



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SUPERCONDUCTIVIDAD EN UNA CADENA LINEAL
CON PARÁMETRO DE SALTO A SEGUNDOS VECINOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A:

JORGE LUIS MARTÍNEZ MÉRIDA

DIRECTOR DE TESIS:

DR. LUIS ANTONIO PÉREZ LÓPEZ

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

Agradezco:

Al Doctor Luis Antonio Pérez López por su apoyo para la realización de este trabajo.

A mis Sinodales Raúl Escamilla, Rosario Paredes, Karen Volke y Raúl Oviedo por sus comentarios sobre este trabajo.

Al Instituto de Física de la UNAM, por las facilidades prestadas.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico el apoyo otorgado por medio de los proyectos DGAPA-IN116605 y DGAPA-IN113008.

HOJA DE DATOS DEL JURADO

<p>1. Datos del alumno Martínez Mérida Jorge Luis 55706039 Universidad nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 090095050</p>
<p>2. Datos del director de tesis Doctor Luis Antonio Pérez López</p>
<p>3. Datos del sinodal 1 Doctor Raúl Escamilla Guerrero</p>
<p>4. Datos del sinodal 2 Doctora Rosario Paredes Gutiérrez</p>
<p>5. Datos del sinodal 3 Doctor Raúl Oviedo Roa</p>
<p>6. Datos del sinodal 4 Doctora Karen Patricia Volke Sepúlveda</p>
<p>7. Datos del trabajo escrito Superconductividad en una cadena lineal con parámetro de salto a segundos vecinos 40 p 2008</p>

DEDICATORIA

Dedico esta tesis a todas las personas que quiero:

A mi madre Juana Mérida Montiel, a quien debo lo que soy.

A mi padre Luis Ángel Martínez Pérez, por todo su apoyo.

A mi hermano Luis Ángel Martínez Mérida, porque gracias a él aprendí álgebra en el CCH.

A mi adorada Laura por todo lo que es y será para mí.

A Elena Georgina, mi bolita de amor.

A Elena Resendiz, la buena suegra que me dejó un año nuevo.

A Patricia y Araceli, las hermanas políticas y consejeras de crianza, y al resto de la gran nueva familia.

A mis tías paternas de la Patria Chica, Carmen, Lola y Patricia y a mis primos Araceli, Javier, Magali, Itzel, Erika, Mitzi, Paola y Mario.

A Claudio Mérida, el hermanito de mi mamá y a todos los primos del lado materno.

A mis maestros:

Fís. Javier Ramírez y Fís. Guillermo González Cuevas (CCH-N),

Dr. Héctor Méndez Lango (FC),

Que más que maestros han sido mis amigos.

Al Doctor Miguel Ángel Herrera Andrade (1944-2002), maestro y amigo, esperando que donde quiera que esté siga gozando los goles del Atlante.

A todos mis amigos y cuates de este tiempo:

César Iván, Indra y Miguel e Iván Alejandro Elizalde, Miguel Ángel y Zohet Huicochea, Alma Heredia, Amado, César y Eva (+) Hernández, Alejandro Mejía, Roxana Monreal, Jorge G. Rosales, Ileana Alcocer, José Sarabia, Álvaro Ross, Rocío Varilla, Mariano y Dení Domínguez, Lirio Aparicio, Juan Manuel R. San Pedro, Edgar Vega, Alán Vargas, Jorge Eduardo López, Rafael Reyes, La gran familia Pajemú, Víctor Marcos, Salvador Guerrero, Einar Martínez, Higinio Muñoz, José Blancas, Belinda Victoria, Antonio González y Citlalli Hernández.

Al Ing. Hans Peter Russ (1937-2007), por permitirme entrar al interesante mundo de la metrología.

A todos los técnicos de Masstech, S.A. de C.V., uno de los lugares más divertidos para trabajar.

Contenido

Introducción	1
1 Electrones en redes periódicas	3
1.1 La ecuación de Schrödinger para potenciales periódicos.	3
1.2 Teorema de Bloch.	4
1.3 Modelo de Amarre Fuerte	7
1.4 Densidad de estados	9
2 Correlación electrónica	13
2.1 Segunda cuantización	13
2.2 El modelo de Hubbard	15
3 Teoría Microscópica de la Superconductividad.	17
3.1 Formalismo BCS a $T = 0$	17
3.2 Formalismo BCS a $T \neq 0$	20
3.3 Modelo de Hubbard atractivo	23
4 Superconductividad en una cadena lineal	26
4.1 Resultados	26
Conclusiones	34
A Campo medio	35
Referencias	37

Resumen

En esta tesis se reporta el estudio teórico del estado superconductor en una cadena lineal descrita por el modelo de Hubbard atractivo y que incluye, además del parámetro de salto o *hopping* a primeros vecinos, un parámetro de salto a segundos vecinos. En particular se analizó el comportamiento de la temperatura crítica y de la brecha superconductora al variar la concentración de electrones en el sistema así como el valor del hopping a segundos vecinos. Los cálculos se realizaron de forma numérica a partir del formalismo de Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS).

Introducción

Desde su descubrimiento en 1911 por el físico holandés H. Kamerlingh Onnes, la superconductividad ha sido uno de los fenómenos que más ha llamado la atención dentro de la física del estado sólido puesto que pone de manifiesto a una escala macroscópica la naturaleza cuántica de la materia. En los materiales superconductores, por debajo de cierta temperatura crítica de transición (T_c), se forma un condensado de pares de electrones cuya propagación coherente da lugar al transporte de corriente eléctrica sin resistencia alguna. Hoy en día se conocen diversos superconductores en los que la función de onda espacial de los pares presenta distintas simetrías. En los superconductores llamados convencionales, constituidos por algunos metales y aleaciones metálicas, los pares se encuentran en un estado con espín total cero (singulete) y la función de onda espacial presenta simetría esférica (Schiffer & Tinkham, 1999). Por otra parte diversos experimentos que miden la susceptibilidad de espín en el estado superconductor, sugieren que en los sistemas de fermiones pesados así como en el rutenato de estroncio, los pares tienen espín total uno. En este caso la función de onda espacial del par debe ser antisimétrica en la coordenada relativa y en el caso más simple dicha función espacial tendría simetría p . Por último, muchos experimentos basados en el efecto Josephson y que prueban directamente la fase de la función de onda de los pares han dado evidencia convincente de que en la mayoría de los superconductores cerámicos de alta T_c , los pares tienen simetría d .

En 1957 J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer propusieron una teoría que explicaba la superconductividad a partir de una interacción atractiva electrón-electrón mediada por fonones (Bardeen, J. *et. al.*, 1957). Esta teoría, conocida como BCS, les valió a sus autores el premio Nóbel de Física en 1972; y aunque tuvo un gran impacto al poder explicar la superconductividad en los materiales ahora llamados superconductores convencionales, dejó ver sus limitaciones cuando en 1986 fueron descubiertos los cupratos superconductores (Bednorz & Müller, 1986). Estos materiales junto con los sistemas de fermiones pesados y los superconductores orgánicos, entre los que se encuentran algunos superconductores cuasi-unidimensionales (Skorenkyy, 2006), conforman los llamados superconductores no convencionales para los cuales un mecanismo de interacción *electrón-fonón* podría no ser aplicable, y en los que el mecanismo de apareamiento sigue siendo objeto de una intensa investigación. En particular, durante los últimos años la investigación en conductores orgánicos se ha convertido en una de las ramas más activas de la física de la materia condensada. Los conductores moleculares están formados de bloques construidos a partir de átomos de carbono y sus combinaciones con otros elementos tales como azufre, selenio u oxígeno. Al formarse el cristal, estas unidades moleculares preservan en gran medida sus características específicas tales como orbitales moleculares, energía de ionización y modos vibracionales intramoleculares. La geometría de los bloques estructurales y la manera en que se empaquetan en el cristal determinan la dimensionalidad efectiva de la estructura electrónica del compuesto dando lugar, en muchos casos, a una estructura electrónica unidimensional. En estos sistemas, la fenomenología observada es consistente con la hipótesis de que el apareamiento de partículas tiene su origen en interacciones no retardadas de corto alcance y apoyan la descripción de estos materiales

por medio de modelos con interacciones locales. Un modelo genérico, que puede pensarse como una parametrización del problema, es el modelo de Hubbard así como sus diversas extensiones.

En esta tesis abordaremos el problema de la superconductividad en una cadena lineal a partir de un modelo de Hubbard que incluye parámetros de salto (hopping) a primeros (t) y segundos (t') vecinos, además de una interacción atractiva efectiva entre dos electrones situados en un mismo sitio (U). Esta cadena sirve de modelo básico para muchos de los superconductores orgánicos cuasi-unidimensionales. Utilizando técnicas de campo medio, como lo es el formalismo de BCS, realizaremos un estudio numérico sistemático del comportamiento de la temperatura crítica y de la brecha superconductora como función de la concentración de electrones, de U y de t' . En particular, se analizará con detalle el efecto de t' en las propiedades termodinámicas de un superconductor unidimensional.

1 Electrones en redes periódicas

Cuando los átomos en los sólidos se ordenan formando un arreglo periódico hablamos de un sólido cristalino; el cual se puede obtener por medio de la repetición de un arreglo elemental, lo que da lugar a la simetría traslacional del sistema. Esta propiedad periódica de la estructura de un cristal nos ayuda a comprender y calcular sus propiedades físicas. A pesar de que en realidad el cristal perfecto no existe, la mayoría de las propiedades físicas de muchos sólidos reales son muy similares a las del prototipo ideal, de manera que el estudio del modelo ideal nos da mucha información acerca del origen de tales propiedades.

La estructura de un cristal se puede describir usando una red de puntos en el espacio, a cada uno de los cuales se le asocia un átomo con lo que formamos lo que se denomina base. Una red es un arreglo regular periódico de puntos y está definida (en tres dimensiones) por el conjunto $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, donde las n_i son números enteros mientras que los vectores \mathbf{a}_i son los vectores base de la red y no son exclusivos de cada red. Por simplicidad siempre se escogen para la base de la red los vectores más pequeños. El paralelepípedo que forman estos vectores se conoce como una celda primitiva de la red, que es la menor unidad estructural cuya repetición regular en el espacio de lugar a un cristal. Una celda primitiva siempre contiene un solo punto de la red.

Las operaciones que dejan invariante a un cristal ideal forman un grupo matemático llamado grupo espacial del cristal. En estas operaciones están incluidas las traslaciones $T_{\mathbf{R}_n}$ por un vector $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, rotaciones y reflexiones (rotaciones impropias). Todas estas operaciones de simetría se pueden representar por una transformación ortogonal de la siguiente forma: $\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{a}$; donde α es una rotación y \mathbf{a} es una traslación.

1.1 La ecuación de Schrödinger para potenciales periódicos.

Para realizar los cálculos de muchas de las propiedades físicas de un sólido es común comenzar a partir de la ecuación de Schrödinger. El hamiltoniano que describe a un sólido debe contener la energía de todas las partículas que componen al sistema así como sus energías de interacción. Podemos hacer una buena aproximación, que llamaremos adiabática, separando las propiedades electrónicas del sistema y las propiedades dinámicas de la red (Ibach, 1991). el argumento que sustenta dicha aproximación es que la masa de cada uno de los iones que componen la red es mucho mayor que la de los electrones libres, por lo cual los iones sólo pueden responder de manera muy lenta a un cambio de configuración de los electrones mientras que estos últimos responden casi instantáneamente a cualquier cambio de posición de los iones cristalinos. Dicha velocidad de respuesta electrónica tiene como consecuencia que la configuración in-

stantánea de los iones sea la única que influye en el movimiento de los electrones. Así, dentro de la aproximación adiabática, es posible estudiar el movimiento de los electrones en un potencial estático producido por los iones. La dificultad radica al considerar las interacciones entre los propios electrones, por lo cual debemos recurrir a otra aproximación, la de Hartree-Fock (Kittel, 1963), la cual permite reducir el problema de muchos electrones al de un sólo electrón en un potencial efectivo $V(\mathbf{r})$ que es la suma del potencial producido por los iones de la red en sus posiciones de equilibrio más un potencial promedio debido a los demás electrones y que contiene las interacciones coulombiana y de intercambio. Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger toma la forma conocida:

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial efectivo para un electrón, \hbar es la constante de Planck sobre 2π , m la masa del electrón y ε su energía. Si consideramos a los iones fijos en sus posiciones de equilibrio, la contribución de éstos al potencial efectivo es invariante bajo todas las operaciones del grupo espacial del cristal. El término de interacción también cumple con esta invarianza (Madelung, 1978). en consecuencia el hamiltoniano de la ecuación (1.1). es también invariante bajo las transformaciones del grupo espacial del cristal.

