo de temperatura dado ya que para otro caso $N_{B,0}(T)$ es despreciable. Por definición T_c es la temperatura bajo la cual empieza a acumularse un gran número de bosones en el nivel de mínima energía. Ésto equivale, según la función de distribución bosónica (22), a tener $\mu_B(T_c) \cong 0$. Por medio de este razonamiento y con la Ec. (68) la relación (71) en $T = T_c$ es

$$\mu(T_c) - \mu_2(T_c) \cong \Delta_0(T_c)/2. \quad (72)$$

La ecuación de número para $T < T_c$ se obtiene sustituyendo (71) en (70). Así, después de dividir entre $2g(\mu)\hbar\omega_D$, se obtiene

$$\begin{aligned}
1 = & \frac{k_B T}{\hbar\omega_D} \ln \left(\frac{1 + \exp[-\beta\{\Delta_0(T)/2 - \hbar\omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta\{\Delta_0(T)/2 + \hbar\omega_D\}]} \right) \\
& + \frac{1}{g(\mu)\hbar\omega_D} \left[N_{B,0}(T) + \sum_{\mathbf{K} > 0}^{\mathbf{K}_0} \frac{1}{\exp[\beta\{\varepsilon_{\mathbf{K}}(T) - \mu_B(T)\}] - 1} \right] \quad (T < T_c). \quad (73)
\end{aligned}$$

3.2 IBFM en 2D

Como ya mencionemos antes, nos interesa investigar teóricamente la superconductividad de “alta temperatura” cuyos materiales son considerados en 2D. Por tal motivo, en esta sección restringiremos a 2D la teoría IBFM.

Para $T = T_c$ el número de bosones condensados es despreciable comparado con el número de bosones excitados y $\mu_B(T_c) = 2[\mu(T_c) - \mu_2(T_c)] - \Delta_0(T_c) \cong 0$, ver Ec. (72). Así, la ecuación de número (73) en dicha temperatura es

$$1 = \frac{k_B T_c}{\hbar \omega_D} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar \omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar \omega_D\}]} \right] + \frac{1}{g_e \hbar \omega_D} \frac{L^2}{2\pi} \int_0^{K_0(T_c)} dK \frac{K}{\exp[\beta_c \varepsilon] - 1}. \quad (74)$$

Para transformar la sumatoria bosónica en integral

$$\sum_{\mathbf{K}} \rightarrow \int g_B(K) dK. \quad (75)$$

se utilizó de la densidad de estados bosónica $g_B(K) = (L^2/2\pi)K$. En (74) hemos escrito g_e en lugar de $g_e(\mu)$ ya que en 2D la densidad de estados fermiónicos es constante, ver Ec. (17).

Para cambiar la variable de integración K de (74) por la energía bosónica ε necesitamos la relación de dispersión para \mathbf{K} pequeña que está dada por (7), que a primer orden en \mathbf{K} es

$$\varepsilon_{\mathbf{K}} = \Delta_0(T) - \Delta_{\mathbf{K}}(T) = \frac{2}{\pi} \hbar v_F K, \quad (76)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi definida a través de la energía de Fermi $E_F \equiv \hbar^2 k_F^2/2m = \frac{1}{2} m v_F^2$. Utilizando (76) la Ec. (74) se reescribe como

$$1 = \frac{k_B T_c}{\hbar \omega_D} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar \omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar \omega_D\}]} \right] + \frac{1}{g_e \hbar \omega_D} \frac{L^2}{2\pi} \left(\frac{\pi}{2\hbar v_F} \right)^2 \int_0^{\frac{2}{\pi} \hbar v_F K_0} d\varepsilon \frac{\varepsilon}{\exp[\beta_c \varepsilon] - 1}. \quad (77)$$

Utilizando (17) obtenemos la siguiente relación

$$\frac{1}{g_e \hbar \omega_D} \frac{L^2}{2\pi} \left(\frac{\pi}{2\hbar v_F} \right)^2 = \frac{\pi^2}{8\hbar \omega_D E_F}. \quad (78)$$

Por otro lado, como K_0 es la K donde se rompe el enlace entre fermiones $\Delta_{\mathbf{K}_0} = 0$ de (76) se obtiene

$$\Delta_0(T) = \frac{2}{\pi} \hbar v_F K_0. \quad (79)$$

Con estas dos últimas ecuaciones (77) se simplifica como sigue

$$1 = \frac{k_B T_c}{\hbar \omega_D} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar \omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar \omega_D\}]} \right] + \frac{\pi^2}{8 \hbar \omega_D E_F} \int_0^{\Delta_0(T_c)} d\varepsilon \frac{\varepsilon}{\exp[\beta_c \varepsilon] - 1}. \quad (80)$$

y en unidades de E_F ,

$$1 = \frac{\tilde{T}_c}{\nu} \ln \left[\frac{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 - \nu\}/\tilde{T}_c \right]}{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 + \nu\}/\tilde{T}_c \right]} \right] + \frac{\pi^2}{8\nu} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)} d\tilde{\varepsilon} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\exp \left[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c \right] - 1}; \quad (81)$$

donde la tilde significa, para el caso de energía, que la cantidad está dividida entre E_F o entre T_F , para el caso de temperaturas; $\nu = \hbar \omega_D / E_F$.

La ecuación de eigenvalores para un par de fermiones con $\mathbf{K} = 0$ y temperatura T inmersos en $N - 2$ fermiones dentro de la franja de energía donde se enlazan electrones por medio del potencial de interacción (56) está dada por la Ec. (27) de [33]. Aquí la escribimos en $T = T_c$ y en unidades de E_F

$$1 = \lambda \int_0^\nu d\tilde{\xi} \left(\exp \left[-\tilde{\xi}/\tilde{T}_c \right] + 1 \right)^{-2} [2\tilde{\xi} + \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)]^{-1}, \quad (82)$$

con $\tilde{\xi} = \tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu}(T)$. Para que el segundo miembro no diverja cuando $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)$ tienda a cero

$$\lambda \ll 1 \Leftrightarrow \Delta_0(T_c) \ll 1. \quad (83)$$

De (81) y (82) se obtiene la curva de \tilde{T}_c vs. ν que se muestra en la Figura 4 marcada con $C_1 = (2/\pi)\hbar v_F$. En esta gráfica observamos que la temperatura crece con ν . Como $\nu = \hbar \omega_D / E_F$ nos da el límite de la energía fonónica y el mecanismo de formación de bosones es el intercambio fonónica entre electrones, entonces a mayor ν mayor probabilidad de formación de pares y a mayor número de pares mayor temperatura de transición, ver Ec. (9). La Fig. 4 también nos muestra que nuestro modelo predice temperaturas de transición inferiores a las predichas por el modelo de la condensación de Bose Einstein, donde se consideran todos los electrones apareados (curva etiquetada por “Irrompibles”). Sin embargo, T_c es mayor que el obtenido por BCS. Nuestros valores están muy cerca del valor experimental de los superconductores cupratos, lo que nos dice que nuestro modelo es una buena aproximación en 2D para este tipo de materiales.

Averiguemos el comportamiento de T_c en acoplamiento débil, $\lambda \ll 1$, lo cual, según (83), es equivalente a tener $\Delta_0(T_c) \ll 1$. Primero desarrollemos en serie de Taylor el logaritmo de

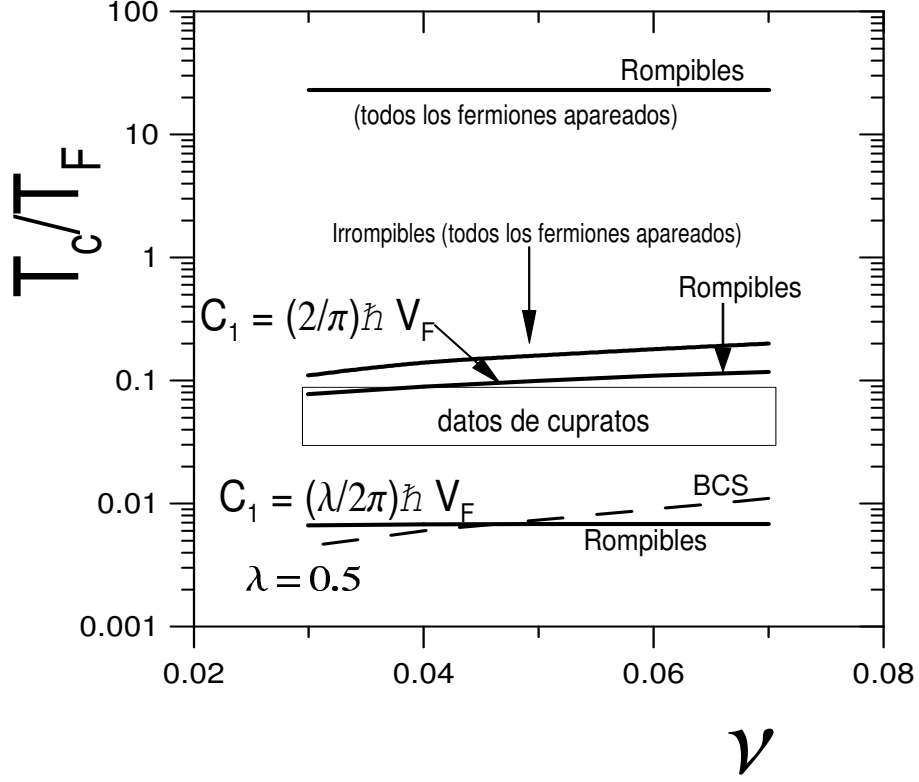


Figura 4: T_c/T_F como función de ν en 2D por medio de la teoría IBFM para $C_1 = (2/\pi)\hbar v_F$ y $C_1 = (\lambda/2\pi)\hbar v_F$, las otras curvas nos sirven para comparar.

(81) con respecto a $\Delta_0(T_c)/2\hbar\omega_D$,

$$\ln \left[\frac{1 + \exp \left[-\nu/\tilde{T}_c \{ \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2\nu - 1 \} \right]}{1 + \exp \left[-\nu/\tilde{T}_c \{ \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2\nu + 1 \} \right]} \right] \cong \ln \left[\frac{1 + \exp \left[\nu/\tilde{T}_c \right]}{1 + \exp \left[-\nu/\tilde{T}_c \right]} \right] + \frac{1 - \exp \left[\nu/\tilde{T}_c \right]}{1 + \exp \left[\nu/\tilde{T}_c \right]} \frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{2\nu} + O \left[\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{2\nu} \right]^3. \quad (84)$$

Consideremos la siguiente relación trivial,

$$\ln \left[\frac{1 + e^a}{1 + e^{-a}} \right] = \ln \left[\frac{e^a(e^{-a} + 1)}{1 + e^{-a}} \right] = a. \quad (85)$$

Haciendo $a = \nu/\tilde{T}_c$ en (85) simplifiquemos el primer término de la Ec. (84),

$$\ln \left[\frac{1 + \exp \left[-\nu/\tilde{T}_c \{ \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2\nu - 1 \} \right]}{1 + \exp \left[-\nu/\tilde{T}_c \{ \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2\nu + 1 \} \right]} \right] \cong \frac{\nu}{\tilde{T}_c} + \frac{1 - \exp \left[\nu/\tilde{T}_c \right]}{1 + \exp \left[\nu/\tilde{T}_c \right]} \frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{2\nu} + O \left[\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{2\nu} \right]^2. \quad (86)$$

Tomando (86) sólo hasta el grado uno en $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)$, la Ec. (81) se transforma en

$$\tilde{T}_c \frac{\exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] - 1}{\exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] + 1} \frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{2\nu} = \frac{\pi^2}{8} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)} d\tilde{\varepsilon} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\exp\left[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c\right] - 1}. \quad (87)$$

Definamos

$$I_{2D}(y) \equiv \frac{1}{y} \int_0^y dx \frac{x}{e^x - 1}. \quad (88)$$

La gráfica de esta función se encuentra en la Figura 5. Veamos que $0 < I_{2D}(y) \leq 1$.

En (87) hagamos el cambio de variable $x = \tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c$ y reordenemos factores para llegar a

$$\tanh \frac{\nu}{2\tilde{T}_c} = \frac{\exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] - 1}{\exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] + 1} = \frac{\pi^2 \nu}{4} I_{2D}(y). \quad (89)$$

donde $y \equiv \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c$.

Si $\tilde{T}_c \rightarrow 0$ cuando $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0$, el primer miembro de (89) tiende a la unidad y como $0 < I_{2D}(y) \leq 1$ (ver la Figura 5), entonces,

$$\frac{4}{\pi^2} \cong 0.405 \leq \nu, \quad \tilde{T}_c \rightarrow 0.$$

Experimentalmente $\nu \sim 10^{-2}$, es decir, en el límite $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0$ debemos tener $\tilde{T}_c \neq 0$.

Por medio del teorema de Taylor podemos obtener la expansión

$$\frac{x}{e^x - 1} = 1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} - \frac{x^4}{720} + O(x)^5; \quad (90)$$

este desarrollo es válido cuando $x = \tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c < 1$, y el valor más grande que nos interesa es el límite superior de la integral $I_{2D}(y)$ que es $x = y = \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c$. Éste es menor que uno (se acaba de demostrar que $\tilde{T}_c \neq 0$ cuando $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0$). Integrando término a término la relación (90) y sustituyendo en la Ec. (89) obtenemos

$$\tanh \frac{\nu}{2\tilde{T}_c} = \frac{\pi^2 \nu}{4} \left\{ 1 - \frac{1}{4} \frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} + \frac{1}{36} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^2 - \frac{1}{3600} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^4 + O \left[\left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^5 \right] \right\}. \quad (91)$$

Teniendo presente que cuando $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0$ la temperatura de transición es distinta de cero, podemos reducir la ecuación anterior a

$$\tanh \frac{\nu}{2\tilde{T}_c} = \frac{\pi^2}{4} \nu. \quad (92)$$

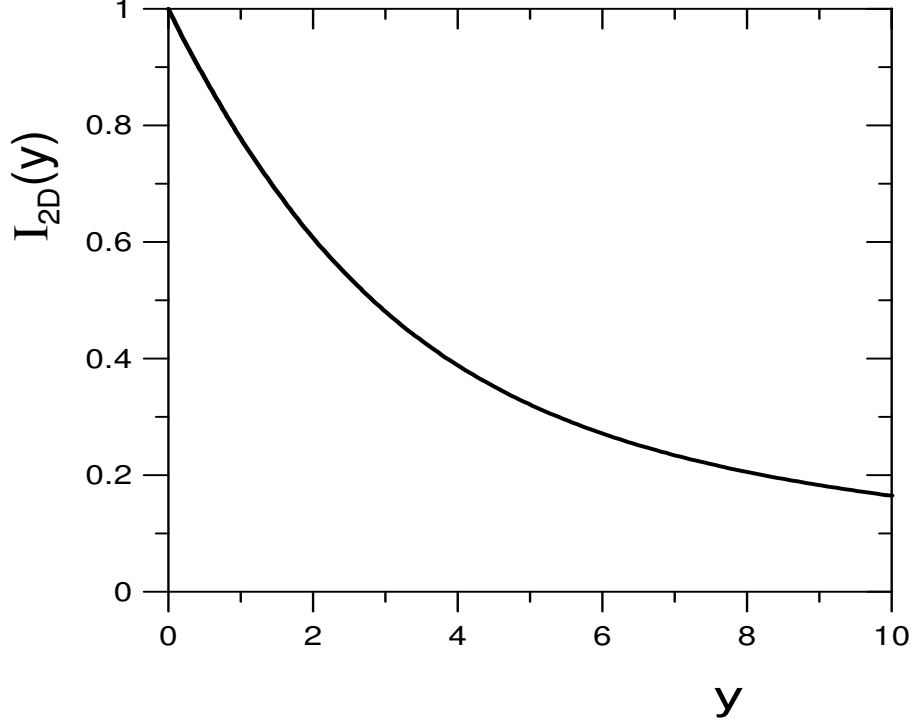


Figura 5: La función $I_{2D}(y)$ para toda $y \equiv \Delta_0(T_c)/k_B T_c$ es menor o igual a la unidad.

Despejando \tilde{T}_c

$$\tilde{T}_c = \frac{\nu}{2 \tanh^{-1} \frac{\pi^2}{4} \nu} \quad \text{para} \quad \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0, \quad (93)$$

cuando ν se hace cero la temperatura de transición al estado condensado también se hace cero. Esto quiere decir que si no hay fonones no hay condensación a la Bose-Einstein.

Ahora analicemos la ecuación desde el parámetro $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)$. Si $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0$ y, por ejemplo, $\nu = 0.04$, se espera que la temperatura de transición sea cero ya que si no hay acoplamiento entre fermiones tampoco puede haber transición de fase, aún cuando hay fonones. Para este caso, según (93), tenemos $T_c \cong 0.202 T_F$, no se logra alcanzar el cero.

Para mejorar nuestros resultados veamos lo que pasa cuando usamos el término lineal de la energía para bosones (par de electrones) obtenida con la ecuación de la función de onda que Bethe-Salpeter construyó tomando en cuenta pares de Cooper de electrones y pares de Cooper de huecos, Ec. (5) de [7]. Nuestra nueva relación de dispersión es

$$\varepsilon_{\mathbf{K}} = \frac{\lambda}{2\pi} \hbar v_F K. \quad (94)$$

Para este caso la ecuación de número en forma análoga a (80) es

$$1 = k_B T_c \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar\omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar\omega_D\}]} \right] + \frac{1}{g} \frac{L^2}{2\pi} \left(\frac{2\pi}{\lambda \hbar v_F} \right)^2 \int_0^{\Delta_0(T_c)} d\varepsilon \frac{\varepsilon}{\exp[\beta_c \varepsilon] - 1}. \quad (95)$$

Con la ayuda de (17) reduzcamos el coeficiente de la integral, a la vez reescribamos la ecuación en unidades de E_F ,

$$1 = \frac{\tilde{T}_c}{\nu} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 - \nu\}/\tilde{T}_c]}{1 + \exp[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 + \nu\}/\tilde{T}_c]} \right] + \frac{2\pi^2}{\lambda^2 \nu} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)} d\tilde{\varepsilon} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\exp[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c] - 1}. \quad (96)$$

Con este resultado y (82) podemos encontrar numéricamente T_c/T_F como función de ν , la curva resultante se muestra en la Figura 4 marcada con $C_1 = (\lambda/2\pi)\hbar v_F$ la cual predice T_c 's muy parecidas a las predichas por BCS, cuya curva está dada en trazas. En dicha figura se aprecia que cuando tomamos una relación de dispersión que tome en cuenta la existencia de huecos, como lo es la relación de dispersión de Bethe-Salpeter, obtenemos temperaturas de transición más pequeñas y más cercanas a BCS que con la relación de dispersión anterior. Aquí también observamos que la temperatura de transición aumenta cuando aumenta el parámetro $\nu = \hbar\omega_D/E_F$, lo cual nos dice que entre más modos de oscilación, obtendremos condensación de Bose a temperaturas más altas.

También en la Figura 4 vemos la curva para la mezcla bosón-fermión con bosones rompibles pero considerando todos los fermiones apareados. Notemos que para este caso la temperatura es muy grande y está muy alejada de BCS.

