



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

RELACIÓN ENTRE EL ESTADO
SUPERCONDUCTOR Y LA DENSIDAD
DE ESTADOS DE UNA PARTÍCULA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Israel Abraham Barragán Vidal

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Luis Antonio Pérez López



2009



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

RELACIÓN ENTRE EL ESTADO
SUPERCONDUCTOR Y LA DENSIDAD
DE ESTADOS DE UNA PARTÍCULA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Israel Abraham Barragán Vidal

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Luis Antonio Pérez López



2009

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos de alumno
Barragán
Vidal
Israel Abraham
57 68 69 59
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
302080047
2. Datos del tutor
Dr
Luis Antonio
Pérez
López
3. Datos del sinodal 1
Dr
Luis Fernando
Magaña
Solís
4. Datos del sinodal 2
Dr
Raúl
Escamilla
Guerrero
5. Datos del sinodal 3
Dr
Gerardo Jorge
Vázquez
Fonseca
6. Datos del sinodal 4
Dr
Chumin
Wang
Chen
7. Datos del trabajo escrito
Relación entre el estado superconductor y la densidad de estados de una partícula
56 p
2009

A mis padres

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi tutor, el Dr. Luis Antonio Pérez López por todo el apoyo y tiempo invertidos en la realización de este trabajo.

A los doctores Luis Fernando Magaña Solís, Raúl Escamilla Guerrero, Gerardo Jorge Vázquez Fonseca y Chumin Wang Chen, por haber aceptado conformar el jurado encargado de revisar esta tesis, así como por todas sus correcciones y sugerencias.

Agradezco al Departamento de Supercómputo de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico (DGSCA-UNAM) por permitir el uso de las computadoras Bakliz y KanBalam, donde se realizaron la gran mayoría de los cálculos de mi trabajo de investigación. Así como al Instituto de Física por permitirme hacer uso de sus instalaciones. También agradezco la beca de tesis otorgada por el proyecto DGAPA-UNAM IN113008.

Agradezco a Viridiana, Maria, Gloria, Esther y Salvador, por su confianza y apoyo.

Finalmente quiero agradecer a mis padres, quienes siempre han estado a mi lado para afrontar las dificultades y compartir los momentos gratos de la vida.

Índice general

1. Introducción	1
2. Formalismo BCS	9
2.1. Segunda Cuantización	9
2.2. Pares de Cooper	10
2.3. Teoría BCS	14
2.3.1. Formulación Original	14
2.3.2. Transformación de Bogoliubov	19
2.4. Resultados de la teoría BCS	23
3. Modelo de Hubbard	25
3.1. Hamiltoniano de Hubbard	25
4. Resultados	29
4.1. Densidad de estados constante	29
4.2. Densidad de estados constante por intervalos	33
4.3. Densidad de estados triangular	44
5. Conclusiones	53
Bibliografía	55

Resumen

A casi cien años de su descubrimiento, el fenómeno de la superconductividad es uno de los temas más fascinantes y controvertidos en el área de la física del estado sólido. Aunque no siempre ha sido así, pues después de que en el año de 1957, John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schieffer, formularan la primera teoría con base en las leyes de la mecánica cuántica, capaz de describir este fenómeno en los materiales superconductores conocidos hasta esa fecha, como lo eran algunos metales y aleaciones simples. Gran parte de la comunidad científica que trabajaba en el área pensó que la investigación pronto llegaría a su fin, y se convertiría exclusivamente en un problema de ingeniería, enfocado en la obtención de materiales con temperaturas de transición cada vez más elevadas, pero siempre dentro del límite $T_c \sim 30K$ predicho por la teoría y que tiene su origen en la gran longitud de coherencia de sus pares de Cooper. Sin embargo, en 1986 Müller y Bednorz descubrieron un compuesto ($La - Ba - Cu - O$) con una temperatura de transición de $35K$ y cuyas propiedades no podían ser del todo explicadas a partir de la formulación original de la teoría BCS. Desde entonces se han descubierto una gran cantidad de materiales superconductores que pueden ser clasificados en diversas familias, como lo son las de los cupratos, fermiones pesados, orgánicos, etc. Dadas las diferentes topologías en la estructura cristalina de estas familias, se espera que las densidades de estados electrónicos de cada compuesto sean diferentes. Además, la inmensa mayoría de estos materiales se caracterizan por la pequeña longitud de coherencia de sus pares de Cooper, por lo que su descripción teórica debe estar basada en un modelo que tome en cuenta interacciones electrónicas de corto alcance, como lo es el modelo de Hubbard de una sola banda.

El propósito de esta tesis fue precisamente estudiar la manera en que se ven modificadas las propiedades del estado superconductor de sistemas cuyas densidades de estados electrónicos puedan ser modeladas a través de funciones simples (constante, constantes por intervalos y triangulares), como función de la energía de interacción entre electrones y los parámetros de los que depende dicha densidad de estados. Esto, con base en el modelo atractivo de Hubbard para una sola banda y a partir de la aplicación del formalismo BCS.

Algunos resultados obtenidos de este análisis son, que para grandes energías de interacción electrónica, tanto la temperatura crítica como la brecha superconductor a temperatura cero, dependen linealmente de dicha energía. Además, en este caso la densidad de estados electrónicos resulta prácticamente irrelevante para el sistema.

Para el caso en que las energías de interacción electrónica son pequeñas, el sistema se vuelve fuertemente susceptible a pequeños cambios en dicho parámetro. Además, para una densidad de estados electrónicos determinada, los máximos de la temperatura crítica y la brecha superconductor a temperatura cero dependen exponencialmente de la energía de interacción.

Asimismo, se encontró que en general, para pequeñas energías de interacción, el estado superconductor se ve favorecido para densidades de estados electrónicos altamente inhomogéneas en la

que existe una gran cantidad de estados accesibles para energías cercanas a los límites de banda, y este comportamiento se ve maximizado en el límite cuando la densidad de estados se convierte en una delta de Dirac.

Además de esto, se encontraron algunas simetrías para las propiedades que describen el estado superconductor, que dependen únicamente de los parámetros que determinan la densidad de estados electrónicos.

Capítulo 1

Introducción

A temperatura ambiente, todos los materiales que conocemos oponen cierta resistencia al flujo de electrones. Para mantener una corriente eléctrica a través del material es necesario aplicar una diferencia de potencial entre sus extremos con la finalidad de remplazar la energía disipada por esta resistencia. Sin embargo, existen algunos materiales cuya resistencia eléctrica desaparece cuando son enfriados por debajo de cierta temperatura crítica (T_c), característica del material. Este comportamiento fue observado por vez primera en el año de 1911, cuando el físico holandés Kamerlingh Onnes logró enfriar una muestra de mercurio por debajo de los 4.2K [1].

Durante los siguientes 40 años, trabajos similares al de Onnes revelaron que muchos metales y aleaciones simples (como Nb_3Ge) presentaban transiciones al estado superconductor con temperaturas críticas inferiores a los 25K. En 1933 Walter Meissner y Robert Ochsenfeld descubrieron que además los materiales superconductores se comportaban como diamagnetos perfectos en presencia de campos magnéticos cuya magnitud se encontrase por debajo de cierto valor crítico [2]. De esta manera, se define un material superconductor como aquel que se comporta como un conductor perfecto y que además presenta el efecto Meissner.

Un año después de este descubrimiento, los físicos ingleses Heinz y Fritz London formularon una teoría fenomenológica basada en una extensión a las ecuaciones de Maxwell, capaz de describir el efecto Meissner y la resistencia cero de ciertos materiales [3]. De acuerdo con esta teoría la expulsión de campos magnéticos externos se debe a la inducción de corrientes superficiales cuyo efecto es el apantallamiento de dicho campo. A distancias muy pequeñas de la superficie del material, el campo no puede ser completamente expelido. Esto define una longitud de penetración de campo que fue confirmada experimentalmente en 1939 [4].

En 1950 Vitaly Ginzburg y Lev Landau formularon una nueva teoría [5], capaz de describir las propiedades termodinámicas de la transición del estado normal al estado superconductor. Un resultado importante de esta teoría es el parámetro conocido como longitud de coherencia de Ginzburg-Landau, la cual indica la magnitud de las fluctuaciones termodinámicas en la fase superconductora. Tanto la teoría de London como esta última sirvieron para establecer relaciones entre distintos fenómenos. Sin embargo ninguna de estas descripciones es capaz de explicar el fenómeno de la superconductividad como una consecuencia de las leyes de la mecánica cuántica.

Fue hasta el año de 1957 cuando Bardeen, Cooper y Schrieffer formularon la primera teoría microscópica de la superconductividad [6][7]. El punto clave detrás de esta teoría fue reconocer que a través de las interacciones con los átomos de la red (interacciones fonónicas), dos electrones

podían formar un estado ligado conocido como *par de Cooper* [8] (cuya longitud de coherencia es 4 ordenes de magnitud mayor que la separación típica entre electrones dentro de la red). Una de las predicciones más importantes de esta teoría es la existencia de un gap de energía ($\Delta(T)$) entre el estado base BCS y el primer estado excitado, donde $2\Delta(0)$ es la energía necesaria para romper un par de Cooper. El gran éxito de la teoría BCS para describir las propiedades del estado superconductor en materiales de baja temperatura crítica orilló a un gran número de teóricos a concluir la inexistencia del estado superconductor a temperaturas por encima de los 30K. Sin embargo, en 1986 K. Müller y G. Bednorz encontraron un material compuesto por lantano (La), bario (Ba), cobre (Cu) y oxígeno (O), con una temperatura de transición de 30 K [9]. En los meses subsiguientes varios grupos de investigación lograron reproducir estos resultados y comprobaron la existencia de superconductividad a temperaturas cercanas a los 40K. Para enero de 1987, físicos de la Universidad de Alabama encontraron un material similar que mostraba signos inequívocos de superconductividad a más de 90K [10].

El descubrimiento de Müller y Bednorz rompió con todas las constricciones impuestas sobre la temperatura crítica máxima predicha por la teoría convencional para metales y demás aleaciones. Uno de los principales problemas con estos nuevos materiales consiste en la corta longitud de coherencia que poseen sus pares de Cooper, la cual no puede ser explicada a través del mecanismo de interacción electrón-fonón, propuesta originalmente por BCS. A este respecto existe toda una gama de nuevas teorías cuyo propósito es describir el tipo de mecanismos que pueden dar origen a interacciones de apareamiento de corto alcance. Dentro de estas, se destacan las interacciones mediadas por bipolarones, donde los portadores se ligan por pares para formar excitaciones bosónicas, interacciones electrón-excitón, interacciones electrón-plasmón, fluctuaciones de espín en sistemas dopados y el modelo de apareamiento entre capas [11].

Este descubrimiento fue tan controversial que incluso ha puesto a debate la relevancia de la teoría BCS para describir el estado superconductor en dichos materiales. Sin embargo, a últimas fechas, un mejor entendimiento de las propiedades de este tipo de compuestos, ha proporcionado evidencia que sugiere que la teoría BCS es capaz de explicar satisfactoriamente la superconductividad en estos materiales. Pero para ello, es necesario tomar en cuenta la fuerte anisotropía de su estructura cristalina, pues la mayoría de estos materiales presentan una estructura casi bidimensional, en la que ocurre principalmente la superconductividad.

Otro aspecto importante de los superconductores de alta temperatura crítica, es que hasta el momento todos ellos pertenecen al grupo de los denominados superconductores tipo II, que se caracterizan por poseer dos valores de campo magnético crítico. Por debajo del primero (H_{C1}), se comportan exactamente como lo refiere el efecto Meissner, es decir, impiden completamente la penetración del campo magnético externo. Cuando el campo magnético externo es tal que $H_{C1} < H < H_{C2}$, el material presenta un efecto Meissner incompleto y el interior del material es atravesado por líneas de flujo de campo magnético (en este caso se dice que el material se encuentra en un estado de vórtices), lo cual incrementa la cantidad de corriente que pueden transportar este tipo de materiales. Por encima del segundo campo crítico (H_{C2}), el material regresa al estado normal.

A continuación se presenta una lista breve de materiales superconductores

- Cupratos: Se dice que un compuesto pertenece a la familia de los cupratos si este contiene planos de CuO_2 . Los cupratos que superconducen también son conocidos como superconductores de alta temperatura crítica. Los compuestos a partir de los que se obtienen los cupratos superconductores son aislantes de Mott antiferromagnéticos. Un aislante de Mott es un material cuya conductividad se desvanece al disminuir la temperatura, a pesar de que la teoría de bandas prediga un comportamiento metálico. Cuando los cupratos son ligeramente dopados

por huecos o electrones (cuando se modifica la concentración de estos por celda unitaria), el material se convierte en un superconductor al disminuir su temperatura. Hasta el momento los cupratos son los únicos aislantes de Mott que superconducen.

Los cupratos son materiales con grandes correlaciones electrónicas. En un metal los electrones pueden ser estudiados bajo la aproximación de campo medio, es decir, se asume que cada electrón dentro del cristal se mueve dentro de un campo promedio generado por el resto de los electrones, por lo que es innecesario conocer la posición exacta del resto de los electrones. En los cupratos y otros materiales con fuertes correlaciones electrónicas, deja de ser válida la aproximación de campo medio, pues la posición y el movimiento de cada electrón están relacionadas con las de todos los demás electrones. Como consecuencia, la combinación de la correlación electrón-electrón y la interacción electrón-fonón resulta en un fuerte acoplamiento electrónico, magnético y estructural. Esto da origen a muchos fenómenos interesantes como lo son la superconductividad y una enorme magnetorresistencia.

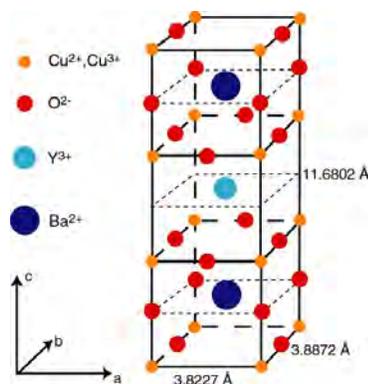


Figura 1.1: Estructura cristalina del compuesto YBCO

La estructura cristalina de los cupratos es del tipo perovskita, y entre otras cosas se caracterizan por ser altamente anisotrópicos. Dicha estructura define de manera importante las propiedades físicas de los cupratos, cosa que no ocurre en los superconductores convencionales, debido a su gran longitud de coherencia. La superconductividad en este tipo de compuestos ocurre principalmente en los planos de óxido de cobre, cuya estructura es básicamente tetragonal. En cada uno de estos planos, los iones de cobre están fuertemente ligados a cuatro iones de oxígeno (como se ejemplifica en la figura 1.1 donde se muestra la estructura del compuesto YBCO). Además, entre cada par de planos de CuO_2 existen planos de otros átomos, generalmente tierras raras (Bi , O , Y , Ba , etc.) quienes extraen electrones de los planos de óxido de cobre o, en otras palabras, dopan con huecos a dichos planos. El efecto de este dopaje tiene profunda influencia en las propiedades superconductoras de los cupratos, pues al agregar huecos a los planos de CuO_2 , la red entera se vuelve inestable, lo cual se hace más notable a bajas temperaturas.

En los superconductores convencionales, la temperatura crítica aumenta de forma monótona al incrementar la concentración de portadores de carga (p). Sin embargo, en los cupratos dicha dependencia no es monótona. Un ejemplo de ello es que en muchos cupratos dopados con huecos dicha dependencia puede ser aproximada por la siguiente relación empírica

$$T_c(p) \approx T_c^{max}[1 - 82.6(p - 0.16)^2], \quad (1.1)$$

donde T_c^{max} es la máxima temperatura crítica para un compuesto dado [12].

Otra propiedad importante de estos materiales es que para un nivel de dopaje fijo, la mayor temperatura crítica se obtiene para cupratos en los que las capas de CuO_2 son completamente planas y cuadradas.

- Superconductores orgánicos: Forman parte de la familia de conductores orgánicos, conformada por sales moleculares, polímeros y estructuras de carbono puro (como lo son los nanotubos de carbono y compuestos de C_{60}). La investigación en este tipo de compuestos inició en 1964, cuando Bill Little sugirió la existencia de una transición al estado superconductor para cadenas metálicas rodeadas por moléculas orgánicas [13]. Sin embargo, el primer superconductor orgánico, conocido como $(TMTSF)_2PF_6$ (sal de Bechgaard) y cuya temperatura de transición es de $0.9K$ a una presión de 12kbar, fue sintetizado hasta 1980 por un grupo de investigadores de la universidad de Copenhague [14]. Dicho compuesto posee una estructura cristalina formada por planos de cadenas de $TMTSF$ (cationes) unidas entre sí por los aniones PF_6^- , como se muestra en la figura 1.2.

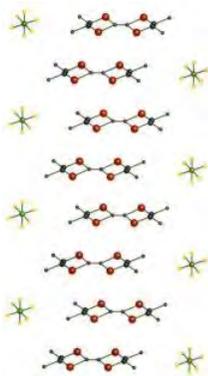


Figura 1.2: Estructura cristalina del compuesto $(TMTSF)_2PF_6$

Desde 1980 se han descubierto más de 80 superconductores basados en diferentes compuestos orgánicos, todos ellos con una estructura similar a la mencionada anteriormente. De estos, los materiales con mayor temperatura crítica son aquellos basados en la molécula $BEDT-TTF$ (usualmente abreviada como ET y que corresponde a una sal de Fabre). En 1990 Jack Williams y colaboradores del Argonne National Laboratory, obtuvieron la máxima temperatura crítica registrada para este tipo de materiales $T_c = 12.5K$ a presión atmosférica, correspondiente al compuesto $(ET)_2Cu[N(CN)_2]Br$ [15].

Algunas de las características que impulsan la investigación de estos materiales son que en apenas 20 años su temperatura crítica se ha incrementado por un factor de 10, se preparan a temperatura ambiente, poseen una estructura cuasi bidimensional (similar a los cupratos). Además existe una gran cantidad de moléculas orgánicas y aniones que pueden ser usados en su elaboración, lo cual deja grandes expectativas para la obtención de temperaturas de transición cada vez más elevadas.