1.2 Teorema de Bloch.

El que el hamiltoniano de la Ec. (1.1) sea invariante bajo traslaciones nos permite deducir importantes resultados. Sea \mathbf{R}_l una traslación dentro de la red. Podemos asociar a \mathbf{R}_l un operador $T_{\mathbf{R}_l}$ de tal modo que $T_{\mathbf{R}_l}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l)$. En un cristal infinito en principio hay un número infinito de elementos del grupo de traslación. Sin embargo, si el cristal se limita a un volumen finito V con condiciones periódicas a la frontera, el grupo de traslación se hace finito y tiene el mismo número de elementos que puntos de la red existen en V .

Aplicando el operador $T_{\mathbf{R}_l}$ a la Ec. (1.1) obtenemos

$$T_{\mathbf{R}_l}(H\Psi(\mathbf{r})) = T_{\mathbf{R}_l}(\varepsilon\Psi(\mathbf{r})) \quad (1.2)$$

y la condición de invarianza del hamiltoniano nos lleva a

$$H(T_{\mathbf{R}_l}\Psi(\mathbf{r})) = \varepsilon(T_{\mathbf{R}_l}\Psi(\mathbf{r})) \quad (1.3)$$

El resultado es que todas las funciones $T_{\mathbf{R}_l}\Psi(\mathbf{r})$ y $\Psi(\mathbf{r})$ son simultáneamente funciones propias del hamiltoniano con el mismo valor E . Sea $\lambda^{(l)}$ el valor propio del operador $T_{\mathbf{R}_l}$, es decir

$$T_{\mathbf{R}_l} \Psi(\mathbf{r}) = \lambda^{(l)} \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

De la condición de normalización de la función de onda en el volumen V y de la igualdad

$$\int_V |T_{\mathbf{R}_l} \Psi|^2 d^3r = \int_V |\Psi|^2 d^3\mathbf{r} \quad (1.5)$$

se sigue que $|\lambda^{(l)}|^2 = 1$. De esta manera $\lambda^{(l)} = \exp(i\alpha_l)$, y ya que $\mathbf{r} + \mathbf{r}_m = \mathbf{r}_p$ tenemos también que $T_{\mathbf{r}_l} T_{\mathbf{r}_m} = T_{\mathbf{r}_p}$; por lo tanto $\exp[i(\alpha_l + \alpha_m)] = \exp(i\alpha_p)$. Resulta entonces conveniente escribir a las α_l como un producto punto de un vector \mathbf{k} común a todas las α_l con los vectores \mathbf{R} asociados:

$$\lambda^{(l)} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \quad (1.6)$$

en donde \mathbf{k} es hasta ahora un vector arbitrario con unidades del inverso de la distancia. Hasta ahora hemos supuesto que el valor propio ε es no degenerado. Se puede demostrar (Madelung, 1972) que para un valor ε con una degeneración de orden f se obtiene una relación matricial similar a (1.2):

$$T_{\mathbf{R}_l} \Psi(\mathbf{r}) = \Lambda_{ss}^{(l)} \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.7)$$

donde la $\Lambda_{ss}^{(l)}$ es una matriz diagonal con $|\Lambda_{ss}^{(l)}|^2 = 1$ ($s = 1 \dots f$ siendo f el orden de la degeneración) por lo cual podemos escribir también $|\Lambda_{ss}^{(l)}| = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$. En consecuencia para cada una de las Ψ siempre existe un vector \mathbf{k} tal que para cada función propia Ψ de $T_{\mathbf{R}_l}$, su valor propio será $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l)$; de tal forma que Ψ está clasificada por ese vector \mathbf{k} .

Las ecuaciones (1.2, 1.7) conducen al Teorema de Bloch: Las soluciones no degeneradas de la ecuación de Schrödinger y combinaciones lineales de las soluciones degeneradas escogidas adecuadamente, son simultáneamente funciones propias del hamiltoniano y del operador de traslación $T_{\mathbf{R}_l}$ con valores propios $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l)$:

$$T_{\mathbf{R}_l} \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l) \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (1.8)$$

Puesto que las Ψ son simultáneamente funciones propias del hamiltoniano y de $T_{\mathbf{R}_l}$, los valores propios ε también dependen de \mathbf{k} , es decir: $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$. Además para las soluciones degeneradas se tiene que $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}_{s'})$.

El teorema de Bloch implica que $\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ siempre puede representarse por una función $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ con la periodicidad de la red multiplicada por una onda plana $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (1.9)$$

Para ver esto, insertemos la expresión anterior en la Ec. (1.8) con lo que se obtiene,

para el lado izquierdo, $\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_l))u(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l)$ y, para el lado derecho, $\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_l))u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$. Por lo tanto

$$u(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = u(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.10)$$

es decir, $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red. Las funciones $\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ se denominan funciones de Bloch y los electrones descritos por ellas son llamados electrones de Bloch.

Ahora supóngase que se establece una red periódica \mathbf{G}_l en el espacio asociado al vector \mathbf{k} , el cual se conoce como espacio recíproco. Los vectores \mathbf{G}_l en este espacio tienen la propiedad de que $\mathbf{R}_l \cdot \mathbf{G}_m$ es un múltiplo entero de 2π (Kittel, 1996), por lo que si se hace actuar $T_{\mathbf{R}_l}$ sobre $\Psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r})$ se obtiene

$$T_{\mathbf{R}_l}\Psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}) = \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) \cdot \mathbf{R}_l)\Psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l)\Psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}) \quad (1.11)$$

De esta manera, a través del operador $T_{\mathbf{R}_l}$, no sólo una \mathbf{k} sino todas las $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_m$ están asociadas con una $\Psi(\mathbf{r})$. Por otra parte ya se mencionó que los valores propios de los operadores de traslación son no degenerados por lo que se concluye que

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}). \quad (1.12)$$

Este último resultado puede interpretarse como sigue. Al clasificar las soluciones de la ecuación de Schrödinger en términos del vector \mathbf{k} , los valores de \mathbf{k} en una celda de volumen mínimo son suficientes. Por lo general se elige como tal a la primera zona de Brillouin (Kittel, 1996). Asimismo, la función $\varepsilon(\mathbf{k})$ puede limitarse a la primera zona de Brillouin.

La forma de las funciones de Bloch (ver Ec. (1.9)) da la primera clave del significado físico del vector \mathbf{k} . Si se hace $u = \text{constante}$, Ψ viene dada por

$$\Psi = c \cdot \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (1.13)$$

El electrón en este caso se comporta como una partícula libre y está representada por una onda plana con un vector de onda \mathbf{k} . Si se transfiere este significado al caso del cristal, entonces la Ec. (1.9) corresponde al enunciado de que el electrón de Bloch está representado por una onda plana modulada por la periodicidad de la red. Por otra parte si se considera el caso límite en el cual los átomos del cristal tienen una separación infinita, es decir, $|\mathbf{a}_i| \rightarrow \infty$ (donde los vectores \mathbf{a}_i son los vectores base de la red), el espacio recíproco se colapsaría en su origen $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Asimismo el término $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \rightarrow 1$, por lo que la función de Bloch (Ec. (1.9)) tendría que ser igual a la función de onda $u(\mathbf{0}, \mathbf{r})$ de un átomo aislado. Sin embargo, en el límite de átomos aislados, la función de onda debe tender a alguno de los orbitales atómicos φ_n (donde el subíndice n indica uno de los estados $1s, 2s$, etc.) y no a una sola función $u(\mathbf{0}, \mathbf{r})$. Por consiguiente uno debe escribir las funciones de las celdas como $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, de tal

forma que en el caso límite de átomos aislados se obtenga una función $u_n(\mathbf{0}, \mathbf{r})$, la cual debe coincidir con un orbital atómico φ_n . Este nuevo índice debe introducirse en las funciones de onda así como en la energía, es decir:

$$\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (1.14)$$

$$H\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (1.15)$$

Por último, como las funciones de Bloch son periódicas en el espacio \mathbf{k} se pueden representar por una serie de Fourier

$$\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_l a_n(\mathbf{R}_l, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}, \quad (1.16)$$

donde $N^{-1/2}$ es un factor de normalización siendo N el número de átomos en el cristal. A las funciones $a_n(\mathbf{R}_l, \mathbf{r})$ se les conoce como funciones de Wannier. Invertiendo la relación anterior obtenemos

$$a_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_l) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l)} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.17)$$

donde la suma se realiza sobre todos los vectores \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin. Debido a que $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red, las a_n dependen solamente de la diferencia $\mathbf{r} - \mathbf{R}_l$, es decir, las funciones de Wannier están centradas alrededor del punto \mathbf{R}_l de la red.

Asimismo, tenemos que las funciones de Wannier son ortogonales para diferentes bandas (índice n) y \mathbf{R}_l distintos. Esto se sigue de

$$\int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) a_{n'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{l'}) d\mathbf{r} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{l'})] \int \Psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp[i(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}))] \delta_{nn'} = \delta_{nn'} \delta_{ll'}. \quad (1.18)$$

Como forman un conjunto completo, estas funciones ofrecen una base alternativa para una descripción exacta del hamiltoniano.

1.3 Modelo de Amarre Fuerte

En esta sección introduciremos el modelo de amarre fuerte para una sola banda. La premisa básica de este modelo es que es más fácil estimar los elementos de matriz que involucran a las funciones de Wannier (debido a su localización alrededor del átomo

correspondiente) que resolver las ecuaciones diferenciales para las funciones de Bloch. Si en la ecuación de Schrödinger estacionaria en la aproximación de un solo electrón:

$$H\Psi(\mathbf{r}) = [-\hbar/2m\nabla^2 + V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r})$$

sustituimos la relación (1.16), prescindiendo del subíndice n (porque solo consideramos una banda) y además utilizando la notación de Dirac $|l\rangle$ (Sutton, 1993) para representar a la función de Wannier $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$, tenemos:

$$\sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} H |l\rangle = \varepsilon(\mathbf{k}) \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} |l\rangle$$

si ahora multiplicamos por la función $\langle m|$, y debido a la ortogonalidad de las funciones de Wannier, tendremos:

$$\sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \langle m| H |l\rangle = \varepsilon(\mathbf{k}) \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \delta_{ml},$$

y para $l = m$

$$\sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \langle m| H |l\rangle = \varepsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m},$$

por lo que la energía toma la forma

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \langle m| H |l\rangle, \quad (1.19)$$

donde el elemento de matriz $\langle m| H |l\rangle$ tiene unidades de energía y puede verse como un término de salto (*hopping*) entre vecinos según su proximidad:

$$\langle m| H |l\rangle = \begin{cases} t & \text{si } \langle m| \text{ es primer vecino de } |l\rangle \\ t' & \text{si } \langle m| \text{ es segundo vecino de } |l\rangle \\ \varepsilon_0 & \text{si } l = m \end{cases}$$

La condición para que este parámetro de salto sea diferente de cero, es que cada uno de los dos estados atómicos presenten en los extremos del enlace la misma componente de momento angular a lo largo de del eje del enlace. Existen solamente cuatro tipos de parámetros de salto diferentes de cero (Sutton, 1993); el que utilizaremos en este trabajo será el llamado $ss\sigma$, que involucra a dos orbitales esféricos del tipo s . La cantidad $ss\sigma$ es negativa, debido a que ambos orbitales tienen el mismo signo.