Para ver el límite de acoplamiento débil, lo cual, como ya habíamos mencionado, es equivalente a $\Delta_0(T_c) \ll 1$, tomemos (86) sólo hasta el grado uno. Así, la Ec. (96) se transforma en

$$\tilde{T}_c \frac{\exp[\nu/\tilde{T}_c] - 1}{\exp[\nu/\tilde{T}_c] + 1} \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) = \frac{4\pi^2 \nu}{\lambda^2} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)} d\tilde{\varepsilon} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\exp[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c] - 1}. \quad (97)$$

Con el cambio de variable $x = \tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c$ la ecuación anterior se transforma en

$$\frac{\exp[\nu/\tilde{T}_c] - 1}{\exp[\nu/\tilde{T}_c] + 1} = \frac{4\pi^2 \nu}{\lambda^2} \frac{\tilde{T}_c}{\tilde{\Delta}_0(T_c)} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c} dx \frac{x}{e^x - 1}. \quad (98)$$

Recordemos que $\lambda \ll 1$ implica $\Delta_0(T_c) \ll 1$. Como una aproximación, consideremos $\lambda \approx \Delta_0(T_c)$ para $\lambda < 10^{-2}$. Introduciendo esta idea en la Ec. (98) se obtiene la gráfica de la Figura 6, donde se observa que cuando $\lambda \rightarrow 0$ también $\tilde{T}_c \rightarrow 0$.

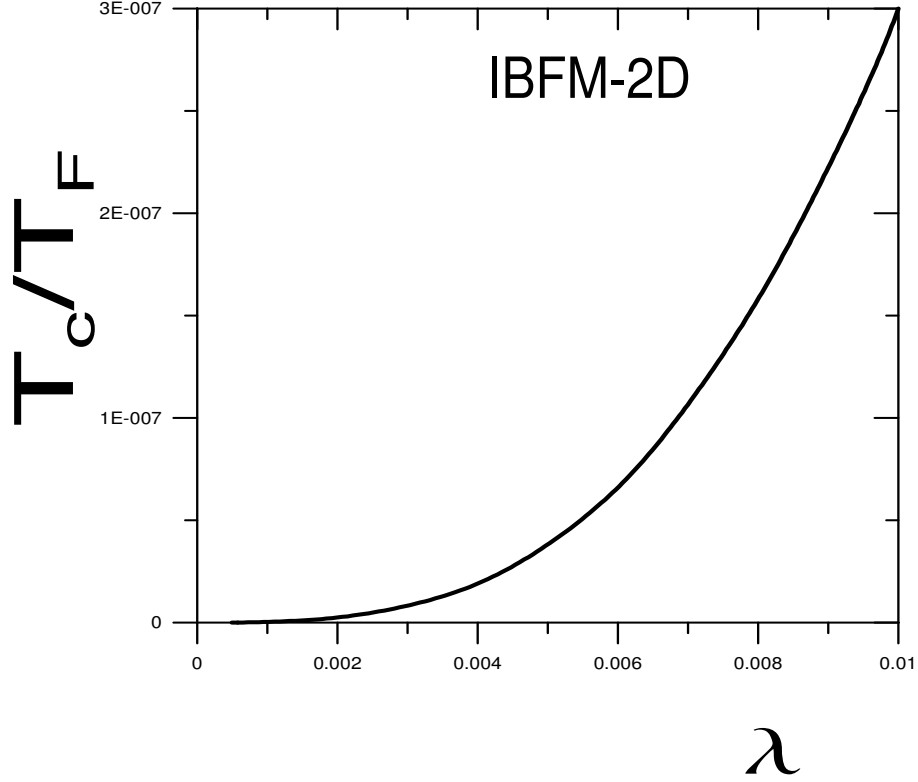


Figura 6: T_c/T_F vs. λ con $C_1 = (\lambda/2\pi)\hbar v_F$ en 2D. $\nu = 0.05$.

Combinando (90) y (98), sin la aproximación $\lambda \approx \Delta_0(T_c)$ que sólo se tomó para darnos una idea de la forma T_c/T_F vs. λ , y después de integrar, se obtiene

$$\begin{aligned} & \frac{\exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] - 1}{\exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] + 1} \\ &= \frac{4\pi^2\nu}{\lambda^2} \left\{ 1 - \frac{1}{4} \frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} + \frac{1}{36} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^2 - \frac{1}{3600} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^4 + O\left[\left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^5 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (99)$$

Analícemos lo que pasa para $\tilde{\Delta}_0(T_c) \rightarrow 0$. Suponiendo que para este caso $T_c \neq 0$ la Ec. (99) nos lleva a lo siguiente

$$\frac{\exp[\hbar\omega_D/k_B T_c] - 1}{\exp[\hbar\omega_D/k_B T_c] + 1} = \frac{4\pi^2\nu}{\lambda^2} \quad (100)$$

el primer miembro es menor o igual a la unidad y el segundo diverge. Por lo tanto, podemos concluir que para $\lambda \rightarrow 0$, tenemos, $T_c \rightarrow 0$, lo cual concuerda con lo esperado y que mostramos

en la Figura 5. Recordemos que para llegar a esto se necesitó introducir en la relación de dispersión el parámetro de acoplamiento fermiónico, lo cual viene de un análisis fermión-bosón donde se toman en cuenta, tanto los electrones como los huecos. En los siguientes capítulos se estudia un modelo que toma en cuenta los huecos.

3.3 IBFM en 3D

Veamos el caso 3D. La relación de dispersión que utilizaremos fue estudiada en [10] Pág. 33 y tiene la forma

$$\varepsilon_{\mathbf{K}} \equiv \Delta_0(T) - \Delta_{\mathbf{K}}(T) = \frac{1}{2}\hbar v_F K. \quad (101)$$

Con el auxilio de la transformación (75), donde para 3D $g(K) = (L^3/2\pi^2)K^2$, la Ec. (73) en $T = T_c$ se escribe como

$$1 = \frac{k_B T_c}{\hbar \omega_D} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar \omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar \omega_D\}]} \right] + \frac{1}{g(\mu)\hbar \omega_D} \frac{L^3}{2\pi^2} \int_0^{K_0(T_c)} dK \frac{K^2}{\exp[\beta_c \varepsilon_{\mathbf{K}}] - 1} \quad (102)$$

ya que $N_{B,0}(T_c)$ y $\mu_B(T_c)$ son cero.

Hagamos el cambio de variable $\varepsilon = \frac{1}{2}\hbar v_F K$. Como en K_0 se pierde el amarre, entonces, $\Delta_{\mathbf{K}_0}(T) = 0$. En consecuencia, según (101) y el presente cambio de variable, el límite superior de integración en (102) es $\varepsilon_{\mathbf{K}_0} = \Delta_0(T)$. Con esto, la ecuación de número (102) se reescribe como

$$1 = \frac{k_B T_c}{\hbar \omega_D} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar \omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar \omega_D\}]} \right] + \frac{1}{g(\mu)\hbar \omega_D} \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar v_F} \right)^3 \int_0^{\Delta_0(T_c)} d\varepsilon \frac{[\varepsilon]^2}{\exp[\beta_c \varepsilon] - 1}. \quad (103)$$

Considerando la relación de dispersión cuadrática dada en (16), podemos obtener la densidad de estados $g(\varepsilon)$ haciendo $s = 2$, $C_s = \hbar^2/2m$ y $d = 3$ en (15),

$$g(\varepsilon) = \frac{L^3 m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon}, \quad (104)$$

para llegar a este resultado se utilizó $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$. Con esta expresión de la densidad de estados fermiónicos la Ec. (103) se ve como sigue

$$1 = \frac{k_B T_c}{\hbar \omega_D} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar \omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar \omega_D\}]} \right] + \frac{2}{\sqrt{\mu}\hbar \omega_D E_F^{3/2}} \int_0^{\Delta_0(T_c)} d\varepsilon \frac{[\varepsilon]^2}{\exp[\beta_c \varepsilon] - 1}. \quad (105)$$

Es conveniente escribir la ecuación de número en unidades de la energía de Fermi E_F

$$1 = \frac{\tilde{T}_c}{\nu} \ln \left[\frac{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 - \nu\}/\tilde{T}_c \right]}{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 + \nu\}/\tilde{T}_c \right]} \right] + \frac{2}{\sqrt{\tilde{\mu}\nu}} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)} d\tilde{\varepsilon} \frac{[\tilde{\varepsilon}]^2}{\exp \left[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c \right] - 1}, \quad (106)$$

donde las variables con tilde significan que están divididas por E_F .

Para que a partir de la Ec. (106) encontremos T_c/T_F necesitamos la Ec. (82) para obtener $\tilde{\Delta}_0$. Sólo falta encontrar una expresión para $\tilde{\mu}$.

La forma del potencial químico fermiónico se obtiene de la expresión para el número total de partículas fermiónicas. Ésta la obtenemos integrando de cero a infinito de la distribución de Fermi, Ec. (21),

$$N_f = 2 \int_0^\infty d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{\exp(\beta\{\epsilon - \mu\}) + 1}. \quad (107)$$

La densidad de estados $g(\epsilon)$ está descrita por la Ec. (104), la cual se obtuvo a partir de la relación de dispersión cuadrática, Ec. (16). Así, (107) resulta

$$N_f = \frac{2^{1/2} L^3 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{\exp(\beta\{\epsilon - \mu\}) + 1} \quad (108)$$

En $T=0$ la exponencial de la distribución de estados fermiónicos es cero si $\epsilon < \mu$ e infinito si $\epsilon > \mu$. Para el segundo caso (108) resulta

$$N_f = \frac{2^{1/2} L^3 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} = \frac{2}{3} \frac{2^{1/2} L^3 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E_F^{3/2}. \quad (109)$$

Como el número total de fermiones no cambia con la temperatura, podemos igualar (108) y (109) para obtener

$$\frac{2}{3} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon}^{1/2}}{e^{\frac{\tilde{\epsilon}-\tilde{\mu}}{\tilde{T}}} + 1}, \quad (110)$$

donde las cantidades con tilde significan que están divididas entre E_F ; en el caso de la temperatura tenemos $\tilde{T} = T/T_F$. La forma de μ en función de T/T_F , según (110), se muestra en la Figura 7.

Ahora si podemos encontrar T_c/T_F en función de ν a partir de la Ec. (106) con la ayuda de (82) para obtener $\tilde{\Delta}_0$ y con la ayuda de (110) para obtener $\tilde{\mu}$. El resultado se muestra en la Figura 8.

Como en el caso de 2D, de (82) vemos que acoplamiento pequeño implica $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)$ pequeña, y podemos sustituir (86) en (106) sólo hasta primer orden en $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)$ y obtener

$$\frac{\tilde{T}_c}{\nu} \frac{\exp \left[\nu/\tilde{T}_c \right] - 1}{\exp \left[\nu/\tilde{T}_c \right] + 1} \frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{2\nu} = \frac{2}{\sqrt{\tilde{\mu}\nu}} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)} d\tilde{\varepsilon} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\exp \left[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c \right] - 1}, \quad (111)$$

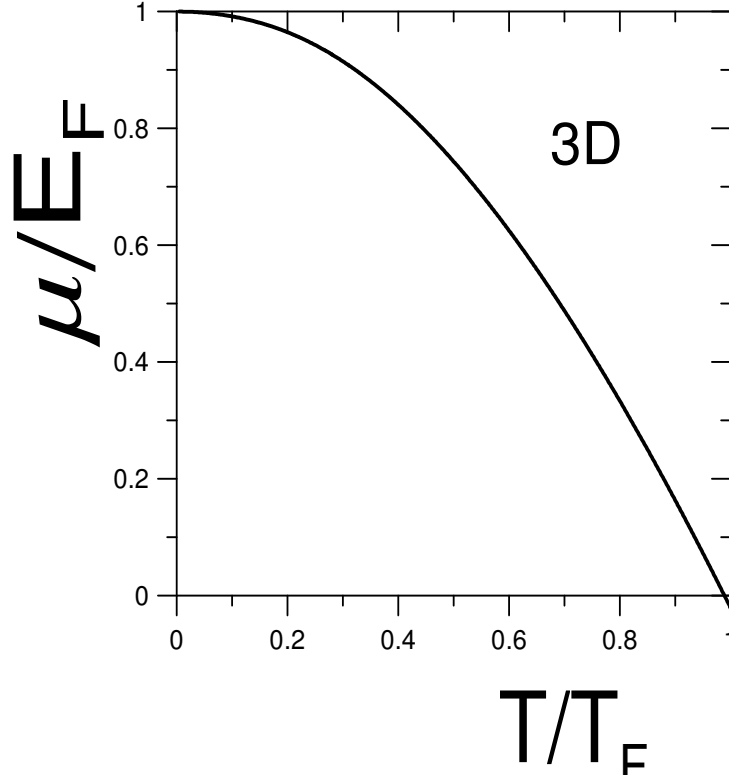


Figura 7: Potencial químico fermiónico μ en 3D como una función de la temperatura T/T_F . Notemos que $\mu = 0$ cuando $T/T_F = 0.988$.

Ahora hagamos el cambio de variable $x = \varepsilon/\tilde{T}_c$ para obtener,

$$\frac{\sqrt{\tilde{\mu}}}{4\nu} \frac{1 - \exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] - 1}{\tilde{T}_c \exp\left[\nu/\tilde{T}_c\right] + 1} = I_{3D}(y). \quad (112)$$

donde hemos definido

$$y \equiv \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c$$

y

$$I_{3D}(y) \equiv \frac{1}{y} \int_0^y dx \frac{x^2}{e^x - 1}. \quad (113)$$

Debemos notar que en (112) T_c no puede ser cero. Cuando $T_c = 0$ tenemos $\tilde{\mu} = 1$, ver Figura 7, y en consecuencia el primer miembro de (112) divergería. Sin embargo, como se muestra en la Figura 9, el segundo miembro no diverge sea cual sea el valor de y .

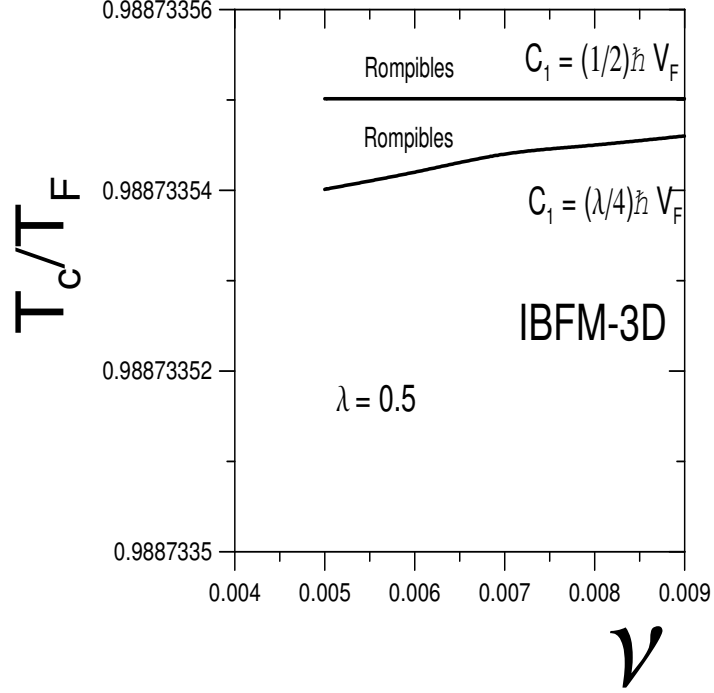


Figura 8: Temperatura de transición en unidades de T_F como una función de $\nu = \hbar\omega_D/E_F$ para los casos $C_1 = (1/2)\hbar v_F$ y $C_1 = (\lambda/4)\hbar v_F$ en 3D.

Del teorema de Taylor obtenemos la siguiente expansión

$$\frac{x^2}{e^x - 1} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{12} - \frac{x^5}{720} + \frac{x^7}{30240} - \frac{x^9}{1209600} + O[x]^{10}, \quad (114)$$

que al integrarla término a término y sustituirla en (112) resulta

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{\tilde{\mu}}}{4\nu} \frac{1}{\tilde{T}_c} \frac{\exp[\nu/\tilde{T}_c] - 1}{\exp[\nu/\tilde{T}_c] + 1} &= \frac{1}{2} \frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} - \frac{1}{6} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^2 + \frac{1}{48} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^3 \\ &- \frac{1}{4320} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^5 + \frac{1}{241920} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^7 - \frac{1}{12096000} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right)^9 + O \left[\frac{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)}{\tilde{T}_c} \right]^{10} \end{aligned} \quad (115)$$

Como $\tilde{T}_c \neq 0$ y estamos suponiendo $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \ll 1$, la serie anterior se puede aproximar a su primer orden y reducirse a

$$\frac{\sqrt{\tilde{\mu}}}{2\nu} \frac{\exp[\nu/\tilde{T}_c] - 1}{\exp[\nu/\tilde{T}_c] + 1} = \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c). \quad (116)$$

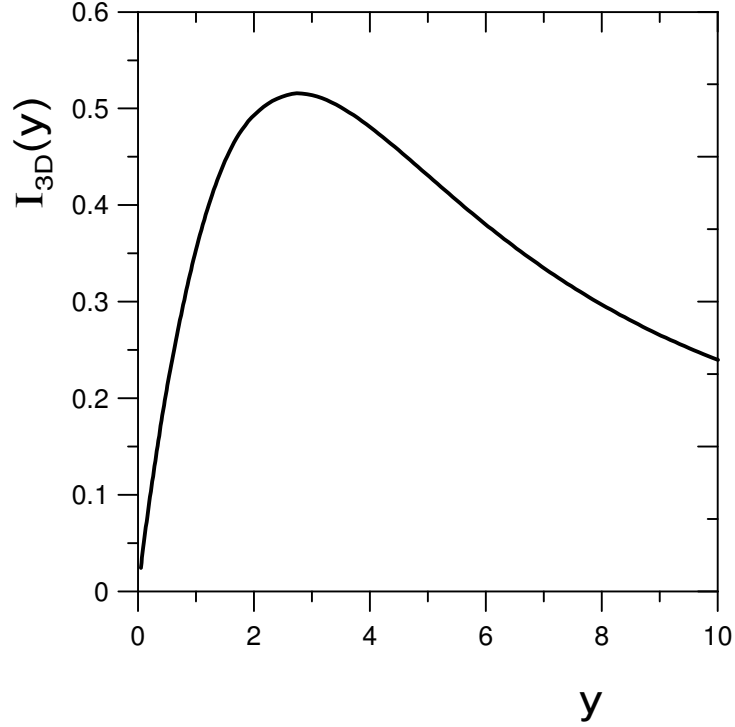


Figura 9: Forma gráfica de $I_{3D}(y)$.

Haciendo $\tilde{T}_c = 0.988$ en (116) se tiene $\Delta_0(T_c) = 0$. Esto por que en $\tilde{T}_c = 0.988$ el potencial químico es cero, ver Figura 7. Llegamos al mismo conflicto del caso 2D cuando se toma la relación de dispersión sin parámetro de acoplamiento. ¡Tenemos un estado condensado de bosones sin bosones!

Introduzcamos la relación de dispersión lineal de Bethe-Salpeter, Ec. (70) de [34]

$$\varepsilon = \Delta_0(T) - \Delta_{\mathbf{K}}(T) = \frac{\lambda}{4} \hbar v_F K. \quad (117)$$

Con ésta la Ec. (103) es

$$1 = \frac{k_B T_c}{\hbar \omega_D} \ln \left[\frac{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 - \hbar \omega_D\}]}{1 + \exp[-\beta_c \{\Delta_0(T_c)/2 + \hbar \omega_D\}]} \right] + \frac{1}{g(\mu) \hbar \omega_D} \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{4}{\lambda \hbar v_F} \right)^3 \int_0^{\Delta_0(T_c)} d\varepsilon \frac{\varepsilon^2}{\exp[\beta_c \varepsilon] - 1} \quad (118)$$

con (104), el coeficiente de la integral, después de adimensionalizar con E_F , se reduce a

$$1 = \frac{\tilde{T}_c}{\nu} \ln \left[\frac{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 - \nu\}/\tilde{T}_c \right]}{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 + \nu\}/\tilde{T}_c \right]} \right] + \frac{16}{\lambda^3 \sqrt{\tilde{\mu}} \nu} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)} d\tilde{\varepsilon} \frac{[\tilde{\varepsilon}]^2}{\exp \left[\tilde{\varepsilon}/\tilde{T}_c \right] - 1}. \quad (119)$$

Podemos obtener T_c/T_F de esta ecuación si nos auxiliamos de (82), para obtener $\tilde{\Delta}_0$, y de (110), para obtener $\tilde{\mu}$. La Figura 8 exhibe el comportamiento de T_c/T_F como una función de ν . Al igual que en 2D con la relación de dispersión de Bethe-Salpeter obtenemos temperaturas de transición más pequeñas, aunque todavía muy grandes, del orden de la temperatura de Fermi la cual es típicamente de 10^5 K (ver página 8 de [32]).