Con lo que respecta a los fullerenos, se ha comprobado que al dopar la molécula de C_{60} con algunos metales alcalinos, se producen transiciones al estado superconductor con temperaturas críticas de hasta $40K$ (Cs_3C_{60})[16]. La fórmula general para este tipo de superconductores es A_3C_{60} , donde A es un metal alcalino (K , Rb o Cs). Asimismo, en abril del 2001, un grupo de investigadores de la universidad de Hong Kong, observó superconductividad en nanotubos de carbono con una temperatura crítica alrededor de los $15K$ [17][18].

- Borocarburos: A la fecha son uno de los sistemas superconductores menos entendidos. El primer compuesto de esta clase fue descubierto en 1993 por Bob Cava en los laboratorios Bell [19]. Su formulación general es $LnNi_2B_2C$, donde Ln puede ser una tierra rara o itrio. Poseen una estructura laminada y tetragonal en la que los planos de NiB_2 se alternan con los planos de LnC (véase la figura 1.3, donde se muestra la estructura cristalina del compuesto $YNiBC$), lo que ocasiona que las propiedades superconductoras de este tipo de compuesto sean altamente anisotrópicas. Además se cree que las interacciones electrónicas en este tipo de compuestos son principalmente mediadas por fonones. Paralelamente, en el estado normal, su resistividad eléctrica muestra una dependencia cuadrática como función de la temperatura, lo cual implica la existencia de una fuerte correlación electrón-electrón. Algunos exhiben la coexistencia del fenómeno superconductor y antiferromagnetismo. Poseen temperatura críticas en el rango $T_c = 6 \rightarrow 17K$. Además, existen compuestos para los que $T_c > T_N$, donde T_N es la temperatura de Néel (aquella para la que un material antiferromagnético se convierte en un paramagneto), mientras que en otros $T_c < T_N$.

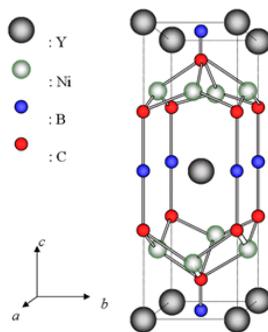


Figura 1.3: Estructura cristalina del compuesto $YNiBC$

- Fermiones pesados: Es una familia de superconductores cuyos compuestos están formados por un ion magnético con electrones $4f$ o $5f$ y uno o más metales con electrones s , p o d . La principal característica de estos materiales es que por debajo de cierta temperatura (usualmente entre 20 y $100K$), la masa efectiva de sus portadores de carga se vuelve cientos de veces mayor que la de un electrón libre (esto se debe a la fuerte interacción entre los electrones localizados (f) y los electrones de conducción). Un gran número de estos materiales presentan transiciones al estado superconductor únicamente bajo la aplicación de grandes presiones y en general poseen temperaturas críticas demasiado bajas ($T_c \approx 1K$) [20]. A diferencia de muchas otras familias de superconductores, éstos no poseen un patrón general en su estructura cristalina. El primer superconductor de este tipo ($CeCu_2Si_2$) fue descubierto en 1979 por

Frank Steglich [21]. Desde entonces se han encontrado cerca de 20 compuestos formados por *Ce*, *U*, *Pu* y *Pr*, muchos de los cuales exhiben la presencia de antiferromagnetismo y superconductividad. Recientemente se ha agregado a esta lista un grupo de superconductores ferromagnéticos, como lo son *UGe₂* y *URhGe*.

El estudio de este tipo de materiales ha llevado al descubrimiento de fenómenos inesperados (superconductores anti y ferro magnéticos) así como la formulación de nuevas teorías, pues actualmente existen grandes sospechas de que el fenómeno de la superconductividad en dichos compuestos es mediado a través de interacciones magnéticas. Más aún, la presencia de superconductividad en *PrOs₄Sb₁₂*, sugiere la existencia de un nuevo mecanismo de interacción mediado por interacciones cuadrupolares eléctricas.

- Cobaltatos: Son compuestos descubiertos en 2003 [22], cuya formulación es $Na_xCoO_2 \cdot yH_2O$. Su estructura consiste de planos de CoO_2 y Na entre los cuales se intercalan moléculas de agua. En estos compuestos la superconductividad se presenta a lo largo de los planos de CoO_2 , como se muestra en la figura 1.4. Al igual que los cupratos, todos ellos se obtienen a partir de un aislante de Mott. Además son el primer tipo de superconductores que contienen agua.

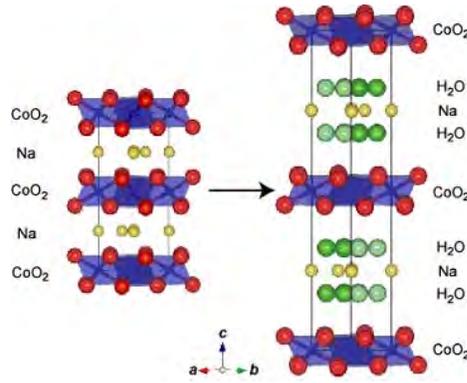


Figura 1.4: Estructura cristalina de los compuestos Na_xCoO_2 y $Na_xCoO_2 \cdot yH_2O$

- Superconductores con base en *Fe*: Estos superconductores fueron descubiertos en 2008 y existen tres grupos en esta nueva familia de materiales. El primero de ellos es el conocido como 1111, formado por compuestos de la forma $MFeAsO$, donde *M* puede ser *La*, *Ce*, *Pr*, *Sm* o *Eu* [23][24]. Dichos compuestos poseen temperaturas de transición de hasta $55K$ cuando son dopados con electrones, lo cual puede conseguirse remplazando el oxígeno con fluoreno o reduciendo la concentración de oxígeno. El segundo grupo, conocido como 122, tiene la composición MFe_2As_2 , donde *M* es una tierra alcalina. Estos se vuelven superconductores cuando son dopados con huecos [25]. El tercer grupo consiste únicamente de *Fe* y algún elemento calcógeno. Un ejemplo de este tipo de compuestos es el *FeSe*, cuya estructura cristalina se presenta en la figura 1.5. Este compuesto posee una temperatura de transición de alrededor de $8K$ en ausencia de dopaje o presión externa. Sin embargo, cuando es sometido a alguno de estos factores, puede alcanzar temperaturas de transición de hasta $27K$ [26]. A diferencia de los cupratos, que se obtienen a partir de aislantes de Mott, los superconductores basados en hierro no se obtienen a partir de dichos aislantes, lo que sugiere que las correlaciones

electrónicas en estos compuestos no son tan fuertes como en los cupratos. Además de esto, presentan un ordenamiento magnético, lo que hace suponer que la interacción electrónica en estos compuestos no es mediada por fonones.

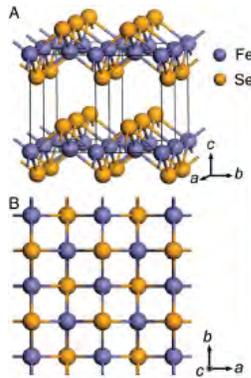


Figura 1.5: Estructura cristalina del compuesto $FeSe$

Como se puede apreciar, actualmente existe una gran variedad de materiales superconductores y se espera que cada grupo de ellos presente diferentes densidades de estados electrónicos debido a sus diferentes topologías. En esta tesis realizaremos un estudio sistemático de las propiedades superconductoras de diferentes sistemas modelados por densidades de estados simples, definidas por un pequeño número de parámetros que pueden variarse. Como un modelo simple de interacción electrón-electrón usaremos el hamiltoniano de Hubbard atractivo y las propiedades superconductoras de cada sistema se obtendrán a partir del formalismo BCS que veremos en el siguiente capítulo.

Capítulo 2

Formalismo BCS

2.1. Segunda Cuantización

Una formulación de la mecánica cuántica que resulta especialmente útil para describir sistemas de muchas partículas, donde además estas pueden ser creadas o destruidas, es el formalismo de segunda cuantización [27]. En esta formulación los estados físicos son representados por *vectores* en un espacio de Hilbert. Una forma usual de definir los vectores de estado es enumerando (para cada tipo de partícula) un conjunto completo de estados correspondientes a una sola partícula (i), luego se identifica el número de partículas (n_i) que hay en cada uno de ellos

$$|\bar{n}\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (2.1)$$

Para este espacio vectorial el producto escalar se define como:

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle = \prod_{i=1} \delta_{n_i, n'_i}. \quad (2.2)$$

De esta manera se cuenta con los elementos requeridos para construir el espacio de Hilbert que describa al sistema.

Al igual que en la formulación usual de la mecánica cuántica, un estado general puede ser escrito como combinación lineal de los estados que conforman la base del espacio vectorial

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} C_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (2.3)$$

donde $|C_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t)|^2$ representa la probabilidad de encontrar n_i partículas en el estado de una sola partícula i al instante de tiempo t .

Una forma práctica y elegante de trabajar con este formalismo, es a través de la aplicación de operadores sobre los vectores de estado $|\bar{n}\rangle$. Con este propósito se define el operador de creación a_i^\dagger , cuyo resultado es aumentar en 1 el número de partículas existentes en el estado i

$$a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = C_{n_1, \dots, n_i+1, \dots}^+ |n_1, \dots, n_i+1, \dots\rangle \quad (2.4)$$

de forma contraria, el operador de aniquilación a_i disminuye en 1 el número de partículas que se encuentran en el estado i

$$a_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = C_{n_i}^- |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \quad (2.5)$$

Con la ayuda de estos operadores es posible generar una base para el espacio de Hilbert, esto a partir de su aplicación sobre el estado de vacío $|0\rangle$, que se define como aquel estado cuyos números de ocupación son todos nulos. Una propiedad importante que se exige al operador de aniquilación es que su aplicación sobre el estado de vacío sea nula

$$a_i |0\rangle \equiv 0. \quad (2.6)$$

Hasta este punto el espacio de Hilbert es completamente general en relación al tipo de sistemas que puede describir. Para describir sistemas formados por fermiones es preciso definir las siguientes relaciones de conmutación entre los operadores a y a^\dagger

$$\begin{aligned} \{a_i, a_j\} &= \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \\ \{a_i, a_j^\dagger\} &= \delta_{i,j} \end{aligned} \quad \text{donde} \quad \{A, B\} = AB + BA, \quad (2.7)$$

de donde se deducen las siguientes propiedades

- El estado de dos partículas es antisimétrico respecto a su intercambio.

$$a_i^\dagger a_j^\dagger |0\rangle = -a_j^\dagger a_i^\dagger |0\rangle \quad (2.8)$$

- Las partículas obedecen el principio de exclusión de Pauli.

$$a_i^\dagger a_i^\dagger |0\rangle = 0 \quad (2.9)$$

- El valor de los coeficientes $C_{n_i}^\pm$ es

$$|C_{0_i}^+| = |C_{1_i}^-| = 1 \quad (2.10)$$

y cero en los demás casos.

- Se define el operador de número como $N_i \equiv a_i^\dagger a_i$. Este operador satisface que $N_i^2 = N_i$, con lo que sus valores propios solo pueden ser 0 y 1.

2.2. Pares de Cooper

La idea básica detrás de la teoría BCS es que los electrones de un sólido pueden formar estados ligados, incluso a pesar de la repulsión Coulombiana existente entre ellos [8].

A bajas temperaturas los átomos de cualquier estructura presentan vibraciones de origen térmico que en cada punto de la red pueden ser modeladas como osciladores armónicos con una frecuencia máxima de oscilación dada por la frecuencia de Debye (ω_D) [28]. Cuando un electrón atraviesa la red, ejerce una fuerza atractiva sobre los cationes a su alrededor, provocando que éstos sufran un desplazamiento en dirección al electrón y posteriormente regresen a su posición de equilibrio en un tiempo similar al periodo de oscilación natural de la red ($2\pi/\omega_D \sim 10^{-13}s$), considerando que dentro

del material los electrones se desplazan con una velocidad típica de $10^6 m/s$, durante ese tiempo recorrerán una distancia aproximada de $10^{-7} m$. El resultado de este proceso es el apantallamiento de la repulsión Coulombiana entre electrones, pues la separación entre cationes es de apenas unos cuantos Angstroms ($10^{-10} m$).

Con esta imagen del mecanismo de interacción entre electrones, lo siguiente es mostrar que éste, en efecto, es capaz de formar estados ligados de dos electrones. Para ello Cooper pensó en un gas de electrones libres que no interactúan entre si y que se encuentran a una temperatura $T = 0K$. Por el principio de exclusión sabemos que no es posible encontrar más de un electrón en el mismo estado cuántico, consecuentemente, el estado base poseerá una configuración con electrones apilados desde el nivel de mínima energía ($\epsilon = 0$) hasta un nivel de energía máxima ($\epsilon = E_F$) sin que existan niveles desocupados, donde la energía de un electrón, en términos de su vector de onda \mathbf{k} , está dada por: $\epsilon_k = (\hbar^2 |\mathbf{k}|^2 / 2m)$.

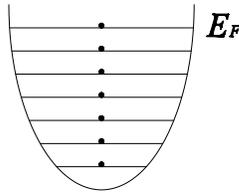


Figura 2.1: Representación esquemática de la energía de un gas de electrones a temperatura $0K$.

Ahora agregamos al sistema dos electrones con vectores de onda \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 , cada uno de ellos con energía ligeramente por encima del nivel de Fermi. Debido a la interacción con los átomos de la red el primer electrón sufrirá una pérdida de momento $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 - \Delta\mathbf{k}$, que puede ser vista como la emisión de un fonón con momento $\Delta\mathbf{k}$. Poco después el segundo electrón absorberá dicho fonón resultando en una modificación a su momento original dada por $\mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_2 + \Delta\mathbf{k}$. En términos del formalismo de segunda cuantización este proceso puede ser visto como la aniquilación de un electrón con momento \mathbf{k}_1 y la correspondiente creación de un fonón con momento $\Delta\mathbf{k}$ y un electrón con momento \mathbf{k}'_1 , seguido de la aniquilación de un electrón con momento \mathbf{k}_2 , la aniquilación del fonón y la creación de un electrón con momento \mathbf{k}'_2 ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 = \mathbf{K}$).

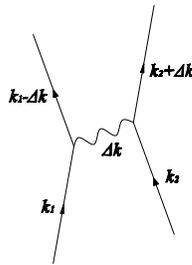


Figura 2.2: Diagrama de Feynman para la interacción electrón-electrón.

Dado que todos los niveles de energía por debajo de E_F se encuentran ocupados, debe satisfacerse

que:

$$\mathbf{k}_F \leq \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \leq \mathbf{k}_F + \Delta\mathbf{k}. \quad (2.11)$$

En la siguiente figura se muestran los valores para \mathbf{k}'_1 y \mathbf{k}'_2 que satisfacen esta relación (región sombreada), en ella se observa que el proceso de dispersión se ve maximizado para el caso en que $\mathbf{K} = 0$, es decir $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$.

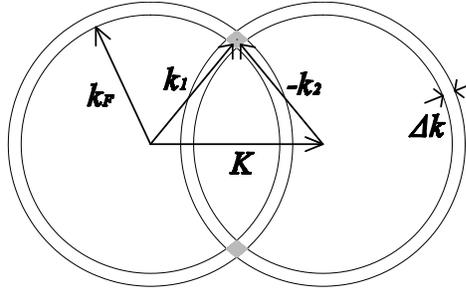


Figura 2.3: Representación en el espacio \mathbf{K} para la interacción electrón-electrón.

La ecuación de Schrödinger para el problema de dos partículas es

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= (\epsilon + 2E_F) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde ϵ es la energía de ambos electrones con respecto a $2E_F$ y V es el potencial de interacción efectivo entre éstos. Suponiendo $|V| \ll 1$, a primer orden los eigenestados del sistema serán iguales que los correspondientes al problema con $V = 0$, que para el caso de una función de onda separable resultan ser ondas planas:

$$\psi(\mathbf{r}) = \Omega^{-1} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.13)$$

donde Ω es un factor de normalización y $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Sabemos que la función de onda debe ser antisimétrica respecto al intercambio de ambos electrones, además el potencial de interacción entre estos es atractivo, entonces la solución a la parte espacial del problema será la correspondiente al término simétrico ($\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$), lo que implica que el término de espín debe ser antisimétrico, es decir, corresponde a un singulete.

La solución más general del problema está dada por una superposición de eigenestados

$$\psi(r) = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.14)$$

donde de acuerdo con la expresión 2.11, $g(\mathbf{k})$ debe satisfacer la siguiente condición:

$$g(\mathbf{k}) = 0 \quad \text{si} \quad \mathbf{k} \begin{cases} \leq \mathbf{k}_F \\ \geq \mathbf{k}_F + \Delta\mathbf{k} \end{cases} \quad (2.15)$$

Sustituyendo 2.14 en 2.12 se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \left(\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) + V(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \\ = (\epsilon + 2E_F) \left(\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Multiplicando ambos lados por $e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$ y haciendo uso de la ortogonalidad entre eigenfunciones

$$\frac{\hbar^2 |\mathbf{k}'|^2}{m} g(\mathbf{k}') + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}) = (\epsilon + 2E_F) g(\mathbf{k}'), \quad (2.17)$$

donde

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} d\mathbf{r}, \quad (2.18)$$

es la energía potencial de la interacción entre electrones.

El análisis de este problema se torna demasiado complicado cuando se consideran expresiones generales para $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$, por este motivo, en la formulación original de la teoría, Cooper propuso la siguiente aproximación [8]:

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{para} \quad \mathbf{k}_F \leq \mathbf{k} \leq \mathbf{k}_F + \Delta\mathbf{k} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2.19)$$

Tomando esto en cuenta la expresión 2.17 puede ser rescrita como:

$$g(\mathbf{k}') = \frac{V\Omega^{-1}}{\hbar^2 |\mathbf{k}'|^2/m - \epsilon - 2E_F} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}). \quad (2.20)$$

Sumando sobre \mathbf{k}' , renombrando índices y extendiendo al caso continuo se obtiene:

$$1 = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}_F}^{\mathbf{k}_F + \Delta\mathbf{k}} \frac{d\mathbf{k}}{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2/m - \epsilon - 2E_F}. \quad (2.21)$$

Esta es una integral esféricamente simétrica que puede ser remplazada por una integral en una dimensión, pero para ello debe hacerse uso de la densidad de estados $\rho(k)$, entonces

$$1 = V \int_{k_F}^{k_F + \Delta k} \frac{\rho(k) dk}{\hbar^2 k^2/m - \epsilon - 2E_F}. \quad (2.22)$$

En este caso, se ha incluido el factor $(2\pi)^{-3}$ en la densidad de estados.