Regresando a la expresión de la energía, ahora en términos de esta parámetro de salto, para el caso de una dimensión tenemos

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 + 2t \cos(ka) \quad (1.20)$$

y para el caso de segundos vecinos:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 + 2t \cos(ka) + 2t' \cos(2ka) \quad (1.21)$$

1.4 Densidad de estados

En esta sección se revisa brevemente como se obtiene la densidad de estados electrónicos a partir de la función de Green cuya definición, en términos de operadores, es $(z\hat{\mathbf{1}} - \hat{H})\hat{G} = \hat{\mathbf{1}}$, donde $\hat{\mathbf{1}}$ representa al operador identidad y $z = \varepsilon + i\delta$, es un número complejo. En el caso del hamiltoniano de amarre fuerte la función de Green está dada por (Economou, 1983):

$$G = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|}{z - \varepsilon(\mathbf{k})} \quad (1.22)$$

donde $|\mathbf{k}\rangle = N^{-1/2} \sum_l \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l)$ y $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + \sum_l e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \langle m| H |l\rangle$. En estas expresiones, $|\mathbf{k}\rangle$ y $|l\rangle$ son las funciones de Bloch y de Wannier respectivamente. Los elementos de matriz para $G(z)$ están dados de la siguiente forma:

$$G(l, m; z) = \langle l|G(z)|m\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle l|\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|m\rangle}{z - \varepsilon(\mathbf{k})} = \frac{\Omega}{2\pi} \int_{1BZ} \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m))}{z - \varepsilon(k)} dk \quad (1.23)$$

La evaluación de la función de Green permite obtener la densidad de estados electrónica por sitio $\rho(\varepsilon)$ mediante la relación

$$\rho(\varepsilon) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} [Tr G^{\pm}(\varepsilon)] \quad (1.24)$$

donde

$$G^{\pm}(\varepsilon) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|}{\varepsilon \pm i\delta - \varepsilon(\mathbf{k})}, \quad (1.25)$$

donde δ es un número real positivo. La $\rho(\varepsilon)$ multiplicada por un incremento de energía da el número de estados que tiene un electrón en dicho intervalo de energía; los cuales pueden estar ocupados o desocupados. La densidad de estados se ha logrado medir experimentalmente usando técnicas como la espectroscopia de escaneo de tunelaje (scanning tunnelling spectroscopy) (Liljeroth, 2006).

Para el caso de una cadena lineal con parámetros de salto a primeros y segundos vecinos, sustituimos la expresión correspondiente para $\varepsilon(\mathbf{k})$ y obtenemos:

$$G(l, m; z) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{\exp(ik(l-m))}{z - \varepsilon_0 - 2t \cos(ka) - 2t' \cos(2ka)} dk \quad (1.26)$$

En la figura 1.26 se presentan las densidades de estados electrónicas por sitio para cadenas lineales con $t = -1$ y $t' = \pm 0.2|t|, \pm 0.5|t|, \pm 0.7|t|$, y $\pm |t|$.

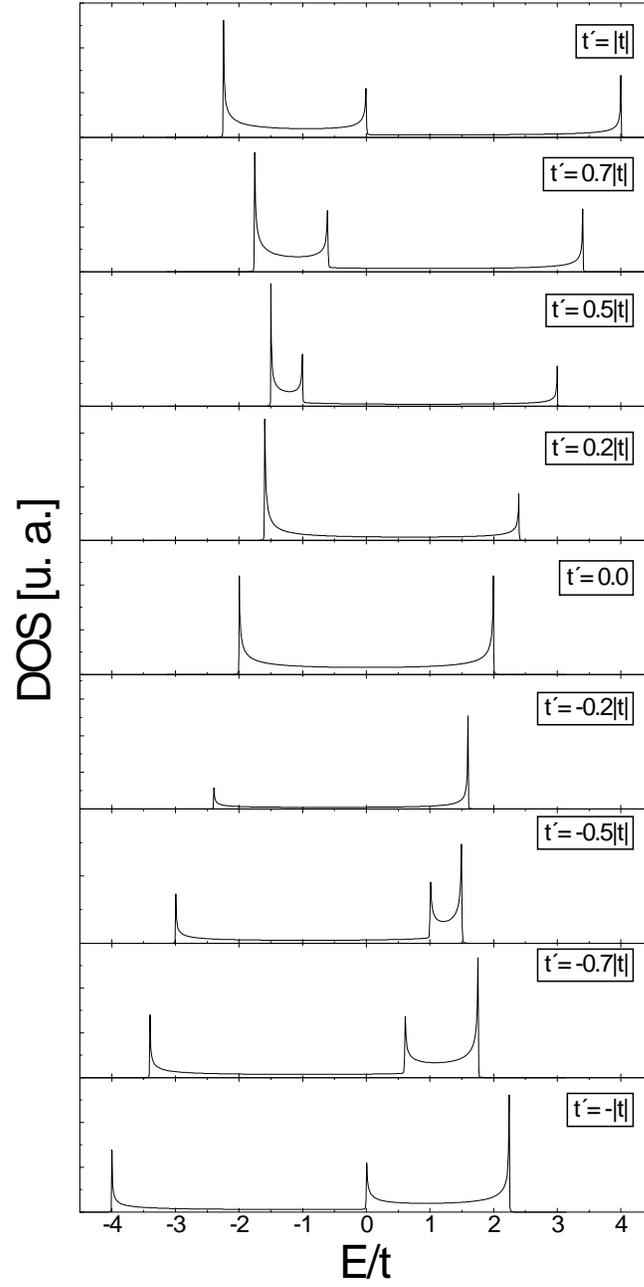


Figura 1. Densidad de estados electrónicos para cadenas lineales con $t = -1$ y $t' = 0, \pm 0.2 |t|, \pm 0.5 |t|, \pm 0.7 |t|$, y $\pm |t|$.

Nótese que para $t' = 0$, la densidad de estados es simétrica con respecto a $\varepsilon = \varepsilon_0$ (que tomamos como 0) como es de esperarse para una red bipartita, y presenta dos sin-

gularidades de van Hove situadas en $\varepsilon = \pm 2|t|$, las cuales son consecuencias topológicas de la estructura periódica del cristal (Van Hove, 1953). Asimismo, el ancho de banda es $4|t|$. Más aún, las densidades de estados de los sistemas con $t' \neq 0$ no son simétricas con respecto a $\varepsilon = \varepsilon_0$ y además pueden presentar más de dos singularidades de van Hove. Para localizar dichas singularidades calculamos los puntos extremos de la relación de dispersión para una cadena lineal dada por la ecuación 1.21:

$$\frac{d}{dk}(\varepsilon_0 + 2t \cos(ka) + 2t' \cos(2ka)) = 0, \quad (1.27)$$

usando identidades trigonométricas, convertimos el último miembro de $\varepsilon(k)$ en

$$\cos 2ka = \cos^2 ka - \text{sen}^2 ka, \quad (1.28)$$

y entonces la ecuación 1.27 queda de la siguiente manera

$$\frac{d}{dk}\varepsilon(k) = \frac{d}{dk} [4t' \cos^2 ka + 2t \cos ka - 2t'] = 0, \quad (1.29)$$

o bien:

$$\sin ka [-8t'a \cos(ka) - 2ta] = 0. \quad (1.30)$$

Esta última ecuación tiene las siguientes soluciones

$$k = \frac{l\pi}{a}, \quad l \text{ entero} \quad (1.31)$$

$$k = \frac{1}{a} \arccos\left(-\frac{t}{4t'}\right) \quad (1.32)$$

Con referencia a la ecuación 1.31, como la primera zona de Brillouin está comprendida entre $k = \pm \frac{\pi}{a}$, únicamente tomaremos $l = 0$ y $l = 1$.

La solución de la ecuación 1.32 existirá siempre y cuando

$$\left| \frac{t}{4t'} \right| \leq 1. \quad (1.33)$$

lo cual implica que

$$|t| > 0.25t. \quad (1.34)$$

Ya que encontramos las soluciones de la ecuación 1.30 podemos encontrar los puntos extremos de la relación de dispersión dada por la ecuación 1.21. Usando la solución de la ecuación 1.31; si $ka = \pi$ y tomando $\varepsilon_0 = 0$, tenemos una primera expresión para la relación de dispersión:

$$\varepsilon_1(ka = \pm\pi) = -2t + 2t' \quad (1.35)$$

la cual es la misma para $ka = -\pi$ debido a la paridad del $\cos x$. Ahora, si en 1.31 tenemos que $l = 0$, la relación de dispersión será:

$$\varepsilon_2(ka = 0) = 2t + 2t' \quad (1.36)$$

En caso de que $|t'| \geq 0.25$, que es cuando tenemos la solución de la ecuación 1.32, la relación de dispersión tiene la siguiente forma:

$$\varepsilon_3(ka = \arccos[-t'/4t']) = -\frac{t'^2}{4t'} - 2t' \quad (1.37)$$

En resumen, cuando el parámetro de salto a segundos vecinos $|t'|$ sea menor que $0.25|t|$, la densidad de estados tendrá dos singularidades de van Hove en las energías dadas por la ecuaciones 1.35 y 1.36. Pero al superar $|t'|$ el valor de $0.25|t|$ aparecerá una tercera singularidad, como se puede ver claramente tanto en la figura 1 como en la tabla 1.

t'	0	-0.1	-0.2	-0.25	-0.3	-0.4	-0.5	-0.6	-0.7	-0.8	-0.9	-1
ε_1	2.0	1.8	1.6	1.5	1.4	1.2	1.0	0.8	0.6	0.4	0.2	0.0
ε_2	-2.0	-2.2	-2.4	-2.5	-2.6	-2.8	-3	-3.2	-3.4	-3.6	-3.8	-4.0
ε_3	-	-	-	1.5	1.43	1.425	1.5	1.617	1.76	1.91	2.08	2.25

Tabla 1. Localización de las singularidades de van Hove para diferentes valores del parámetro t' . Las unidades están en términos de $|t|$

Cabe mencionar que cuando $|t'| \leq 0.25|t|$ el ancho de la banda de energía (D) siempre es $4|t|$, mientras que cuando $|t'| > 0.25|t|$, $|D|$ crece conforme $|t'|$ aumenta; con un valor fijo de t . Si t y t' tienen signos opuestos

$$D = |-2t + 2t'| + \left| \frac{t'^2}{4t'} + 2t' \right| \quad (1.38)$$

mientras que si t y t' son del mismo signo

$$D = |2t + 2t'| + \left| \frac{t'^2}{4t'} + 2t' \right|. \quad (1.39)$$

2 Correlación electrónica

Durante los últimos años, los descubrimientos de los superconductores orgánicos, de los sistemas de fermiones pesados, del rutenato de estroncio y sobre todo de los cupratos superconductores con altas T_c , impulsaron el estudio de sistemas de electrones fuertemente correlacionados en los que la interacción electrón-electrón de corto alcance juega un papel fundamental (Anderson, 1987). El modelo de Hubbard es útil para estudiar esta correlación de corto alcance, ya que éste está expresado en términos de interacciones locales y no depende explícitamente de la naturaleza de éstas. En este capítulo se revisan brevemente el formalismo de segunda cuantización que simplifica la descripción de sistemas cuánticos de muchas partículas, el modelo de Hubbard.

2.1 Segunda cuantización

El formalismo de segunda cuantización reformula la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos con la ventaja de que los operadores en esta representación incorporan la estadística de las partículas (bosones o fermiones), simplificando el estudio de sistemas de muchas partículas idénticas que interactúan entre sí.

Comencemos por considerar un conjunto completo ortonormal de funciones de onda de una sola partícula $\varphi_{\varepsilon_j}(\zeta)$ donde ε_j denota el estado de una sola partícula mientras que la variable ζ representa todas las coordenadas de la partícula, incluyendo las coordenadas espaciales y la componente z del espín. Ahora pensemos en un conjunto de fermiones independientes en el que cada partícula está en alguno de los estados φ_{ε_j} y sea n_j el número de partículas en dicho estado (n_j puede ser 0 o 1). Las cantidades n_j son los llamados números de ocupación y constituyen las variables fundamentales del formalismo de segunda cuantización, en vez de las coordenadas de las partículas. Una función de onda para este sistema de N fermiones independientes no interactuantes debe ser el producto antisimétrico de las funciones de onda de las N partículas del sistema. Una manera de expresar tales funciones es como determinantes de Slater

$$\Phi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\varepsilon_1}(\zeta_1) & \dots & \varphi_{\varepsilon_1}(\zeta_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{\varepsilon_N}(\zeta_1) & \dots & \varphi_{\varepsilon_N}(\zeta_N) \end{vmatrix}. \quad (2.1)$$

En el esquema de los números de ocupación, la función anterior se expresa como $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$. Para evitar ambigüedades en los signos algebraicos, se establece un orden en los índices ε_j , de tal forma que siempre ε_j se acomoda antes de ε_{j+1} . El principio de exclusión de Pauli nos asegura que ningún estado poseerá los mismos números cuánticos ε_j que otro, ni 2 partículas distintas compartan coordenadas; de lo contrario la función de onda se anularía. El factor $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ asegura que la función Φ definida arriba está normalizada. Asimismo, todas las funciones formadas a partir de diferentes esta-

dos de una sola partícula son ortogonales a (2.1). De esta manera, cualquier función de onda de un sistema de N fermiones puede expresarse como una combinación lineal de funciones Φ (Fetter y Walecka, 1971).