Investiguemos lo que pasa en este caso cuando $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \ll 1$. Haciendo $x = \varepsilon/\tilde{T}_c$ la Ec. (119) se reescribe como

$$1 = \frac{\tilde{T}_c}{\nu} \ln \left[\frac{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 - \nu\}/\tilde{T}_c \right]}{1 + \exp \left[-\{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/2 + \nu\}/\tilde{T}_c \right]} \right] + \frac{16\tilde{T}_c^3}{\lambda^3 \sqrt{\tilde{\mu}} \nu} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c} dx \frac{x^2}{e^x - 1}. \quad (120)$$

Suponiendo que $\tilde{T}_c \rightarrow 0$

$$\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) = \frac{32\tilde{T}_c^3}{\lambda^3 \sqrt{\tilde{\mu}}} \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c} dx \frac{x^2}{e^x - 1} \quad \text{para} \quad \tilde{T}_c \rightarrow 0 \quad (121)$$

Por otro lado, escribamos (82) en unidades de E_F y evaluemos $\tilde{T}_c = 0$

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^\nu d\xi [2\xi + \tilde{\Delta}_0(0)]^{-1}. \quad (122)$$

Haciendo $U = 2\xi + \tilde{\Delta}_0(0)$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \int_{\tilde{\Delta}_0(0)}^{2\nu + \tilde{\Delta}_0(0)} \frac{dU}{U} = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{2\nu + \tilde{\Delta}_0(0)}{\tilde{\Delta}_0(0)} \right]; \quad (123)$$

sustituyendo este resultado en (121)

$$\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) / \left[\ln \frac{2\nu + \tilde{\Delta}_0(0)}{\tilde{\Delta}_0(0)} \right]^3 = 4\tilde{T}_c^3 \int_0^{\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c} dx \frac{x^2}{e^x - 1}; \quad (124)$$

donde se utilizó el hecho que $\tilde{\mu} \rightarrow 1$ para $\tilde{T}_c \rightarrow 0$, ver Figura 7. Hagamos $y \equiv \tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c)/\tilde{T}_c$ para reescribir (124) como sigue

$$0.25\tilde{T}_c^{-2} \left[\ln \frac{2\nu + \tilde{\Delta}_0(0)}{\tilde{\Delta}_0(0)} \right]^{-3} = \frac{1}{y} \int_0^y dx \frac{x^2}{e^x - 1} \quad \text{para} \quad \tilde{T}_c \rightarrow 0, \quad (125)$$

de la Figura 9 observamos que el segundo miembro es finito. El primer miembro también es finito ya que $\tilde{T}_c \rightarrow 0$; de otra manera el primer miembro divergería ya que $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0$.

Para bosones irrompibles (es decir, que pueden permanecer apareados para cualquier valor de su momento de centro de masa $\hbar K$) tenemos

$$\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) / \left[\ln \frac{2\nu + \tilde{\Delta}_0(0)}{\tilde{\Delta}_0(0)} \right]^3 = 4\tilde{T}_c^3 \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x - 1} \quad \text{para} \quad \tilde{T}_c \rightarrow 0, \quad (126)$$

la integral es una integral de Bose la cual se puede evaluar

$$\int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x - 1} = \zeta(3)\Gamma(3), \quad (127)$$

donde $\zeta(3) \simeq 1.202$ es la zeta de Riemann evaluada en 3 y $\Gamma(3) = (3-1)! = 2$. Con esto (126) se reduce a

$$\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \left[\ln \frac{2\nu + \tilde{\Delta}_0(0)}{\tilde{\Delta}_0(0)} \right]^{-3} = 9.616\tilde{T}_c^3 \quad \text{para} \quad \tilde{T}_c \rightarrow 0, \quad (128)$$

como \tilde{T}_c está tendiendo a cero, entonces, $\tilde{\Delta}_0(\tilde{T}_c) \rightarrow 0$.

Este resultado, a diferencia del obtenido con la relación de dispersión anterior, tiene sentido físico. Si no hay acoplamiento fermiónico no hay bosones y por tanto $T_c = 0$.

En [13] se llega a la relación

$$\frac{T_c}{T_F} \simeq \nu a(d)^d (d-1) \left(\frac{e^{2/\lambda}}{\nu} \right) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \infty \quad (129)$$

(ver Ec. (18) de [13]), donde d es la dimensionalidad espacial que para el presente capítulo es $d = 2, 3$. Dicha ecuación contrasta con lo anteriormente expuesto. Como ya hemos visto, que el acoplamiento tienda a cero equivale a $\mathbf{K}_0 \rightarrow 0$. En [13] se dice que esto significa que todos los pares están en $\mathbf{K} = 0$, en otras palabras, el sistema está en el estado condensado para toda T . Sin embargo, debemos tomar en cuenta que entre más débil sea el acoplamiento más disminuye la probabilidad de formación de pares y por tanto disminuye la temperatura de transición a tal grado que cuando $\lambda = 0$ no hay bosones y en consecuencia tengamos $T_c = 0$.

En resumen, el papel que juegan los pares de huecos en el mecanismo que conduce a la superconductividad no debe despreciarse si queremos que nuestros modelos sean más realistas. Por otro lado, notemos que el tratamiento bosónico que se le da a los pares de Cooper no contrasta con el acoplamiento fermiónico introducido en la teoría BCS.

Capítulo 4

Modelo estadístico bosón-fermión completo de la superconductividad

4.1 Introducción

Con el fin de mejorar los resultados encontrados con el IBFM, consideraremos otra teoría más completa de la mezcla bosón-fermión en la cual se toma en cuenta tanto la formación de pares de Cooper por electrones como por huecos [26]. Esta teoría, la cual recibe el nombre de Modelo Bosón-Fermión Completo (CBFM), completo en el sentido de que considera la participación de los huecos, es desarrollada para ver: a) si el modelo de interacción tipo BCS para el mecanismo dinámico electrón-fonón es suficiente para predecir los altos valores de T_c/T_F ($\sim 0.01 - 0.05$ [35]) exhibidas por los llamados superconductores exóticos en 2D y 3D (los valores predichos por BCS son $\leq 10^{-3}$, valores que corresponden a los superconductores convencionales); y b) si se puede explicar porqué los materiales superconductores dopados con huecos tienen más altas T_c 's.

En la teoría BCS original se considera a los fermiones como partículas individuales, aunque sabemos que estos están interaccionando fuertemente con los pares de electrones y huecos condensados a la Bose-Einstein. De hecho los creadores de la teoría BCS [1] nunca aceptaron que la superconductividad fuera una BEC. Aquí consideraremos los pares de Cooper no como dos electrones con espines directamente opuestos moviéndose con direcciones opuestas cuyo momento es $\hbar\mathbf{k}_1$ y $-\hbar\mathbf{k}_1$ y con una fuerte correlación de Cooper, si no como partículas bosónicas individuales en estados de enlace $2e$ (\equiv dos electrones) o $2h$ (\equiv dos huecos), es decir, como partículas extendidas compuestas de tamaño finito las cuales sólo existen en la fase superconductora. Aunque los operadores de creación y aniquilación para los pares de Cooper con \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 definidos no satisfacen exactamente la familiar relación de conmutación de bosones [10], los pares con \mathbf{K} definida (pero no \mathbf{k}) pueden ser tratados como bosones ya que obedecen la distribución de Bose-Einstein. Esto es porque con el modelo de interacción BCS (ver Ec. (56)) habrá, para cualquier acoplamiento y en el límite termodinámico, un número indefinido de valores para el momento relativo $\hbar\mathbf{k} \equiv \frac{1}{2}(\hbar\mathbf{k}_1 - \hbar\mathbf{k}_2)$ que dan un sólo valor de $\hbar\mathbf{K}$ total $\equiv \hbar\mathbf{k}_1 + \hbar\mathbf{k}_2$.

4.2 Hamiltoniano de interacción

En el modelo CBFM se propone el Hamiltoniano $H = H_0 + H_{int}$ para un sistema de muchos electrones dentro de un volumen de tamaño L^d (el cual lo reescribiremos para el caso 2D), donde el Hamiltoniano sin perturbación H_0 corresponde a un gas ideal (es decir, sin interacción) compuesto de la mezcla de electrones más ambos tipos de pares de Cooper (CP, por sus siglas en inglés), $2e$ y $2h$. Dicho Hamiltoniano está dado por [26]

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{s}_1} \epsilon_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_1, \mathbf{s}_1}^+ a_{\mathbf{k}_1, \mathbf{s}_1} + \sum_{\mathbf{K}} E_+(\mathbf{K}) b_{\mathbf{K}}^+ b_{\mathbf{K}} - \sum_{\mathbf{K}} E_-(\mathbf{K}) c_{\mathbf{K}}^+ c_{\mathbf{K}}, \quad (130)$$

donde $a_{\mathbf{k}_1, \mathbf{s}_1}^+$ y $a_{\mathbf{k}_1, \mathbf{s}_1}$ son los operadores de creación y aniquilación de electrones, respectivamente, con momento $\hbar\mathbf{k}_1$ y proyección de espín \mathbf{s}_1 ; $b_{\mathbf{K}}^+$, $b_{\mathbf{K}}$ y $c_{\mathbf{K}}^+$, $c_{\mathbf{K}}$ son operadores de creación y aniquilación para $2e$ - y $2h$ -CP respectivamente, de momento total $\hbar\mathbf{K}$. La energía para los electrones está dada por $\epsilon_{\mathbf{k}} \equiv \hbar^2 k^2 / 2m$. La energía para $2e$ está dada por $E_+(K) = E_+(0) + 2\Delta + \lambda/2\pi\hbar v_F K$; donde $E_+(0)$ es la energía de estado base del par de electrones y Δ es el gap fermiónico introducido por BCS, el factor 2 viene de que son dos fermiones. La energía de $2h$ es $E_-(K) = E_-(0) - 2\Delta - \lambda/2\pi\hbar v_F K$, ésta es de signo contrario a la de $2e$ ya que la energía de una partícula es la necesaria para meterla al sistema, y la energía del hueco es la energía necesaria para sacar la partícula. $E_-(0)$ es la energía de estado base del par de huecos.

En el presente modelo las interacciones entre electrones, entre pares $2e$ y entre pares $2h$ son omitidas. Son tomadas en cuenta las interacciones entre electrones y los pares $2e$ y $2h$ debido a los procesos elementales de decaimiento de $2e$ o $2h$ en un par de electrones o de huecos. O bien, los procesos inversos.

El Hamiltoniano de interacción H_{int} tiene la siguiente forma [26]

$$H_{int} = L^{-d/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} f_+(\mathbf{k}) \left\{ a_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow}^+ b_{\mathbf{K}} + a_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow} a_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow} b_{\mathbf{K}}^+ \right\} \\ + L^{-d/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} f_-(\mathbf{k}) \left\{ a_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{K}}^+ + a_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow} a_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow} c_{\mathbf{K}} \right\}. \quad (131)$$

donde L^d es el volumen del sistema, $f_+(\mathbf{k})$ es el parámetro de interacción entre los electrones y los pares $2e$; $f_-(\mathbf{k})$ es el parámetro de interacción entre los electrones y los pares $2h$. La primera suma describe los siguientes procesos: 1) aniquilación de un bosón $2e$ con momento dado por $\hbar\mathbf{K}$ y creación simultánea de dos electrones con espines opuestos cuyo momento está dado por $\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$ y $-\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$; 2) creación de un bosón $2e$ con momento dado por $\hbar\mathbf{K}$ y aniquilación

simultánea de dos electrones con espines opuestos cuyo momento está dado por $-\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$ y $\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$.

La segunda suma describe los siguientes procesos: 1) creación simultánea de un bosón $2h$ con momento dado por $\hbar\mathbf{K}$ y dos electrones de espines opuestos con momento dado por $\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$ y $-\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$; 2) aniquilación simultánea de un bosón $2h$ con momento dado por $\hbar\mathbf{K}$ y dos electrones con espines opuestos cuyo momento está dado por $-\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$ y $\hbar\mathbf{k} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{K}$.

Al considerar una condensación de Bose-Einstein (BEC) con N_0 pares de electrones y M_0 pares de huecos con $\mathbf{K} = 0$ y reemplazar cada operador de creación y aniquilación b_0^+ y b_0 por $\sqrt{N_0}$ y cada operador c_0^+ y c_0 por $\sqrt{M_0}$, además de despreciar las interacciones entre electrones desapareados y bosones excitados ($\mathbf{K} \neq 0$) pero tomando en cuenta las interacciones entre electrones desapareados y bosones condensados, el Hamiltoniano propuesto en CBFM se reduce a

$$\begin{aligned}
H - \mu N &= [E_+(0) - 2\mu]N_0 + [2\mu - E_-(0)]M_0 + \sum_{\mathbf{k}_1, s_1} [\epsilon(\mathbf{k}_1) - \mu] a_{\mathbf{k}_1, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_1, s_1} \\
&+ \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] b_{\mathbf{K}}^+ b_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] c_{\mathbf{K}}^+ c_{\mathbf{K}} \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} [\sqrt{n_0} f_+(\mathbf{k}) + \sqrt{m_0} f_-(\mathbf{k})] (a_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}, \downarrow}^+ + a_{-\mathbf{k}, \downarrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow}), \tag{132}
\end{aligned}$$

donde μ es el potencial químico fermiónico, $n_0 = N_0/L^d$ y $m_0 = M_0/L^d$.

Antes de continuar recordemos algunas relaciones entre los potenciales termodinámicos (ver por ejemplo [36]). La energía libre de Helmholtz se define a través de la energía interna E , la temperatura T y la entropía S como

$$F \equiv E - TS. \tag{133}$$

El potencial gran canónico o termodinámico Ω es, al igual que la energía libre de Helmholtz, una transformada de Legendre de la energía interna

$$\Omega \equiv E - TS - \mu N. \tag{134}$$

De las Ecs. (133) y (134) vemos que

$$F \equiv \Omega + \mu N. \tag{135}$$

El potencial termodinámico se puede ver como [29]

$$\Omega(L^d, T, \mu, N_0, M_0) = -k_B T \ln \text{Tr}[\exp \{-\beta(H - \mu N)\}] \tag{136}$$

(donde Tr significa traza y $\beta = 1/k_B T$ con $k_B \equiv$ constante de Boltzmann).

De los valores propios del operador (132) y la relación (136) se obtiene que el potencial termodinámico Ω por unidad de volumen tiene la forma

$$\begin{aligned} \frac{\Omega(T, L^d, \mu, N_0, M_0)}{L^d} &= \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) [\epsilon - \mu - E(\epsilon)] - 2k_B T \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \ln\{1 + \exp[-\beta E(\epsilon)]\} \\ &+ [E_+(0) - 2\mu]n_0 + k_B T \int_{2\Delta}^\infty d\epsilon M(\epsilon) \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon + E_+(0) - 2\mu)]\} \\ &+ [2\mu - E_-(0)]m_0 + k_B T \int_{2\Delta}^\infty d\epsilon M(\epsilon) \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon - E_-(0) + 2\mu)]\} \end{aligned} \quad (137)$$

donde n_0 y m_0 son las densidades del número de pares condensados dos-electrones y dos-huecos, respectivamente; ϵ es la energía de los pares de electrones o de huecos dada en (94) pero ahora se incluye la energía necesaria para alcanzar el primer estado excitado Δ , que según la teoría BCS es $\hbar\omega_D/\sinh(1/\lambda)$, ver ecuación (2.40) de [1]. Es decir,

$$\epsilon_{\mathbf{K}} = 2\Delta + \frac{\lambda}{2\pi} \hbar v_F K. \quad (138)$$

$N(\epsilon)$ es la densidad de estados fermiónicos y $M(\epsilon)$ la densidad de estados bosónicos. En (137) también se utilizó la definición

$$E(\epsilon) \equiv \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2(\epsilon)} \quad (139)$$

que es la energía de excitación fermiónica, donde el gap fermiónico de energía (energía de mínima excitación fermiónica) $\Delta(\epsilon)$ tiene la siguiente forma

$$\Delta(\epsilon) \equiv \sqrt{n_0} f_+(\epsilon) + \sqrt{m_0} f_-(\epsilon). \quad (140)$$

Definamos los parámetros

$$\delta\epsilon \equiv \frac{1}{2}[E_+(0) - E_-(0)], \quad (141)$$

y

$$E_f \equiv \frac{1}{4}[E_+(0) + E_-(0)], \quad (142)$$

no confundir con la usual energía de Fermi de un gas ideal de Fermi. Estos dos parámetros tienen carácter fenomenológico. Es evidente que

$$E_\pm(0) = 2E_f \pm \delta\epsilon. \quad (143)$$

En contraste con la teoría BCS, en la CBFM las energías $E_\pm(0)$ de CPs sin movimiento (es decir, $\mathbf{K} = 0$) no están relacionadas con la energía de Fermi E_F .

4.3 Ecuaciones de número y de gap

De la relación termodinámica $\partial\Omega/\partial\mu = -N$ se llega a la ecuación de número

$$\begin{aligned}
n \equiv N/L^d &= 2n_B(T) - 2m_B(T) + n_f(T) = \\
&= 2n_0 + \int_{2\Delta}^{\infty} M(\varepsilon)d\varepsilon \left[\frac{2}{\exp[\beta(\varepsilon + 2E_f + \delta\varepsilon - 2\mu)] - 1} \right] \\
&\quad - 2m_0 - \int_{2\Delta}^{\infty} M(\varepsilon)d\varepsilon \left[\frac{2}{\exp[\beta(\varepsilon - 2E_f + \delta\varepsilon + 2\mu)] - 1} \right] \\
&\quad + \int_0^{\infty} N(\varepsilon)d\varepsilon \left[1 - \frac{\varepsilon - \mu}{E(\varepsilon)} \tanh \frac{1}{2}\beta E(\varepsilon) \right], \tag{144}
\end{aligned}$$

donde n es el número total de electrones dividido entre el volumen del sistema, n_B es el número de pares $2e$ dividido entre el volumen, m_B es el número de pares $2h$ dividido entre el volumen y n_f es el número de electrones libres dividido entre el volumen.

El número de pares de electrones excitados (i.e., con $\mathbf{K} > 0$) es

$$n_{B+}(T) \equiv \int_{2\Delta}^{\infty} M(\varepsilon)d\varepsilon \left[\frac{1}{\exp[\frac{1}{2}\beta\{\varepsilon + E_+(0) - 2\mu\}] - 1} \right] \tag{145}$$

mientras que el número de pares de agujeros excitados es

$$m_{B+}(T) = \int_{2\Delta}^{\infty} M(\varepsilon)d\varepsilon \left[\frac{1}{\exp[\frac{1}{2}\beta\{\varepsilon - E_-(0) + 2\mu\}] - 1} \right]. \tag{146}$$

Es evidente que

$$n_B(T) \equiv n_0(T) + n_{B+}(T) \tag{147}$$

y

$$m_B(T) \equiv m_0(T) + m_{B+}(T). \tag{148}$$

El parámetro $n_f(T)$ es el número de electrones desapareados y está dado por la última integral de (144).