Una forma equivalente de esta expresión se obtiene remplazando la integral sobre k , por una integral sobre energías, dada por

$$1 = V \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{\rho(E) dE}{2E - \epsilon - 2E_F}, \quad (2.23)$$

donde $\rho(E)$ es la densidad de estados de energía para un electrón. Suponiendo que dicha densidad de estados es aproximadamente constante en el intervalo $(E_F, E_F + \hbar\omega_D)$, o bien, que $\hbar\omega_D \ll E_F$, se obtiene

$$\epsilon = \frac{2\hbar\omega_D}{1 - e^{2/V\rho}}. \quad (2.24)$$

Hay que recordar que este análisis ha sido hecho bajo la suposición $|V| \ll 1$, lo que implica:

$$\epsilon \approx -2\hbar\omega_D e^{-2/\rho V}, \quad (2.25)$$

es decir; la energía del par de electrones se encuentra por debajo de $2E_F$. Esta aparente contradicción al principio de exclusión sugiere que ambos electrones forman una pseudo partícula conocida como *par de Cooper*.

2.3. Teoría BCS

2.3.1. Formulación Original

Habiendo demostrado que el mar de Fermi se vuelve inestable bajo la presencia de un potencial efectivo de atracción entre electrones, el siguiente reto que enfrentaron Bardeen, Cooper y Schrieffer en la formulación de la teoría BCS, fue la construcción de una función de onda capaz de describir las propiedades de un sistema en el que tiene lugar la formación de un gran número de pares.

Dado que el número de ocupación de un estado fermiónico únicamente puede ser 0 ó 1, resulta imposible encontrar un número macroscópico de fermiones en el mismo estado cuántico, entonces el problema consiste en encontrar una función de onda para la que cada electrón en la vecindad del nivel de Fermi participe en la formación de pares de Cooper. Este problema fue brillantemente resuelto por Schrieffer [29] al proponer la existencia de un estado coherente para el que un gran número de pares se encuentran en el mismo estado cuántico (condensado de pares de Cooper).

El objetivo de esta sección es mostrar, de forma breve, la forma en que este problema fue resuelto, dando con ello paso al surgimiento de la teoría BCS.

Como se mostró en la sección anterior, un par de electrones con energía ligeramente por encima del nivel de Fermi, forman un estado ligado dado por:

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = \psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (2.26)$$

siempre y cuando exista un potencial de interacción atractivo entre ellos.

La primera propuesta realizada por Schrieffer para la solución a este problema fue una función de onda en la que cada electrón se encuentra apareado [30],

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) \cdots \Psi(\mathbf{r}_{N-1}\sigma_{N-1}, \mathbf{r}_N\sigma_N), \quad (2.27)$$

donde la suma sobre P denota todas las permutaciones posibles ($N!$) para las etiquetas $(\mathbf{r}_i\sigma_i, \mathbf{r}_j\sigma_j)$ y la alternancia de signo (-1^P) es introducida con la finalidad de satisfacer la antisimetría requerida para el intercambio de fermiones. Sin embargo, esta propuesta, en la que el número de partículas permanece fijo, resultó poco manejable y en su lugar se optó por una representación de estados coherentes (en términos del formalismo de segunda cuantización),

$$|\Psi\rangle = A e^{\sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle, \quad (2.28)$$

donde los $\alpha_{\mathbf{k}}$ son números complejos a determinar y el estado de vacío, $|0\rangle$, es el estado con un mar de Fermi completamente lleno. Dadas las relaciones de conmutación para los operadores de creación y aniquilación, esta expresión puede ser rescrita como:

$$|\Psi\rangle = A \prod_{\mathbf{k}} e^{\alpha_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle. \quad (2.29)$$

Expandiendo en series de Taylor y teniendo en cuenta que todos los términos de orden mayor que uno son nulos se obtiene:

$$|\Psi\rangle = A \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \alpha_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle. \quad (2.30)$$

Normalizando

$$|\Psi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (2.31)$$

con

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{1+|\alpha_{\mathbf{k}}|^2}} \quad y \quad v_{\mathbf{k}} = \frac{\alpha_{\mathbf{k}}}{\sqrt{1+|\alpha_{\mathbf{k}}|^2}} \quad (2.32)$$

De esta manera la probabilidad de encontrar un par de electrones en el estado $(\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow)$ es $|v_{\mathbf{k}}|^2$ y la probabilidad de que dicho estado se encuentre desocupado es $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |v_{\mathbf{k}}|^2$.

Ahora podemos hacer uso del principio variacional para encontrar los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ correspondientes al estado base. Para ello usaremos un hamiltoniano dado por:

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} C_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger C_{\mathbf{l}\uparrow} C_{-\mathbf{l}\downarrow}, \quad (2.33)$$

donde el primer término representa la energía no perturbada de los electrones que participarán en la formación de pares y el segundo indica el potencial efectivo de interacción entre estos. Se debe recordar que la función de onda 2.30 corresponde a un estado coherente, donde la probabilidad de encontrar el sistema en el estado $|n\rangle$ está dada por una distribución de Poisson [30], es decir, los estados coherentes representan sistemas para los que el número de partículas no es constante. Sin embargo, para esta distribución $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle}$, ó:

$$\frac{\Delta n}{\langle n \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{\langle n \rangle}}. \quad (2.34)$$

es decir, para sistemas macroscópicos las fluctuaciones alrededor del valor medio serán pequeñas (aproximación de campo medio). Por este motivo el hamiltoniano relevante para el sistema será:

$$H = H_{BCS} - \mu \hat{N}, \quad (2.35)$$

donde μ es el potencial químico y \hat{N} es el operador de número. Este término representa un multiplicador de Lagrange que se ha introducido con la finalidad de fijar el número promedio de partículas del sistema.

De acuerdo con el principio variacional, para encontrar $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ es necesario calcular

$$\delta \langle \Psi | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi \rangle = 0. \quad (2.36)$$

Haciendo uso de las propiedades de los operadores $C_{\mathbf{k}\uparrow}$ y $C_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger$ se obtiene

$$\langle \Psi | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}}, \quad (2.37)$$

donde $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Dado que $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, éstos pueden ser representados por:

$$u_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \quad \text{y} \quad v_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}}. \quad (2.38)$$

Entonces la expresión (2.37) puede ser rescrita como:

$$\langle \Psi | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{l}}. \quad (2.39)$$

Ahora es posible efectuar la variación (2.36) con respecto a los parámetros $\theta_{\mathbf{k}}$, resultando en

$$\delta_{\theta_{\mathbf{k}}} \langle \Psi | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi \rangle = -2\xi_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \cos 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{l}} = 0, \quad (2.40)$$

por tanto

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2\xi_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \sin 2\theta_{\mathbf{l}}. \quad (2.41)$$

Si ahora se definen

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} = \frac{-1}{2} \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \sin 2\theta_{\mathbf{l}} \quad (2.42)$$

y

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}. \quad (2.43)$$

Más adelante se mostrará que $E_{\mathbf{k}}$ puede ser entendida como la energía de excitación de una quasi-partícula con momento $\hbar\mathbf{k}$, mientras que $\Delta_{\mathbf{k}}$ resultará esencialmente independiente de \mathbf{k} , y por tanto representará la mínima energía de excitación ó un gap de energía.

Con estas definiciones, la expresión (2.41) puede reescribirse como

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}}. \quad (2.44)$$

De forma que

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (2.45)$$

y

$$v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}. \quad (2.46)$$

Sustituyendo (2.45) en (2.42) se obtiene la condición de autoconsistencia para $\Delta_{\mathbf{k}}$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{E_{\mathbf{l}}} V_{\mathbf{kl}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{\sqrt{\Delta_{\mathbf{l}}^2 + \xi_{\mathbf{l}}^2}} V_{\mathbf{kl}}. \quad (2.47)$$

Una solución a esta ecuación se obtiene cuando $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$. Lo cual implica que (2.46) se reduce a $v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = -\text{signo}(\xi_{\mathbf{k}})$, es decir:

$$v_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 0 & \text{si } \xi_{\mathbf{k}} > 0 \\ 1 & \text{si } \xi_{\mathbf{k}} < 0. \end{cases} \quad (2.48)$$

En este caso la función de onda del sistema corresponde a una configuración donde todos los estados por debajo de \mathbf{k}_F se encuentran ocupados (un mar de Fermi a $T = 0$). Sin embargo, al igual que en el problema con solo un par de electrones, se espera que la energía del sistema se encuentre por debajo del nivel de Fermi siempre que exista un potencial de interacción atractivo entre electrones. Por este motivo se hace uso de una expresión para $V_{\mathbf{kl}}$ análoga a la utilizada en la sección (2.2)

$$V_{\mathbf{kl}} = \begin{cases} -V & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}, |\xi_{\mathbf{l}}| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.49)$$

Sustituyendo este potencial en la ecuación (2.47) se obtiene:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}, |\xi_{\mathbf{l}}| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (2.50)$$

con lo que la relación de consistencia se reduce a:

$$1 = \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}}, \quad (2.51)$$

reemplazando la suma por una integral en el intervalo $\xi \in (-\hbar\omega_D, \hbar\omega_D)$, y haciendo uso de la simetría con respecto a los valores $\pm\xi$, la expresión anterior se rescribe como

$$\frac{1}{\rho_0 V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} = \ln \left[\frac{\hbar\omega_D + \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta^2}}{\Delta} \right]. \quad (2.52)$$

Entonces

$$\Delta \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/\rho_0 V}, \quad (2.53)$$

donde el último paso se justifica para el límite de acoplamiento débil $\rho_0 V \ll 1$

Por otra parte, es posible encontrar $v_{\mathbf{k}}$ y $u_{\mathbf{k}}$ haciendo uso de (2.46) y la condición $|v_{\mathbf{k}}|^2 + |u_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, obteniendo

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad \text{y} \quad u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right). \quad (2.54)$$

Ahora que se cuenta con una función de onda para el estado base BCS se pueden obtener distintas propiedades del sistema. En particular resulta de gran importancia verificar que la energía del estado base se encuentra por debajo del nivel de Fermi. Para ello únicamente hace falta calcular

$$\langle E \rangle_s = \langle \Psi | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V}. \quad (2.55)$$

Debe recordarse que para el estado normal ($\Delta = 0$) la energía está dada por

$$\langle E \rangle_n = \langle \Psi | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi \rangle = \sum_{|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_F} 2\xi_{\mathbf{k}}. \quad (2.56)$$

En el caso continuo y bajo la aproximación de acoplamiento débil ($\rho_0 V \ll 1$) la diferencia entre estas energías es

$$\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_n = \left(\frac{\Delta^2}{V} - \frac{\rho_0 \Delta^2}{2} \right) - \frac{\Delta^2}{V} = -\frac{\rho_0 \Delta^2}{2}, \quad (2.57)$$

que en efecto resulta ser negativa, lo cual confirma la inestabilidad del mar de Fermi bajo la presencia de un potencial atractivo entre electrones. Anticipando una dependencia de Δ con respecto a la temperatura se introduce la energía interna ($U(T)$) [27]. De esta manera la expresión anterior puede ser rescrita como:

$$U_s(0) - U_n(0) = -\frac{1}{2} \rho_0 \Delta^2(0), \quad (2.58)$$

lo cual se conoce como energía de condensación del sistema.

Además de esto, resulta interesante conocer el número promedio de electrones en el sistema, para ello es necesario calcular

$$\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} | \Psi \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2. \quad (2.59)$$

Sustituyendo en la primera expresión de (2.54) se obtiene:

$$\bar{N} = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right). \quad (2.60)$$

2.3.2. Transformación de Bogoliubov

En el apartado anterior se hizo uso del principio variacional para encontrar la función de onda y la energía del estado base BCS a temperatura cero. En esta sección se hará uso de un método más moderno (basado en una transformación canónica de los operadores de aniquilación y creación) con la finalidad de extender el modelo para temperaturas distintas de cero. Este método también es autoconsistente, pero a diferencia del anterior no necesita apelar al principio variacional para obtener resultados.

El hamiltoniano es el mismo que en (2.35)

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} C_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} C_{\mathbf{k}'\uparrow} C_{-\mathbf{k}'\downarrow}.$$

Se definen los operadores de creación y aniquilación de pares

$$b_{\mathbf{k}}^{\dagger} = C_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} C_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \quad \text{y} \quad b_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}\uparrow} C_{-\mathbf{k}\downarrow}. \quad (2.61)$$

donde de acuerdo con el formalismo de la mecánica estadística cuántica su valor esperado está dado por [31]:

$$\langle b_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\text{Tr} (e^{-\beta H} b_{\mathbf{k}})}{\text{Tr} (e^{-\beta H})}. \quad (2.62)$$

Una propiedad importante de estos operadores es que $\langle b_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle = \langle b_{\mathbf{k}} \rangle$.

Suponiendo la formación de una gran cantidad de pares para una muestra macroscópica, las fluctuaciones alrededor del valor esperado deberán ser pequeñas, lo cual nos permite escribir

$$b_{\mathbf{k}} = \langle b_{\mathbf{k}} \rangle + \delta b_{\mathbf{k}} \quad \text{y} \quad b_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \langle b_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle + \delta b_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \quad (2.63)$$

Haciendo uso de esta aproximación se tiene que

$$\begin{aligned}
b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} &= \left(\langle b_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle + \delta b_{\mathbf{k}}^\dagger \right) \left(\langle b_{\mathbf{k}'} \rangle + \delta b_{\mathbf{k}'} \right) \\
&= \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle + \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \delta b_{\mathbf{k}'} + \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle \delta b_{\mathbf{k}}^\dagger \\
&= \langle b_{\mathbf{k}} \rangle b_{\mathbf{k}'} + \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle b_{\mathbf{k}}^\dagger - \langle b_{\mathbf{k}} \rangle \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.64}$$

donde se han despreciado los términos $O(\delta b^2)$ y superiores (aproximación de campo medio). Si ahora se define

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle, \tag{2.65}$$

es posible describir el hamiltoniano (2.35) como:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} \langle b_{\mathbf{k}} \rangle \right). \tag{2.66}$$

Con la finalidad de diagonalizar el hamiltoniano se hace uso de la transformación de Bogoliubov-Valatin [32]

$$C_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \tag{2.67}$$

$$C_{-\mathbf{k}\downarrow} = u_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \tag{2.68}$$

donde $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, y α y β son operadores que obedecen las relaciones de anticonmutación para fermiones.

Expresando (2.66) en términos de estos operadores se tiene

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2)] (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}) \right. \\
&\quad \left. + [2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2)] (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}) \right\} + G
\end{aligned} \tag{2.69}$$

donde

$$G = \sum_{\mathbf{k}} (2\xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 - 2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle b_{\mathbf{k}} \rangle). \tag{2.70}$$

Si ahora se eligen $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ tales que

$$2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) = 0, \tag{2.71}$$

el hamiltoniano será diagonalizado, es decir, únicamente poseerá términos constantes y proporcionales a los números de ocupación $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}$ y $\beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}$.

Haciendo uso de (2.71) y de la condición de normalización $|v_{\mathbf{k}}|^2 + |u_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ se encuentra que

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad \text{y} \quad |u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (2.72)$$

donde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$.

Ahora que se han obtenido los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ que diagonalizan el hamiltoniano, la expresión (2.69) puede ser rescrita como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle b_{\mathbf{k}} \rangle). \quad (2.73)$$

El segundo término es una constante, que difiere de la correspondiente suma para el estado normal a $T = 0$ ($E_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}}$, $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$) por exactamente la energía de condensación (2.58). El primer término representa el incremento de energía por encima del estado base para los fermiones $\alpha_{\mathbf{k}}$, expresado en términos de los operadores de número $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}$ y $\beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}$. De modo que estos operadores describen excitaciones elementales de quasi-partículas conocidas como *bogoliubones*, cuya energía de excitación es justamente $E_{\mathbf{k}}$. De aquí que $\Delta_{\mathbf{k}}$ juegue el papel de un gap de energía o energía mínima de excitación, pues incluso para el nivel de Fermi, donde $\xi_{\mathbf{k}} = 0$ sucede que $E_{\mathbf{k}} = |\Delta_{\mathbf{k}}| > 0$.

Para continuar con el análisis, notemos que el operador de aniquilación de pares puede ser rescrito en términos de los operadores $\alpha_{\mathbf{k}}$ y $\beta_{\mathbf{k}}$ como:

$$b_{\mathbf{k}} = -v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}}^2 \beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}. \quad (2.74)$$

Entonces

$$\langle b_{\mathbf{k}} \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(1 - \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle - \langle \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \rangle \right), \quad (2.75)$$

pero [32]

$$\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{E_{\mathbf{k}}/k_B T} + 1}, \quad (2.76)$$

es la función de distribución de Fermi-Dirac, que en este caso no incluye el potencial químico pues los operadores α^\dagger y β^\dagger generan estados excitados pero no cambian el número de partículas.