En general, el hamiltoniano de un sistema de N partículas interactuantes puede escribirse como

$$H = \sum_{i=1}^N h(\zeta_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(\zeta_i, \zeta_j) . \quad (2.2)$$

Este hamiltoniano está formado por operadores de una sola partícula y operadores de dos partículas. El primero es un operador $h(\zeta)$ que solamente depende de las coordenadas de una sola partícula, sin embargo, al considerar sistemas de N partículas idénticas siempre encontramos sumas de tales operadores, iguales entre sí excepto por la coordenada, por lo que entenderemos como operadores de una sola partícula H_1 a la suma de los operadores $h(\zeta_i)$

$$H_1 = \sum_{i=1}^N h(\zeta_i) . \quad (2.3)$$

La energía cinética de las N partículas cae en esta definición. Análogamente entenderemos como un operador de 2 partículas H_2 a la suma de los operadores $v(\zeta_i, \zeta_j)$ que dependen de las coordenadas de dos partículas. En la suma se incluyen todos los pares distintos y se excluye el término $v(\zeta_i, \zeta_i)$ ya que suponemos que las partículas no interactúan consigo mismas; de tal modo que el operador de dos partículas será definido como:

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(\zeta_i, \zeta_j) . \quad (2.4)$$

Introduciendo los operadores de creación (c_i^+) y aniquilación (c_i) en el espacio de números de ocupación y que cumplen con las siguientes reglas de anticonmutación:

$$\{c_i, c_j^+\} \equiv c_i c_j^+ + c_j^+ c_i = \delta_{ij}, \quad \{c_i, c_j\} = \{c_i^+, c_j^+\} = 0 . \quad (2.5)$$

Dichas reglas garantizan la antisimetría del estado cuántico de muchos fermiones ante el intercambio de las coordenadas de dos de ellos. Se puede demostrar (Fetter y Walecka, 1971) que el operador H_1 puede expresarse como

$$H_1 = \sum_{i,j} \langle i | h | j \rangle c_i^+ c_j . \quad (2.6)$$

y que el operador H_2 puede escribirse como

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|v|kl\rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k, \quad (2.7)$$

en donde el elemento de matriz $\langle ij|v|kl\rangle$ está dado por

$$\langle ij|v|kl\rangle = \int \varphi_{\varepsilon_i}^*(\zeta_1) \varphi_{\varepsilon_j}^*(\zeta_2) v(\zeta_1, \zeta_2) \varphi_{\varepsilon_k}(\zeta_1) \varphi_{\varepsilon_l}(\zeta_2) d\zeta_1 d\zeta_2. \quad (2.8)$$

Es importante hacer notar que el orden de los operadores (i, j, k, l) en la ecuación (2.7) es distinto del que aparece en los elementos de matriz (i, j, l, k) . De esta manera, el hamiltoniano más general de un sistema de N partículas interactuantes puede escribirse, dentro del formalismo de segunda cuantización, como

$$H = H_1 + H_2 = \sum_{i,j} \langle i|h|j\rangle c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|v|kl\rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \quad (2.9)$$

2.2 El modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard (Hubbard, 1963) es quizás el modelo más simple que toma en cuenta la interacción que hay entre los electrones en un sólido. Como se verá a continuación, este modelo solamente considera la interacción entre dos electrones localizados en un mismo sitio o átomo, por lo que representa una simplificación considerable del problema real. Primero daremos una definición para este modelo (Tasaki, 1998):

Sea Λ una red formada por los sitios R_i . Físicamente hablando, cada sitio en la red corresponde a un sitio atómico en un cristal. Simplifiquemos nuestro problema pensando que cada átomo tiene solamente un orbital electrónico, con simetría esférica y cuyo estado propio $|i\rangle$ es no degenerado. Por supuesto que los átomos pueden tener más de un orbital y más de un electrón en los correspondientes estados, sin embargo la filosofía detrás de la construcción de este modelo es que aquellos electrones en otros estados no juegan un papel importante en la física de bajas energías en la que estamos interesados y por el momento no los consideraremos.

Si nos interesa una descripción local del sistema, es conveniente trabajar con las funciones de Wannier, las cuales se obtienen mediante la aplicación de una transformada de Fourier de las funciones de Bloch (Aschcroft, 1976), tal como vimos en el capítulo anterior.

Sea $|i\rangle$ el estado de un electrón descrito por la función de Wannier $\varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$ centrada en el sitio \mathbf{R}_i . Como se vió en la sección anterior, el hamiltoniano más general de un

sistema de fermiones interactuantes se puede expresar como

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} + \sum_{i,j \neq i,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{ij}^{kl} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma'}^+ c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma}, \quad (2.10)$$

donde

$$t_{ij} \equiv \langle i | h | j \rangle = \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) h(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad \varepsilon_i \equiv t_{ii}, \quad (2.11)$$

y

$$U_{ij}^{kl} \equiv \langle ij | v | kl \rangle = \int d^3r d^3r' \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \varphi^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) \varphi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_l). \quad (2.12)$$

La aproximación más sencilla consiste en considerar únicamente el término $U \equiv U_{ii}^{ii} = \langle ii | v | ii \rangle$ y despreciar el resto, lo que conduce al hamiltoniano de Hubbard estándar (Hubbard, 1963)

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (2.13)$$

donde $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}$ es el operador de número, y la ocupación electrónica total en el sitio i es $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$. De esta manera U parametriza la interacción entre dos electrones que se hallan en el mismo sitio. En otras palabras, U representa la energía que cuesta colocar dos electrones en un mismo átomo. Más aún, en el presente trabajo tomaremos

$$t_{ij} = \begin{cases} t & \text{si } i, j \text{ son primeros vecinos} \\ t' & \text{si } i, j \text{ son segundos vecinos} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.14)$$

donde, por simplicidad hemos escogido $\varepsilon_{ii} = t_{ii} = 0$.

Los valores experimentales de t y t' pueden determinarse a partir de la estructura de bandas de un material dado, ajustando una relación de dispersión a la banda que cruza el nivel de Fermi. Por otra parte, la medición experimental de U ha sido un problema difícil, y solamente recientemente se ha logrado hacerlo en el compuesto NaV_2O_5 utilizando dispersión resonante inelástica de rayos X (RIXS, por sus siglas en inglés) (Zhang, *et al.* 2002). Por último, cabe mencionar que para los metales de transición se estima que $U \approx 20eV$ mientras que t es del orden de $1eV$ (Hubbard, 1963).

3 Teoría Microscópica de la Superconductividad.

En esta sección haremos una breve revisión de la teoría BCS de la superconductividad (Bardeen, *et al.*, 1957) y de aplicación de este formalismo al modelo de Hubbard atractivo.

3.1 Formalismo BCS a $T = 0$

A través del método variacional, obtendremos una ecuación para la brecha superconductor así como para el estado base superconductor a temperatura cero ($T = 0$).

Partiremos del llamado hamiltoniano reducido que incluye las interacciones que involucran solamente pares de electrones con espines y momentos opuestos

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow}, \quad (3.1)$$

suponiendo que este hamiltoniano incluye todos los términos relevantes para la superconductividad. Aquí, $\varepsilon(\mathbf{k})$ es la energía de una sola partícula, $U_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}$ es el elemento de matriz del potencial de interacción entre dos electrones y N_s es el número de celdas unitarias del sólido. Para aplicar el método variacional necesitamos una función de prueba; la teoría BCS propone una de la siguiente forma (Bardeen, *et al.*, 1957)

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^+) |0\rangle, \quad (3.2)$$

donde $|0\rangle$ representa el estado del vacío, es decir, sin partículas presentes, y donde $v_{\mathbf{k}}$, $u_{\mathbf{k}}$, son las amplitudes de probabilidad de encontrar al estado $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ ocupado y desocupado, respectivamente, y por lo tanto

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (3.3)$$

la cual es llamada “condición de normalización”. Esta función de onda no es función propia del operador de número total \hat{N} , lo que significa que representa un estado con un número de partículas variable. Si queremos determinar el valor medio del número de partículas N debemos minimizar con respecto de $v_{\mathbf{k}}$ (el coeficiente de probabilidad

de ocupación) el valor de expectación $\langle \Psi_G | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi_G \rangle$, es decir,

$$\delta \langle \Psi_G | H_{BCS} - \mu N | \Psi_G \rangle = \delta \left[2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \right] = 0, \quad (3.4)$$

donde μ es el potencial químico. Dada la condición de normalización podemos suponer, sin pérdida de generalidad, que

$$u_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}}, \quad v_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}} \quad (3.5)$$

donde $\theta_{\mathbf{k}}$ es un parámetro por determinar. Después de usar identidades trigonométricas básicas, el miembro derecho de la ecuación 3.4 se puede escribir como

$$\sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k})(1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{4N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (3.6)$$

en donde $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$.

La minimización de $\langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle$ con respecto a $\theta_{\mathbf{k}}$ conduce a

$$\frac{\partial \langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle}{\partial \theta_{\mathbf{k}}} = 0 = -2\xi(\mathbf{k}) \sin 2\theta_{\mathbf{k}} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \cos 2\theta_{\mathbf{k}} \cos 2\theta_{\mathbf{k}'} \quad (3.7)$$

y entonces

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}}{2\xi(\mathbf{k})} \quad (3.8)$$

Definiendo

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} = -\frac{1}{2} \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'} \quad (3.9)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} = \sqrt{\xi(\mathbf{k})^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \quad (3.10)$$

Esta $E_{\mathbf{k}}$ es la energía de excitación de una cuasi-partícula de momento $\hbar_{\mathbf{k}}$ mientras que $\Delta_{\mathbf{k}}$ es la mínima energía de excitación, o brecha de energía (*gap*). Con estas definiciones podemos escribir

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \quad (3.11)$$

$$2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}$$

los respectivos signos del seno y del coseno se escogen basados en que $v_{\mathbf{k}}^2 \rightarrow 0$ conforme $\varepsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow \infty$.

Ahora, si sustituimos la primera de las relaciones anteriores en la ecuación 3.9 para evaluar $\Delta_{\mathbf{k}}$, llevándonos a una condición de autoconsistencia

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}}. \quad (3.12)$$

Notemos que existe la solución trivial $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$, entonces $v_{\mathbf{k}} = 1$ para $\xi(\mathbf{k}) < 0$, y $v_{\mathbf{k}} = 0$ para $\xi(\mathbf{k}) > 0$, y la función $|\Psi_G\rangle$ es la del estado normal del mar de Fermi a $T = 0$. Pero esperamos soluciones no triviales con menor energía si $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} < 0$. Conservamos entonces el modelo usado por Cooper y BCS

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}| \text{ y } |\xi_{\mathbf{k}'}| \leq \hbar\omega_c \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (3.13)$$

Insertando la definición anterior de Δ (Ec. 3.12) encontramos que

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_c \end{cases} \quad (3.14)$$

Una vez calculado Δ podemos facilmente encontrar el valor para los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$

$$v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right)} \text{ y } u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right)}. \quad (3.15)$$

los cuales especifican la óptima función de onda BCS. Una vez determinada $|\Psi_G\rangle$ se puede calcular la energía del estado base E_G a partir de la Ec. (3.6) obteniendo

$$E_G = \langle \Psi_G | H | \Psi_G \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi(\mathbf{k}) - \frac{\xi^2(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E(\mathbf{k})} + \mu N. \quad (3.16)$$

El valor medio del número de partículas viene dado por

$$N = \langle \Psi_G | \hat{N} | \Psi_G \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right), \quad (3.17)$$

o bien,

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})}, \quad (3.18)$$

en donde n es el número de partículas por sitio, es decir $n = N/N_s$.