De la minimización de Ω , Ec. (137), con respecto de N_0 y M_0 , se llega a las ecuaciones tipo gap que tienen la forma

$$2\sqrt{n_0} [E_+(0) - 2\mu] = \int_0^{\infty} N(\varepsilon)d\varepsilon \frac{\Delta(\varepsilon)f_+(\varepsilon)}{E(\varepsilon)} \tanh \frac{1}{2}\beta E(\varepsilon), \tag{149}$$

$$2\sqrt{m_0} [2\mu - E_-(0)] = \int_0^{\infty} N(\varepsilon)d\varepsilon \frac{\Delta(\varepsilon)f_-(\varepsilon)}{E(\varepsilon)} \tanh \frac{1}{2}\beta E(\varepsilon). \tag{150}$$

El modelo de interacción boson-fermión (BF) entre electrones y pares de electrones está dado por [37]

$$f_+(\epsilon) \equiv \begin{cases} f & \text{si } E_f < \epsilon < E_f + \delta\epsilon, \\ 0 & \text{en cualquier otro caso;} \end{cases} \quad (151)$$

donde f es una constante de acoplamiento positiva y puede ser tomada como parámetro fenomenológico. Esta ecuación nos dice que hay probabilidad de la formación de una pares 2e si los electrones que la van a formar estan en los niveles de energía E_f y $E_f + \delta\epsilon$.

El modelo de interacción BF entre electrones y pares de huecos

$$f_-(\epsilon) \equiv \begin{cases} f & \text{si } E_f - \delta\epsilon < \epsilon < E_f, \\ 0 & \text{en cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (152)$$

en palabras, hay probabilidad de formación de pares 2h si dos electrones saltan de la región que va desde $E_f - \delta\epsilon$ hasta E_f a la región que se forma entre E_f y $E_f + \delta\epsilon$, ver Fig. 10.

Utilizando el modelo de interacción anterior en la Ec. (140) llegamos a la siguiente expresión del gap fermiónico de energía

$$\Delta(\epsilon) = \begin{cases} f\sqrt{n_0} & \text{si } E_f < \epsilon < E_f + \delta\epsilon, \\ f\sqrt{m_0} & \text{si } E_f - \delta\epsilon < \epsilon < E_f, \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (153)$$

Si consideramos $m_0(T) = n_0(T)$ y $m_B(T) = n_B(T)$, es decir, simetría perfecta, según (145) y (146) necesitamos que

$$E_+(0) - 2\mu = 2\mu - E_-(0),$$

y de (142) se deduce

$$E_f = \mu. \quad (154)$$

De manera análoga se puede ver que si $E_f > \mu$ se tiene $n_{B+} < m_{B+}$ y para $E_f < \mu$ se tiene $n_{B+} > m_{B+}$.

Introduciendo (154) y el modelo de interacción boson-fermión en las Ecs. (149) y (150) obtenemos

$$1 \cong \frac{f^2 N(\mu)}{2\delta\epsilon} \int_{\mu}^{\mu+\delta\epsilon} d\epsilon \frac{1}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{1}{2} \beta \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}. \quad (155)$$

y

$$1 \cong \frac{f^2 N(\mu)}{2\delta\epsilon} \int_{\mu-\delta\epsilon}^{\mu} d\epsilon \frac{1}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{1}{2} \beta \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}. \quad (156)$$

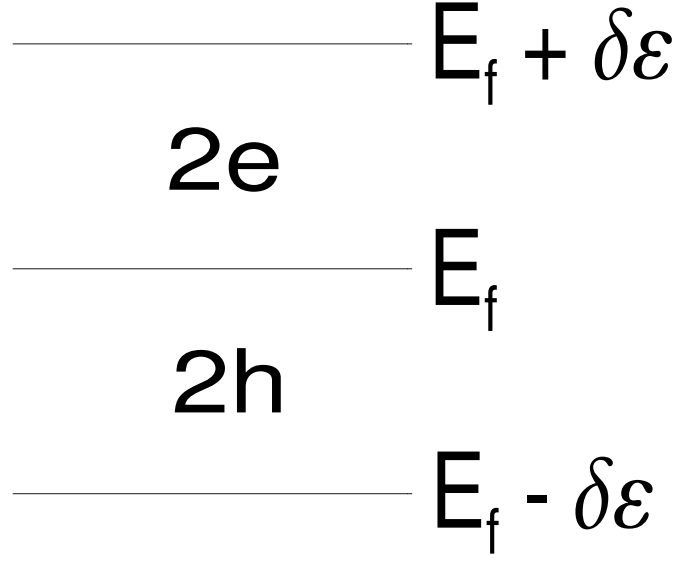


Figura 10: Este diagrama nos señala los niveles de energía donde hay formación de pares de electrones (región 2e) y la región donde se forman pares de huecos (región 2h). La formación de pares de huecos es debido al salto de electrones de la región 2h a la región 2e.

donde se definió $\Delta \equiv f\sqrt{n_0} = f\sqrt{m_0}$. Las relaciones (155) y (156) son exactas en 2D y una buena aproximación en 1D y 3D si $\delta\epsilon \ll \mu$. Si hacemos el cambio de variable $\xi = \epsilon - \mu$, el integrando de (155) y (156) resulta simétrico; por tanto sus integrales son idénticas y se vuelven

$$1 \cong \frac{f^2 N(\mu)}{2\delta\epsilon} \int_0^{\delta\epsilon} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{1}{2} \beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}. \quad (157)$$

Identificando

$$\frac{f^2}{2\delta\epsilon} \equiv V, \quad \delta\epsilon \equiv \hbar\omega_D, \quad (158)$$

donde V es la intensidad del potencial de interacción BCS y $\hbar\omega_D$ la energía de Debye, la Ec. (157) en el límite de acoplamiento pequeño $f = \sqrt{2\hbar\omega_D V} \rightarrow 0$ se puede reescribir como

$$1 \cong VN(E_F) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{1}{2} \beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}, \quad (159)$$

que es la ecuación fundamental de la teoría BCS (ver Ec. (3.27) de la ref. [1]). En resumen, la teoría CBFM reproduce BCS al considerar simetría perfecta con respecto al número de pares de electrones y al número de pares de huecos. Esto muestra que ignorando ya sea los pares $2e$ o los pares $2h$ no se puede reproducir la ecuación del gap de la teoría BCS.

La región de temperaturas que nos interesa tienen valores lo suficientemente pequeños para hacer la aproximación $\mu \approx E_F$. Veamos por qué.

En [9], Pag. 348, se deduce la relación

$$\mu \approx E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]. \quad (160)$$

El valor de T_F está dentro del rango $10^4 - 10^5 K$. Cuando $T = 1000K$ se tiene $\mu \approx 0.99E_F$. Por esta razón en (159) se sustituyó μ por E_F .

En la Figura 11 se ilustran las regiones en las que la teoría CBFM reproduce otras teorías referentes a la superconductividad. El eje m_0 representa la fase condensada pura m_0 ; el eje n_0 representa la fase condensada pura n_0 . El plano sombreado es la región para la simetría $n_0 = m_0$. En dicho plano tenemos la región BCS cuando el acoplamiento, dado por λ , es débil. Cuando el acoplamiento es fuerte el plano sombreado nos da la región que estudia la teoría de la condensación de Bose-Einstein BEC con sus pares irrompibles. Cuando el acoplamiento es intermedio el plano sombreado nos señala la teoría BCS-Bose crossover.

4.4 Energía de condensación

Utilizaremos el potencial termodinámico Ω para encontrar la energía que se necesita sacar al sistema fermión-bosón en d -dimensiones descrito por la teoría CBFM para condensarlo (a ésta se le llama energía de condensación). La relación entre la energía libre de Helmholtz F y la energía interna E se describe como $F = E - TS$, donde T es la temperatura y S la entropía. En términos de Ω la energía libre de Helmholtz es $F = \Omega + \mu N$. Por lo que para $T = 0$

$$E = \Omega + \mu N. \quad (161)$$

donde μ es el potencial químico y N el número total de fermiones. Sea E_s y Ω_s la energía interna y el potencial termodinámico, respectivamente, del sistema bosón-fermión en el estado superconductor, es decir, en el estado condensado de los bosones. Sea E_n y Ω_n la energía interna

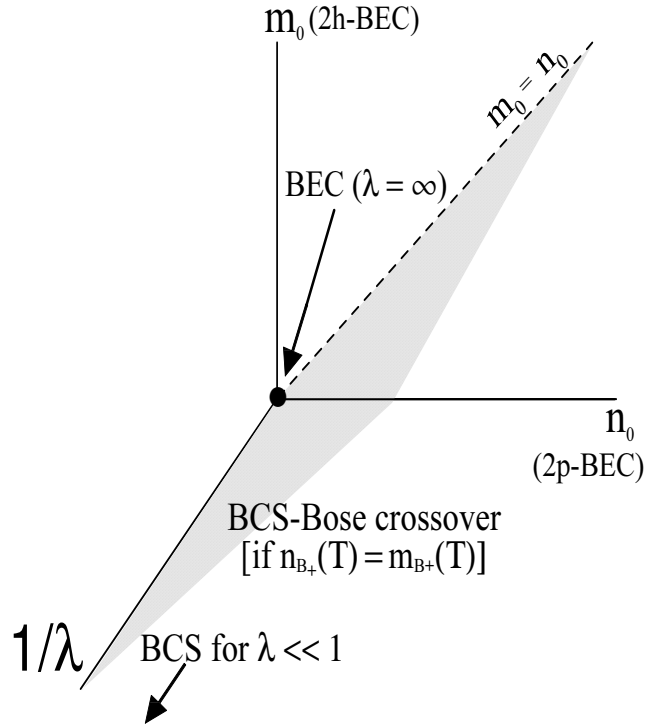


Figura 11: Diagrama de fases donde los ejes representan las fases puras y la línea a trazos la fase a simetría perfecta donde $m_0(T) = n_0(T)$ y $m_B(T) = n_B(T)$. El eje $1/\lambda$ nos sirve para señalar las regiones sobre el plano sombreado: para acoplamiento débil encontramos la región BCS, si el acoplamiento es fuerte obtenemos la región BEC, y el acoplamiento intermedio que nos lleva a la teoría BCS-Bose crossover.

y el potencial termodinámico, respectivamente, en el estado normal. Así, en $T = 0$ la energía de condensación es

$$\frac{E_s - E_n}{L^d} = \frac{\Omega_s(T = 0) - \Omega_n(T = 0)}{L^d}, \quad (162)$$

ya que μ y N se mantienen constantes. Nuestro problema ahora es encontrar Ω_s y Ω_n a $T = 0$.

Para $n_0(T) = m_0(T)$ y $n_B(T) = m_B(T)$ el parámetro $\delta\varepsilon$, dada en (141), es la energía de Debye, ver Ec. (158). Para el presente caso, en $T = 0$, la Ec. (137) es,

$$\frac{\Omega_s(T = 0)}{L^d} = 2\hbar\omega_D n_0(0) + \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \left[\epsilon - \mu - \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2(\epsilon)} \right]. \quad (163)$$

Recordando que para simetría perfecta $\mu = E_F$ y representando con la letra Δ al valor de $\Delta(\epsilon)$

en los intervalos de energía donde es distinta de cero, ver Ec. (153), llegamos a

$$\frac{\Omega_s(T=0)}{L^d} = 2\hbar\omega_D n_0(0) + 2 \int_0^{\mu-\hbar\omega_D} d\epsilon N(\epsilon)[\epsilon-\mu] + N(E_F) \int_{\mu-\hbar\omega_D}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \left[\epsilon - \mu - \sqrt{(\epsilon-\mu)^2 + \Delta^2} \right]. \quad (164)$$

La densidad de estados sale de la integral ya que el rango de integración sobreviviente, después de introducir (153), es muy pequeño y está alrededor de μ que es igual a E_F para $T=0$, ver Ec. (160). Observemos que el primer y segundo integrando de la segunda integral son funciones par e impar, respectivamente; por lo tanto

$$\frac{\Omega_s(T=0)}{L^d} = 2\hbar\omega_D n_0(0) + 2 \int_0^{\mu-\hbar\omega_D} d\epsilon N(\epsilon)[\epsilon-\mu] - 2N(E_F) \int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \sqrt{(\epsilon-\mu)^2 + \Delta^2}. \quad (165)$$

Por otro lado, para el estado normal el número de partículas condensadas en un estado cualquiera es muy pequeño comparado con el total de partículas bosónicas, de modo que $n_0 = 0$, $m_0 = 0$. Por tanto de la definición (153) $\Delta(T) = 0$. Así, tomando en cuenta (139) y recordando que $T=0$ de (137) tenemos

$$\frac{\Omega_n(T=0)}{L^d} = \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) [\epsilon - \mu - |\epsilon - \mu|] = 2 \int_0^\mu d\epsilon N(\epsilon) [\epsilon - \mu]; \quad (166)$$

Según la Ec. (162) la energía de condensación en el CBFM se obtiene restando (166) de (165). Así

$$\frac{E_s - E_n}{L^d} = 2\hbar\omega_D n_0(0) + 2N(E_F) \int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \left[\epsilon - \mu - \sqrt{(\epsilon-\mu)^2 + \Delta^2} \right]. \quad (\text{CBFM}) \quad (167)$$

Utilizando la Ec. (2) de la Sec. 4.3.3.1 de la Ref. [38] la integral vale

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}\hbar\omega_D \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta^2} + \frac{(\hbar\omega_D)^2}{2} + \frac{1}{2}\Delta^2 \ln \frac{\Delta}{\hbar\omega_D + \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta^2}} \\ \xrightarrow{\Delta \rightarrow 0} & \frac{1}{2}\Delta^2 \ln \left(\frac{\Delta}{2\hbar\omega_D} \right) - \frac{1}{4}\Delta^2 - \frac{1}{16} \frac{\Delta^4}{(\hbar\omega_D)^2} + O\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^6. \end{aligned} \quad (168)$$

Por otro lado, de la Ec. (153) obtenemos

$$n_0(0) = \Delta^2/f^2. \quad (169)$$

Sustituyendo (168) en (167) y usando la relación anterior encontramos que para acoplamiento débil, $f \rightarrow 0$, es decir, $\Delta = f\sqrt{n_0} \rightarrow 0$, la energía de condensación según CBFM para simetría perfecta es

$$\frac{E_s - E_n}{L^d} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{2}N(E_F)\Delta^2 \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^2 + O\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^4 \right]. \quad (170)$$

Por otro lado, con el fin de comparar la energía de condensación obtenida por medio de la presente teoría y la que obtuvo originalmente BCS, reescribamos la Ec. (167). Para esto, consideremos la siguiente relación

$$\int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2} = \int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \frac{(\epsilon - \mu)^2}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} + \int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \frac{\Delta^2}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}}. \quad (171)$$

esto se demuestra sumando los dos integrandos de la derecha. La ecuación del gap fermiónico de la teoría BCS, dada en la Ec. (2.39) de Ref. [1], en $T = 0$ es

$$\int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} = \frac{1}{N(E_F)V}. \quad (172)$$

sustituyendo (172) en (171) se obtiene

$$\int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2} = \int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \frac{(\epsilon - \mu)^2}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} + \frac{\Delta^2}{N(E_F)V}. \quad (173)$$

Ahora, de (169) y recordando que $V = f^2/2\delta\varepsilon$, ver Pág. 43 de [26], resulta lo siguiente

$$2\hbar\omega_D n_0(0) = \frac{\Delta^2}{V}; \quad (174)$$

donde V es el potencial de interacción entre fermiones. Sustituyendo (173) y (174) en (167) obtenemos

$$\frac{E_s - E_n}{L^d} = 2N(E_F) \int_{\mu}^{\mu+\hbar\omega_D} d\epsilon \left[\epsilon - \mu - \frac{(\epsilon - \mu)^2}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \right] - \frac{\Delta^2}{V}, \quad (175)$$

que es la expresión original dada por la teoría BCS en la expresión (2.41) de Ref. [1]. La ecuación para la energía de condensación calculada bajo la teoría CBFM o bajo la teoría BCS son equivalentes para toda $\lambda = VN(E_F) = f^2N(E_F)/2\delta\varepsilon$. Con esto se refuerza la idea de que CBFM reproduce BCS haciendo la restricción $m_B(T) = n_B(T)$ así como $m_0(T) = n_0(T)$.

4.5 Interacción delta atractiva en 2D según CBFM

Recordemos que el modelo BCS nos dice como una interacción electrón-fonón puede llevar a una interacción atractiva entre dos electrones. Podemos ver el problema como una sola partícula de masa reducida en el centro de masa y que está en un potencial atractivo que es una función de la coordenada relativa. Dicho potencial puede ser una delta atractiva

$V(\mathbf{r}) = -v_0\delta(\mathbf{r})$, donde $v_0 > 0$ es la intensidad de la interacción. En el espacio de los momentos una interacción interfermiónica separable es

$$v_{kk'} = -v_0/L^2 g_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}'}$$

donde L es la longitud del sistema y $g_{\mathbf{k}} = (1 + k^2/k_0^2)^{-1/2}$ con k_0 el inverso del alcance del potencial. Así para el potencial delta $k_0 = \infty$, o bien, $g_{\mathbf{k}} = 1$, $v_{kk'} = -v_0$. La transformada de Fourier de la función delta es una constante. De aquí que no debe de haber restricción para el acoplamiento entre partículas y pares. Para este caso, el modelo de interacción es

$$f_+(\epsilon) \equiv f_+ \quad \text{para } 0 < \epsilon < \infty \quad (176)$$

y

$$f_-(\epsilon) \equiv f_- \quad \text{para } 0 < \epsilon < \infty, \quad (177)$$

donde a diferencia de la CBFM aquí las electrones y los huecos no necesariamente tienen la misma constante de acoplamiento, esto se discutirá más adelante. Veamos primero la ecuación de número dada en Ec. (144). Como en $T = 0$ no hay bosones excitados y la tangente hiperbólica de infinito vale la unidad, entonces, la ecuación mencionada se simplifica a la siguiente expresión

$$n = 2n_0 - 2m_0 + \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \left[1 - \frac{\epsilon - \mu}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \right], \quad (178)$$

Como $\Delta(\epsilon) = \sqrt{n_0}f_+(\epsilon) + \sqrt{m_0}f_-(\epsilon)$, ver (140), y como, para el presente caso, $f_+(\epsilon)$ y $f_-(\epsilon)$ son constantes, ver las Ecs. (176) y (177), el gap de energía Δ no depende de ϵ .

Por otro lado, tomando en cuenta que para 2D la densidad de estados $N(\epsilon)$ es constante, ver Ec. (18), la densidad de número de fermiones se puede calcular de la siguiente manera

$$n = 2N \int_0^{E_F} d\epsilon \Rightarrow n = 2NE_F \Rightarrow N = \frac{n}{2E_F}. \quad (179)$$

Sustituyendo, (179) en (178)

$$\frac{n - (2n_0 - 2m_0)}{n} 2E_F = \int_0^\infty d\epsilon \left[1 - \frac{\epsilon - \mu}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \right]. \quad (180)$$

Haciendo $u = (\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2$ es fácil calcular la integral de (180). Después de integrar y reacomodar términos

$$\left(2 \frac{n_f(0)}{n} E_F \right)^2 - 4 \frac{n_f(0)}{n} E_F \mu = \Delta^2; \quad (181)$$

donde

$$n_f(0) = n - (2n_0 - 2m_0) \quad (182)$$

es el número de fermiones desapareados en $T = 0$.