Sustituyendo (2.75) y (2.76) en (2.65) se tiene

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle \\ &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - 2f(E_{\mathbf{k}'})) \\ &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - 2f(E_{\mathbf{k}'})) \end{aligned} \quad (2.77)$$

Haciendo uso de la aproximación (2.49) para el potencial esta expresión (condición de autoconsistencia) puede ser rescrita como

$$\Delta = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V\Delta}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right). \quad (2.78)$$

Remplazando la suma sobre \mathbf{k} por una integral sobre energías en la región $\xi \in (E_F, E_F + \hbar\omega_D)$ y suponiendo que $\hbar\omega_D \ll E_F$, se obtiene

$$\frac{1}{\rho_0 V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right) d\xi. \quad (2.79)$$

Se puede proceder de forma análoga para encontrar el número promedio de partículas por sitio ($n = \bar{N}/N_s$)

$$n - 1 = \rho_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right) d\xi. \quad (2.80)$$

De la ecuación (2.79) es posible obtener una solución analítica en el caso $T \rightarrow 0$, dada por

$$\frac{\Delta_0}{2\hbar\omega_D} = e^{-1/\rho_0 V} \quad (2.81)$$

que en límite de acoplamiento débil se reduce a

$$\Delta_0 \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/\rho_0 V} \quad (2.82)$$

Análogamente, se define la temperatura crítica T_c como aquella para la que $\Delta(T) \rightarrow 0$, es decir; $E \rightarrow |\xi|$. En este caso la solución a la ecuación (2.79) es [27]

$$\frac{1}{\rho_0 V} = \ln\left(\frac{A\hbar\omega_D}{k_B T_c}\right), \quad (2.83)$$

donde $A = 2e^\gamma/\pi \approx 1.13$ y $\gamma \approx 0.577$, es la constante de Euler. Consecuentemente

$$k_B T_c = 1.13\hbar\omega_D e^{-1/\rho_0 V}. \quad (2.84)$$

Esta es una expresión muy importante que depende de tres propiedades del material: la frecuencia de Debye (ω_D), el potencial de interacción entre electrones (V) y el número de electrones disponibles en el nivel de Fermi (ρ_0). Nótese que típicamente $\omega_D \propto m^{1/2}$, donde m es la masa atómica del material. Esto proporciona una explicación directa del denominado efecto isotópico. Comparando esta expresión con (2.82), se obtiene

$$\frac{\Delta_0}{k_B T_c} = \frac{2}{1.13} = 1.764, \quad (2.85)$$

es decir, el gap a temperatura cero es comparable en energía con $k_B T_c$.

Para superconductores en los que se satisface el límite de acoplamiento débil, el cociente Δ/Δ_0 resulta ser una función monótonamente decreciente de T/T_c , que alcanza su máximo en 1 y su mínimo en 0. Cerca de $T = 0$ la respuesta del material a los cambios de temperatura es exponencialmente pequeña, pues en este caso el argumento de la tangente hiperbólica es esencialmente 1, el significado físico de este comportamiento es que Δ es aproximadamente constante hasta que un número significativo de cuasi-partículas son térmicamente excitadas. Contrariamente, cerca de T_c , $\Delta(T)$ decrece bruscamente.

2.4. Resultados de la teoría BCS

- Un pequeño potencial atractivo, de interacción entre electrones (V), ocasiona la formación de estados ligados (*pares de Cooper*) cuya energía se encuentra por debajo del nivel de Fermi. Es decir, el mar de Fermi se vuelve inestable bajo la presencia de dicha interacción.
- Para el modelo más simple, esta interacción tiene su origen en el intercambio de fonones entre electrones.
- El estado base del sistema se encuentra separado de los estados excitados por un gap de energía (2Δ) dado por:

$$\frac{1}{\rho_0 V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right) d\epsilon.$$

- La existencia de este gap de energía resulta en un flujo de electrones sin resistencia a lo largo del material.
- En el límite de acoplamiento débil ($\rho_0 V \ll 1$), la temperatura crítica está dada por:

$$k_B T_c \approx 1.13 \hbar \omega_D e^{-1/\rho_0 V}.$$

- En el mismo límite, la brecha superconductor a temperatura cero y la temperatura crítica satisfacen la siguiente relación:

$$\frac{\Delta_0}{k_B T_c} = 1.764.$$

Capítulo 3

Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard [33] es una de las aproximaciones más simples y usadas en física del estado sólido, para estudiar sistemas de partículas interactuantes dentro de una red, cuyo hamiltoniano incluye únicamente dos términos: uno cinético, que describe el tuneo de partículas entre diferentes sitios de la red y un término potencial que considera las interacciones intra-atómicas. Por este motivo, el hamiltoniano de Hubbard es un candidato natural para estudiar las propiedades superconductoras en materiales de alta temperatura crítica, pues este tipo de estructuras se caracterizan por la pequeña longitud de coherencia de sus pares de Cooper. Por tanto, su estudio requiere de un modelo en el que la interacción electrónica sea descrita de manera local.

A pesar de su aparente simplicidad, no existe un tratamiento general para este modelo y hasta la fecha únicamente se conocen dos situaciones para las que dicho hamiltoniano posee solución exacta, a decir; sistemas de una dimensión y sistemas con infinitas dimensiones.

3.1. Hamiltoniano de Hubbard

El hamiltoniano de un sistema con muchos fermiones interactuantes en una red, puede escribirse como

$$H = - \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} \langle ij|V|kl\rangle C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma'}^{\dagger} C_{l\sigma'} C_{k\sigma}, \quad (3.1)$$

donde los índices latinos denotan sitios sobre la red, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ representa el espín y, $C_{i\sigma}^{\dagger}$ y $C_{i\sigma}$ son operadores de creación y aniquilación de electrones. t_{ij} es la integral de salto entre el sitio i y el sitio j y V es el potencial de interacción entre cualesquiera dos partículas. Haciendo uso de la aproximación de salto entre primeros vecinos (denotado por $\langle ij\rangle$)

$$t_{ij} = \begin{cases} t & \text{si } \langle ij\rangle \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (3.2)$$

y de un potencial de interacción efectivo (que para el caso de una sola banda implica $\sigma' = -\sigma$)

$$\langle ij|V|kl\rangle = \begin{cases} U & \text{si } i = j = k = l \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (3.3)$$

se obtiene una versión simplificada del modelo, que usualmente se conoce como hamiltoniano de Hubbard para una banda

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (3.4)$$

Para escribir esta expresión en el espacio recíproco es necesario hacer uso de las siguientes definiciones [34][35]:

$$\begin{aligned} C_{i\sigma}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \\ C_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} C_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Entonces

$$C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} C_{\mathbf{k}'\sigma}. \quad (3.6)$$

Si ahora se denota $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_m + \mathbf{R}_j$, donde \mathbf{R}_i son los primeros vecinos de \mathbf{R}_j , se obtiene:

$$\sum_{\langle ij \rangle} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ \left(\sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j} \right) \cdot \left(\sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \right) C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}'\sigma} \right\}. \quad (3.7)$$

Nótese que $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 1/N_s \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j}$. Entonces la ecuación anterior puede ser rescrita como

$$\sum_{\langle ij \rangle} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_m \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}\sigma} \right\}. \quad (3.8)$$

Se puede proceder de forma análoga para demostrar que

$$\sum_i C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.9)$$

y

$$\sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} C_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^{\dagger} C_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^{\dagger} C_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} C_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow}. \quad (3.10)$$

Haciendo uso de (3.8), (3.9) y (3.10), el hamiltoniano (3.4) puede ser rescrito como

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_0(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} C_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} C_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow}, \quad (3.11)$$

donde se ha definido

$$\epsilon_0(\mathbf{k}) \equiv -t \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}. \quad (3.12)$$

Como se vio anteriormente, en la teoría BCS se supone que los términos relevantes para la superconductividad son aquellos con $\mathbf{q} = 0$, entonces es posible efectuar la aproximación de campo medio para la suma correspondiente a $\mathbf{q} \neq 0$. Para ello nótese que $\hat{N} = \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})$ y $n_{i\sigma} = \langle n_{i\sigma} \rangle + \delta n_{i\sigma}$, entonces

$$\begin{aligned} U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} &\approx U \left[\frac{n^2}{4} \sum_i 1 + \frac{n}{2} \sum_i \left(n_{i\downarrow} - \frac{n}{2} \right) + \frac{n}{2} \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{n}{2} \right) \right] \\ &= -\frac{Un^2}{4} N_s + \frac{Un}{2} \hat{N}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

De esta manera (3.11) toma su forma final, dada por

$$H - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon(\mathbf{k}) - \mu) C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger C_{-\mathbf{k}'\downarrow} C_{\mathbf{k}'\uparrow} - \frac{Un^2}{4} N_s. \quad (3.14)$$

donde $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + Un/2$ es la relación de dispersión de una partícula con auto-energía $Un/2$ [36]. Comparando (3.14) con (2.35) se sigue que las ecuaciones que describen el estado superconductor de un sistema modelado a través del hamiltoniano de Hubbard son

$$1 = \frac{|U|}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right] \quad (3.15a)$$

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right] \quad (3.15b)$$

donde $\xi = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$ y la suma sobre \mathbf{k} se extiende a lo largo de la primera zona de Brillouin [37].

Remplazando la suma sobre \mathbf{k} por una suma sobre energías y extendiendo al caso continuo

$$1 = \frac{|U|}{2} \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} \frac{\rho(\epsilon)}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right] d\epsilon \quad (3.16a)$$

$$n - 1 = -\int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} \frac{(\epsilon - \mu)\rho(\epsilon)}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \tanh \left[\frac{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right] d\epsilon \quad (3.16b)$$

donde $\rho(\epsilon)$ es la densidad de estados de energía del sistema. Dados μ y n , estas ecuaciones pueden ser resueltas para T y Δ . En particular, la temperatura crítica se obtiene cuando $\Delta = 0$.

Capítulo 4

Resultados

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos a partir de la solución numérica de las ecuaciones que describen el estado superconductor para el modelo de Hubbard atractivo de una banda. Para sistemas cuyas densidades de estados electrónicos (DOS) son modeladas por medio de funciones simples definidas por escalones y triángulos. Se determinaron la temperatura crítica (T_c) y la brecha superconductor a temperatura cero (Δ_0) como función del número de partículas por sitio (n), el potencial de interacción (U) y los parámetros característicos de cada densidad de estados electrónicos. En todos los casos se ha supuesto que las energías accesibles para cada electrón se distribuyen a lo largo de un intervalo simétrico ($-\epsilon_0, \epsilon_0$) de ancho $D = 1$. Además, la densidad de estados por espín para una partícula debe cumplir:

$$\int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_0} \rho(\epsilon) d\epsilon = 1. \quad (4.1)$$

Cabe mencionar que las densidades de estados electrónicos de sistemas bidimensionales generalmente presentan singularidades finitas como las que se encuentran en las densidades de estados tipo escalón. Por otra parte, en los sistemas tridimensionales las densidades de estados electrónicos no son discontinuas pero pueden presentar discontinuidades en su pendiente, tal y como ocurre en las densidades de estados triangulares.

4.1. Densidad de estados constante

Para determinar la temperatura crítica en el caso de una DOS constante se debe resolver el siguiente sistema de ecuaciones

$$1 = \frac{\rho|U|}{2} \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_0} \frac{1}{|\epsilon - \mu|} \tanh \left[\frac{|\epsilon - \mu|}{2k_B T_c} \right] d\epsilon \quad (4.2a)$$

$$n - 1 = -\rho \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_0} \frac{\epsilon - \mu}{|\epsilon - \mu|} \tanh \left[\frac{|\epsilon - \mu|}{2k_B T_c} \right] d\epsilon. \quad (4.2b)$$

Teniendo en cuenta que estas integrales serán evaluadas en un intervalo simétrico con respecto a

cero y considerando la propiedad $\tanh(-x) = -\tanh(x)$, es posible rescribir dichas expresiones en una forma simplificada al efectuar el cambio de variable $x = \frac{\epsilon - \mu}{2k_B T_c}$, obteniendo

$$1 = \frac{|U|\rho}{2} \int_{\frac{-\epsilon_0 - \mu}{2k_B T_c}}^{\frac{\epsilon_0 - \mu}{2k_B T_c}} \frac{\tanh(x)}{x} dx \quad (4.3a)$$

$$n - 1 = -2\rho k_B T_c \int_{\frac{\epsilon_0 + \mu}{2k_B T_c}}^{\frac{\epsilon_0 - \mu}{2k_B T_c}} \tanh x dx. \quad (4.3b)$$

La evaluación de (4.3b) es directa, sin embargo, para obtener (4.3a) debe hacerse uso de una representación en series de potencias para $\tanh(x)$, resultando

$$1 = \frac{|U|\rho}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \frac{B_{m+1} 2^{m+1} (2^{m+1} - 1)}{(k_B T_c)^m m(m+1)!} [(\epsilon_0 - \mu)^m - (-\epsilon_0 - \mu)^m] \right\} \quad (4.4a)$$

$$n - 1 = 2\rho k_B T_c \left\{ \ln \left(\cosh \left(\frac{\epsilon_0 + \mu}{2k_B T_c} \right) \right) - \ln \left(\cosh \left(\frac{\epsilon_0 - \mu}{2k_B T_c} \right) \right) \right\}. \quad (4.4b)$$

Es poco lo que puede hacerse para obtener una solución analítica de estas ecuaciones en un caso general.

En el caso de la brecha superconductor a temperatura cero, el sistema de ecuaciones acopladas a resolver es el siguiente

$$1 = \frac{|U|\rho}{2} \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + (\Delta_0)^2}} d\epsilon \quad (4.5a)$$

$$n - 1 = -\rho \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_0} \frac{\epsilon - \mu}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + (\Delta_0)^2}} d\epsilon. \quad (4.5b)$$

En este caso ambas integrales pueden ser evaluadas de forma directa

$$1 = \frac{|U|\rho}{2} \ln \left[\frac{\epsilon_0 - \mu + \sqrt{(\epsilon_0 - \mu)^2 + (\Delta_0)^2}}{-\epsilon_0 - \mu + \sqrt{(\epsilon_0 - \mu)^2 + (\Delta_0)^2}} \right] \quad (4.6a)$$

$$(4.6b)$$

$$n - 1 = -\rho \left(\sqrt{(\epsilon_0 - \mu)^2 + (\Delta_0)^2} - \sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + (\Delta_0)^2} \right). \quad (4.6c)$$

Al igual que en el caso anterior, la solución del sistema resulta demasiado complicada para una situación general, sin embargo, es posible encontrar una solución exacta si se considera una banda semi-llena ($n = 1$). Bajo este supuesto (4.6c) implica que $\mu = 0$. Sustituyendo esto en (4.6b) se obtiene

$$\Delta_0 = \pm \frac{2\epsilon_0 e^{1/|U|\rho}}{-1 + e^{2/|U|\rho}}. \quad (4.7)$$

Esta expresión presenta los siguientes casos límite

$$\Delta_0 = \begin{cases} \rho\epsilon_0|U| & |U| \gg D \\ 2\epsilon_0 e^{1/|U|\rho} & |U| \ll D. \end{cases} \quad (4.8)$$

Para obtener resultados bajo situaciones generales es necesario proceder de forma numérica en la solución de los sistemas de ecuaciones (4.4) y (4.6) ó, equivalentemente, resolver directamente (4.2) y (4.5). En nuestro caso se ha elaborado un programa en C^{++} que resuelve (4.2) y (4.5) a través del método de Newton. Para ello se han adimensionalizado los parámetros del problema dividiendo entre el ancho de banda (D). De esta manera la densidad de estados constante resulta ser $\rho = 1$, y evaluada en el intervalo $\epsilon \in (-0.5D, 0.5D)$. Al introducir esta densidad de estados en el programa que resuelve el sistema de ecuaciones para T_c se obtienen los resultados mostrados en la figura 4.1.

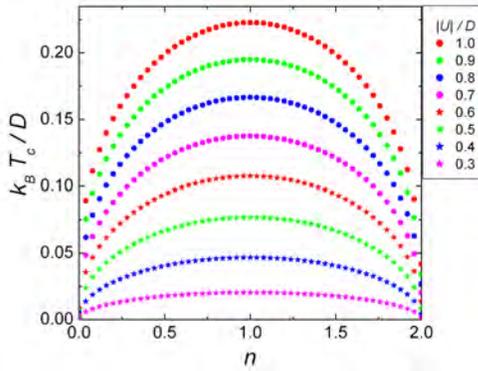


Figura 4.1: Temperatura crítica (T_c) como función de la densidad de partículas (n) para una densidad de estados electrónicos constante y diferentes valores del potencial de interacción ($|U|$).

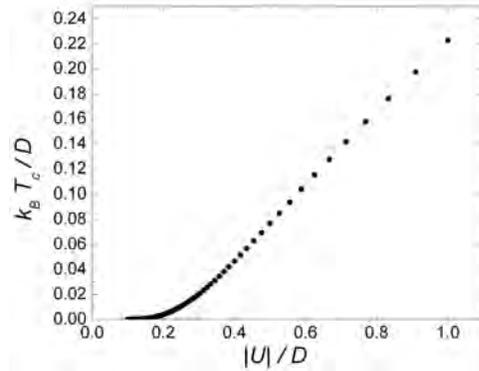


Figura 4.2: Temperatura crítica (T_c) como función de $|U|$ para una densidad de partículas $n = 1$.

Como era de esperar, T_c se anula para los casos de una banda vacía ($n = 0$) o completamente llena ($n = 2$), además, la temperatura crítica máxima siempre se obtiene para una banda semillena sin importar el valor de U y en todos los casos se observa una simetría con respecto a $n = 1$. Asimismo se aprecia que en el régimen $|U| \geq D$, T_c crece linealmente con $|U|$. En la figura 4.2 se presenta la dependencia de T_c como función de $|U|$ para el caso $n = 1$, lo cual nos da una idea cualitativa de lo que ocurre para diferentes valores de n .

Lo cual coincide cualitativamente con el resultado mostrado en (2.84). Procediendo de igual forma en la determinación de la brecha superconductor a temperatura cero (Δ_0) se obtienen los resultados mostrados en las figuras 4.3 y 4.4. Como se puede observar, el comportamiento de Δ_0 como función de n es similar al de T_c . Además en la figura 4.4 se presentan tanto la solución numérica (círculos) como la analítica (línea obtenida a partir de (4.7)), lo cual sirve para verificar los resultados obtenidos con nuestro programa.