3.2 Formalismo BCS a $T \neq 0$

Si deseamos realizar un estudio termodinámico, conviene emplear el ensamble gran canónico. La función de partición gran canónica es

$$Z_{gc} = \text{Tr} e^{-[H_{BCS} - \mu\hat{N}]/k_B T}, \quad (3.19)$$

en donde k_B es la constante de Boltzman, T es la temperatura y la traza se realiza sobre todos los conjuntos de números de ocupación. debemos tomar en cuenta que H_{BCS} contiene productos de cuatro operadores fermiónicos, por lo cual la traza no se puede calcular en forma cerrada. Sin embargo empleando una técnica de campo medio diseñada para reproducir los resultados a temperatura cero, podemos obtener una muy buena aproximación a la termodinámica. Para ello escribiremos

$$c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} = b_{\mathbf{k}} + (c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} - b_{\mathbf{k}}) \quad (3.20)$$

en donde $b_{\mathbf{k}} \equiv \langle c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle$. Al aplicar esta definición, solamente consideraremos las cantidades a primer orden del término entre paréntesis de la ecuación 3.20. El resultado es

$$Z_{gc} = \text{Tr} e^{-[H_{CM} - \mu\hat{N}]/k_B T}, \quad (3.21)$$

donde

$$\begin{aligned} H_{CM} - \mu\hat{N} &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (b_{\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k},\uparrow}^+c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ + b_{\mathbf{k}'}^*c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} - b_{\mathbf{k}'}^*b_{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k},\uparrow}^+c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ + \Delta_{\mathbf{k}}^*c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}}^*), \end{aligned} \quad (3.22)$$

y

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'}. \quad (3.23)$$

Ahora solamente tenemos productos de dos operadores fermiónicos, por lo cual la traza del hamiltoniano se puede calcular de forma cerrada; aunque es necesario diagonalizar antes el hamiltoniano a través de una transformación canónica de Bogoliubov (Bogoliubov, 1958)

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k},\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^+, \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ &= -v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \end{aligned}$$

que define nuevos operadores fermiónicos $\gamma_{\mathbf{k}0}$ y $\gamma_{\mathbf{k}1}$, donde los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ deben satisfacer

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (3.24)$$

Sustituyendo estos nuevos operadores en el hamiltoniano de la ecuación 3.22 y llevando a cabo los productos indicados considerando las propiedades de conmutación de los nuevos operadores fermiónicos, obtenemos

$$\begin{aligned}
H_{CM} - \mu\hat{N} = & \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) [(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2|v_{\mathbf{k}}|^2 \\
& + 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+] \\
& + \sum_{\mathbf{k}} [(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1} - 1) \\
& + (\Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{*2} - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^{*2}) \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} + (\Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2) \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+ + \Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^+] \quad (3.25)
\end{aligned}$$

Para diagonalizar el hamiltoniano, escogemos $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ de tal forma que los coeficientes de $\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}$ y $\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+$ en la ecuación anterior sean cero, esto es

$$2\xi(k)u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^2 = 0. \quad (3.26)$$

Las ecuaciones (3.26) y (3.24) son suficientes para determinar $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ en términos de $\Delta_{\mathbf{k}}$. De la Ec. (3.26) encontramos que $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}$ es real (Tinkham, 1996) y multiplicando la Ec. (3.26) por $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}}$ y resolviendo la ecuación cuadrática resultante obtenemos

$$\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} - \xi(\mathbf{k}) \equiv E(\mathbf{k}) - \xi(\mathbf{k}). \quad (3.27)$$

Se escogió el signo positivo de la raíz pues es el que corresponde a la solución estable de mínima energía. De la condición de normalización $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ y sabiendo que $|v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}| = (E(\mathbf{k}) - \xi(\mathbf{k})) / |\Delta_{\mathbf{k}}|$, se encuentra que los coeficientes son

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right). \quad (3.28)$$

Aunque las fases de $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ son individualmente arbitrarias, ellas están relacionadas ya que $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}$ es real. Esto es, la fase de $v_{\mathbf{k}}$ relativa a $u_{\mathbf{k}}$ debe ser la fase de $\Delta_{\mathbf{k}}$. No se pierde generalidad si escogemos $u_{\mathbf{k}}$ real y positiva. Si lo hacemos así, $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ deben tener entonces la misma fase. Reescribiendo el hamiltoniano en términos de los nuevos operadores se obtiene

$$H_{CM} - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}) - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}'} \right) + \sum_{\mathbf{k}} E(k) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}) \quad (3.29)$$

El primer término de esta expresión es una constante mientras que el segundo término describe fermiones independientes con energías de excitación $E(\mathbf{k})$, ya que los operadores $\gamma_{\mathbf{k}0}$ y $\gamma_{\mathbf{k}1}$ obedecen las relaciones de conmutación de Fermi-Dirac. El hamiltoniano de la ecuación (3.29) determina las propiedades del sistema en térmi-

nos de los $b_{\mathbf{k}}$ pero aún se deben determinar dichos números. Aquí es donde el requerimiento de autoconsistencia aparece ya que los números $b_{\mathbf{k}}$ son los promedios cuántico y termodinámico de los operadores $c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow}$ cuando el sistema está descrito por $H_{CM} - \mu\hat{N}$. En mecánica estadística cuántica se demuestra que tales promedios están dados por (Pathria, 1972)

$$b_{\mathbf{k}} \equiv \langle c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu\hat{N} \right) \right] c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu\hat{N} \right) \right] \right\}}, \quad (3.30)$$

donde $\text{Tr}\{\dots\}$ denota a la traza del operador entre paréntesis en el espacio de Hilbert de los eigenestados de $H_{CM} - \mu\hat{N}$. Reescribiendo los operadores $c_{\mathbf{k}}$ en términos de los operadores $\gamma_{\mathbf{k}}$, la traza puede evaluarse y se obtiene

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} &= \frac{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu\hat{N} \right) \right] \left(-u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \right) \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu\hat{N} \right) \right] \right\}} \\ &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \{1 - 2f[E(\mathbf{k})]\}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

donde

$$f[E(\mathbf{k})] = \frac{1}{e^{E(\mathbf{k})/k_B T} + 1}, \quad (3.32)$$

es la función de Fermi-Dirac. Cabe señalar que hemos utilizado el hecho de que en un sistema de fermiones independientes esta función da la probabilidad de ocupación de un estado particular. Nótese que el denominador contiene $\exp(E(\mathbf{k})/k_B T)$ en vez de $\exp([E(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T)$. La razón formal es que aunque μ se encuentra contenido en la definición de $E(k)$, no multiplica a los operadores fermiónicos en la ecuación (3.29). Físicamente, la razón es que $\gamma_{\mathbf{k}0}^+$ (o $\gamma_{\mathbf{k}1}^+$) crea un estado excitado pero no cambia el número de partículas. Finalmente, sustituyendo las ecuaciones (3.31), y (3.28) en (3.23) obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E(\mathbf{k}')} \{1 - 2f[E(\mathbf{k}')]\} \\ &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E(\mathbf{k}')} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right], \end{aligned} \quad (3.33)$$

generalizando así la ecuación de la brecha superconductor a temperaturas finitas. De manera análoga, la ecuación (3.18) se generaliza a

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right]. \quad (3.34)$$

Dados $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, n y T , las ecuaciones no lineales integrales (3.33) y (3.34) deben resolverse para determinar $\Delta_{\mathbf{k}}(n, T)$ y $\mu(n, T)$. En particular, la T_c se obtiene a partir de la condición $\Delta_{\mathbf{k}}(n, T_c) = 0$. En este caso $E(\mathbf{k}) = |\xi(\mathbf{k})|$ y el espectro de excitación es el mismo que el del estado normal. En el caso particular de un gas tridimensional de electrones con una interacción atractiva dada por

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{si } |\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu| < \hbar\omega_c \text{ y } |\varepsilon(\mathbf{k}') - \mu| < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (3.35)$$

se puede demostrar (Bardeen, *et al.* 1957) que, en el límite donde $DV \ll 1$, se tiene

$$k_B T_c = 1.13 \hbar\omega_c e^{-\frac{1}{DV}} \quad (3.36)$$

y

$$\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = 1.764 \quad (3.37)$$

donde ω_c es una frecuencia típica de los fonones y D es la densidad de estados electrónicos en el nivel de Fermi. Este resultado se observa en la mayoría de los elementos superconductores, con variaciones menores al 10% (Mersevey y Schwartz, 1969).

3.3 Modelo de Hubbard atractivo

El modelo de Hubbard con U negativa, o atractivo, describe interacciones locales atractivas entre fermiones. Este hamiltoniano debe considerarse como un modelo efectivo con parámetros renormalizados que contienen una interacción indirecta atractiva, es decir, cuando los electrones polarizan un grado de libertad colectivo de la red, ellos pueden obtener una energía de amarre compartiendo dicha polarización (Auerbach, 1994). Cabe mencionar que se han propuesto muchos mecanismos para producir una interacción atractiva entre electrones como por ejemplo, las deformaciones de la red (fonones), oscilaciones colectivas de carga (plasmones) o fluctuaciones de espín (paramagnones).

En esta sección aplicaremos, a manera de ejemplo, la teoría de campo medio de BCS al hamiltoniano de Hubbard atractivo

$$H - \mu \hat{N} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}, \quad (3.38)$$

al que hemos agregado el potencial químico μ para fijar el número de partículas y donde \hat{N} es el operador de número. Usando las transformadas de Fourier de los operadores

de creación y aniquilación

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) c_{\mathbf{k},\sigma}^+ \\ c_{i,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) c_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (3.39)$$

podemos escribir este hamiltoniano en el espacio de momentos de la siguiente forma

$$H - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} U c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow}, \quad (3.40)$$

donde $2\mathbf{q}$ es el momento del centro de masa del par y $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ es la relación de dispersión de una partícula. Dentro del formalismo BCS, los términos con $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ son los únicos términos relevantes para la superconductividad mientras que los términos con $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ pueden reescribirse en la aproximación de campo medio (Dagotto, *et al.*, 1994b; Arrachea, *et al.*, 1997) como $-Un^2N_s/4 + Un\hat{N}/2$. De esta manera tenemos

$$H - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} - \frac{Un^2}{4} N_s, \quad (3.41)$$

donde $\varepsilon(\mathbf{k})$ es la relación de dispersión de una partícula incluyendo una auto-energía de $Un/2$. Comparando las ecuaciones (3.41) y (3.22) y utilizando las ecuaciones (3.33) y (3.34), podemos escribir directamente las ecuaciones que describen el estado superconductor a una temperatura T

$$1 = \frac{|U|}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}} \tanh\left(\frac{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}}{2k_B T}\right), \quad (3.42)$$

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}} \tanh\left(\frac{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}}{2k_B T}\right), \quad (3.43)$$

donde $\Delta \equiv -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} U \langle c_{\mathbf{k}',\uparrow} c_{-\mathbf{k}',\downarrow} \rangle$. Las ecuaciones integrales (3.42) y (3.43) están acopladas y, en el caso general, el potencial químico μ de los fermiones debe determinarse de manera autoconsistente junto con la brecha superconductor Δ . Como ya se mencionó, para obtener T_c hacemos $\Delta = 0$, en las ecuaciones anteriores por lo que

estas se reducen a:

$$1 = \frac{|U|}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\varepsilon(\mathbf{k})-\mu|} \tanh\left(\frac{|\varepsilon(\mathbf{k})-\mu|}{2k_B T_c}\right), \quad (3.44)$$

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k})-\mu}{|\varepsilon(\mathbf{k})-\mu|} \tanh\left(\frac{|\varepsilon(\mathbf{k})-\mu|}{2k_B T_c}\right). \quad (3.45)$$

Por otra parte, la brecha superconductor a $T = 0$ queda determinada por

$$1 = \frac{|U|}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[(\varepsilon(\mathbf{k})-\mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.46)$$

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k})-\mu}{[(\varepsilon(\mathbf{k})-\mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.47)$$

donde hemos usado el hecho de que

$$\lim_{T \rightarrow 0} \tanh\left(\frac{|\varepsilon(\mathbf{k})-\mu|}{2k_B T_c}\right) = 1, \quad (3.48)$$

En el límite $|U| \gg |t|$ a $T = 0$, se sigue de las ecuaciones (3.46) y (3.47) que

$$\mu = -\frac{1}{2}|U|, \quad \Delta = \frac{1}{2}|U| \sqrt{n(2-n)}, \quad (3.49)$$

y la mínima energía ($2\Delta_0$) necesaria para romper el par puede obtenerse minimizando $2E(\mathbf{k}) = 2[(\varepsilon(\mathbf{k})-\mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}$, es decir

$$2\Delta_0 \equiv 2\sqrt{\left(\mu - \frac{Un}{2}\right)^2 + \Delta^2} = |U|, \quad (3.50)$$

que corresponde a la energía de amarre de un par. Asimismo, en el límite de baja densidad ($n \ll 1$) tenemos que

$$\mu = -\frac{1}{2}|U|, \quad \Delta = |U| \sqrt{n/2}. \quad (3.51)$$

Como en este límite la ecuación BCS se reduce a la ecuación de Schrödinger para un solo par, la ecuación (3.51) implica que a primer orden μ está dado por la mitad de la energía de amarre de un solo par.