Ahora introduzcamos la interacción delta a las ecuaciones tipo gap de la teoría CBFM, Ecs. (149) y (150). Así, la Ec. (149) con (176) es

$$2\sqrt{n_0} [E_+(0) - 2\mu] = \Delta f_+ \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon), \quad (183)$$

y (150) con (177)

$$2\sqrt{m_0} [2\mu - E_-(0)] = \Delta f_- \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon). \quad (184)$$

Definamos el potencial de interacción entre dos electrones, v_0^+ , y entre dos huecos, v_0^- , como

$$v_0^{+,-} = \frac{f_{+,-}^2}{\delta\varepsilon}. \quad (185)$$

Empleando la definiciones (143) y (185) las Ecs. (183) y (184) nos dan

$$2\sqrt{n_0} f_+ \left[2 \frac{E_f - \mu}{\delta\varepsilon} + 1 \right] = \Delta v_0^+ \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon). \quad (186)$$

y

$$2\sqrt{m_0} f_- \left[-2 \frac{E_f - \mu}{\delta\varepsilon} + 1 \right] = \Delta v_0^- \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon). \quad (187)$$

Sumando las dos últimas ecuaciones

$$4(\sqrt{n_0} f_+ - \sqrt{m_0} f_-) \frac{E_f - \mu}{\delta\varepsilon} + 2(\sqrt{n_0} f_+ + \sqrt{m_0} f_-) = \Delta(v_0^- + v_0^+) \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon), \quad (188)$$

dividiendo entre 2Δ

$$2 \left(\frac{\sqrt{n_0} f_+ - \sqrt{m_0} f_-}{\sqrt{n_0} f_+ + \sqrt{m_0} f_-} \right) \frac{E_f - \mu}{\delta\varepsilon} + 1 = \frac{v_0^- + v_0^+}{2} \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon), \quad (189)$$

En CBFM el parámetro $\delta\varepsilon$ nos da el intervalo de interacción en el espacio de momentos, entonces, para el presente caso no podemos hacer $\delta\varepsilon = \hbar\omega_D$, debemos hacer $\delta\varepsilon \rightarrow \infty$. Además, como la diferencia $E_f - \mu$ es finita, entonces,

$$1 = \frac{v_0^- + v_0^+}{2} \int_0^\infty N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon). \quad (190)$$

Si hacemos que los potenciales de interacción fermiónica sean iguales, $v_0^- = v_0^+$, aplicando $\delta\varepsilon \rightarrow \infty$ a la suma de las ecuaciones (186) y (187) se obtiene $n_0 = m_0$. Es decir si hay igualdad entre los potenciales de interacción entre electrones y entre huecos, hay igual probabilidad de obtener pares de huecos que pares de electrones, recuperamos el caso BCS.

Volviendo al caso general busquemos una expresión para v_0 suponiendo dos partículas en el espacio libre que interactúan a través de un potencial delta. Para esto denotemos los estados \mathbf{k} por $|\mathbf{k}\rangle$, la función de onda como $\Psi = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle$ y la energía de enlace para estados ligados $-B_2$. Así, la ecuación de Schrödinger es

$$H \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'} |\mathbf{k}'\rangle = -B_2 \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'} |\mathbf{k}'\rangle. \quad (191)$$

Sea $\langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k} \rangle$ la energía del estado \mathbf{k} de los dos electrones formando el par o alternativamente, la energía de una partícula de con masa reducida $mm/(m+m) = m/2$ en el centro de masa que experimenta el potencial delta atractivo que es una función de la coordenada relativa. Por lo tanto

$$\langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k} \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m/2)} = \frac{\hbar^2 k^2}{m} \equiv 2\epsilon_{\mathbf{k}}.$$

El potencial de interacción entre un fermión en el estado \mathbf{k} y otro en el estado \mathbf{k}' está representado por $\langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k}' \rangle \equiv v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Utilizando las dos definiciones anteriores después de multiplicar (191) por $\langle \mathbf{k} |$ se obtiene

$$2\epsilon_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -B_2 C_{\mathbf{k}}. \quad (192)$$

reordenando

$$C_{\mathbf{k}} = \frac{v_0 \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'}}{2\epsilon_{\mathbf{k}} + B_2}, \quad (193)$$

donde se utilizó el hecho de que la transformada de Fourier de una delta es constante, es decir, si $V(r) = -v_0 \delta(r)$, entonces, $v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -v_0$ para toda \mathbf{k} . Sumemos sobre \mathbf{k}

$$\sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_0 \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'}}{2\epsilon_{\mathbf{k}} + B_2} \Rightarrow \frac{1}{v_0} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}} + B_2}. \quad (194)$$

En el límite $L \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{v_0} = \int_0^\infty N(\epsilon) \frac{d\epsilon}{2\epsilon + B_2}, \quad (195)$$

donde como antes $N(\epsilon)$ es la densidad de estados por unidad de volumen. Debemos notar que este análisis se realizó en el vacío. Suponiendo que $v_0 = v_0^- + v_0^+$, podemos utilizar (195) en (190)

$$\int_0^\Lambda N(\epsilon) \frac{d\epsilon}{2\epsilon + B_2} = \int_0^\Lambda N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{2E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2} \beta E(\epsilon). \quad (196)$$

donde $\Lambda \rightarrow \infty$. Para $T = 0$

$$\int_0^\Lambda N(\epsilon) \frac{d\epsilon}{2\epsilon + B_2} = \int_0^\Lambda N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{2\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta_+^2}},$$

donde se puede eliminar $N(E)$ por ser constante en 2D. Integrando obtenemos

$$\ln(2\Lambda) - \ln B_2 = \ln(2\Lambda) - \ln\left(-\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}\right), \quad (197)$$

es decir

$$B_2 + \mu = \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}, \quad (198)$$

o bien

$$\Delta^2 = B_2^2 + 2B_2\mu. \quad (199)$$

Combinemos (181) y (199)

$$\left(\frac{n_f(0)}{n} E_F\right)^2 - \frac{B_2^2}{4} = \left(\frac{n_f(0)}{n} E_F + \frac{B_2}{2}\right) \mu,$$

después de eliminar el factor $(n_f(0)E_F/n + B_2/2)$ de ambos lados de la igualdad, encontramos la siguiente expresión para el potencial químico

$$\mu = \frac{n_f(0)}{n} E_F - \frac{B_2}{2}. \quad (200)$$

Por último, sustituyamos esta forma de μ en (199) para obtener Δ

$$\Delta = \sqrt{2\frac{n_f(0)}{n} E_F B_2}. \quad (201)$$

Las ecuaciones (200) y (201) son la generalización de las ecuaciones de Miyake [3] el cual es el caso de BCS con interacción tipo delta entre fermiones. De tal forma, si $n_0 = m_0$ (200) y (201) se reducen a las ecuaciones de Miyake [3]:

$$\mu = E_F - \frac{B_2}{2}$$

y

$$\Delta = \sqrt{2B_2 E_F}.$$

4.6 Temperatura de transición al estado condensado

De las ecuaciones (144), (149) y (150) podemos calcular la temperatura de transición al estado condensado T_c y el potencial químico como una función de n/n_f (donde $n \equiv N/L^d$ con L^d el volumen del sistema, y n_f la densidad de número de fermiones desapareados). Comencemos calculando T_c .

Dividiendo la Ec. (144) entre el número de electrones desapareados a la temperatura T , $n_f(T)$,

$$\frac{2n_B(T)}{n_f(T)} - \frac{2m_B(T)}{n_f(T)} + 1 = \frac{n}{n_f(T)}. \quad (202)$$

El parámetro $n/n_f(T)$ es una medida de la simetría en cuanto al número de pares de huecos y de electrones, por ejemplo, cuando $n/n_f(T) = 1$ la simetría es perfecta.

Tomemos el caso $m_0 = 0$. Por definición de la temperatura de transición en $T = T_c$ tenemos $n_0 = 0$, para este caso, según (140) se tiene $\Delta(\epsilon) = 0$. Para encontrar una expresión de T_c hagamos $T = T_c$ en la Ec. (149). Para reducir esta ecuación debemos tomar en cuenta el modelo de interacción bosón-fermión de la Ec. (151). La densidad de estados $N(\epsilon)$ en 2D puede salir de la integral ya que es constante. Otra cosa que debemos tener presente es que el producto de la densidad de estados electrónicos de un sólo espín en la energía de Fermi E_F por el potencial de interacción V se le conoce como el parámetro adimensional de acoplamiento $\lambda \equiv N(E_F)V$ (ver [1]) y Tolmachev definió en Pág. 403 de [26] $V \equiv f^2/2\delta\epsilon$. Es decir,

$$\lambda \equiv \frac{f^2 N(E_F)}{2\delta\epsilon}. \quad (203)$$

Con todo lo anterior llegamos a una nueva forma de (149)

$$2[E_+(0) - 2\mu] = 2\delta\epsilon\lambda \int_{E_f}^{E_f+\delta\epsilon} d\epsilon \frac{1}{\epsilon - \mu} \tanh \frac{\epsilon - \mu}{2k_B T_c}; \quad (204)$$

donde utilizamos $\tanh(x) = -\tanh(-x)$ para quitarnos el valor absoluto de $|\epsilon - \mu|$. Introduciendo $E_+(0)$ en la forma dada en (143), identificando $\delta\epsilon = \hbar\omega_D$ y adimensionalizando con E_f llegamos a

$$1 + \frac{\overline{\hbar\omega_D}}{2} - \overline{\mu} = \frac{\overline{\hbar\omega_D}}{2} \lambda \int_1^{1+\overline{\hbar\omega_D}} d\overline{\epsilon} \frac{1}{\overline{\epsilon} - \overline{\mu}} \tanh \frac{\overline{\epsilon} - \overline{\mu}}{2\overline{T_c}} \quad (205)$$

donde la línea sobre la cantidad nos dice que está dividida entre E_f .

Por el momento, restringimos nuestras ecuaciones al caso 2D. El número total de fermiones por unidad de volumen n lo podemos despejar de (30)

$$n = \frac{N}{L^2} = \frac{mE_F}{\pi\hbar^2}, \quad (206)$$

donde se utilizó la forma de la densidad de estados dada en (18). Análogamente

$$n_f = 2 \int_0^{E_f} N(\epsilon) d\epsilon = \frac{mE_f}{\pi\hbar^2}, \quad (207)$$

Dividiendo (206) entre (207) obtenemos una relación entre la energía de Fermi y el parámetro E_f ,

$$\frac{n}{n_f} = \frac{E_F}{E_f}, \quad (208)$$

con la cual podemos pasar de (205) en unidades de E_f a una expresión en unidades de E_F

$$\frac{n_f}{n} + \frac{\nu}{2} - \tilde{\mu} = \frac{\nu}{2} \lambda \int_{\frac{n_f}{n}}^{\frac{n_f}{n} + \nu} d\tilde{\epsilon} \frac{1}{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}} \tanh \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{2\tilde{T}_c}; \quad (209)$$

aquí definimos $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F$ y $\tilde{\epsilon} \equiv \epsilon/E_F$.

La ecuación anterior tiene dos incógnitas: T_c y μ como función de n/n_f , por lo que debemos obtener otra ecuación si deseamos conocer T_c . Trabajemos con la Ec. de número (144) en su fase pura $2e$, es decir, $m_0 = 0$. En estas condiciones (144) toma la forma

$$n = \int_{2\Delta}^{\infty} M(\epsilon) d\epsilon \frac{2}{\exp[\beta(\epsilon + E_+(0) - 2\mu)] - 1} - \int_{2\Delta}^{\infty} M(\epsilon) d\epsilon \frac{2}{\exp[\beta(\epsilon - E_-(0) + 2\mu)] - 1} + \int_0^{\infty} N(\epsilon) d\epsilon \left[1 - \tanh \frac{\epsilon - \mu}{2k_B T_c} \right]. \quad (210)$$

La densidad de estados fermiónicos por unidad de volumen se encuentra en la Ec. (18). Para construir la densidad de estados bosónicos por unidad de volumen $M(\epsilon)$ consideremos la relación de dispersión lineal (138) que tiene la forma de (14). La densidad de estados para una relación de dispersión de esta forma se da en (15). Así, en (15) debemos hacer la identificación $E = \epsilon$, $B = 2\Delta$, $C_1 = (\lambda/2\pi)\hbar v_F$, $d = 2$ y $s = 1$, para obtener,

$$M(\epsilon) = \frac{2\pi}{\lambda^2 \hbar^2 v_F^2} [\epsilon - 2\Delta]. \quad (211)$$

Sustituyendo las densidades de estados en (210), adimensionalizada con E_f , se tiene

$$\begin{aligned} \frac{n}{n_f} &= \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \frac{n_f}{n} \int_{2\bar{\Delta}}^{\infty} d\bar{\epsilon} \frac{\bar{\epsilon} - 2\bar{\Delta}}{\exp[(\bar{\epsilon} + 2 + \bar{\delta}\bar{\epsilon} - 2\bar{\mu})/\bar{T}_c] - 1} \\ &- \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \frac{n_f}{n} \int_{2\bar{\Delta}}^{\infty} d\bar{\epsilon} \frac{\bar{\epsilon} - 2\bar{\Delta}}{\exp[(\bar{\epsilon} - 2 + \bar{\delta}\bar{\epsilon} + 2\bar{\mu})/\bar{T}_c] - 1} + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\bar{\epsilon} \left[1 - \tanh \frac{\bar{\epsilon} - \bar{\mu}}{2\bar{T}_c} \right] \end{aligned} \quad (212)$$

también se usaron (143) y (208). La línea sobre los parametros energéticos significa que están divididos por E_f ; $\bar{T} \equiv T/T_f$ con T_f la temperatura correspondiente a la energía E_f . En unidades de E_f la ecuación de número tiene la forma

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{\Delta}}^{\infty} d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon} - 2\tilde{\Delta}}{\exp\left\{[\tilde{\epsilon} + 2(n_f/n) + \nu - 2\tilde{\mu}]/\tilde{T}_c\right\} - 1} \\
&\quad - \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{\Delta}}^{\infty} d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon} - 2\tilde{\Delta}}{\exp\left\{[\tilde{\epsilon} - 2(n_f/n) + \nu + 2\tilde{\mu}]/\tilde{T}_c\right\} - 1} \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\epsilon \left[1 - \tanh \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{2\tilde{T}_c}\right], \tag{213}
\end{aligned}$$

la tilde sobre los parametros energéticos significa que están divididos por E_F ; $\bar{T} \equiv T/T_F$ con T_F la temperatura correspondiente a la energía de Fermi.

Análogamente, en la fase pura $2h$ ($n_0 = 0$) las ecuaciones para μ y T_c son

$$-\frac{n_f}{n} + \frac{\nu}{2} + \tilde{\mu} = \frac{\nu}{2} \lambda \int_{(n_f/n) - \nu}^{n_f/n} d\tilde{\epsilon} \frac{1}{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}} \tanh \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{2\tilde{T}_c} \tag{214}$$

y

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{\Delta}}^{\infty} d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon} - 2\tilde{\Delta}}{\exp\left\{[\tilde{\epsilon} + 2(n_f/n) + \nu - 2\tilde{\mu}]/\tilde{T}_c\right\} - 1} \\
&\quad - \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{\Delta}}^{\infty} d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon} - 2\tilde{\Delta}}{\exp\left\{[\tilde{\epsilon} - 2(n_f/n) + \nu + 2\tilde{\mu}]/\tilde{T}_c\right\} - 1} \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\epsilon \left[1 - \tanh \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{2\tilde{T}_c}\right]. \tag{215}
\end{aligned}$$

Con las Ecs. (209), (213), (214) y (215) obtenemos la forma de T_c a varios valores de λ , ésta se exhibe en la Figura 12. El valor más grande que tomamos para λ es el 2.89, ya que para valores más grandes, teóricamente, la resistividad crece al disminuir la temperatura, ver Figura 1 de [39]. También graficamos T_c para $\lambda = 1/2$ valor considerado como frontera entre en acoplamiento débil y fuerte. Este rango de valores de λ intenta mostrar que el modelo de interacción BCS con acoplamiento moderadamente débil es suficiente para predecir valores de T_c inusualmente grandes.

Los valores promedios experimentales de la temperatura de Debye y de Fermi para cupratos son $\Theta_D = 400K$ y $T_F = 12,000K$ (ver [40] y [41] respectivamente). Con esto obtenemos el coeficiente $\nu = \Theta_D/T_F = 0.033$, el cual usamos para obtener los resultados de la Figura 12.

Cuando se consideran sólo bosones 2e en el condensado la Figura 12 muestra curvas monótonas crecientes. Esto tiene una interpretación. Cuando n/n_f crece, como n es constante, n_f decrece y por tanto, el número de fermiones apareados aumenta. Bajo estas condiciones, según la teoría de la condensación de Bose-Einstein T_c debe aumentar [30].

Al calcular la temperatura de transición con el condensado formado sólo de bosones 2h, la única forma de elevar la temperatura de transición es elevar el número de pares 2h y la única forma de elevar el número de las pares 2h es elevar el número de electrones libres, ver ecuación (131). Es decir, para el caso 2h, T_c aumenta cuando n/n_f disminuye. Lo cual se refleja en las curvas en trazos de la Figura 12 que fueron calculadas considerando una condensación sólo de bosones 2h. Para este caso, las regiones monótonas crecientes se pueden ver como regiones inestables. De esta manera notamos que para cada valor de n/n_f donde hay una temperatura de transición estable hay una inestable.

En 2D no hay curvas en trazos para $\lambda = 1/2$ ya que sólo hay solución para T_c en valores de n/n_f menores o iguales a la unidad.

Las curvas T_c/T_F vs. n/n_f con $n_0 = 0$ deben de estar por arriba de aquellas con $m_0 = 0$. Esto es por que la superconductividad por huecos en cupratos tiene más alta T_c que la superconductividad por electrones [42]. En la Figura 12 vemos que al considerar en el condensado sólo pares de huecos se tienen más altas T_c 's que cuando se consideran en el condensado sólo pares de electrones.

Otra observación del resultado plasmado en la Figura 12 es que cuando $n/n_f \rightarrow 0$ tenemos $T_c/T_F \rightarrow \infty$. Esta “catástrofe” se exhibe aún cuando la relación de dispersión es cuadrática (ver Pág. 62 de [43]), donde la teoría de la condensación de Bose Einstein predice $T_c = 0$, ver [30]. Sin embargo, el parámetro n/n_f no puede ser menor a la unidad, el número de electrones libres no puede ser mayor al número total de electrones.

Cabe mencionar, por ejemplo, que en YBaCuO [44] y en HgBaCaCuO [45], los cuales pueden ser tratados en 2D, el condensado consiste de pares de electrones ya que el coeficiente de Hall se vuelve negativo por debajo de T_c . Para este caso, se puede descartar la condensación por parte de los pares de huecos.