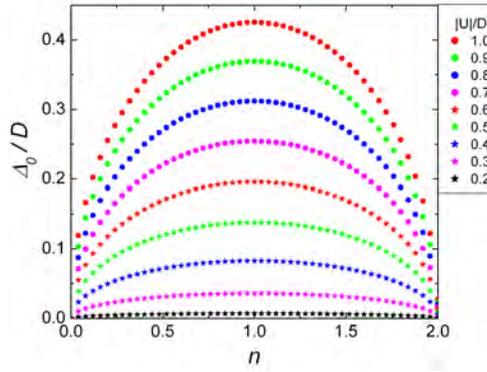


Figura 4.3: Brecha superconductora a temperatura cero (Δ_0) como función de la densidad de partículas (n) y para diferentes valores de $|U|$.

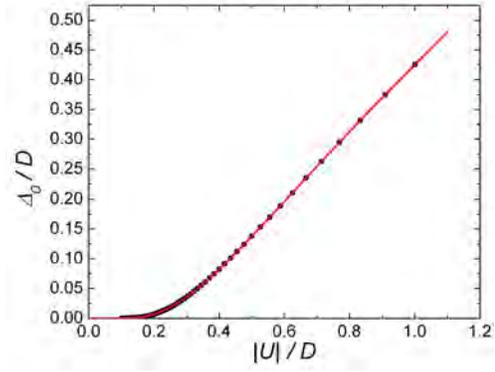


Figura 4.4: Brecha superconductora a temperatura cero (Δ_0) como función de $|U|$ para una densidad de partículas $n = 1$.

Finalmente, en la figura 4.5 se presentan los resultados obtenidos para el cociente $2\Delta_0/k_B T_c$ como función de n

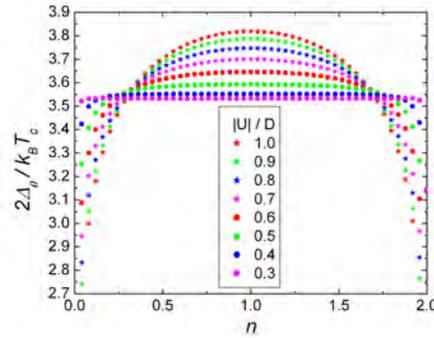


Figura 4.5: Cociente de la brecha superconductora a temperatura cero y la temperatura crítica ($2\Delta_0/k_B T_c$) como función la densidad de partículas (n) y para diferentes valores de $|U|$.

Nótese que en general el cociente $2\Delta_0/k_B T_c$ depende de n , alcanzando su máximo para $n = 1$. Más aún, $|U|$ tiende a cero, el cociente $2\Delta_0/k_B T_c$ se aproxima a un valor constante $2\Delta_0/k_B T_c \approx 3.53$ en casi todo el intervalo $n \in (1, 2)$, lo cual concuerda con el resultado obtenido en (2.85).

4.2. Densidad de estados constante por intervalos

En esta sección se presentan los resultados obtenidos, para las propiedades del estado superconductor, de un sistema cuya densidad de estados electrónicos puede ser modelada a través de una función constante por intervalos, como se muestra en la figura 4.6. Una vez fijados los límites de la banda en $\epsilon_{min} = -0.5D$ y $\epsilon_{max} = 0.5D$, esta densidad de estados queda definida por la energía para la que ocurre la discontinuidad (ϵ_1) y la relación de alturas entre los dos intervalos constantes (ρ_1/ρ_2). Los parámetros ϵ_1 , ρ_1 y ρ_2 están relacionados a través de la condición (4.1), por lo que únicamente se tienen dos parámetros independientes.

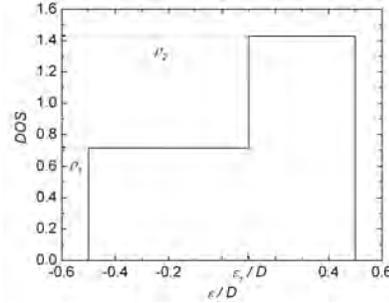


Figura 4.6: Densidad de estados constante por intervalos, definida por $\epsilon_1 = 0.1D$ y $\rho_1/\rho_2 = 0.5$

Cabe señalar que en lo que sigue únicamente se mostrarán los resultados correspondientes a la temperatura crítica, ya que cualitativamente la brecha superconductor a temperatura cero se comporta de manera similar, siendo un factor de escala ($\Delta_0^{max} \sim 2k_B T_c^{max}$), la única diferencia notable entre ambas.

En la figura 4.7 se muestra el comportamiento de la temperatura crítica (T_c) como función de la densidad de partículas (n), para diferentes valores del potencial de interacción ($|U|$). En este caso la densidad de estados está determinada por los parámetros $\epsilon_1 = 0.1D$ y $\rho_1/\rho_2 = 0.5$ (como la mostrada en la figura 4.6).

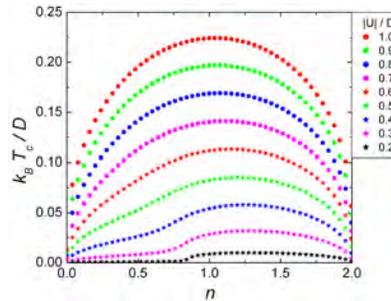


Figura 4.7: Temperatura crítica (T_c) como función de la densidad de partículas (n) y diferentes valores del potencial de interacción ($|U|$). Para una densidad de estados definida por $\epsilon_1 = 0.1D$ y $\rho_1/\rho_2 = 0.5$

Como se puede observar, existen algunas diferencias al comparar con los resultados mostrados en

la figura 4.1 (correspondientes a una densidad de estados constante). Una de ellas es la pérdida de simetría con respecto a $n = 1$, la cual se acentúa conforme $|U|$ tiende a cero. En este caso particular ($\epsilon_1 = 0.1D$ y $\rho_1/\rho_2 = 0.5$), la densidad de partículas para la cual se alcanza la temperatura crítica máxima, aumenta conforme $|U|$ disminuye, lo cual indica que para pequeños potenciales de interacción, el estado superconductor se ve favorecido cuando existe una alta concentración de electrones por sitio con energías positivas. Exactamente lo opuesto ocurre si $\epsilon_1 = -0.1D$ y $\rho_1/\rho_2 = 2$, en cuyo caso el estado superconductor se ve favorecido cuando existe una alta concentración de portadores con energía negativa. Otro punto importante es que la curva correspondiente a $|U| = D$, es muy parecida a la obtenida en el caso de una densidad de estados constante, lo cual sugiere que para grandes potenciales de interacción la densidad de estados resulta irrelevante.

Con la finalidad de encontrar la relación entre el estado superconductor, el potencial de interacción ($|U|$) y los parámetros que determinan la densidad de estados (ϵ_1 y ρ_1/ρ_2), este análisis será dividido en dos partes. En la primera se estudiará el comportamiento de la temperatura crítica como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 , para $|U|$ fijo. Mientras que en la segunda se estudiará su comportamiento como función de ϵ_1 y $|U|$ para ρ_1/ρ_2 fijo.

Para una densidad de estados determinada (ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 fijos) y un valor de $|U|$ dado, definiremos T_c^{max} como el máximo de la curva T_c vs n . Asimismo, denotaremos por n_{opt} al valor de n para el cual se alcanza T_c^{max} .

En la figura 4.8 se presentan los resultados obtenidos para T_c^{max} como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$. El primer aspecto notable es que gran parte de esta superficie se encuentra por encima de la curva correspondiente a una densidad de estados constante (definida por $\rho_1/\rho_2 = 1$), lo cual indica que en general T_c^{max} se ve favorecida para densidades de estados inhomogéneas.

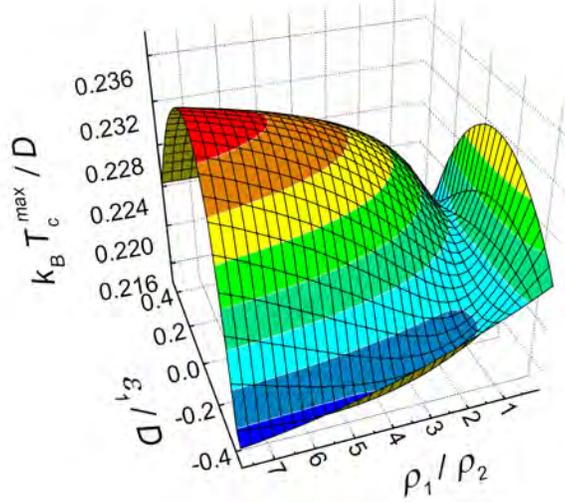


Figura 4.8: Temperatura crítica máxima T_c^{max} como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 para el caso $|U| = D$

Para facilitar el estudio de esta superficie, veamos lo que ocurre con sus proyecciones a lo largo de los planos $\rho_1/\rho_2 = \text{constante}$, como se muestra en 4.9. En ella se observan varios aspectos importantes, uno de ellos es la simetría de T_c^{max} con respecto al intercambio $(\epsilon_1, \rho_1/\rho_2) \rightarrow (-\epsilon_1, \rho_2/\rho_1)$, ver por ejemplo las curvas correspondientes a $\rho_1/\rho_2 = 0.5$ (roja) y $\rho_1/\rho_2 = 2$ (verde). Teniendo en cuenta

ta dicha simetría, a continuación describiremos el comportamiento de las curvas correspondientes a los casos en que $\rho_1/\rho_2 \geq 1$.

Nótese que para cada valor de ρ_1/ρ_2 , existe un punto ϵ_1^* tal que si $\epsilon_1 \in (-0.5D, \epsilon_1^*)$, $T_c^{max}(\epsilon_1)$ es menor que la correspondiente a una densidad de estados constante. Además, en dicho intervalo T_c^{max} siempre alcanza su mínimo (al que denotaremos por T_c^{min}). Asimismo, al aumentar el valor de ρ_1/ρ_2 , ϵ_1^* tiende a $-0.5D$ y T_c^{min} disminuye.

Para $\epsilon_1 \in (\epsilon_1^*, 0.5D)$ y para cada valor de ρ_1/ρ_2 , existe un punto ϵ_1^c para el cual T_c^{max} alcanza su máximo, al que de ahora en adelante llamaremos temperatura crítica óptima y que denotaremos por T_c^{opt} . Nótese también que estas curvas lucen bastante amplias alrededor de T_c^{opt} y presentan una caída suave para densidades de estados en las que $\epsilon_1 < \epsilon_1^c$. Al incrementar el valor de ρ_1/ρ_2 , T_c^{opt} aumenta y ϵ_1^c tiende a ϵ_1^* (recuérdese a que su vez ϵ_1^* tiende a $-0.5D$). Además se estrechan ligeramente alrededor de T_c^{opt} y la caída para valores a la izquierda de ϵ_1^c es cada vez más pronunciada.

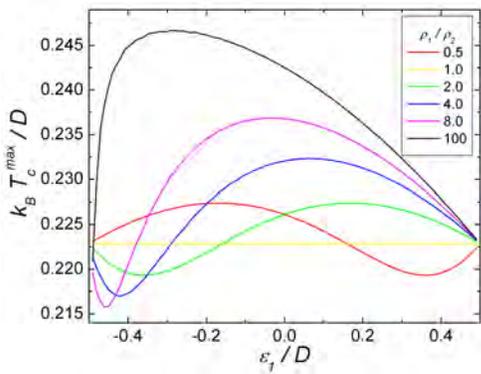


Figura 4.9: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ϵ_1 , para diferentes valores de ρ_1/ρ_2 y $|U| = D$.

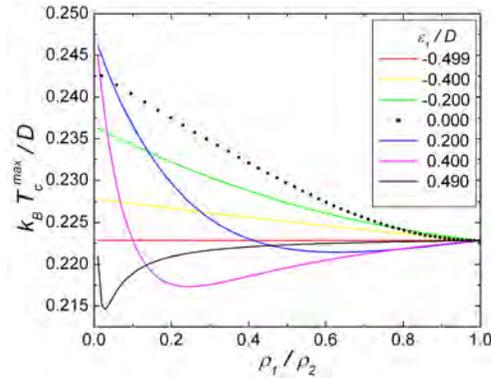


Figura 4.10: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ρ_1/ρ_2 , para diferentes valores de ϵ_1 y $|U| = D$.

Teniendo en cuenta la simetría del problema, ahora analizaremos las proyecciones de 4.8 a lo largo de los planos $\epsilon_1 = \text{constante}$ para los casos $\rho_1/\rho_2 \leq 1$, como se muestra en la figura 4.10. Como era de esperarse, todas las curvas se intersectan en $\rho_1/\rho_2 = 1$, pues en este caso la densidad de estados se reduce a una constante. Asimismo, para ϵ_1 muy cercano a $-0.5D$, T_c^{max} es casi una constante. Sin embargo, al incrementar ligeramente el valor de ϵ_1 , T_c^{max} se comporta como una función decreciente de ρ_1/ρ_2 , que siempre está por encima de la curva correspondiente a una densidad de estados constante y que en principio puede ser modelada por una recta (ver por ejemplo la curva correspondiente a $\epsilon_1 = -0.4D$ (amarilla)). Al seguir incrementando el valor de ϵ_1 (pero siempre en el intervalo $(-0.5D, 0D)$) $T_c^{max}(\rho_1/\rho_2)$ se convierte gradualmente en una función exponencialmente decreciente (curva punteada). Todas estas curvas alcanzan su máximo en el límite cuando ρ_1/ρ_2 tiende a 0, situación que corresponde a densidades de estados constantes, pero carentes de estados con energías menores que ϵ_1 .

Por otra parte, para $\epsilon_1 > 0$ las curvas de T_c^{max} como función de ρ_1/ρ_2 dejan de ser monótonas. Más aún, para cada valor de ϵ_1 existe un punto $\alpha = \rho_1/\rho_2$ para el que la curva $T_c^{max}(\rho_1/\rho_2)$ alcanza su mínimo. A la derecha de dicho punto T_c^{max} crece asintóticamente hacia el valor correspondiente

a una densidad de estados constante, mientras que a su izquierda T_c^{max} crece exponencialmente hasta alcanzar su máximo en el límite cuando ρ_1/ρ_2 tiende a 0. Nótese además, que conforme ϵ_1 aumenta, α tiende a 0 y $T_c^{max}(\alpha)$ disminuye.

En la figura 4.11 se muestran los resultados obtenidos para la densidad óptima de partículas (n_{opt}) correspondiente a la superficie 4.8, como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 .

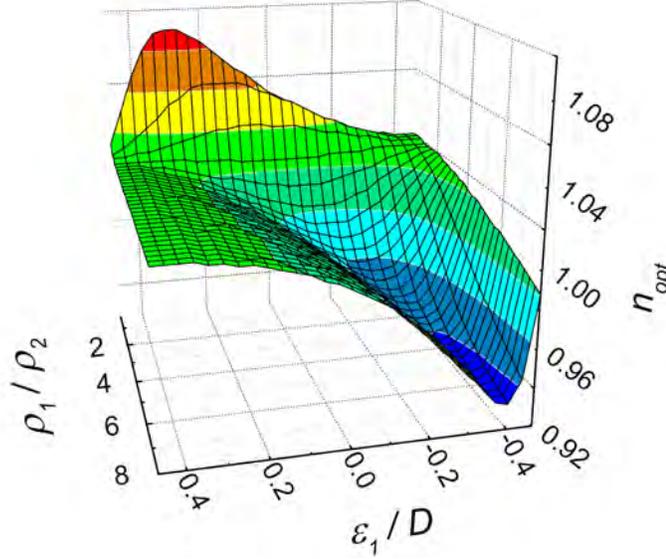


Figura 4.11: Densidad óptima de partículas n_{opt} como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 para el caso $|U| = D$

En contraste con lo ocurrido para T_c^{max} , en este caso la mayor parte de la superficie se encuentra por debajo de la curva correspondiente a una densidad de estados constante. Además se aprecia que para densidades de estados en las que $\rho_1/\rho_2 > 1$ y $\epsilon_1 > 0$, $n_{opt} \sim 1$, mientras que para los casos en que $\rho_1/\rho_2 > 1$ y $\epsilon_1 < 0$, n_{opt} es notablemente menor que 1.

Para facilitar el análisis de esta superficie observemos lo que ocurre con sus proyecciones a lo largo de los planos $\rho_1/\rho_2 = \text{constante}$, como se muestra en la figura 4.12. En ella se aprecia que n_{opt} es antisimétrica ante el intercambio $(\epsilon_1, \rho_1/\rho_2) \rightarrow (-\epsilon_1, \rho_2/\rho_1)$ (donde dicha simetría está referida a la curva $n_{opt}(\epsilon_1, \rho_1/\rho_2 = 1)$), ver por ejemplo las curvas correspondientes a $\rho_1/\rho_2 = 0.5$ (roja) y $\rho_1/\rho_2 = 2$ (verde). Teniendo esto en cuenta, analicemos lo que ocurre con las curvas correspondientes a $\rho_1/\rho_2 \geq 1$. El primer aspecto notable es que para todas estas curvas sucede que $n_{opt} \leq 1$. Además, para cada valor de ρ_1/ρ_2 existe un valor de ϵ_1 que denotaremos como ϵ_1^α para el que la curva alcanza su mínimo. Nótese también que al incrementar el valor de ρ_1/ρ_2 , ϵ_1^α se desplaza hacia la izquierda y $n_{opt}(\epsilon_1^\alpha)$ disminuye. Otro aspecto importante es que para puntos a la derecha de ϵ_1^α , $n_{opt}(\epsilon_1)$ crece de forma asintótica hacia $n_{opt} = 1$.