4 Superconductividad en una cadena lineal

El hamiltoniano de Hubbard atractivo con parámetro de salto a primeros vecinos es quizás el modelo más simple que incorpora los ingredientes básicos del apareamiento local de electrones en redes cristalinas. Este modelo se ha aplicado para estudiar la superconductividad en los regímenes de acoplamiento débil y fuerte debido a que esencialmente tiene un único parámetro de interacción U/t que puede variarse para pasar de un régimen a otro. A pesar de su simplicidad, el modelo de Hubbard con parámetro de salto a primeros vecinos solamente ha sido resuelto exactamente para una dimensión (Lieb, 1968; Quick, 1993, Tahir-Kheli, 1993). Esto ha permitido hacer comparaciones entre la solución exacta y la solución obtenida a través del formalismo de campo medio o BCS (Marsiglio, 1997; Salwen, 2004; Kocharian, 1999). En todos estos trabajos se ha demostrado que la solución BCS es una magnífica aproximación para la energía del estado base superconductor, particularmente para bajas densidades de electrones y todos los valores de U . Por otra parte, en el límite diluido, el valor de la brecha superconductora coincide con el valor exacto aunque dicho acuerdo disminuye cuando la densidad de electrones aumenta. Aún así el formalismo BCS tiene una poderosa utilidad y es un buen punto de partida para investigar el estado superconductor en modelos más complicados que carecen de solución exacta, como es el caso del modelo de Hubbard con parámetro de salto a segundos vecinos (t') que se estudia en esta tesis.

En este capítulo estudiamos las principales propiedades físicas del estado superconductor en una cadena lineal con parámetros de salto a primeros (t) y segundos vecinos (t') por medio del hamiltoniano de Hubbard atractivo y usando el formalismo BCS. En particular, a partir de las ecuaciones integrales acopladas (3.42), (3.43) y (3.46), (3.47) obtenemos numéricamente la temperatura crítica (T_c) y la brecha superconductora (Δ) como función de los dos parámetros de control del modelo que son $U/|t|$ y $t'/|t|$, y de la densidad de electrones en el sistema (n). Aquí cabe mencionar que en general cada conjunto de valores (t, t', U, n) caracteriza a un solo material o sistema, por lo que, al considerar una variación en dichos parámetros, estamos teniendo en cuenta diferentes materiales. Un caso particularmente interesante lo constituyen los superconductores cerámicos de alta T_c (que no estudiamos en esta tesis) en los cuales es posible variar la concentración de portadores n por métodos químicos (Poole, *et al.*, 1995) manteniendo t, t' y U aproximadamente constantes.

4.1 Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para la temperatura crítica y la brecha superconductora de un cadena lineal con parámetros de salto a primeros (t) y segundos vecinos (t') como función de U, t' y la densidad de electrones en el sistema (n). Para este caso particular, hay que sustituir $\varepsilon(k) = 2t \cos(ka) + 2t' \cos(2ka)$ en

las ecuaciones (3.42) y (3.43), las cuales se resolvieron numéricamente para diferentes valores de U y t' . En todos los casos utilizamos $t = -1$.

En las figuras 2, 3, 4 y 5 se muestran las gráficas de la temperatura crítica (T_c) y de la brecha superconductora (Δ) como función de n para $U/|t| = -1, -2, -3$ y -5 , respectivamente y diferentes valores de t'/t , los cuales se indican en las gráficas correspondientes.

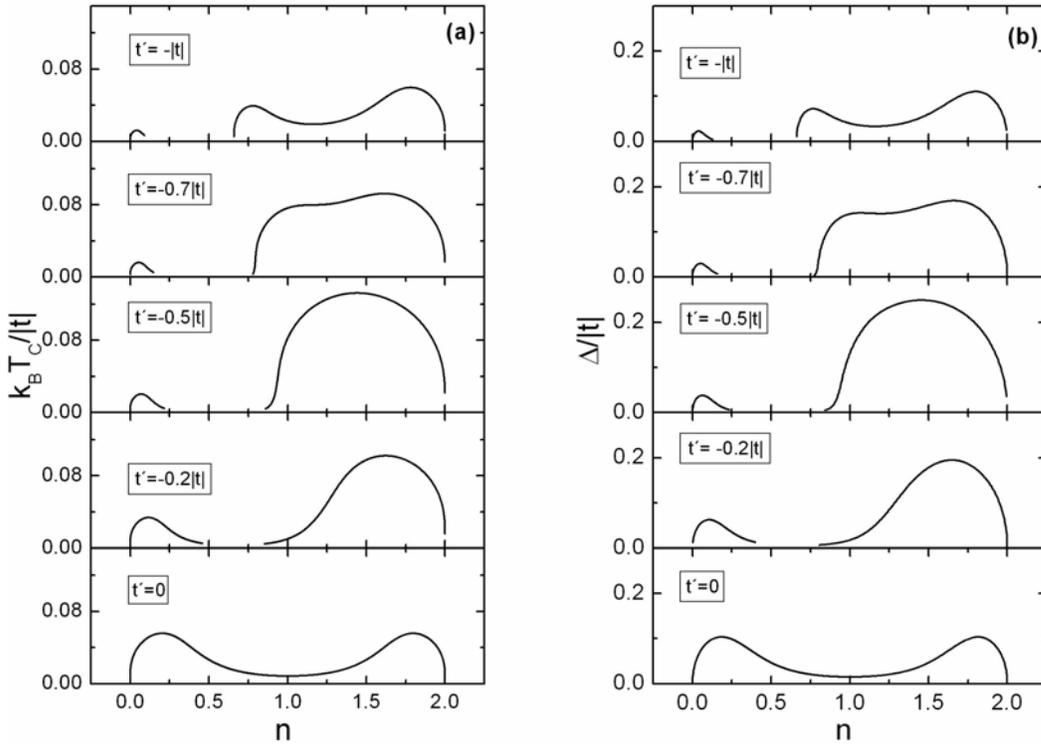


Figura 2. (a). Temperatura crítica (T_c) y (b) brecha superconductora (Δ) como función de la densidad de partículas (n) para $U = -|t|$ y diferentes valores de t' .

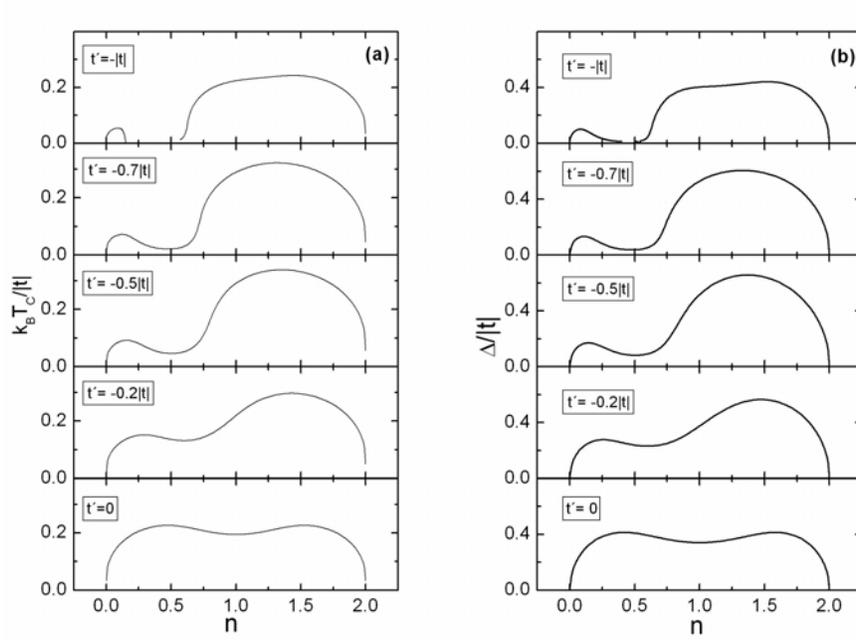


Figura 3. (a). Temperatura crítica (T_C) y (b) brecha superconductora (Δ) como función de la densidad de partículas (n) para $U = -2|t|$ y diferentes valores de t' .

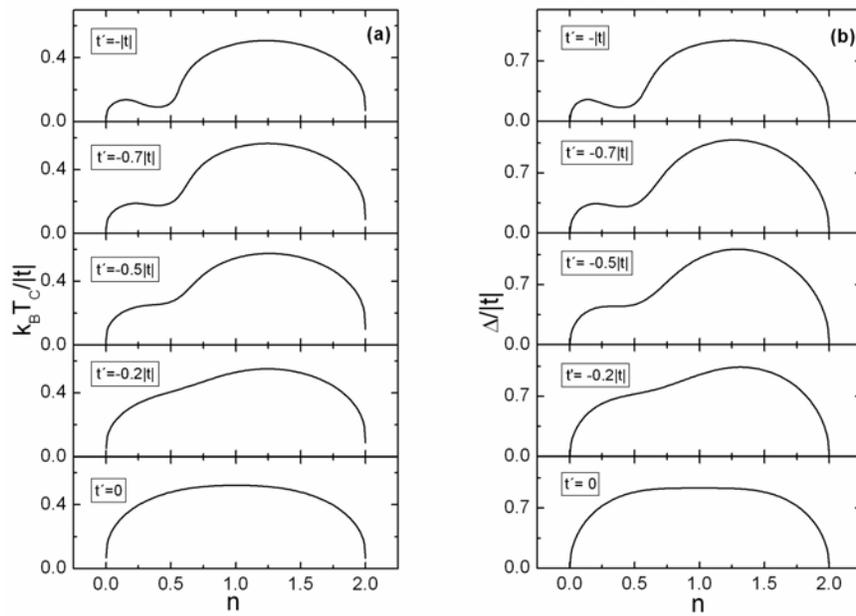


Figura 4 (a). Temperatura crítica (T_C) y (b) brecha superconductora (Δ) como función de la densidad de partículas (n) para $U = -3|t|$ y diferentes valores de t' .