En la Figura 13 mostramos curvas de la temperatura de transición en 3D con $\nu = \Theta_D/T_F = 0.005$, que es un valor experimental representativo. Para poder comparar los dos casos 3D y 2D tomamos los mismos valores de λ . El comportamiento de T_c en 2D y 3D es muy parecido. Todas las curvas para 2h tienen la forma de “hoz” que tiene la curva para $\lambda = 2.75$ en la Figura

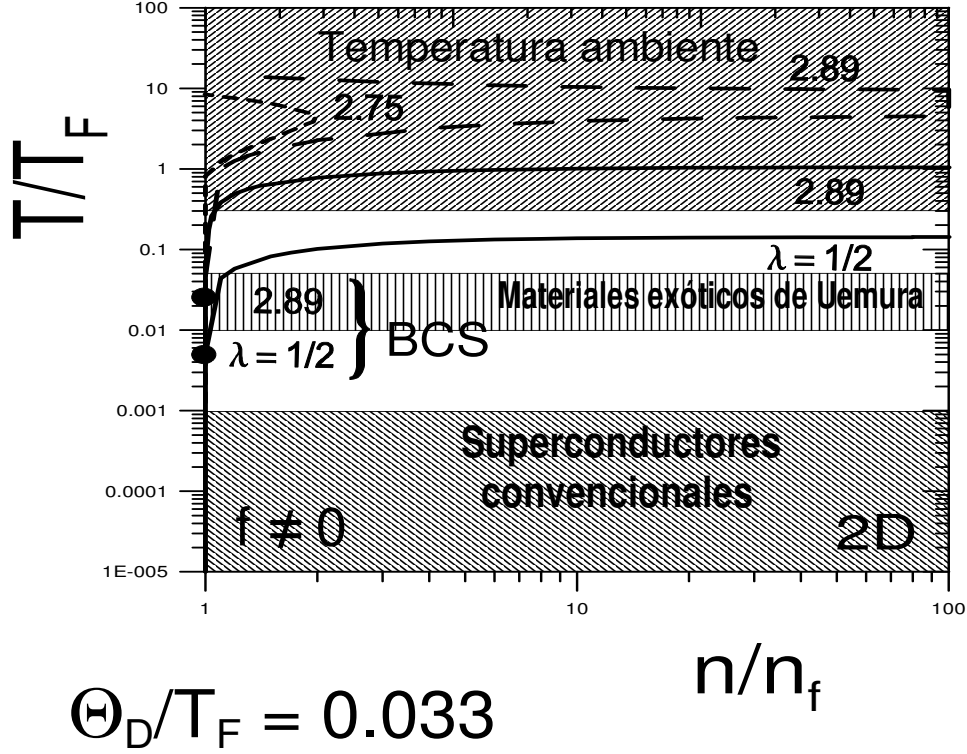


Figura 12: Las curvas en trazos nos dan el comportamiento para la fase con $n_0 = 0$. Para la fase con $m_0 = 0$ utilizamos curvas continuas. Todas las curvas están etiquetadas con el valor de λ que fueron calculadas. También incluimos, en puntos gruesos, la temperatura de transición que se obtiene por medio de BCS con $\lambda = 0.5$ y 2.89 en orden ascendente. Estas curvas fueron calculadas con $f \neq 0$.

12 solamente que para las demás el regreso se encuentra en valores de n/n_f tan grandes que no los incluimos en la figura.

El límite BCS se obtiene de hacer $n_B(T) = m_B(T)$ y $n_0(T) = m_0(T)$, lo que equivale a $n/n_f = 1$, ver (202). La temperatura BCS esta dada por

$$\frac{T_c}{T_F} = 1.14 \frac{\Theta_D}{T_F} \exp \left[-\frac{1}{\lambda} \right], \quad (216)$$

ver Ec. (3.29) de [1]. El punto negro en las Figuras 12 y 13 representa este límite, punto que debe coincidir con el cruce de las curvas continuas (representando a los pares de electrones) y en trazos (representando a los pares de huecos) con la misma λ . Considero importante mencionar que en 2D el cruce entre los dos tipos de curvas, con λ 's mayores a 2, se aleja del resultado

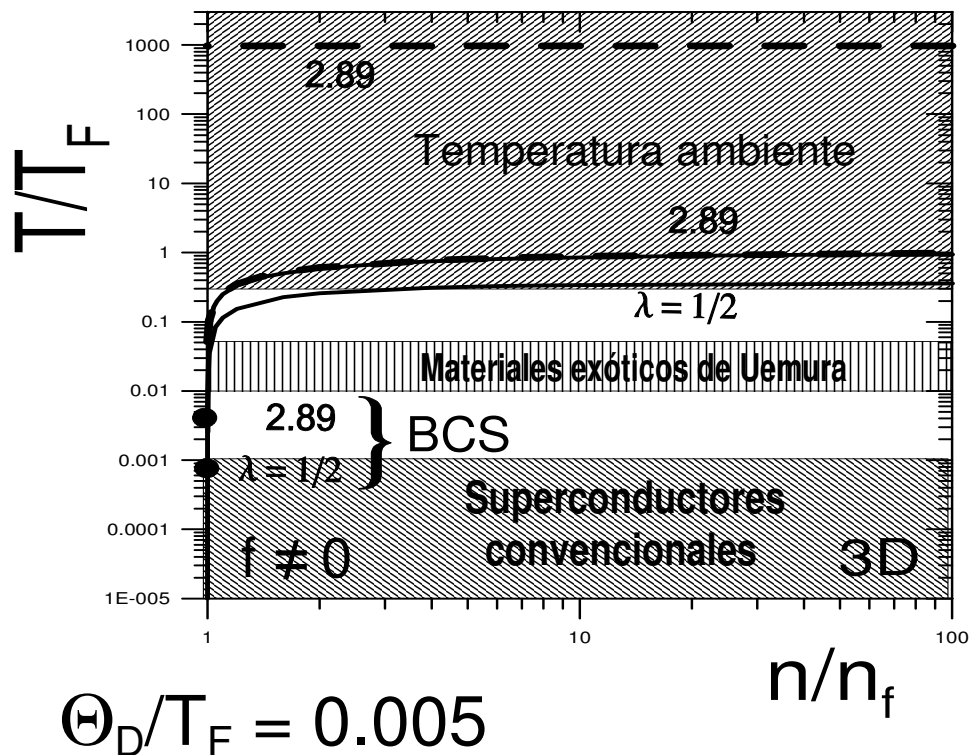


Figura 13: Las curvas en trazas nos dan el comportamiento para la fase con $n_0 = 0$. Las curvas continuas representan la fase con $m_0 = 0$. Todas las curvas están etiquetadas con el valor de λ que fueron calculadas. Los puntos gruesos señalan la temperatura de transición BCS para $\lambda = 1/2$ y 2.89 .

BCS, realizándose en valores mayores de T_c . Este alejamiento crece junto con λ .

Las curvas de las Figuras 12 y 13 están contenidas, en un buen tramo, en la región de temperaturas ambiente (RTSC, siglas de “room-temperature superconductivity”), saliéndose de esta región al acercarse al límite BCS. En general vemos que entre más grande es la diferencia entre el número de pares $2h$ y el número de pares $2e$, obtenemos una mayor temperatura de transición al estado condensado, o lo que es lo mismo, mayor temperatura de transición al estado superconductor.

4.7 Potencial químico fermiónico

De (209) y (213), obtenemos la forma del potencial químico fermiónico en la temperatura de transición, $\mu(T_c)$, como una función de n/n_f , para la fase $m_0 = 0$; en la Figura 14 ésta se encuentra en la región $n/n_f < 1$. De (214) y (215), obtenemos la forma de $\mu(T_c)$ como una función de n/n_f , para la fase $n_0 = 0$, la cual se exhibe en la región $n/n_f > 1$ de la Figura 14. En dicha figura vemos que el potencial químico fermiónico decae monótonicamente conforme disminuye el número de electrones libres.

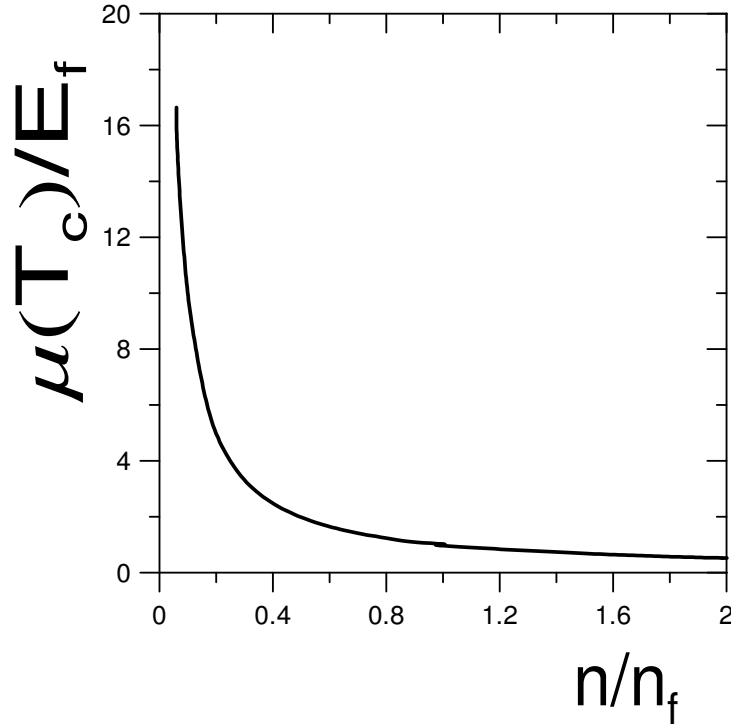


Figura 14: Comportamiento del potencial químico del sistema descrito por la teoría CBFM en 2D. A la derecha de $n/n_f = 1$ tenemos la fase pura $n_0 = 0$, la izquierda T_c/T_F la fase $m_0 = 0$.

4.8 Energía libre de Helmholtz

El estado de mínima energía potencial es el que determina en cual de las posibles fases de equilibrio termodinámico se encontrará un sistema. Un estado microscópico significa una

especificación en detalle del momento y las posiciones de todas las partículas. Así la energía E del sistema es la suma de las energías cinéticas y potenciales.

El principio fundamental de la mecánica estadística es que la probabilidad de encontrar al sistema en un cierto estado microscópico con energía E es proporcional a $\exp(-E/k_B T)$ (ver Ec. 7.7 de [9]). Todos estos estados microscópicos tienen la energía E vista macroscópicamente. Así, un estado macroscópico dado de energía E tendrá un gran número de estados microscópicos correspondientes al número de formas $p(E)$ en que la energía E puede ser particionada entre los muchos grados de libertad. Por lo tanto la probabilidad de ocurrencia de un estado macroscópico debe ser proporcional a $p(E)\exp(-E/k_B T)$. De (133), podemos reescribir esto como $\exp(-F/k_B T)$, donde $S \equiv k_B \ln[p(E)]$ es la entropía. De esto podemos ver que el estado más probable es el que corresponde al mínimo valor de F , a diferencia del sistema de una sola partícula en el cual el estado más probable es el que corresponde al mínimo valor de E . En $T = 0$ la minimización de F corresponde con la minimización de E , ya que para este caso, según (133), $F = E$. Este estado de más baja energía tiene sólo una forma de particionar la energía, es decir $p = 1$ lo que implica $S = 0$. El estado base es el más ordenado correspondiendo a entropía cero. Es evidente que a temperaturas lo suficientemente altas el término de la entropía en F puede dominar la energía libre. En general $p(E)$ y, por lo tanto, la entropía incrementa con la energía habiendo más formas de particionar la energía entre los grados de libertad. El correspondiente estado macroscópico es más desordenado.

A continuación se calcula la energía libre de Helmholtz en 2D como función de la temperatura de transición T_c con la ayuda del potencial gran canónico Ω .

Habiendo deducido las ecuaciones (209) y (213) que nos dan la temperatura crítica y el potencial químico como funciones del parámetro de simetría n/n_f , necesitamos una expresión para el potencial termodinámico en función de T_c y μ . Por tanto, sustituyamos $T = T_c$, $\Delta = 0$, $n_0 = 0$, y $m_0 = 0$, en (137), así,

$$\begin{aligned} \frac{\Omega(T_c)}{L^2} &= 2 \int_0^\mu d\epsilon N(\epsilon)(\epsilon - \mu) - 2k_B T_c \int_0^\mu d\epsilon N(\epsilon) \ln\{1 + \exp[\beta_c(\epsilon - \mu)]\} \\ &\quad - 2k_B T_c \int_\mu^\infty d\epsilon N(\epsilon) \ln\{1 + \exp[-\beta_c(\epsilon - \mu)]\} \\ &\quad + k_B T_c \int_{2\Delta}^\infty d\epsilon M(\epsilon) \ln\{1 - \exp[-\beta_c(\epsilon + 2E_f + \delta\epsilon - 2\mu)]\} \\ &\quad + k_B T_c \int_{2\Delta}^\infty d\epsilon M(\epsilon) \ln\{1 - \exp[-\beta_c(\epsilon - 2E_f + \delta\epsilon + 2\mu)]\}; \end{aligned} \quad (217)$$

donde se utilizaron las Ecs. (139) y (143). La densidad de estados fermiónicos y bosónicos por

unidad de volumen está dada en (18) y (211) respectivamente.

Tomando en cuenta la relación (208) así como (207) y $E_F = mv_F^2/2$ llegamos a otra relación que nos ayuda a obtener la expresión final del potencial gran canónico

$$\frac{2\pi E_f^2}{\lambda^2 \hbar^2 v_F^2} = \frac{\pi^2 n_f^2}{\lambda^2 n}. \quad (218)$$

Con la ayuda de las relaciones anteriores y adimensionalizando la última expresión para Ω con el parámetro E_f obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\Omega(\bar{T}_c)}{L^2 E_f n_f} &= -\frac{\bar{\mu}^2}{2} - \bar{T}_c \int_0^{\bar{\mu}} d\bar{\epsilon} \ln\{1 + \exp[(\bar{\epsilon} - \bar{\mu})/\bar{T}_c]\} \\ &\quad - \bar{T}_c \int_{\bar{\mu}}^{\infty} d\bar{\epsilon} \ln\{1 + \exp[-(\bar{\epsilon} - \bar{\mu})/\bar{T}_c]\} \\ &\quad + \bar{T}_c \frac{\pi^2 n_f}{\lambda^2 n} \int_{2\bar{\Delta}}^{\infty} d\bar{\epsilon} [\bar{\epsilon} - 2\bar{\Delta}] \ln\{1 - \exp[-(\bar{\epsilon} + 2 + \bar{\delta}\bar{\epsilon} - 2\bar{\mu})/\bar{T}_c]\} \\ &\quad + \bar{T}_c \frac{\pi^2 n_f}{\lambda^2 n} \int_{2\bar{\Delta}}^{\infty} d\bar{\epsilon} [\bar{\epsilon} - 2\bar{\Delta}] \ln\{1 - \exp[-(\bar{\epsilon} - 2 + \bar{\delta}\bar{\epsilon} + 2\bar{\mu})/\bar{T}_c]\}, \quad (219) \end{aligned}$$

donde la línea sobre las variables de energía significa su adimensionalización con E_f ; de la misma manera, $\bar{T}_c \equiv T_c/T_f$. Para escribir esta expresión en unidades de E_F basta con multiplicar todas las variables de energía por E_f/E_F ,

$$\begin{aligned} \frac{\Omega(\tilde{T}_c)}{N E_F} &= -\frac{\tilde{\mu}^2}{2} - \tilde{T}_c \int_0^{\tilde{\mu}} d\tilde{\epsilon} \ln\{1 + \exp[(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})/\tilde{T}_c]\} \\ &\quad - \tilde{T}_c \int_{\tilde{\mu}}^{\infty} d\tilde{\epsilon} \ln\{1 + \exp[-(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})/\tilde{T}_c]\} \\ &\quad + \tilde{T}_c \frac{\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{G}(0)}^{\infty} d\tilde{\epsilon} [\tilde{\epsilon} - 2\tilde{G}(0)] \ln\left\{1 - \exp[-(\tilde{\epsilon} + 2(n_f/n) + \tilde{\delta}\tilde{\epsilon} - 2\tilde{\mu})/\tilde{T}_c]\right\} \\ &\quad + \tilde{T}_c \frac{\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{G}(0)}^{\infty} d\tilde{\epsilon} [\tilde{\epsilon} - 2\tilde{G}(0)] \ln\left\{1 - \exp[-(\tilde{\epsilon} - 2(n_f/n) + \tilde{\delta}\tilde{\epsilon} + 2\tilde{\mu})/\tilde{T}_c]\right\}; \quad (220) \end{aligned}$$

la tilde significa las variables de energía están en unidades de E_F y la temperatura en unidades

de T_F . De (135) vemos que

$$\begin{aligned}
\frac{F(\tilde{T}_c)}{NE_F} &= \tilde{\mu} - \frac{\tilde{\mu}^2}{2} - \tilde{T}_c \int_0^{\tilde{\mu}} d\tilde{\epsilon} \ln\{1 + \exp[(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})/\tilde{T}_c]\} \\
&\quad - \tilde{T}_c \int_{\tilde{\mu}}^{\infty} d\tilde{\epsilon} \ln\{1 + \exp[-(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})/\tilde{T}_c]\} \\
&\quad + \tilde{T}_c \frac{\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{G}(0)}^{\infty} d\tilde{\epsilon} [\tilde{\epsilon} - 2\tilde{G}(0)] \ln \left\{ 1 - \exp[-(\tilde{\epsilon} + 2(n_f/n) + \tilde{\delta}\tilde{\epsilon} - 2\tilde{\mu})/\tilde{T}_c] \right\} \\
&\quad + \tilde{T}_c \frac{\pi^2}{\lambda^2} \int_{2\tilde{G}(0)}^{\infty} d\tilde{\epsilon} [\tilde{\epsilon} - 2\tilde{G}(0)] \ln \left\{ 1 - \exp[-(\tilde{\epsilon} - 2(n_f/n) + \tilde{\delta}\tilde{\epsilon} + 2\tilde{\mu})/\tilde{T}_c] \right\} \quad (221)
\end{aligned}$$

La forma de F sin tomar en cuenta los pares de huecos condensados se obtiene de (221) al utilizar la ecuación tipo gap (209) y la ecuación de número (213) para $\tilde{\mu}$ y \tilde{T}_c . Para obtener F sin pares de electrones condensados utilizamos (221), (214) y (215). En la Figura 15 se grafican estas dos ramas de F como una función de n/n_f . Para $n/n_f < 1$ son más estables los pares de huecos y para $n/n_f > 1$ más estables los pares de electrones. Notemos que, según (202), para $n/n_f(T) < 1$ el número de pares de huecos es mayor que el de pares de electrones y para $n/n_f(T) > 1$ lo contrario. En $n/n_f = 1$ tienen la misma estabilidad, estamos en el caso BCS donde hay igual número de pares de electrones y huecos.