Ahora veamos lo que ocurre con las proyecciones de 4.11 a lo largo de los planos $\epsilon_1 = \text{constante}$ y para los casos en que $\rho_1/\rho_2 \leq 1$, como se muestra en la figura 4.13. En ella se aprecia que todas las curvas se encuentran por encima de la correspondiente a una densidad de estados constante. Además, todas ellas satisfacen que $n_{opt}(\rho_1/\rho_2 = 1) = n_{opt}(\rho_1/\rho_2 = 0) = 1$, lo cual confirma que para

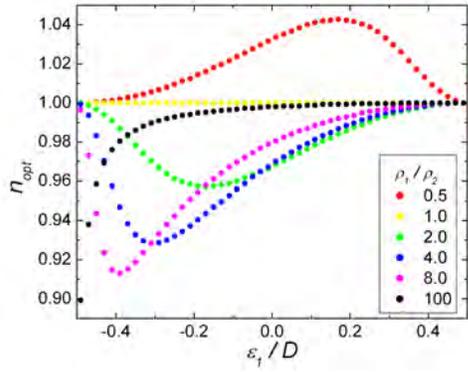


Figura 4.12: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ϵ_1 , para diferentes valores de ρ_1/ρ_2 y $|U| = D$.

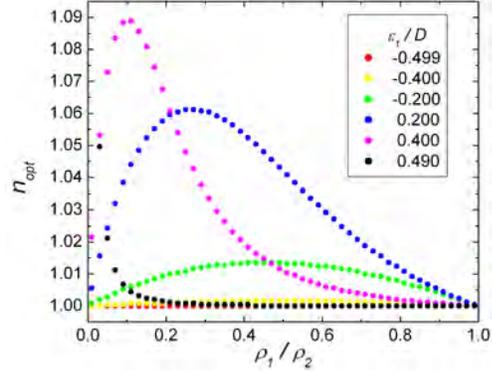


Figura 4.13: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ρ_1/ρ_2 , para diferentes valores de ϵ_1 y $|U| = D$.

sistemas cuya densidad de estados electrónicos es constante, T_c^{max} siempre se alcanza para $n = 1$. Otro aspecto notable es que para cada valor de ϵ_1 existe $\beta = \rho_1/\rho_2$ en el que la curva $n_{opt}(\rho_1/\rho_2)$ alcanza su máximo. Además, al aumentar el valor de ϵ_1 , β tiende a 0 y $n_{opt}(\beta)$ aumenta.

Ahora veamos como se modifican las propiedades del estado superconductor como función de ϵ_1 y $|U|$ para ρ_1/ρ_2 fijo. A este respecto, en la figura 4.14 se muestran los resultados obtenidos para T_c^{max} en el caso $\rho_1/\rho_2 = 4$, aunque debemos mencionar que se obtuvieron resultados similares para diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

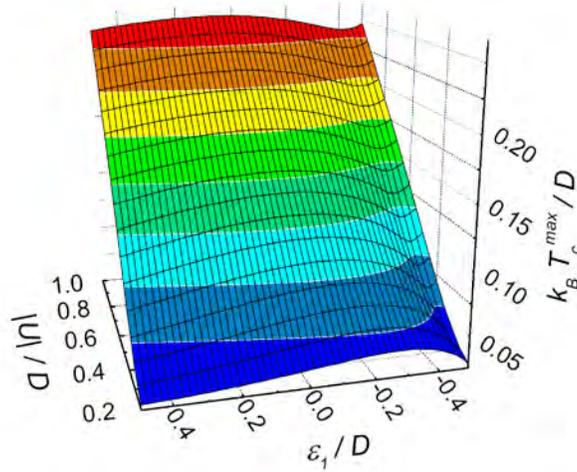


Figura 4.14: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ϵ_1 y $|U|$ para $\rho_1/\rho_2 = 4$.

Nótese que independientemente del valor de ϵ_1 , T_c^{max} es una función decreciente de $|U|$. Además,

para ϵ_1 fija y $|U| \sim D$, T_c^{max} puede ser modelada como una función lineal de $|U|$, mientras que para el caso $|U| \ll D$, $T_c^{max}(|U|)$ decrece de forma exponencial. Otro aspecto notable es que ϵ_1^c (definida como el valor para el que la curva $T_c^{max}(\epsilon_1, \rho_1/\rho_2 = \text{constante})$ alcanza su máximo) tiende a $-0.5D$ conforme $|U|$ disminuye. Para hacer más claro este comportamiento, en la figura 4.15 se muestran algunas curvas T_c^{max} vs ϵ_1 , para $|U| = 0.2D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

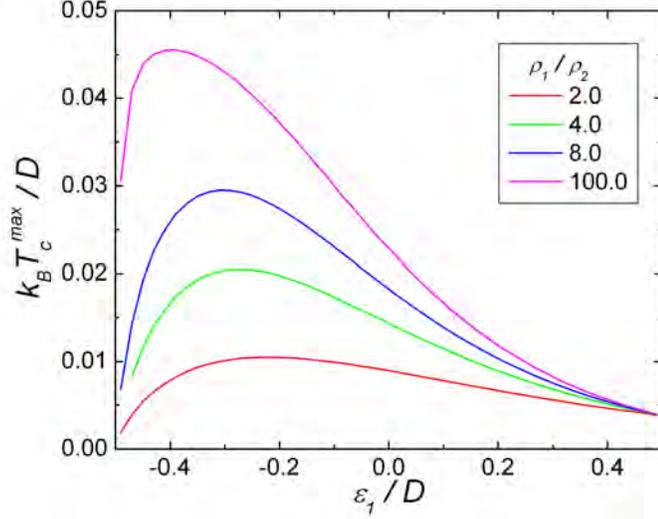


Figura 4.15: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ϵ_1 para $|U| = 0.2D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

Al comparar éstas con las curvas correspondientes a $|U| = D$ (figura 4.9) se aprecian algunas diferencias. Una de ellas es que para ρ_1/ρ_2 fijo, $\epsilon_1^c(|U| = 0.2D) < \epsilon_1^c(|U| = D)$. Nótese también que $|\epsilon_1^c(0.2D, a) - \epsilon_1^c(0.2D, b)| < |\epsilon_1^c(D, a) - \epsilon_1^c(D, b)|$, donde la primera entrada de cada expresión corresponde al valor de $|U|$ y la segunda a ρ_1/ρ_2 . Asimismo, si se define

$$\Phi(|U|, \alpha) = \frac{T_c^{opt}(|U|, \rho_1/\rho_2 = \alpha)}{T_c^{opt}(|U|, \rho_1/\rho_2 = 1)}, \quad (4.9)$$

se observa que

$$\frac{\Phi(0.2D, \alpha)}{\Phi(D, \alpha)} \sim \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha \sim 1 \\ 10 & \text{si } \alpha \gg 1 \end{cases} \quad (4.10)$$

Lo que refleja que el sistema es mucho más sensible a cambios en la densidad de estados cuando $|U| \ll D$. Otra diferencia importante en comparación con los resultados mostrados en 4.9, es que para $|U| = 0.2D$ y ρ_1/ρ_2 fijo, $T_c^{max}(\epsilon_1)$ decrece exponencialmente para valores de ϵ_1 a la derecha de ϵ_1^c .

Ahora veamos lo que ocurre con n_{opt} como función $|U|$ y ϵ_1 para ρ_1/ρ_2 fijo. A este respecto, en la figura 4.16 se muestran los resultados obtenidos para el caso $\rho_1/\rho_2 = 4$.

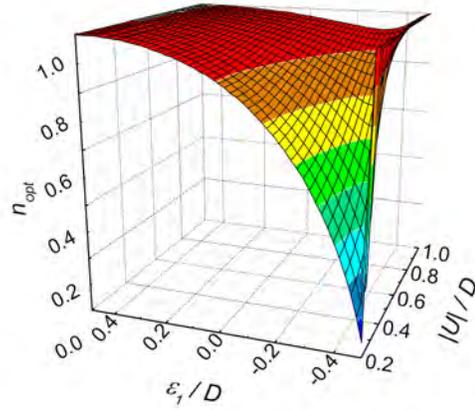


Figura 4.16: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ϵ_1 y $|U|$ para $\rho_1/\rho_2 = 4$.

En este caso es extremadamente notorio el efecto de $|U|$ sobre el sistema. En primer lugar nótese que al disminuir el valor de $|U|$, ϵ_1^α (definido como el valor para el que la curva $n_{opt}(\epsilon_1)$ alcanza su mínimo) tiende a $-0.5D$ y $n_{opt}(\epsilon_1^\alpha)$ disminuye, y lo hace cada vez más rápido. Asimismo, para $|U| \ll D$ y ϵ_1 en el intervalo $(\epsilon_1^\alpha, 0.5D)$, $n_{opt}(\epsilon_1)$ decrece y también lo hace cada vez más rápido conforme ϵ_1 se aproxima a ϵ_1^α , mientras que en el intervalo $(-0.5D, \epsilon_1^\alpha)$, $n_{opt}(\epsilon_1) \approx m\epsilon_1$, con $m \ll 1$. En la figura 4.17 se muestra que un comportamiento similar ocurre para diferentes valores de ρ_1/ρ_2 . Además se observa que conforme ρ_1/ρ_2 aumenta, ϵ_1^α tiende a $-0.5D$ y las curvas se aproximan cada vez más a la recta definida por $n = 1$.

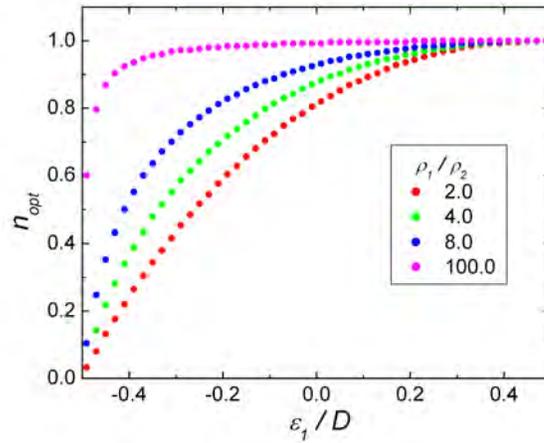


Figura 4.17: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ϵ_1 y $|U|$ para $|U| = 0.2D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

Ahora que hemos hecho una descripción general de las propiedades del estado superconductor

como función del potencial de interacción y los parámetros que determinan la densidad de estados, estudiaremos de forma más detallada lo que ocurre con T_c^{opt} y su densidad de partículas correspondiente (a la que denotaremos por n_{opt}^c). A este respecto, en las figuras 4.18 y 4.19 se muestra el comportamiento de T_c^{opt} como función de ρ_1/ρ_2 para $|U| = D$ y $|U| = 0.2D$ respectivamente.

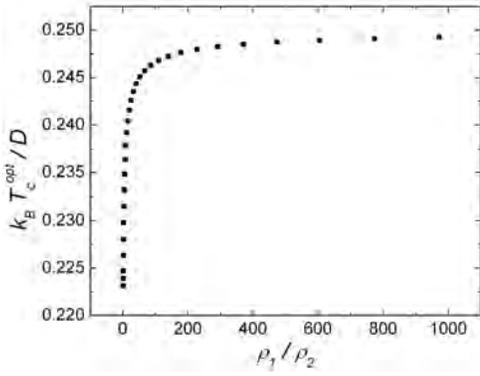


Figura 4.18: Temperatura crítica óptima (T_c^{opt}) como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

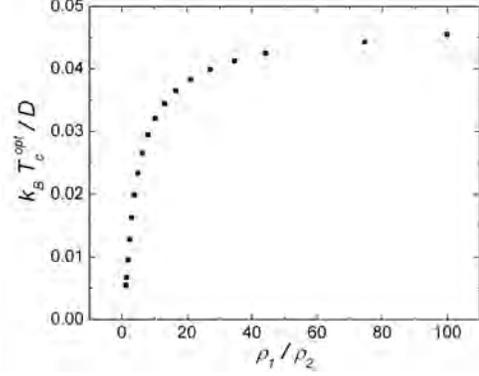


Figura 4.19: Temperatura crítica óptima (T_c^{opt}) como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = 0.2D$.

En ambos casos se observa que T_c^{opt} es una función monótonamente creciente de ρ_1/ρ_2 que alcanza su mínimo cuando $\rho_1/\rho_2 = 1$. Además, dicho mínimo es siempre mayor que 0. Nótese también que estas curvas crecen de forma asintótica cuando $\rho_1/\rho_2 \gg 1$, lo cual resulta particularmente importante, pues indica que para un valor de $|U|$ dado, existe una cota superior para la temperatura crítica y que además se alcanza en el límite cuando $\rho_1/\rho_2 \rightarrow \infty$. Asimismo, el valor de ϵ_1^c correspondiente a dichas curvas (figuras 4.20 y 4.21 respectivamente) decrece exponencialmente hacia $-0.5D$ en el mismo límite. De aquí se concluye que para un valor de $|U|$ dado, el máximo de T_c^{opt} se alcanza en el límite cuando la densidad de estados se convierte en una delta de Dirac.

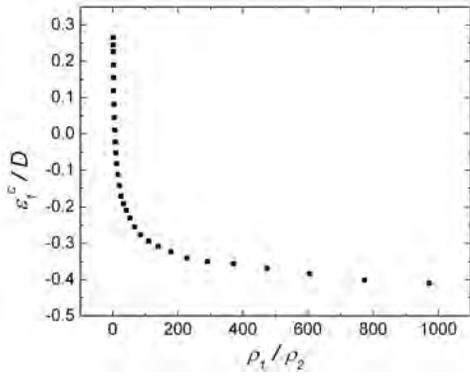


Figura 4.20: ϵ_1^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

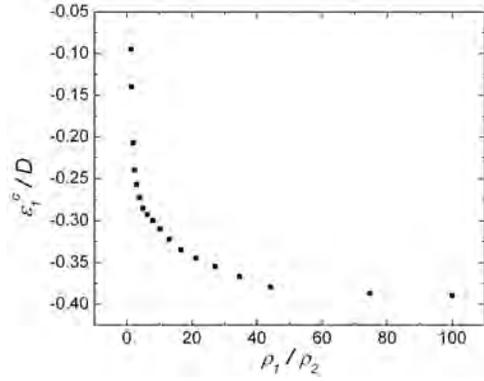


Figura 4.21: ϵ_1^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = 0.2D$.

Finalmente, analicemos el comportamiento de n_{opt}^c como función de ρ_1/ρ_2 para los mismos

valores de $|U|$ que en los casos anteriores. En las figuras 4.22 y 4.23 se observa que n_{opt}^c no es una función monótona de ρ_1/ρ_2 , sino que para cada valor de $|U|$ existe un punto $\eta = \rho_1/\rho_2$ en el que n_{opt}^c alcanza su mínimo. Además, para $\rho_1/\rho_2 < \eta$, $n_{opt}^c(\rho_1/\rho_2) \approx m \cdot \rho_1/\rho_2$, donde $m \ll 1$, mientras que para $\rho_1/\rho_2 > \eta$, n_{opt}^c crece asintóticamente hacia $n = 1$, es decir, para el límite en que la densidad de estados se convierte en una delta de Dirac, T_c^{opt} siempre se alcanza para una densidad de partículas $n = 1$.

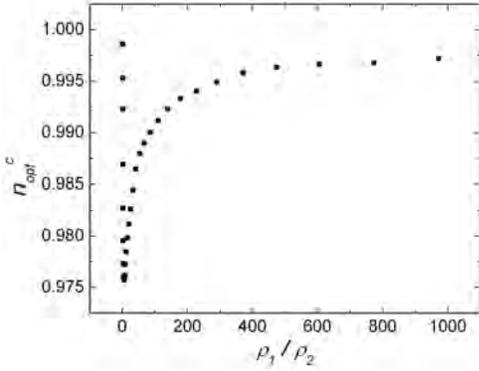


Figura 4.22: n_{opt}^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

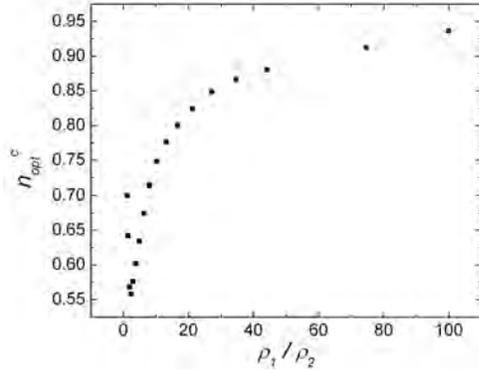


Figura 4.23: n_{opt}^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = 0.2D$.

Al suponer una densidad de estados modelada a través de una delta de Dirac centrada en $\epsilon_{min} = -\epsilon_0$ ($\rho(\epsilon) = \delta(\epsilon + \epsilon_0)$), es posible obtener una solución analítica del sistema de ecuaciones (3.16). Bajo esta suposición, dichas ecuaciones pueden ser rescritas como:

$$1 = \frac{|U|}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + \Delta^2}} \tanh \left(\frac{\sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right) \right] \quad (4.11a)$$

$$n - 1 = \frac{(\epsilon_0 + \mu)}{\sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + \Delta^2}} \tanh \left(\frac{\sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right) \quad (4.11b)$$

Para encontrar la temperatura crítica es necesario hacer $\Delta = 0$, con lo que (4.11) se reduce a

$$1 = \frac{|U|}{2} \left[\frac{1}{|\epsilon_0 + \mu|} \tanh \left(\frac{|\epsilon_0 + \mu|}{2k_B T_c} \right) \right] \quad (4.12a)$$

$$n - 1 = \lambda \tanh \left(\frac{|\epsilon_0 + \mu|}{2k_B T_c} \right) \quad (4.12b)$$

donde $\lambda = (\epsilon_0 + \mu)/|\epsilon_0 + \mu|$.