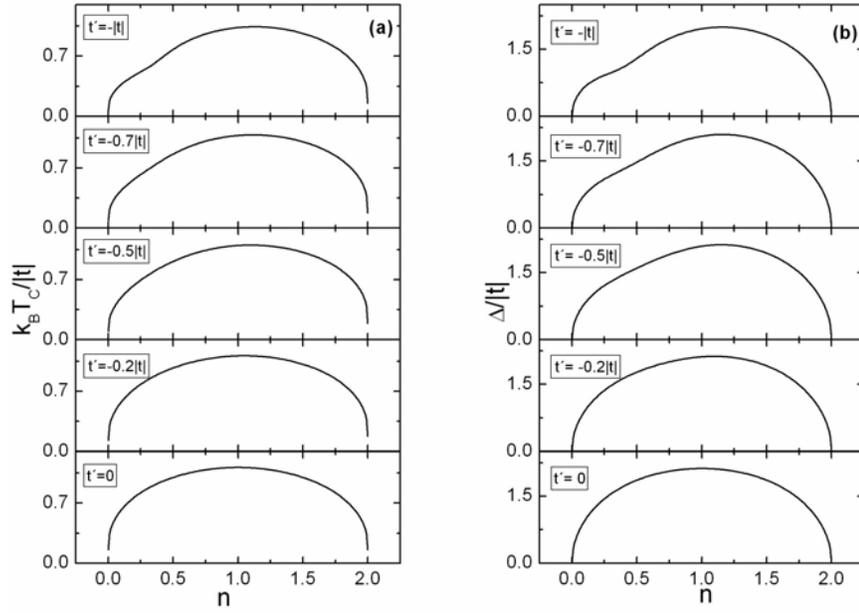


Figura 5. (a) Temperatura crítica (T_c) y (b) brecha superconductora (Δ) como función de la densidad de partículas (n) para $U = -5|t|$ y diferentes valores de t' .

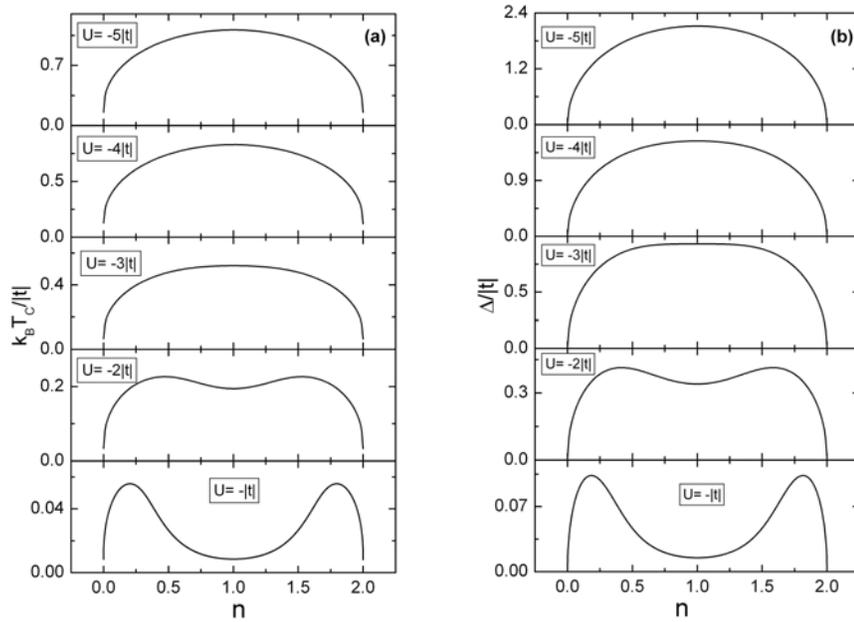


Figura 6. (a) Temperatura crítica (T_c) y (b) brecha superconductora (Δ) como función de la densidad de partículas (n) para $t' = 0$ y diferentes valores de U .

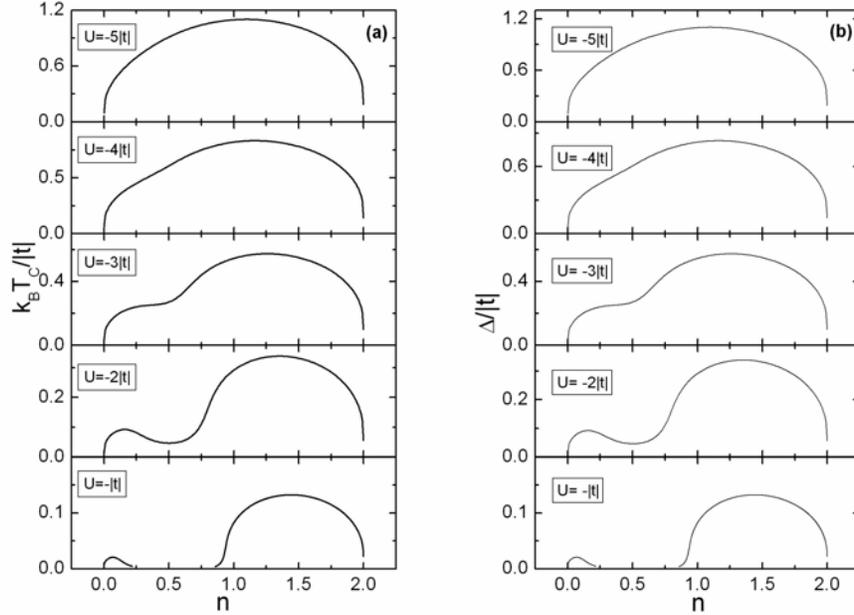


Figura 7. (a) Temperatura crítica (T_C) y (b) brecha superconductora (Δ) como función de la densidad de partículas (n) para $t' = -0.5|t|$ y diferentes valores de U .

Nótese que para $t' = 0$ existe un comportamiento simétrico de la curva $T_c(n)$ (análogamente para $\Delta(n)$) alrededor de $n = 1$ para todos los valores de $U/|t|$, debido a la simetría electrón-hueco que ocurre en redes bipartitas. Sin embargo, al incluir el término t' se rompe dicha simetría. Asimismo, para valores de $U/|t| \simeq -1$, tanto T_c como la brecha superconductora (Δ) presentan dos máximos locales cuando $0 \geq t' > -0.5|t|$, mientras que para $t' < -0.5|t|$ se tienen tres máximos locales. Nótese que el máximo global de $T_c(n)$ [al igual que para $\Delta(n)$] siempre ocurre para $n > 1$ cuando $t' < 0$. Para valores más grandes de $|U|$, $T_c(n)$ y $\Delta(n)$ solamente presentan dos máximos locales cuya diferencia se incrementa conforme $|t'|$ aumenta, siendo iguales solamente cuando $t' = 0$. Más aún, conforme U crece en magnitud, los máximos locales desaparecen para dar lugar a un único máximo que se alcanza en $n = 1$. Este comportamiento se aprecia mejor en las figuras 6 y 7, en donde se muestran las gráficas de $T_c(n)$ y $\Delta(n)$ para $t' = 0$ y $t' = -0.5|t|$, respectivamente, y diferentes valores de $|U|$. Nótese que este máximo se encuentra en $n = 1$ si $t' = 0$ y se aleja de este valor cuando $|t'|$ aumenta manteniendo U fija. Como puede observarse, para energías de interacción débiles ($|U|/|t|$), el número de máximos locales de T_c como función de n está directamente relacionado con el número de singularidades de van Hove en la densidad de estados electrónicos de una sola partícula (ver Figura 1). Asimismo, cabe mencionar que el comportamiento similar que presentan $T_c(n)$ y $\Delta(n)$ se debe a que, en general, estos son aproximadamente proporcionales entre sí, como se muestra en

la ecuación 3.37. Es decir, una mayor brecha superconductor siempre conduce a una mayor temperatura crítica.

Sin embargo, a medida que U crece, la densidad de electrones donde ocurre la T_C máxima (Δ) siempre tiende $n = 1$ sin importar el valor de t' , como se muestra en las figuras 6 y 7. De hecho, en el límite $|U| \gg |t|$ todas las propiedades del estado superconductor son independientes de la dimensionalidad y topología de la red, y el máximo de la T_C (Δ) ocurre en $n = 1$ (ver figura 8) como se predice a partir de la ecuación (3.49).

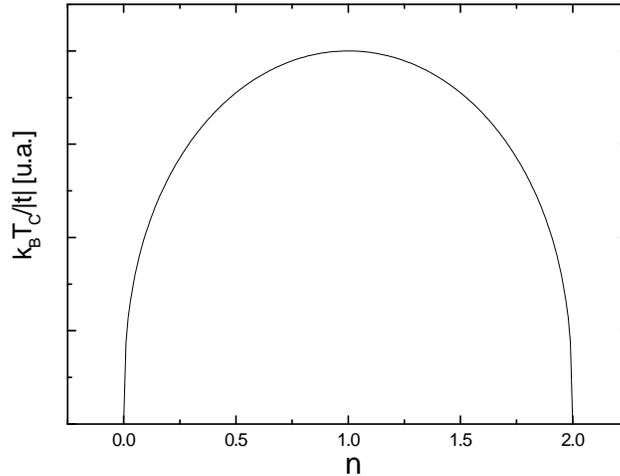


Figura 8. Temperatura crítica (T_C) como función de la densidad de partículas, para $|U| \gg |t|$. Se aprecia como el máximo de la curva ocurre en $n = 1$.

Por otra parte, en la figura 9 se grafican (a) los máximos locales de la temperatura crítica (T_C^{\max}) junto con (b) las correspondientes densidades óptimas (n_{opt}), como función de t' para diferentes valores de U . Nótese que cuando $|U| \sim |t|$, el máximo global de T_C (cuadrados sólidos) alcanza su mayor valor (para U fija) cuando $t' = -0.5|t|$, mientras que cuando $|U| \gg |t|$, el máximo global de T_C alcanza su mayor valor (para U fija) cuando $t' = 0$. Más aún, el segundo máximo local de T_C (círculos sólidos), el cual solamente existe cuando $|U| \sim |t|$, siempre crece conforme $|t|$ disminuye, manteniendo U constante. Asimismo cuando $|U| \sim |t|$, la densidad óptima a la cual se alcanza la máxima T_C , $n_{opt}(t')$, tiene un comportamiento irregular, manteniéndose siempre por arriba de la banda semillena.

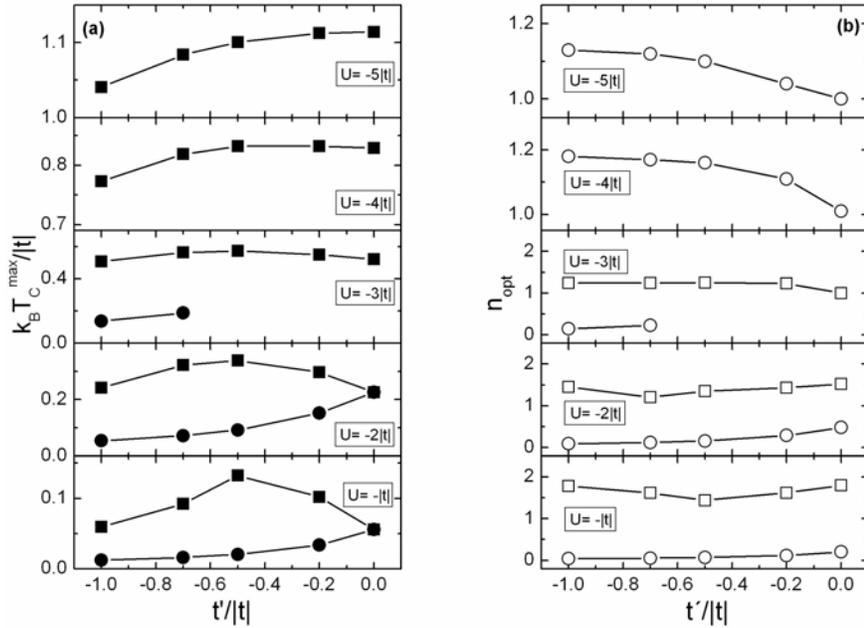


Figura 9.(a) Maximos locales de la temperatura crıtica [T_C^{\max}] y (b) las correspondientes densidades  imas (n_{opt}) para $n \geq 1$ (cırculos) y $n \leq 1$ (cuadrados).

Finalmente, cabe se alar que los casos con $t' < 0$ y $t' > 0$ est an ligados por la relaci on (Micnas, et al., 1989)

$$T_c(n, t'/t) = T_c(2 - n, -t'/t) , \quad (4.1)$$

$$\Delta(n, t'/t) = \Delta(2 - n, -t'/t) \quad (4.2)$$

lo cual se aprecia en las figuras 7 y 8. Esta relaci on puede demostrarse a partir de las ecuaciones (3.42) y (3.43). De esta manera, es suficiente estudiar el comportamiento de T_c y Δ para un solo signo de t' .