4.9 Temperatura de transición en $2 \leq d \leq 3$

Veamos el comportamiento de T_c tomando la dimensión espacial en el intervalo que va desde $d = 2$ hasta $d = 3$. Para esto restrinjámonos a $m_0 = 0$. Recordemos que en la temperatura de transición el número de bosones condensados es cero, $n_0 = 0$, comparados con los bosones excitados y que $\Delta(\epsilon) = 0$. Con esto, la Ec. (144) se reduce a

$$\begin{aligned}
n &= \int_{2\Delta}^{\infty} M(\epsilon) d\epsilon \frac{2}{\exp[\beta_c(\epsilon + 2E_f + \delta\epsilon - 2\mu)] - 1} \\
&\quad - \int_{2\Delta}^{\infty} M(\epsilon) d\epsilon \frac{2}{\exp[\beta_c(\epsilon - 2E_f + \delta\epsilon + 2\mu)] - 1} \\
&\quad + \int_0^{\infty} N(\epsilon) d\epsilon \left[1 - \tanh \frac{1}{2} \beta_c(\epsilon - \mu) \right]. \quad (222)
\end{aligned}$$

Tomemos la relación de dispersión cuadrática (16) para describir a las partículas fermiónicas. Haciendo $C_2 = \hbar^2/2m$, $s = 2$ y $B = 0$ en (14) y (15) construimos la densidad de estados en

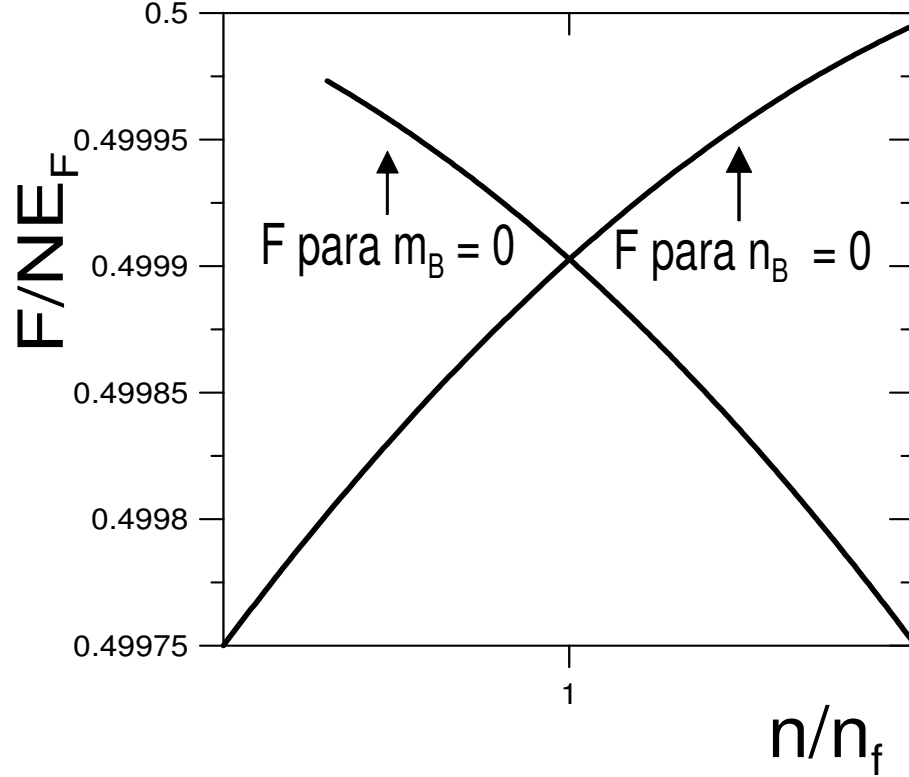


Figura 15: F/NE_F vs. n/n_f . En la región $n/n_f < 1$ son más estables los condensados con pares de huecos y en $n/n_f > 1$ más estables los condensados con pares de electrones.

d -dimensiones para dichas partículas,

$$N(\epsilon) = \frac{g(E)}{L^d} = \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{d/2} \frac{\epsilon^{d/2-1}}{\Gamma(d/2)\hbar^d}. \quad (223)$$

Busquemos una relación de dispersión bosónica. Tomando el caso de la relación de dispersión lineal, $s = 1$, el coeficiente de proporcionalidad entre ϵ y K en 2D es

$$C_1 = (\lambda/2\pi)\hbar v_F \quad (224)$$

y en 3D

$$C_1 = (\lambda/4)\hbar v_F. \quad (225)$$

Sin embargo, necesitamos una expresión para C_1 que recorra el intervalo continuo $d = 1 - 2$. Como una aproximación a dicha expresión proponemos que sea lineal, es decir,

$$C_1 = \frac{d(\pi - 2) - 2\pi + 6}{4\pi} \lambda \hbar v_F, \quad (226)$$

que en $d = 2$ reproduce a (224) y en $d = 3$ reproduce a (225).

Sustituyamos $s = 1$, $B = 2\Delta$ y el valor obtenido para C_1 en (15)

$$M(\varepsilon) = \frac{g(E)}{L^d} = \frac{d}{(2\sqrt{\pi})^d} \frac{(4\pi)^d [\varepsilon - 2\Delta]^{d-1}}{\Gamma(1 + d/2) [\{d(\pi - 2) - 2\pi + 6\} \lambda \hbar v_F]^d}. \quad (227)$$

Ahora veamos la forma del número total de fermiones en d -dimensiones. Como dicho número es independiente de la temperatura, nos conviene hacer $T = 0$, donde la distribución de Fermi vale uno de $\varepsilon = 0$ a $\varepsilon = E_F$ y cero en cualquier otro intervalo de energías, es decir,

$$n = 2 \int_0^{E_F} N(\varepsilon) d\varepsilon = 2 \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{d/2} \frac{E_F^{d/2}}{\Gamma(d/2 + 1) \hbar^d}. \quad (228)$$

Análogamente,

$$n_f = 2 \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{d/2} \frac{E_f^{d/2}}{\Gamma(d/2 + 1) \hbar^d}. \quad (229)$$

Dividiendo estas dos relaciones obtenemos una relación entre n y n_f

$$\frac{n}{n_f} = \left(\frac{E_F}{E_f}\right)^{d/2} \quad (230)$$

Auxiliándonos de estas relaciones y haciendo $y = \varepsilon/E_f$ y $x = \varepsilon/E_f$ la ecuación de número (222) se reescribe como

$$\begin{aligned} \frac{n}{n_f} = & \frac{2^{d-1} d \pi^d}{\lambda^d [d(\pi - 2) - 2\pi + 6]^d} \frac{n_f}{n} \int_{2\Delta}^{\infty} dy \frac{2[y - 2\Delta]^{d-1}}{\exp[(y + 2 + \overline{\delta\varepsilon} - 2\overline{\mu})/\overline{T}_c] - 1} \\ & - \frac{2^{d-1} d \pi^d}{\lambda^d [d(\pi - 2) - 2\pi + 6]^d} \frac{n_f}{n} \int_{2\Delta}^{\infty} dy \frac{2[y - 2\Delta]^{d-1}}{\exp[(y - 2 + \overline{\delta\varepsilon} + 2\overline{\mu})/\overline{T}_c] - 1} \\ & + \frac{d}{4} \int_0^{\infty} dx x^{d/2-1} \left[1 - \tanh \frac{x - \overline{\mu}}{2\overline{T}_c}\right] \end{aligned} \quad (231)$$

donde la barra significa que la cantidad está dividida por E_f .

Ahora encontremos la expresión para la ecuación tipo gap (149). Si en dicha ecuación sustituimos (140) y (151), recordando que estamos considerando el caso $m_B = 0$,

$$2[E_+(0) - 2\mu] = \int_{E_f}^{E_f + \delta\varepsilon} N(\varepsilon) d\varepsilon \frac{f^2}{\varepsilon - \mu} \tanh \frac{\varepsilon - \mu}{2k_B T_c}, \quad (232)$$

y en unidades de E_f

$$1 + \frac{\overline{\delta\varepsilon}}{2} - \mu = \lambda \frac{\overline{\delta\varepsilon}}{2} \left(\frac{n_f}{n}\right)^{1-2/d} \int_1^{1+\overline{\delta\varepsilon}} dx \frac{x^{d/2-1}}{x - \overline{\mu}} \tanh \frac{x - \overline{\mu}}{2\overline{T}_c}. \quad (233)$$

Nos conviene escribir las ecuaciones en términos de $\tilde{\delta} = \delta\varepsilon/E_F$ en lugar de $\overline{\delta\varepsilon}$, ya que el primero se puede relacionar con el parámetro fenomenológico ν . La Ec. (231) queda como

$$\begin{aligned} \frac{n}{n_f} &= \frac{2^{d-1}d\pi^d}{\lambda^d[d(\pi-2)-2\pi+6]^d} \frac{n_f}{n} \int_{2\overline{\Delta}}^{\infty} dy \frac{2[y-2\overline{\Delta}]^{d-1}}{\exp\left\{[y+2+\tilde{\delta}\varepsilon(n_f/n)^{2/d}-2\overline{\mu}]/\overline{T}_c\right\}-1} \\ &\quad - \frac{2^{d-1}d\pi^d}{\lambda^d[d(\pi-2)-2\pi+6]^d} \frac{n_f}{n} \int_{2\overline{\Delta}}^{\infty} dy \frac{2[y-2\overline{\Delta}]^{d-1}}{\exp\left\{[y-2+\tilde{\delta}\varepsilon(n_f/n)^{2/d}+2\overline{\mu}]/\overline{T}_c\right\}-1} \\ &\quad + \frac{d}{4} \int_0^{\infty} dx x^{d/2-1} \left[1 - \tanh \frac{x-\overline{\mu}}{2\overline{T}_c}\right] \end{aligned} \quad (234)$$

y la (233) como

$$\left(\frac{n_f}{n}\right)^{2/d} + \frac{\tilde{\delta}\varepsilon}{2} - \mu \left(\frac{n_f}{n}\right)^{2/d} = \lambda \frac{\tilde{\delta}\varepsilon}{2} \left(\frac{n_f}{n}\right)^{1-2/d} \int_1^{1+\tilde{\delta}\varepsilon\left(\frac{n_f}{n}\right)^{2/d}} dx \frac{x^{d/2-1}}{x-\overline{\mu}} \tanh \frac{x-\overline{\mu}}{2\overline{T}_c}, \quad (235)$$

Con estas ecuaciones obtenemos la gráfica de la Figura 16 que nos señala un comportamiento decreciente de T_c/T_F con la dimensión espacial del sistema, en el intervalo $2 \leq d \leq 3$, cuando estamos alrededor del caso BCS. En dicha gráfica se nota que cuando el parámetro de simetría n/n_f crece, la temperatura de transición aumenta.

4.10 CBFM con $f = 0$

Si en el presente modelo despreciamos la interacción entre los electrones desapareados y los $2e$ -CP, lo mismo para la interacción entre los huecos desapareados y los $2h$ -CP, el potencial termodinámico, dado en (137) se reduce a

$$\begin{aligned} \frac{\Omega_0(T, L^2, \mu, N_0, M_0)}{L^d} &= [E_+(0) - 2\mu]n_0(T) + [2\mu - E_-(0)]m_0(T) \\ &\quad - \frac{k_B T}{\pi} \int_0^{\infty} k dk \ln[1 + \exp\{-\beta(\epsilon_k - \mu)\}] \\ &\quad + \frac{k_B T}{2\pi} \int_{0^+}^{\infty} K dK \ln[1 - \exp\{-\beta[E_+(\mathbf{K}) - 2\mu]\}] \\ &\quad + \frac{k_B T}{2\pi} \int_{0^+}^{\infty} K dK \ln[1 - \exp\{-\beta[2\mu - E_-(\mathbf{K})]\}], \end{aligned} \quad (236)$$

con las definiciones $n_0(T) \equiv N_0(T)/L^2$ y $m_0(T) \equiv M_0(T)/L^2$.

De la relación termodinámica $N = -\partial\Omega_0/\partial\mu$, podemos encontrar el número total de electrones al derivar el potencial termodinámico con respecto al potencial químico, así,

$$n \equiv N/L^2 = n_f(T) + 2n_B(T) - 2m_B(T), \quad (237)$$

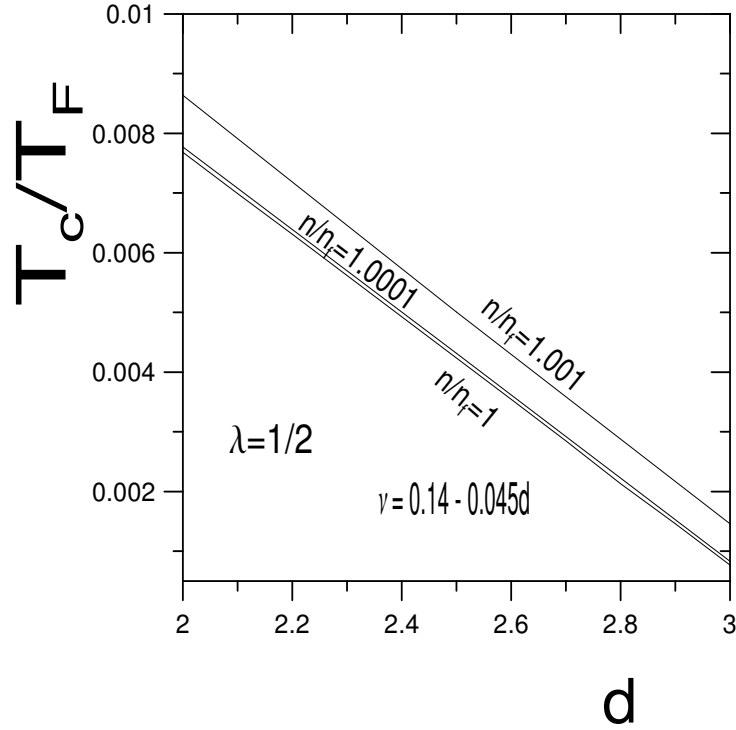


Figura 16: Comportamiento de T_c/T_F con la dimensión espacial d a diferentes valores de n/n_f .

donde

$$n_f(T) \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} k dk [\exp\{\beta(\epsilon_k - \mu)\} + 1]^{-1}, \quad (238)$$

$$n_B \equiv n_0(T) + \frac{1}{2\pi} \int_{0+}^{\infty} K dK [\exp\{\beta[E_+(0) - 2\mu + \epsilon_K]\} - 1]^{-1} \quad (239)$$

y

$$m_B \equiv m_0(T) + \frac{1}{2\pi} \int_{0+}^{\infty} K dK [\exp\{\beta[2\mu - E_-(0) + \epsilon_K]\} - 1]^{-1}. \quad (240)$$

La ecuación de número (237) nos asegura la conservación del número de partículas al transformarse de fermiones a bosones y viceversa.

Con el fin de simplificar nuestra ecuación de número escribamos la densidad de número n en términos de k_F . Así, sustituyamos $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ en (206) para obtener

$$n = \frac{k_F^2}{2\pi}. \quad (241)$$

Sustituyendo este resultado en (237), junto con las definiciones (238), (239) y (240), llegamos a

$$\begin{aligned} \frac{k_F^2}{2} &= \int_0^\infty k dk [\exp\{\beta(\epsilon_k - \mu)\} + 1]^{-1} \\ &+ 2\pi n_0(T) + \int_{0+}^\infty K dK [\exp\{\beta[E_+(0) - 2\mu + \epsilon_K]\} - 1]^{-1} \\ &- 2\pi m_0(T) - \int_{0+}^\infty K dK [\exp\{\beta[2\mu - E_-(0) + \epsilon_K]\} - 1]^{-1}. \end{aligned} \quad (242)$$

Para equilibrio termodinámico debemos tener un valor mínimo de Ω_0 con respecto a n_0 y m_0 . Al derivar la ecuación (236) respecto a n_0 sólo sobrevive el primer sumando, ya que es el único que tiene dependencia en n_0 . Al derivar la ecuación (236) respecto a m_0 sólo sobrevive el segundo sumando, ya que es el único que tiene dependencia en m_0 . Así, llegamos a

$$\frac{\partial \Omega_0}{\partial N_0} = E_+(0) - 2\mu = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial \Omega_0}{\partial M_0} = 2\mu - E_-(0) = 0. \quad (243)$$

Imponiendo $E_+(0) = 2\mu$ sólo la primera ecuación es satisfecha. Esto quiere decir que $M_0 = 0$, así que estamos en la fase pura $2e$ -CP. La condensación de Bose Einstein BEC ocurre por abajo de una temperatura T_c determinada por $n_0(T_c) = 0$. Para el presente caso la Ec. (143), con $\delta\varepsilon = \hbar\omega_D$, es

$$2\mu = 2E_f + \hbar\omega_D \quad \text{y} \quad E_-(0) = 2E_f - \hbar\omega_D. \quad (244)$$

Con lo anterior y sustituyendo $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ y $\epsilon_K = 2\Delta + \lambda \hbar v_F K / 2\pi$ (ver Ec. (69) de [34]), después de adimensionalizar con E_F , la ecuación de número (242) se reduce a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} &= \int_0^\infty \tilde{k} d\tilde{k} [\exp\{(\tilde{k}^2 - \tilde{n}^{-1} - \frac{\nu}{2})/\tilde{T}_c\} + 1]^{-1} \\ &+ \int_{0+}^\infty \tilde{K} d\tilde{K} [\exp\{(2\tilde{\Delta}(0) + \lambda\tilde{K}/\pi)/\tilde{T}_c\} - 1]^{-1} \\ &- \int_{0+}^\infty \tilde{K} d\tilde{K} [\exp\{(2\nu + 2\tilde{\Delta}(0) + \frac{\lambda\tilde{K}}{\pi})/\tilde{T}_c\} - 1]^{-1}. \end{aligned} \quad (245)$$

en esta ecuación hemos definido $\tilde{k} \equiv k/k_F$, $\tilde{K} \equiv K/k_F$, $\tilde{n} \equiv n/n_f$, $\tilde{T}_c \equiv T_c/T_F$, $\tilde{\Delta}(0) \equiv \Delta(0)/E_F$ y $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F$.

La función polylogaritmo, $PolyLog[\sigma, -az]$, está definida en [46] como sigue

$$PolyLog[\sigma, -az] = -\frac{1}{a\Gamma\sigma} \int_0^\infty dx \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1} \exp x + a} = \frac{1}{a^2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-az)^l}{l^\sigma}. \quad (246)$$

Cuando $a = -1$ esta función se reduce a la integral de Bose $g_\sigma(z)$, que tiene la forma

$$g_{d/s}(z_B) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z_B^l}{l^{d/s}}, \quad (247)$$

ver Apéndice E de [29]. Ésta a su vez, para $z = 1$ coincide con la zeta de Riemann, $\zeta(\sigma)$, ver Apéndice E de [29]. Para $a = 1$ la función $PolyLog[\sigma, -az]$ se vuelve la integral de Fermi $f_n(z)$ definida en el Apéndice D de [29] y que tiene la forma

$$f_n(z_e) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} \frac{z_e^l}{l^n}. \quad (248)$$

donde $z_e = \exp\left[\frac{\tilde{\mu}_e}{\tilde{T}}\right]$. Con la ayuda de dichas funciones la igualdad (245) toma la forma

$$\begin{aligned} 1/2 &= -\frac{\tilde{T}_c}{2} PolyLog[1, -\exp\{(\tilde{n}^{-1} + \frac{\nu}{2})/\tilde{T}_c\}] \\ &+ \left(\frac{\pi\tilde{T}_c}{\lambda}\right)^2 \{PolyLog[2, \exp(-2\nu/\sinh(1/\lambda)/\tilde{T}_c)] \\ &- PolyLog[2, \exp\{-[2\nu + 2\nu/\sinh(1/\lambda)]/\tilde{T}_c\}]\}; \end{aligned} \quad (249)$$

donde se tomó la forma de Δ dada por

$$\tilde{G}(0) = \frac{\nu}{\sinh(1/\lambda)}, \quad (250)$$

ver Ec. (2.40) de [1].

Para obtener la ecuación correspondiente a la fase pura $2h$ -CP del condensado de Bose-Einstein debemos tomar $E_-(0) = 2\mu$ con lo cual solamente la segunda igualdad de (243) es satisfecha. De esta forma, siguiendo un procedimiento análogo con el que obtuvimos (249) podemos obtener la correspondiente ecuación de número para la fase pura $2h$ -CP la cual tiene la forma

$$\begin{aligned} 1/2 &= -\frac{\tilde{T}_c}{2} PolyLog[1, -\exp\{(\tilde{n}^{-1} - \frac{\nu}{2})/\tilde{T}_c\}] \\ &+ \left(\frac{\pi\tilde{T}_c}{\lambda}\right)^2 \{PolyLog[2, \exp\{-[2\nu + 2\tilde{G}(0)]/\tilde{T}_c\}] \\ &- PolyLog[2, \exp(-2\tilde{G}(0)/\tilde{T}_c)]\}. \end{aligned} \quad (251)$$

Usando (249) se obtuvieron las curvas continuas de la Figura 17 y con (251) las curvas en trazas. En esta figura se grafica T/T_F vs. n/n_f para $\nu = \Theta_D/T_F = 0.033$ a varios valores de λ . En dicha figura se muestra que para la fase pura $2e$ -CP siempre se obtiene una curva monótona creciente para la temperatura de transición. Esto es debido a que cuando la superconductividad es debida sólo a pares de electrones, la temperatura de transición es proporcional al número de $2e$, ver Ec. (9).