De (4.12b) se tiene

$$|\epsilon_0 + \mu| = 2k_B T_c \operatorname{arctanh} \left(\frac{n-1}{\lambda} \right). \quad (4.13)$$

Sustituyendo (4.13) en (4.12a) se obtiene

$$\begin{aligned} k_B T_c &= \frac{|U|}{4} \left(\frac{n-1}{\lambda} \right) \left[\operatorname{arctanh} \left(\frac{n-1}{\lambda} \right) \right]^{-1} \\ &= \frac{|U|}{4} \left[\frac{n-1}{\operatorname{arctanh}(n-1)} \right], \end{aligned} \quad (4.14)$$

donde el último paso se justifica porque para el caso $\lambda = -1$, $\operatorname{arctanh} \left(\frac{n-1}{\lambda} \right) = -\operatorname{arctanh}(n-1)$. Asimismo se tiene que el potencial químico está dado por

$$\mu = \frac{(n-1)|U|}{2} - \epsilon_0. \quad (4.15)$$

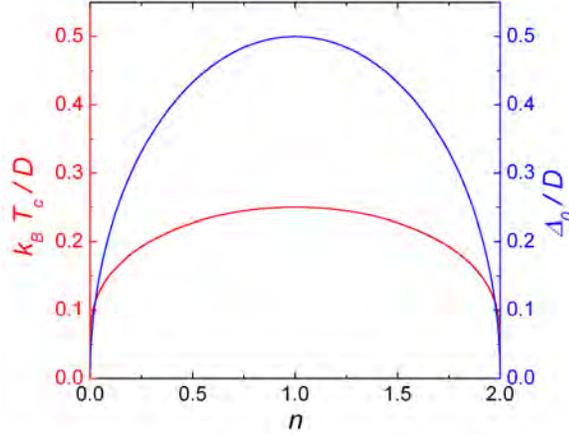


Figura 4.24: Temperatura crítica (T_c) y brecha superconductora a temperatura cero (Δ_0) como función de la densidad de partículas (n), para una densidad de estados dada por una delta de Dirac ($\rho(\epsilon) = \delta(\epsilon + \epsilon_0)$).

En la figura 4.24 se muestra la gráfica de (4.14) como función de n (curva roja), donde se observa que en efecto, el máximo se alcanza para $n = 1$, aunque (4.14) no está definida en este punto, sin embargo, es fácil demostrar que existe el límite cuando $n \rightarrow 1$. Para ello hagamos $f(n) = n - 1$ y $g(n) = \operatorname{arctanh}(n - 1)$, con lo que de acuerdo a la regla de L'Hopital

$$\lim_{n \rightarrow 1} \frac{f(n)}{g(n)} = \lim_{n \rightarrow 1} \frac{\dot{f}(n)}{\dot{g}(n)} = \lim_{n \rightarrow 1} \frac{1}{\frac{1}{1-(n-1)^2}} = 1. \quad (4.16)$$

De aquí que la temperatura crítica máxima de un sistema cuya densidad de estados pueda ser modelada por una delta de Dirac, estará dada por $k_B T_c(n = 1) = |U|/4$.

Por otra parte, para el caso de la brecha superconductor a temperatura 0 (Δ_0), el sistema de ecuaciones (4.11) se reduce a lo siguiente

$$1 = \frac{|U|}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + \Delta_0^2}} \right) \quad (4.17a)$$

$$n - 1 = \frac{\epsilon_0 + \mu}{\sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + \Delta_0^2}} \quad (4.17b)$$

De (4.17b) se obtiene

$$\frac{1}{\sqrt{(\epsilon_0 + \mu)^2 + \Delta_0^2}} = \frac{n - 1}{\epsilon_0 + \mu} \quad (4.18)$$

Sustituyendo esto en (4.17a) se encuentra que μ está dado por

$$\mu = \frac{|U|(n - 1)}{2} - \epsilon_0 \quad (4.19)$$

Finalmente, al sustituir (4.19) en cualquiera de las ecuaciones (4.17) se obtiene la siguiente expresión para Δ_0

$$\Delta_0 = \frac{|U|}{2} \sqrt{n(2 - n)} \quad (4.20)$$

En la figura 4.24 se muestra la gráfica de (4.20) como función de n (curva azul). En ella se observa que para este caso el máximo también se alcanza cuando $n = 1$ y que además está dado por $\Delta_0(n = 1) = |U|/2$ (lo cual es fácil demostrar a partir de (4.20)).

Nótese que a diferencia de lo que ocurre para T_c , $\Delta_0(|U|, n)$ está bien definida para cualquier punto.

Cabe mencionar que $\Delta_0(n = 1) = 2k_B T_c(n = 1)$, en concordancia con lo mencionado al inicio de esta sección. Además, para $|U| = 0.2D$, $k_B T_c(n = 1) = .05D$, lo que verifica los resultados mostrado en la figura 4.19.

Por otra parte, Δ_0 y T_c son independientes de ϵ_0 , por lo que en particular, estos resultados siguen siendo válidos para el caso en que la delta de Dirac está centrada en el extremo opuesto de la banda ($\rho(\epsilon) = \delta(\epsilon - \epsilon_0)$).

4.3. Densidad de estados triangular

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para las propiedades del estado superconductor, de un sistema cuya densidad de estados electrónicos puede ser modelada a través de rectas con pendiente finita, como se muestra en la figura 4.25.

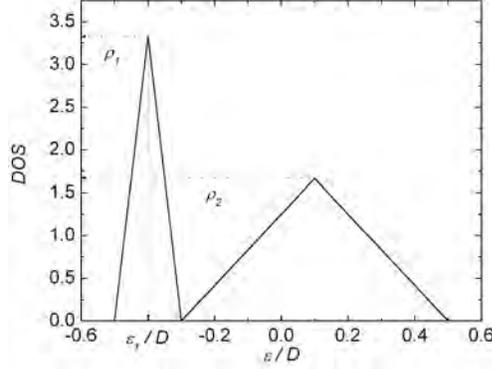


Figura 4.25: Densidad de estados triangular, determinada por $\epsilon_1 = -0.4D$ y $\rho_1/\rho_2 = 2$.

Para simplificar el análisis, únicamente se considerarán los casos con dos picos, definidos por triángulos isósceles y que además satisfagan la condición (4.1). De esta manera, cada densidad de estados quedará definida por dos parámetros, a decir, la posición del primer máximo local (ϵ_1) y la relación de alturas entre ambos picos (ρ_1/ρ_2). Se debe hacer notar que ϵ_1 , únicamente puede tomar valores en el intervalo $(-0.5D, 0D)$.

Al igual que en la sección anterior, en este caso únicamente se presentaran los resultados obtenidos para la temperatura crítica, pues cualitativamente la brecha superconductor a temperatura cero se comporta de manera similar, siendo nuevamente un factor de escala la única diferencia notable entre ambas ($\Delta_0 \approx 2k_B T_c$).

En la figura 4.26 se muestra el comportamiento de la temperatura crítica (T_c) como función de la densidad de partículas (n), para una densidad de estados definida por $\epsilon_1 = -0.4D$ y $\rho_1/\rho_2 = 2$, así como para diferentes valores del potencial de interacción ($|U|$).

Como se puede observar, $T_c(n)$ se comporta de una manera distinta a como lo hacía para el caso de una densidad de estados constante por intervalos (ver figura 4.6). Esta diferencia se vuelve más notoria para valores pequeños de $|U|$, pues en este caso existen dos máximos locales para $T_c(n)$, uno de los cuales se alcanza para $n < 1$ y el otro para $n > 1$. Además, al disminuir el valor de $|U|$, la transición entre dichos máximos es cada vez menos suave, e incluso, pareciera que para $|U| \ll D$, la derivada $\partial T_c(n)/\partial n$ pudiera presentar alguna discontinuidad, ver por ejemplo la curva correspondiente a $|U| = 0.4D$ (estrellas azules). Aunque para la densidad de estados utilizada en la obtención de estas curvas, el máximo global de T_c siempre se alcanza para $n \geq 1$, más adelante se mostrará que existen valores de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 que dan lugar a una situación contraria e incluso existen caso para los que ambos máximos tienen la misma altura. Nótese también que T_c decrece conforme $|U|$ tiende a cero.

Para estudiar con más detalle las propiedades del estado superconductor como función de $|U|$, ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 , nuevamente dividiremos el estudio en dos partes. En la primera analizaremos el comportamiento de dichas propiedades como función de ρ_1/ρ_2 y ϵ_1 para $|U|$ fijo, mientras que en la

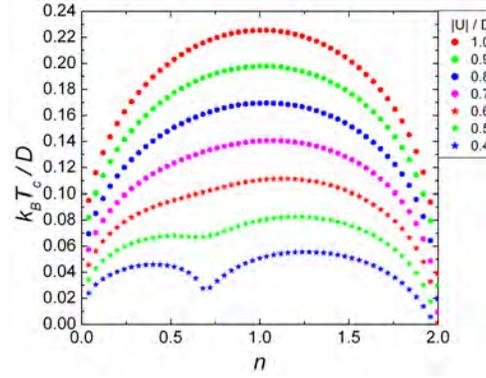


Figura 4.26: Temperatura crítica (T_c) como función de la densidad de partículas (n) y el potencial de interacción ($|U|$), para una densidad de estados definida por $\epsilon_1 = -0.4D$ y $\rho_1/\rho_2 = 2$

segunda se estudiará su comportamiento como función de $|U|$ y ϵ_1 , para ρ_1/ρ_2 fijo.

Para una densidad de estados determinada y $|U|$ fijo, se define T_c^{max} como el máximo de la curva $T_c(n)$, asimismo, denotaremos por n_{opt} al valor de n para el cual se alcanza dicho máximo.

En la figura 4.27 se muestran los resultados obtenidos para T_c^{max} como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$. Como se observa, esta superficie es muy parecida a la obtenida para el caso de una densidad de estados constante por intervalos, siendo la diferencia más notable, que en esta ocasión la parte alta de la superficie se distribuye de una forma más homogénea sobre el espacio de parámetros que definen la densidad de estados, mientras que los descensos hacia las zonas en que la superficie alcanza su mínimo son más pronunciados.

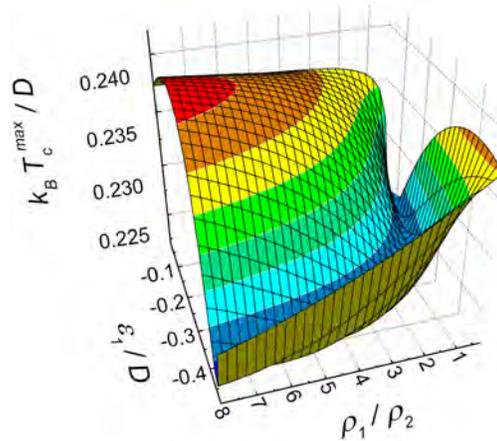


Figura 4.27: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

Analizando las proyecciones de esta superficie sobre los planos $\rho_1/\rho_2 = \text{constante}$, como se muestra en la figura 4.28, se observa que cualitativamente dichas curvas son similares a las obtenidas para una densidad de estados constante por intervalos (figura 4.9). En particular, es importante

resaltar que en este caso se presenta el mismo tipo de simetría que el descrito anteriormente (aunque en esta ocasión el plano de simetría es $\epsilon = -0.25D$).

Sin embargo, existen algunas diferencias que deben ser resaltadas. Para ello, debemos aclarar que al referirnos a las comparaciones de ϵ_1 entre los resultados obtenidos para una densidad de estados triangular y una densidad de estados constante por intervalos (a las que de ahora en adelante denotaremos por DOST y DOSCI respectivamente), en realidad estaremos hablando de la comparación entre $\epsilon_1/0.5D$ (DOST) y ϵ_1/D (DOSCI), pues en ambos casos ϵ_1 toma valores sobre intervalos diferentes. Una vez hecha esta aclaración, veamos cuales son las diferencias entre ambos casos. Una de ellas es que para una DOST y para cada valor de ρ_1/ρ_2 , ϵ_1^c (definido como el valor para el que la curva $T_c^{max}(\epsilon_1)$ alcanza su máximo, antes definido como T_c^{opt}) está desplazado hacia la derecha en relación con lo obtenido para una DOSCI. Además, para cada valor de ρ_1/ρ_2 , la diferencia $|T_c^{opt} - T_c^{max}(0D)|$ para una DOST es menor que la correspondiente a una DOSCI, ver por ejemplo la curva correspondiente a $\rho_1/\rho_2 = 8$ (magenta), mientras que una situación opuesta ocurre para $|T_c^{max}(\epsilon_1^{min}) - T_c^{max}(0D)|$, donde definimos ϵ_1^{min} como el valor para el que la curva $T_c^{max}(\epsilon_1)$ alcanza su mínimo.

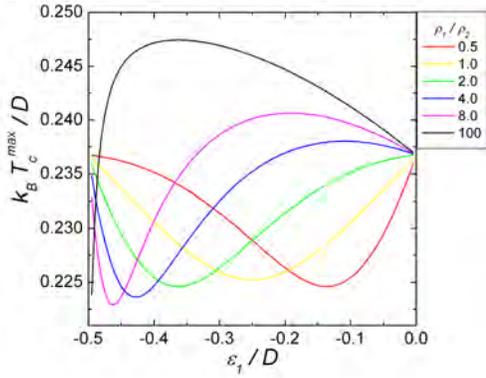


Figura 4.28: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ϵ_1 para $|U| = D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

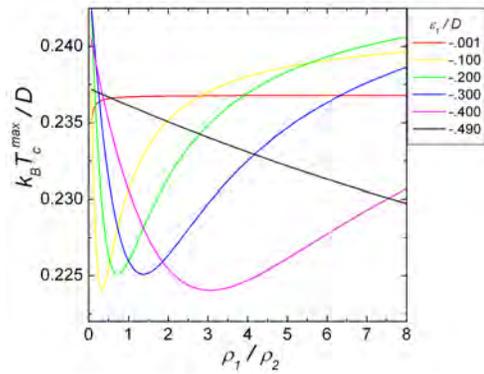


Figura 4.29: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ρ_1/ρ_2 para $|U| = D$ y diferentes valores de ϵ_1 .

Ahora veamos lo que ocurre con las proyecciones de 4.27 a lo largo de los planos $\epsilon_1 = \text{constante}$, como se muestra en la figura 4.29. En ella se observa que para cada valor de ϵ_1 existe un punto $\alpha = \rho_1/\rho_2$, para el que la curva $T_c^{max}(\rho_1/\rho_2)$ alcanza su mínimo. A la izquierda de α , $T_c^{max}(\rho_1/\rho_2)$ decrece exponencialmente, mientras que a la derecha de dicho punto T_c^{max} crece asintóticamente. Además, conforme ϵ_1 disminuye, α tiende a 0. Nótese también que para $\epsilon_1 \in (-0.5D, -0.25D)$, $T_c^{max}(\alpha)$ es una función creciente de ϵ_1 , ver por ejemplo las curvas correspondientes a $\epsilon_1 = -0.4D$ (magenta) y $\epsilon_1 = -0.3D$ (azul), mientras que para $\epsilon_1 \in (-0.25D, 0D)$, $T_c^{max}(\alpha)$ es una función decreciente de ϵ_1 , ver por ejemplo las curvas correspondientes a $\epsilon_1 = -0.2D$ (verde) y $\epsilon_1 = -0.1D$ (amarilla)

Ahora veamos lo que sucede con el valor de n_{opt} asociado a la superficie 4.27, lo cual se muestra en la figura 4.30. En este caso se aprecia una diferencias significativa con los resultados obtenidos para una DOSCI (figura 4.11), pues en el límite cuando $\epsilon_1 \rightarrow -0.5D$ y $\rho_1/\rho_2 \gg 1$, el estado superconductor se ve favorecido para densidades de partículas mayores que 1, situación contraria a

la obtenida para densidades de estados constantes por intervalos. Además, en este caso, también se observa una pendiente más pronunciada al incrementar el valor de ϵ_1 , mientras que una situación completamente opuesta se observa en el límite cuando $\epsilon_1 \rightarrow 0D$ y $\rho_1/\rho_2 \rightarrow 0$.

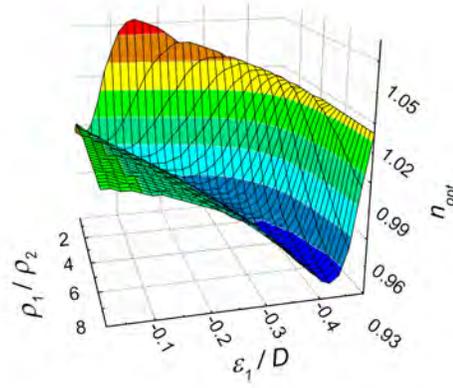


Figura 4.30: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ϵ_1 y ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

Analizando lo que ocurre con las proyecciones de 4.30 a lo largo de los planos $\rho_1/\rho_2 = \text{constante}$, como se muestra en la figura 4.31, se aprecia que n_{opt} sigue siendo una función antisimétrica aunque ahora lo es con respecto al plano $\epsilon = -0.25D$, ver por ejemplo las curvas correspondientes a $\rho_1/\rho_2 = 0.5$ (roja) y $\rho_1/\rho_2 = 2$ (verde). Además, para un valor fijo de ρ_1/ρ_2 , existe un punto $\beta = \epsilon_1$ (distinto de los extremos $0D$ y $-0.5D$) para el que $n_{opt} = 1$, situación que no se presentaba para una DOSCI. Más aún, si $\epsilon_1 \in (-0.5D, \beta)$, $n_{opt}(\epsilon_1) > 1$ y siempre alcanza su máximo (n_{opt}^{max}). Contrariamente, en el resto del intervalo $n_{opt}(\epsilon_1) < 1$ y siempre alcanza su mínimo (n_{opt}^{min}). Al incrementar el valor de ρ_1/ρ_2 , β tiende a $0D$ y tanto n_{opt}^{max} como n_{opt}^{min} disminuyen.

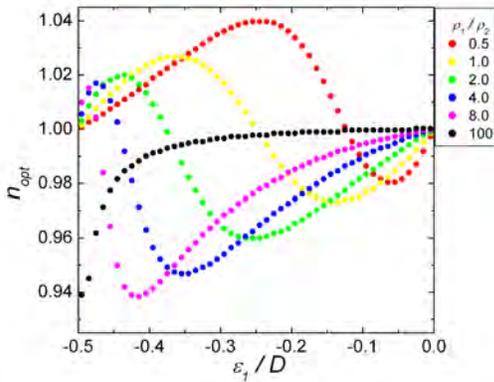


Figura 4.31: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ϵ_1 para $|U| = D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

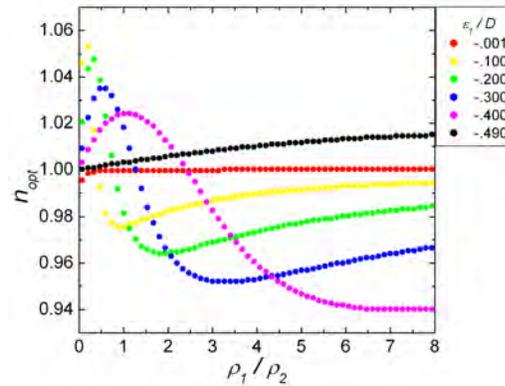


Figura 4.32: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ρ_1/ρ_2 para $|U| = D$ y diferentes valores de ϵ_1 .