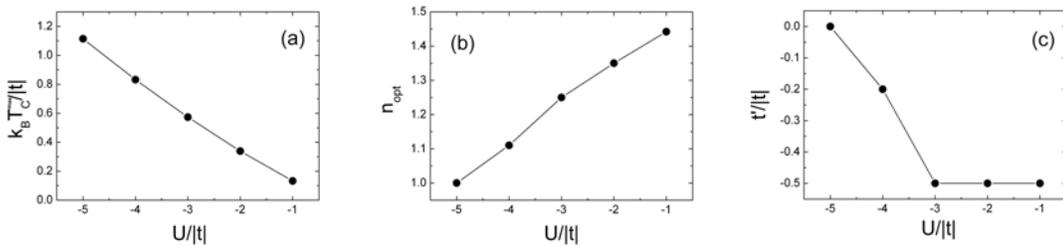


Figura10. (a) Los m aximos valores de la temperatura crıtica (T_C^{\max}), (b) las correspondientes concentraciones  imas (n_{opt}) y (c) valores del hopping a segundos vecinos (t') como funci on de U .

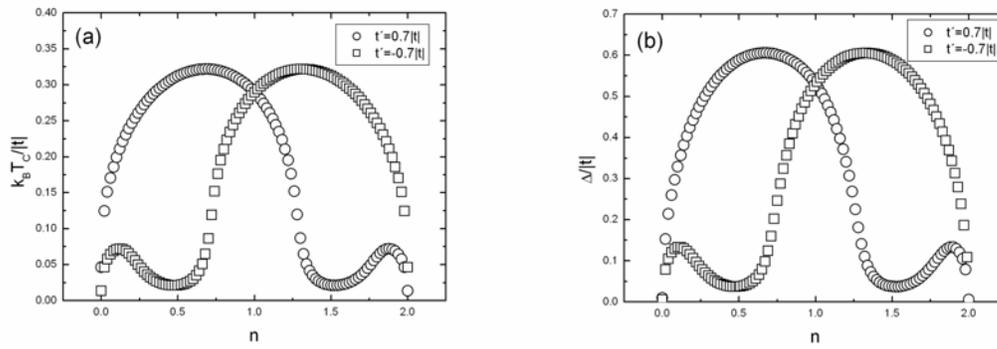


Figura 11. (a) Temperatura crítica (T_c) y (b) brecha superconductora (Δ) como función de la densidad de electrones (n), para $t' = 0.7|t|$ (círculos abiertos) y $t' = -0.7|t|$ (cuadrados abiertos) con $U = -2|t|$.

Conclusiones

En este trabajo se estudió el estado superconductor de una cadena lineal con parámetros de salto (*hopping*) a primeros y segundos vecinos, descrita por el modelo de Hubbard atractivo. Específicamente se analizó el comportamiento de la temperatura crítica (T_c) y de la brecha superconductora (Δ), ambas como función de los parámetros del sistema que son la concentración de electrones (n) y la interacción atractiva intrasitio (U). El estudio se llevó a cabo de forma numérica a partir del formalismo BCS. Las principales conclusiones se enumeran a continuación.

Se encontró una dependencia no monotónica de la temperatura crítica (T_c) y de la brecha superconductora (Δ) con respecto al llenado de la banda (n). Para energías de interacción débiles ($|U|/|t|$), el número de máximos locales de T_c como función de n está directamente relacionado con el número de singularidades de van Hove en la DOS de una sola partícula. Además, para $t' < 0$, el máximo global de $T_c(n)$ (T_c óptima) se encuentra para $n > 1$, mientras que para $t' > 0$, dicho máximo se encuentra para $n < 1$. Más aún, conforme $|t'|$ aumenta desde 0 hasta $0.5|t|$, el valor de la T_c óptima crece. Asimismo, si $|t'|$ se incrementa a partir de $|t'| = 0.5|t|$, el valor de la T_c óptima comienza a decrecer. Cabe mencionar que los otros máximos locales de $T_c(n)$ siempre decrecen cuando $|t'|$ aumenta.

Cuando la energía de interacción $|U|$ aumenta, los máximos locales tienden a desaparecer para dar lugar a un solo máximo, el cual tiende a $n = 1$ (banda semillena). Asimismo, en este régimen de interacciones, la mayor T_c óptima se obtiene cuando $t' = 0$, la cual disminuye conforme $|t'|$ aumenta.

El comportamiento de la brecha superconductora (Δ) como función de t' y n tiene un comportamiento análogo al de T_c .

Finalmente, cabe mencionar que existen algunas simetrías en el modelo de Hubbard que relacionan diferentes topologías de la red lineal y llenados de banda con un mismo valor de T_c y Δ , por lo que solamente es necesario estudiar el comportamiento de la cadena lineal para un solo signo de t y t' . Además, al aumentar la energía de interacción $|U|$, los valores de T_c óptima aumentan, mientras que las n óptimas (n_{opt}) disminuyen.

Apndice A Campo medio

En esta parte se expondrá brevemente a manera de ejemplo, la aproximación más simple de campo medio para el modelo de Hubbard.

Partiendo del hamiltoniano de Hubbard atractivo

$$H - \mu\hat{N} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}, \quad (\text{A.1})$$

y considerando que

$$\begin{aligned} n_{i\uparrow} &= \langle n_{i\uparrow} \rangle + \{n_{i\uparrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle\} \\ n_{i\downarrow} &= \langle n_{i\downarrow} \rangle + \{n_{i\downarrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle\} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

se tiene:

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle + \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle \dots \simeq \frac{n}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{n^2}{4} \quad (\text{A.3})$$

donde se considera que $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = n/2$ y además se han despreciado los términos de orden cuadrático en las fluctuaciones. De esta manera se tiene que

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \simeq \frac{Un}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{Un^2}{4} \sum_i 1 \quad (\text{A.4})$$

ahora, la primera suma de la derecha es igual a

$$\sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) = \hat{N} \quad (\text{A.5})$$

y como la última suma es igual al número de sitios N_s , finalmente podemos escribir

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \simeq \frac{Un}{2} \hat{N} - \frac{Un^2}{4} N_s. \quad (\text{A.6})$$

Así obtenemos el siguiente hamiltoniano de campo medio (en la densidad) :

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \left(\frac{Un}{2} - \mu \right) \hat{N} - \frac{Un^2}{4} N_s. \quad (\text{A.7})$$

El segundo término de la derecha es una constante y generalmente no se considera.

Cabe mencionar que en la presente tesis, además de los términos de campo medio en la densidad, se consideraron explícitamente los términos de cuatro operadores que dan origen a la superconductividad.

Referencias

- Auerbach, A., 1994, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag).
- Ashcroft, N.W., Mermin, N.D., *Solid State Physics* (Harcourt College Publishers, 1976).
- Bardeen J., L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, 1957, Phys. Rev **106**, 162.
- Bednorz, J.G. y Müller, K.A., 1986, Z. Physik B **64**, 189.
- Bogoliubov, N. N., 1958, Noavo Cimento, **7**, 794, citado en Tinkham, 1996.
- Carbotte, J.P., 1990, Rev. Mod. Phys., **62**, 1027.
- Cooper, L. N., 1956, Phys. Rev. **104**, 1189.
- Dagotto, E., 1994a, Rev. Mod. Phys. **66**, 763.
- Dagotto, E., J. Riera, Y. C. Chen, A. Moreo, A. Nazarenko, F. Alcaraz, y F. Ortolani, 1994b, Phys. Rev. B **49**, 3548.
- Dagotto, E., A. Nazarenko, y A. Moreo, 1995, Phys. Rev. Lett. **74**, 310.
- Economou E.N., 1983, *Green's Functions in Quantum Physics*, (Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7).
- Enz C. P., 1992, *A Course on Many Body Theory applied to Solid State Physics*, Lecture Notes in Physics, Vol. **11** (World Scientific, Singapore).
- Essler, F.H.L., 1991, *The One-Dimensional Hubbard Model*, (Cambridge University Press).
- Fetter, A.L. y J. D. Walecka, 1971, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, (McGraw-Hill).
- Foglio, M.E. y L.M. Falicov, 1979, Phys. Rev. B **20**, 4554.
- Fulde, P., 1991, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, (Springer-Verlag).
- Ginzburg, V. L., 2000, J. of Superconductivity, **13**, 665.
- Gradshteyn I.S. e I.M. Ryzhik, 1980, *Table of integrals, series and products*, (Academic Press, New York).
- Hubbard J., 1963, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238.
- Kittel C., 1996, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons).
- Kocharian A.N., C. Yang, Y.L. Chiang, 1999, Phys. Rev. B **59**, 7458.
- Kresin V.Z., and S.A. Wolf, 1990, *Fundamentals of Superconductivity* (Plenum Publishing Corporation).
- Lieb E. y F.Y. Wu, 1968, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445.
- Liljeroth, P, L. Jdira, K. Overgaag, B. Grandier, S. Speller, D. Vanmaekelbergh, 2006, Phys. Chem. Chem. Phys., **8**, 3845–3850
- Lin, H. Q. y J. E. Hirsch, 1987, Phys. Rev. B **35**, 3359.
- Mahan, G.D., 1990, *Many-Particle Physics* (Plenum Press).
- Marder M.P., 2000, *Condensed Matter Physics* (John Wiley & Sons).
- Marsiglio, F., 1997, Phys. Rev. B **55**, 1.
- Mersevey, R. y B.B. Schwartz, *Superconductivity*, Editor R.D. Parks, 1969 (Dekker, New York).
- Micnas, R., S. Robaszkiewicz y K. A. Chao, 1984, Phys. Rev. B, **29**, 2784.
- Micnas, R., J. Ranninger, S. Robaszkiewicz y S. Tabor, 1988, Phys. Rev. B, **37**, 9410.
- Micnas, R., J. Ranninger, y S. Robaszkiewicz, 1989, Phys. Rev. B, **39**, 11 653.
- Micnas, R., J. Ranninger, y S. Robaszkiewicz, 1990, Rev. Mod. Phys. **62**, 113.
- Micnas, R., S. Robaszkiewicz y B. Tobijaszewska, 1999, J. of Superconductivity **12**, 79.
- Nazarenko, A., A. Moreo, E. Dagotto, y J. Riera, 1996, Phys. Rev. B **54**, R768.
- Nelson, K.D., Mao Z.Q., Maeno, Y., Liu, Y., Science 306, 1151 (2004).
- Nozières P., A., y S. Schmitt-Rink, 1985, J. of Low Temp. Phys. **59**, 195.
- Pathria, R.K., 1972, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, London).
- Peierls, R. E., 1955, *Quantum Theory of Solids*, (Oxford University Press).
- Pérez, L.A., 1995, *Tesis Licenciatura*, Universidad Nacional Autónoma de México.

- Pérez, L.A., 2002, *Tesis Doctoral*, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Poole Jr., C.P., H.A. Farach y R.J. Creswick, 1995, *Superconductivity* (Academic Press).
- Rickayzen, G., 1969, en Parks, R. D., *Superconductivity* Vol. 1 (Marcel Dekker, New York).
- Salwen, N., Sheets, S.A. y Cotanch, S.R., 2004, Phys. Rev. B **70**, 064511-1 a 064511-11
- Schrieffer, J.R., Tinkham, R., Rev. Mod. Phys. 71, S313 (1999).
- Skorenkyy, Yu, Kramar, O., 2006, Cond. Matt. Phys., **9**, 1(45), 161-168.
- Sutton, A. *Electronic structure of materials*, 1993 (Clarendon Press, Oxford).
- Tahir-Kheli, J. y Goddard III, W.A. 1993, Phys. Rev. B, **47**, 1116
- Tasaki, Hal, 1998, J. Phys. Condens. Matter **10**, 4353.
- Tinkham, M., 1996, *Introduction to Superconductivity*, 2nd. edition (McGraw-Hill, Inc., New York).
- Tsuei, C.C., Kirtley, J.R., Rev. Mod. Phys. 72, 969 (2000).
- Van Hove, L., 1953, Phys. Rev., **89**, 1189.
- Zhang, G.P., A. Callcott, G.T. Woods, L. Lin, B. Sales, D. Mandrus, J. He., Phys. Rev. Lett. **88**, 077401 (2002).
- Ziman, J.M., 1979, *Principles of the Theory of Solids*, (Cambridge University Press).