Para la fase pura $2h$ -CP cuando n/n_f decrece (es decir el número de fermiones libres crece) la temperatura de transición crece. Esto es de esperarse por que cuando la superconductividad es debida sólo a los pares de huecos, la temperatura de transición aumenta con el número de pares de huecos (que son las que juegan el rol de los bosones, ver Ec. (9)), y el número de $2h$ crece con el incremento de electrones libres, ver ecuación (131). Podemos decir que el intervalo en que crece T_c con n/n_f , para la fase pura $2h$ -CP, esta formado por estados inestables.

Por otro lado, observemos que para $n_0 = 0$ tenemos una T_c más grande que para $m_0 = 0$ (ver Figura 17). Lo cual no es de extrañarse ya que la superconductividad por huecos en cupratos tiene más alta T_c que la superconductividad por electrones [42].

Cabe mencionar que para los valores utilizados de λ y de Θ_D/T_F no hay diferencia significativa entre los resultados obtenidos con $f \neq 0$, ver Figura 12, y los resultados obtenidos con $f = 0$, ver Figura 17. Sin embargo, cuando tomamos $\Theta_D/T_F = 0,35$ la diferencia fundamental del comportamiento de la temperatura de transición como función del parámetro de simetría es que con $f = 0$ no hay intersección entre la curva $n_0 = 0$ y su correspondiente, respecto a su valor de λ , $m_0 = 0$. Recordemos que el cruce, como se da en $n/n_f = 1$, nos da el valor BCS. Esto refleja el acierto del modelo CBFM al introducir la interacción entre los electrones desapareados y los electrones o huecos apareados.

Reescribiendo la ecuación de número para la fase pura $2e$ -CP ahora con relación de dispersión bosónica cuadrática, $\varepsilon_K = \hbar^2 K^2/2m$, obtenemos,

$$1 = \tilde{T}_c \int_0^\infty dx [\exp\{x - (\tilde{n}^{-1} + \frac{\nu}{2})/\tilde{T}_c\} + 1]^{-1} + \tilde{T}_c g_1(1) - \tilde{T}_c \int_{0^+}^\infty dx [\exp\{2\nu/\tilde{T}_c\} \exp\{x\} - 1]^{-1}, \quad (252)$$

donde $x = \tilde{K}^2/\tilde{T}_c$. Como $g_1(1)$ diverge (ver Apéndice D de [29]), la ecuación anterior nos lleva a una aparente contradicción. De un lado de la igualdad tenemos la unidad y del otro lado una divergencia. Propongamos $\tilde{T}_c = 0$. En la primera integral, como $(\tilde{n}^{-1} + \frac{\nu}{2})/\tilde{T}_c \rightarrow \infty$, el integrando vale uno a menos que x sea infinito, donde nuestra función vale $1/2$. Como una buena aproximación, podemos tomar nuestro integrando como la unidad si tomamos el límite superior de la integral como $(\tilde{n}^{-1} + \frac{\nu}{2})/\tilde{T}_c$. Con esta idea, después de realizar la primera integral, la ecuación (252) se reduce a

$$1 = \tilde{n}^{-1} + \frac{\nu}{2} + \tilde{T}_c g_1(1) - \tilde{T}_c \int_{0^+}^\infty dx [\exp\{2\nu/\tilde{T}_c\} \exp\{x\} - 1]^{-1}. \quad (253)$$

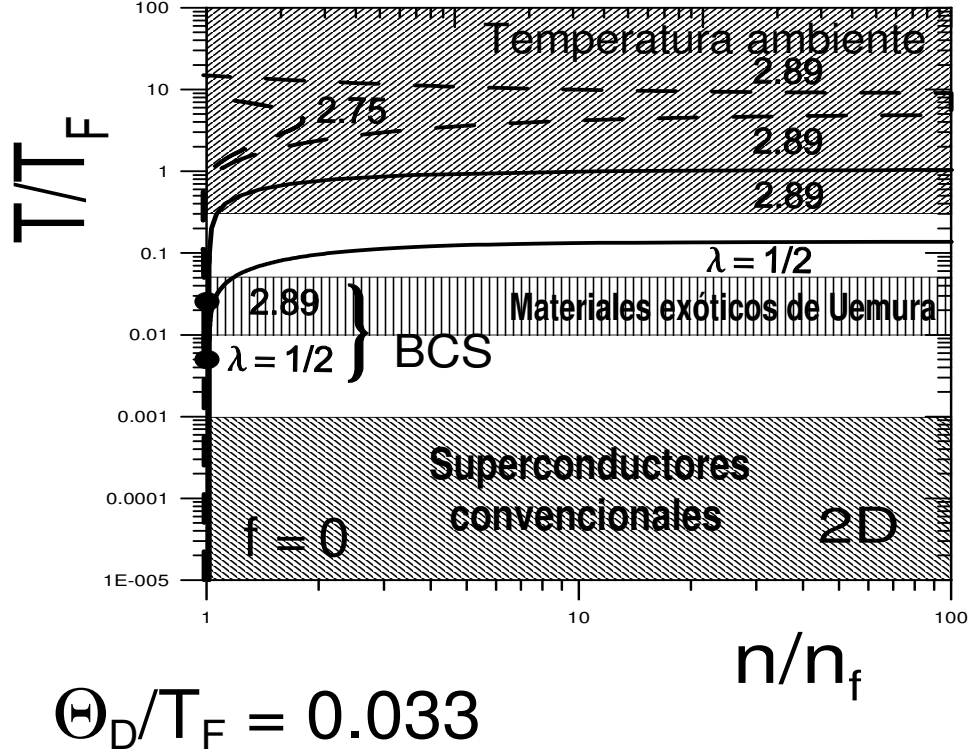


Figura 17: Las curvas continuas nos dan el comportamiento para la fase $m_0 = 0$. Para la fase $n_0 = 0$ utilizamos las curvas en trazas. Todas las curvas están etiquetadas con su valor de λ . Los dos puntos negros indican el valor BCS de T_c/T_F con $\lambda = 1/2$ y 2.89 en forma ascendente. Estas curvas fueron calculadas con $f = 0$.

La solución a esta ecuación es $\tilde{T}_c = 0$, ya que sólo este valor contrarresta la divergencia de $g_1(1)$; además el integrando se hace cero.

Para la fase pura $2h$ -CP tenemos la misma conclusión

$$1 + \tilde{n}^{-1} - \frac{\nu}{2} = \tilde{T}_c g_1(1). \quad (254)$$

El que T_c sea cero en 2D para relación de dispersión cuadrática, es un resultado muy conocido, ver Ec. (9). La teoría de la condensación de Bose-Einstein concluye que no hay estado condensado para sistemas tales que $d/s \leq 1$ [30]. El mismo resultado se obtiene si en CBFM hacemos $\lambda = 0$ en vez de $f = 0$. Esto resulta de que en la temperatura crítica el potencial químico bosónico alcanza el valor del estado base de energía, es decir,

$$\mu_B = 2\mu = 2E_f + \hbar\omega_D = E_+(0) \quad (255)$$

o bien,

$$\mu_B = 2\mu = 2E_f - \hbar\omega_D = E_-(0) \quad (256)$$

lo cual es la condición para obtener las fases puras $2e$ -CP y $2h$ -CP respectivamente.

Para CBFM con f finito el potencial químico bosónico no alcanza el estado base del espectro bosónico, esto es debido al mecanismo de formación y destrucción de pares de fermiones lo que está reflejado en las ecuaciones del potencial químico (149) y (150).

La discusión más importante de este capítulo es la generalización de la teoría BCS al alejarnos de la simetría perfecta entre el número de pares de electrones y de huecos en el estado condensado. Esto nos llevó a obtener más altas temperaturas de transición teóricas. Según CBFM, si experimentalmente se pudieran aumentar el número de pares de partículas por sobre el número de pares de huecos en un material superconductor, se podría llegar a una T_c del orden de la temperatura ambiente. Más aún, si en este mismo límite los portadores de carga son pares de huecos se podría llegar a T_c 's todavía más altas que si los portadores fueran pares de partículas, ver figuras 12, 13 y 17. Esto resalta la idea que hemos llevado a lo largo de este trabajo al defender la participación de los pares de huecos en el fenómeno de la superconductividad.

También debemos mencionar que el papel que juega la dimensionalidad es irrelevante en el incremento de la temperatura de transición al alejarnos de la simetría perfecta, ver figuras 12 y 13. Aunque muy cerca de la simetría perfecta la temperatura de transición es menor en 3D.

Capítulo 5

Conclusiones

- Tratando a un sistema superconductor como una mezcla ideal de fermiones y bosones encontramos que la cúspide del calor específico que exhiben gráficas experimentales en superconductores considerados por algunos autores en 2D, como por ejemplo los cupratos, desaparece conforme disminuye el número de bosones. Este resultado reafirma que los pares de Cooper, introducidos a la teoría de la superconductividad por BCS, los cuales son los causantes de la transición al estado superconductor, pueden tratarse como bosones.

- Para $T > 0.5T_c$ y $d = 3, 2$ y 1 la relación de dispersión bosónica es lineal en su fase pura (sólo $2e-$ o $2h-$ CP). Para más bajos valores de T 's uno puede argumentar que una fase mixta de BEC conteniendo $2e-$ y $2h-$ CP's es más estable (es decir, tiene una energía libre de Helmholtz más baja).

- Al utilizar una relación de dispersión que no toma en cuenta el papel que juegan los pares de huecos en el mecanismo que conduce a la superconductividad, la temperatura de transición tiende a $T_c \cong 0.202T_F$ (donde T_F es la temperatura de Fermi) cuando el acoplamiento tiende a cero. Esta temperatura es grande, y aún más tomado en cuenta que el acoplamiento entre fermiones para formar un par bosónico es cero. Físicamente esperaríamos que, al ser muy difícil el apareamiento, la temperatura de transición al estado condensado sea muy chica de modo que la vibración térmica de la red cristalina sea lo suficientemente pequeña de forma que no pueda impedir el apareamiento. Al introducir una relación de dispersión que toma en cuenta la participación de los pares de huecos en la superconductividad se obtiene que cuando el acoplamiento tiende a cero la temperatura de transición también tiende a cero, como se espera físicamente. De esto también notemos que el tratamiento bosónico que se le da a los pares de Cooper no contrasta con el acoplamiento fermiónico introducido en la teoría BCS.

Algo análogo ocurre en 3D. Cuando utilizamos la relación de dispersión independiente de λ encontramos que al tender a cero el acoplamiento, T_c tiende a $0.988T_F$. Al introducir la dependencia de λ en la relación de dispersión T_c tiende a cero cuando el acoplamiento tiende a cero.

- Por medio de la teoría CBFM se estudió de la energía libre de Helmholtz en 2D. Encontramos que para $n/n_f < 1$ son más estables los pares de huecos y para $n/n_f > 1$ más estables los pares de electrones. En $n/n_f = 1$ tienen la misma estabilidad, estamos en el caso BCS donde

hay igual número de pares de electrones y huecos.

- En todas nuestras gráficas de T_c/T_F vs. n/n_f vemos que cuando el condensado consta sólo de pares de huecos la T_c es más grande que cuando el condensado consta únicamente de pares de electrones. Resultado que concuerda con resultados experimentales.

- Otro resultado de interés que nos arroja el análisis de las curvas T_c/T_F vs. n/n_f es que conforme λ crece por arriba de $1/2$ la teoría CBFM se aleja de BCS. En $\lambda = 1/2$ se obtiene, por medio de CBFM, el valor de T_c obtenido con BCS, pero en $\lambda = 2.89$ CBFM predice una T_c ligeramente más grande que BCS.

- La conclusión más importante que se obtiene del estudio de la teoría CBFM es que para acoplamiento fermiónico moderadamente débil el modelo de interacción BCS es suficiente para predecir valores de T_c inusualmente grandes. Cuanto mayor es la diferencia entre el número de pares de electrones y el número de pares de huecos, mayor es la temperatura de transición al estado superconductor.

- También se analizó la teoría CBFM sin interacción entre fermiones y bosones. Al introducir la relación de dispersión cuadrática para bosones en CBFM con $f = 0$, o alternativamente $\lambda = 0$, se obtiene $T_c = 0$, resultado que concuerda con la teoría de la condensación de Bose-Einstein. Esto resulta de que al hacer $f = 0$, o bien, $\lambda = 0$, a la temperatura T_c el potencial químico bosónico es igual al estado base de energía bosónica.

Al calcular T_c con interacción entre fermiones y bosones se puede ver que, con f y λ distintos de cero, caso en el que $T_c \neq 0$, el potencial químico bosónico no alcanza el estado base del espectro bosónico. Esto nos hace pensar que la distancia entre el potencial químico bosónico y el estado base es proporcional al intervalo de energías donde se forman los pares.

- Trabajando con la teoría CBFM en simetría perfecta y con la teoría BCS se llegó al mismo resultado al calcular la energía de condensación. Este resultado refuerza la idea que CBFM reproduce BCS haciendo $m_0(T) = n_0(T)$ así como $m_B(T) = n_B(T)$.

- Estudiamos la interacción atractiva entre los electrones (o huecos) de la teoría CBFM como una sola partícula, de masa reducida en el centro de masa, en un potencial atractivo que es una función de la coordenada relativa. Tratamos dicho potencial como una delta atractiva $V(\mathbf{r}) = -V_0\delta(\mathbf{r})$, obtenemos una generalización, al sistema en que se considera, no sólo los electrones y pares de electrones, sino también huecos y pares de huecos, de las ecuaciones que W. Miyake publicó en 1983 .

- A través de la teoría CBFM se puede llegar a una descripción teórica de superconduc-

tores tanto de alta como de baja temperatura de transición. Con ésta se podría investigar las condiciones bajo las cuales se puede dar la superconductividad a temperatura ambiente.

Bibliografía

- [1] J. Bardeen, L.N. Cooper & J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108** 1175 (1957).
- [2] J.M. Blatt, *Theory of superconductivity* (Academic Press, N.Y., 1964).
- [3] K. Miyake, Prog. Teor. Phys. **69**, 1794 (1983).
- [4] M. Casas, S. Fujita, M. de Llano, A. Puente, A. Rigo & M. A. Solís, Phys. C **245**, 93 (1998).
- [5] S.K. Adhikari, M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. Fortes, M.A. Solís, M. de Llano, A.A. Valladares & O. Rojo, Phys. Rev. B **62**, 8671 (2001).
- [6] M. Fortes, M.A. Solís, M. de Llano & V.V. Tolmachev, Phys. C **364-365**, 95 (2001).
- [7] V.C. Aguilera-Navarro, M. Fortes & M. de Llano, Sol. St. Comm. **129**, 577 (2004).
- [8] A. Rosencwaig, Phys. Rev. B **67**, 184514 (2003).
- [9] W. Greiner, L. Neise y H. Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics* (Springer, N.Y., 1995).
- [10] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Benjamin, NY, 1964).
- [11] S.K. Adhikari, M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. Fortes, M.A. Solís, A.A. Valladares & O. Rojo, Phys. C **351**, 341 (2001).
- [12] P. Gosdzinsky & R. Tarrach, Am. J. Phys. **59**, 70 (1991).
- [13] M. Casas, A. Rigo, M. de Llano, O. Rojo & M.A. Solís, Phys. Lett. A **245**, 55 (1998); V.C. Aguilera-Navarro, M. de Llano & M.A. Solís, Eur. J. Phys. **20**, 177-182 (1999).
- [14] D. Jérôme, Science **252**, 1509 (1991).

- [15] H. Hori, *Int. J. Mod. Phys. B* **8**, 1 (1994).
- [16] J.A. Wilson, *Phil. Mag.* **84**, 2183-2216 (2004). Ver esp. Fig. 2.
- [17] J.E. Hoffman, K. McElroy, D.H. Lee, K.M. Lang, H. Eisaki, S. Uchida & J.C. Davis, *Science* **297**, 1148 (2002).
- [18] K. McElroy, R.W. Simmonds, J.E. Hoffman, D.H. Lee, J. Orenstein, H. Eisaki, S. Uchida & J.C. Davis, *Nature* **422**, 592 (2003); ver también artículo por J. Zaanen, pág. 569.
- [19] J. Guimpel, F. de la Cruz, J. Murduck, I. K. Schuller, *Phys. Rev. B* **35**, 3655 (1987).
- [20] A.H. Harker, *Superconductivity II* (2002) www.cmp.ucl.ac.uk/~ahh/teaching/3C25/Lecture31p.pdf
- [21] T. Jacobs, S. Sridhar, Q. Li, G.D. Gu, N. Koshizuka, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4516 (1995).
- [22] D.A. Bonn, S. Kamal, K. Zhang, R. Liang, D.J. Baar, E. Klein, W.N. Hardy, *Phys. Rev. B* **50**, 4051 (1994).
- [23] J.E. Sonier, J.H. Brewer, R.F. Kiefl, G.D. Morris, R.I. Miller, D.A. Bonn, J. Cakhalian, R.H. Heffner, W.N. Hardy, R. Liang, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4156 (1999).
- [24] Z.K. Tang, Lingyun Zhang, N. Wang, X.X. Zhang, G.H. Wen, G.D. Li, J.N. Wang, C.T. Chan, Ping Sheng, *Science* **292**, 2462 (2001).
- [25] B. Mühlischlegel, *Z. Phys.* **155**, 313 (1959).
- [26] V.V. Tolmachev, *Phys. Lett. A* **266**, 400 (2000).
- [27] C.J. Gorter & H.B.G. Casimir, *Phys.* **1**, 306 (1934).
- [28] V.C. Aguilera Navarro, V. Fuentes, M. Grether, M.G. López Arrieta, M. de Llano, J.J. Valencia, A. Salazar, O. Rojo & M.A. Solís, *Cond. Mat. Theories* **14**, 61 (Nova Science Publisher, Inc., N.Y., 2000).
- [29] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2a Ed. (Pergamon, Oxford, 1996).
- [30] V.C. Aguilera-Navarro, M. de Llano & M. A. Solís, *Eur. J. Phys.* **20**, 177 (1999).
- [31] <http://physicsworld.com/cws/article/print/772/1/pw-13-02-08fig2>

- [32] Ch.P. Poole, Jr. H.A. Farach, & R.J. Creswick, *Superconductivity* (Academic Press, 1995).
- [33] M. Casas, N.J. Davidson, M. de Llano, T.A. Mamedov, A. Puente, R.M. Quick, A. Rigo & M.A. Solís, *Physica A* **295**, 425-440 (2001).
- [34] M. de Llano, capítulo del libro “*Frontiers in Superconductivity Research*” Ed. por B.P. Martins, 1-52 (Nova Science Publishers, NY, 2004).
- [35] Y.J. Uemura, *J. Phys. Condens. Matter* **16**, S4515 (2004).
- [36] H. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2a Ed. (Wiley, New York, 1985).
- [37] M. de Llano & V.V. Tolmachev, *Physica A* **317**, 546 (2003).
- [38] A. Jeffrey, *Handbook of Mathematical Formulas and Integrals* (Academic Press, Newcastle U.K., 1995).
- [39] S. Blawid, A. Deppeler, A.J. Millis, cond-mat/0207603.
- [40] H. Ledbetter, *Physica C* **235**, 1325 (1994).
- [41] Micnas et al., *Rev. Mod. Phys.* 62 (enero 1990) Tabla I.
- [42] J. Hirsch, *Physica C* **213**, 341-348 (2000).
J. Hirsch, *Phys. Rev. B*, **55**, 9007 (1997).
- [43] F.J. Sevilla, Tesis doctoral (Posgrado en Ciencias Físicas, UNAM, 2004).
- [44] R. Jin, H.R. Ott, *Phys. Rev. B*, **57**, 13872 (1998).
- [45] H. Richter, I. Puica, W. Lang, M. Peruzzi, J.H. Durrell, H. Sturm, J.D. Pedarnig, D. Bäuerle, cond-mat/0604352.
- [46] S. Wolfram, *The MATHEMATICA Book*, 3rd Ed. (Wolfram Media, IL, 1996).