Con lo que respecta a las proyecciones de 4.30 sobre los planos $\epsilon = \text{constante}$, en la figura 4.32 se aprecia que para cada valor de ϵ_1 existe $\alpha = \rho_1/\rho_2$ para el que $n_{opt}(\rho_1/\rho_2) = 1$, a la izquierda de este punto $n_{opt} > 1$ y siempre alcanza su máximo, mientras que a su derecha $n_{opt} < 1$ y siempre alcanza su mínimo. Asimismo, al disminuir el valor de ϵ_1 , α aumenta y tanto el máximo como el mínimo de $n_{opt}(\rho_1/\rho_2)$ disminuyen.

Ahora analicemos la forma en que se modifican las propiedades del estado superconductor como función de $|U|$ y ϵ_1 para ρ_1/ρ_2 fijo. A este respecto, en la figura 4.33 se muestran los resultados obtenidos para $T_c^{max}(|U|, \epsilon_1)$ con $\rho_1/\rho_2 = 1$. En ella se observa que al igual que en el caso de una DOSCI, para ϵ_1 fijo, T_c^{max} decrece de manera casi lineal al disminuir el valor de $|U|$. Asimismo, nótese que para los puntos en los que la curva $T_c^{max}(\epsilon_1)$ alcanza su mínimo (a los que denotaremos por ϵ_1^{min}), la derivada $\partial T_c^{max}(\epsilon_1)/\partial \epsilon_1$ se vuelve discontinua para valores de $|U| \ll D$. Otro aspecto notable es el cambio de concavidad de las curvas $T_c^{max}(\epsilon_1)$, para $|U| \ll D$.

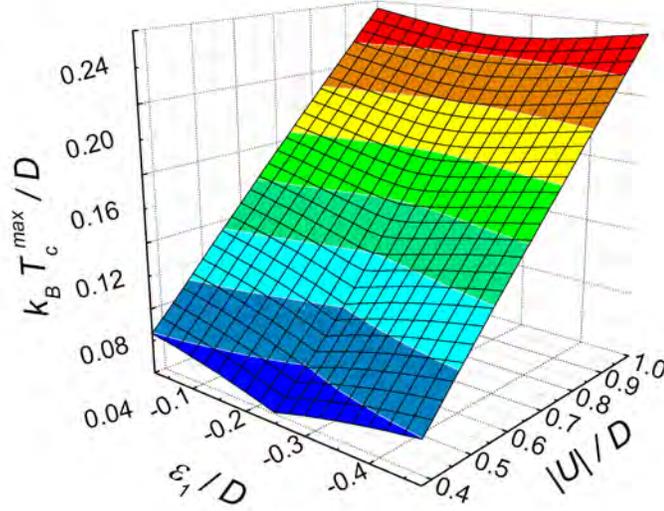


Figura 4.33: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ϵ_1 y $|U|$, para $\rho_1/\rho_2 = 1$.

Con la final de mostrar más claramente los efectos de $|U|$ sobre el sistema, en la figura 4.34 se muestran algunas curvas de $T_c^{max}(\epsilon_1)$ para $|U| = 0.2D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

Nótese que en contraste con lo ocurrido para $|U| = D$, en este caso $|T_c^{opt} - T_c^{max}(0D)| > |T_c^{max}(\epsilon_1^{min}) - T_c^{max}(0D)|$, para cada valor de ρ_1/ρ_2 . Además, para puntos a la derecha de ϵ_1^c (aquel para el que se alcanza T_c^{opt}), $T_c^{max}(\epsilon_1)$ decrece de forma casi lineal. Por otra parte, el cociente $\Phi(|U|, \alpha)$, definido de igual manera que en la sección anterior, resulta ser

$$\frac{\Phi(0.2D, \alpha)}{\Phi(D, \alpha)} \sim \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha \sim 1 \\ 3 & \text{si } \alpha \gg 1 \end{cases} \quad (4.21)$$

lo cual refleja que el sistema es más sensible a cambios en la densidad de estados cuando $|U| \ll D$ (aunque no lo es tanto como lo era para una DOSCI).

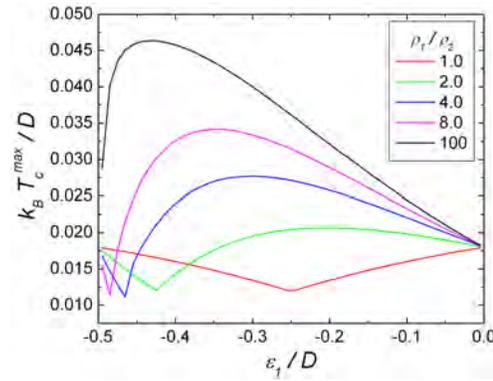


Figura 4.34: Temperatura crítica máxima (T_c^{max}) como función de ϵ_1 , para $|U| = 0.2D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

Por otra parte, en la figura 4.35 se muestra el comportamiento de n_{opt} como función de $|U|$ y ϵ_1 , para el caso $\rho_1/\rho_2 = 1$. El primer aspecto notable (y quizá el más importante) es la discontinuidad que se presenta para valores de $|U|$ aproximadamente menores que $0.6D$, en los puntos para los que la curva $n_{opt}(\epsilon_1)$ cambia de concavidad (en lo que sigue, dichos puntos serán denotados por ϵ_1^d). Además, para un valor fijo $\epsilon_1 < \epsilon_1^d$, n_{opt} crece de forma asintótica al disminuir el valor de $|U|$, mientras que para $\epsilon_1 > \epsilon_1^d$ se presenta un comportamiento opuesto.

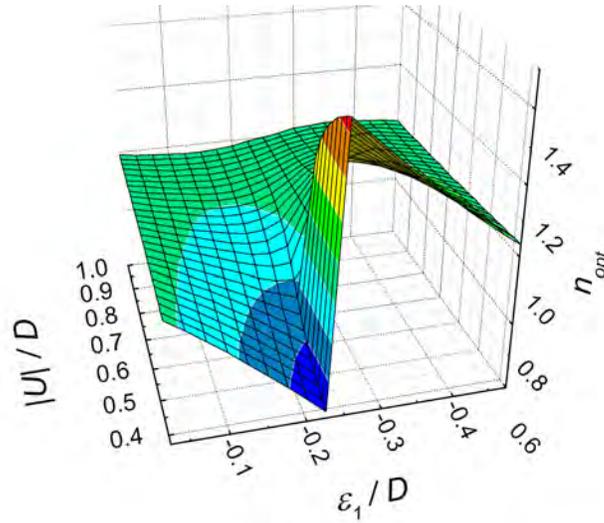


Figura 4.35: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ϵ_1 y $|U|$, para $\rho_1/\rho_2 = 1$.

En la figura 4.36 se muestran algunas curvas de $n_{opt}(\epsilon_1)$, para el caso $|U| = 0.2D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 . En ella se aprecia que para $\rho_1/\rho_2 = 1$ y $\epsilon_1 > \epsilon_1^d$, $n_{opt}(\epsilon_1)$ es siempre menor que 1 y demás puede ser modelada como una función lineal y creciente. Al incrementar el valor de ρ_1/ρ_2 ,

$\epsilon_1^d \rightarrow -0.5D$ y $n_{opt}(\epsilon_1)$ (para $\epsilon_1 > \epsilon_1^d$) gradualmente se convierte en una función que crece asintóticamente hacia $n = 1$. Cabe mencionar que para $\epsilon_1 < \epsilon_1^d$, $n_{opt}(\epsilon_1)$ presenta un comportamiento opuesto al descrito anteriormente.

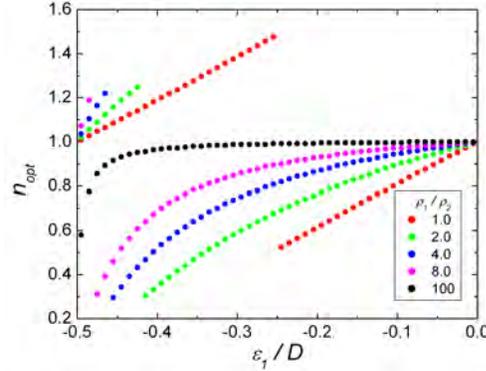


Figura 4.36: Densidad óptima de partículas (n_{opt}) como función de ϵ_1 , para $|U| = 0.2D$ y diferentes valores de ρ_1/ρ_2 .

Para entender el origen de dicha discontinuidad veamos lo que ocurre con T_c como función de n , para valores de ϵ_1 cercanos al punto donde la curva $n_{opt}(\epsilon_1, |U| = 0.55D, \rho_1/\rho_2 = 1)$ se vuelve discontinua ($\epsilon_1^d = -0.25D$), como se muestra en la figura 4.37.

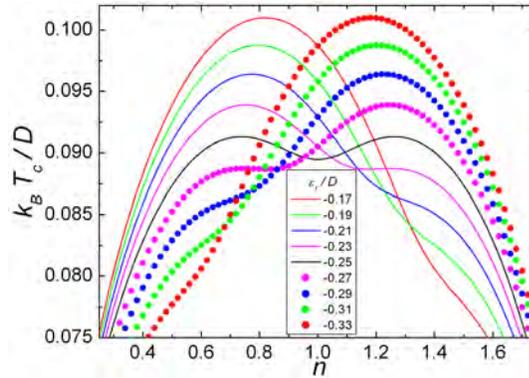


Figura 4.37: Temperatura crítica (T_c) como función de la densidad de partículas (n), para $|U| = 0.55D$, $\rho_1/\rho_2 = 1$ y diferentes valores ϵ_1 .

Para densidades de estados en las que $\epsilon_1 < \epsilon_1^d$, $T_c(n)$ presenta un único máximo (T_c^{max}), que se alcanza para $n > 1$ (n_{opt}), ver por ejemplo la curva correspondiente a $\epsilon_1 = -0.33D$ (círculos rojos). Conforme ϵ_1 se aproxima a ϵ_1^d , T_c^{max} se comporta como una función decreciente de ϵ_1 , y n_{opt} se comporta como una función creciente del mismo parámetro. Simultáneamente, la curva $T_c(n)$ comienza a presentar un nuevo máximo local para $n < 1$ y éste se comporta de forma opuesta al máximo global, como se aprecia en la curva para $\epsilon_1 = -0.27D$ (círculos de color magenta). Cuando $\epsilon_1 = \epsilon_1^d$, ambos máximos se vuelven completamente simétricos con respecto a $n = 1$. Además,

justo en este punto $n_{opt}(\epsilon_1)$ se convierte en una función multi valuada (línea negra correspondiente a $\epsilon_1 = -0.25D$). A partir de este momento el máximo local se convierte en máximo global y viceversa, y como resultado de este intercambio, n_{opt} se convierte en una función decreciente de ϵ_1 .

Finalmente se presentan los resultados obtenidos para T_c^{opt} y su densidad de partículas correspondiente (n_{opt}^c), como función de $|U|$ y los parámetros que determinan la densidad de estados. Dichos resultados son muy similares a los obtenidos para una densidad de estados constante por intervalos, por tal motivo se ha decidido omitir su discusión.

Cabe mencionar que los resultados obtenidos en la sección anterior para una densidad de estados modelada a través de una delta de Dirac, siguen siendo válidos en este caso, pues en dicho límite DOST y DOSCI son indistinguibles.

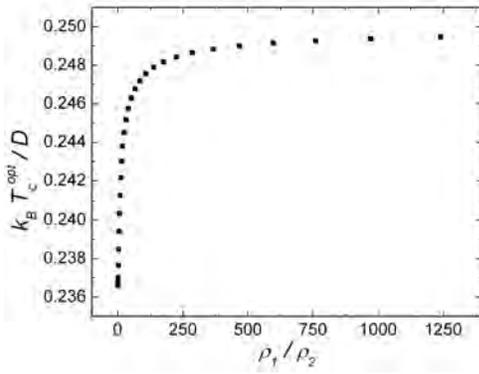


Figura 4.38: Temperatura crítica óptima (T_c^{opt}) como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

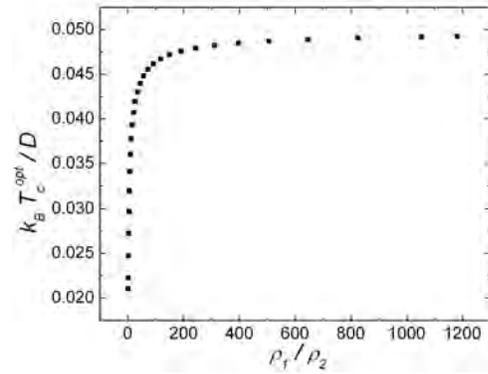


Figura 4.39: Temperatura crítica óptima (T_c^{opt}) como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = 0.2D$.

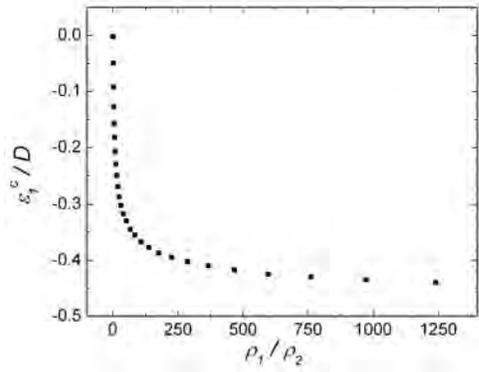


Figura 4.40: ϵ_1^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

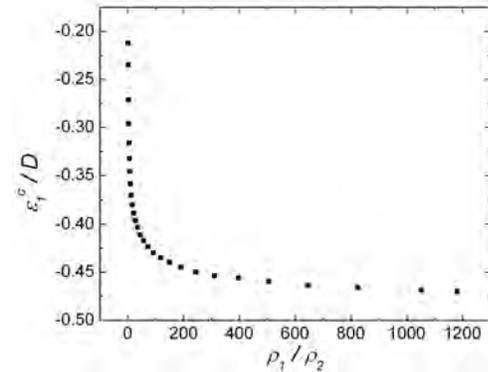


Figura 4.41: ϵ_1^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = 0.2D$.

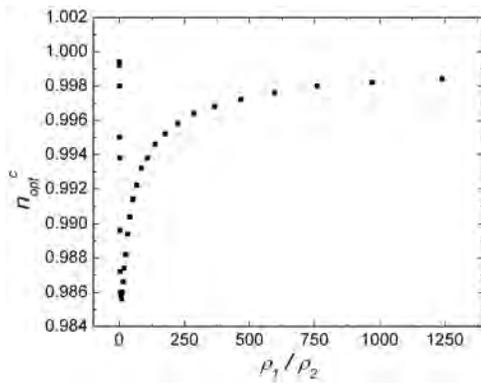


Figura 4.42: n_{opt}^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = D$.

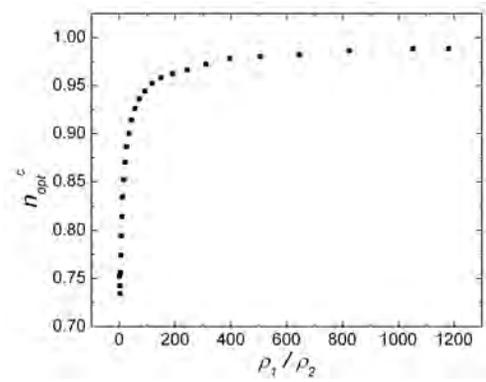


Figura 4.43: n_{opt}^c como función de ρ_1/ρ_2 , para $|U| = 0.2D$.

Capítulo 5

Conclusiones

A lo largo de este trabajo se estudiaron las propiedades del estado superconductor, para sistemas que pueden ser modelados por densidades de estados electrónicos constantes, constantes por intervalos y triangulares. Para ello se utilizó el modelo de Hubbard atractivo de una sola banda y el formalismo BCS. En particular, se estudió el comportamiento de la temperatura crítica y la brecha superconductora a temperatura cero, como función de la energía de interacción (atractiva) entre electrones, la densidad de electrones por sitio y los parámetros que definen cada densidad de estados. A partir de lo cual se obtuvieron las siguientes conclusiones.

Densidades de estados constantes:

- En el caso de interacciones atractivas electrón-electrón muy pequeñas, se reproducen los resultados obtenidos por la formulación original de la teoría BCS.
- En general, la temperatura crítica y la brecha superconductora, como funciones de la densidad de electrones (n), siempre alcanzan su máximo en $n = 1$.

Densidades de estados constantes por intervalos:

- Para una densidad de estados y potencial de interacción ($|U|$) fijos, la brecha superconductora a temperatura cero (Δ_0) y la temperatura crítica (T_c), resultan cualitativamente similares, siendo la única diferencia notable un factor de escala ($\Delta_0 \sim 2k_B T_c$).
- Para un valor de U dado y una densidad de estados fija, se encontraron las siguientes simetrías

$$\begin{aligned} T_c^{max}(\epsilon_1, \rho_1/\rho_2) &= T_c^{max}(-\epsilon_1, \rho_2/\rho_2), \\ n_{opt}(\epsilon_1, \rho_1/\rho_2) &= 2 - n_{opt}(-\epsilon_1, \rho_2/\rho_1), \end{aligned}$$

donde T_c^{max} denota al valor máximo de la temperatura crítica como función de n y donde n_{opt} se define como $T_c^{max} = T_c(n_{opt})$.

- Para $|U|$ fijo y $\rho_1/\rho_2 \geq 1$, la temperatura crítica óptima (T_c^{opt}) es una función que crece asintóticamente como función de ρ_1/ρ_2 y que está acotada superiormente por el valor $T_c(n=1) = |U|/4k_B$, donde dicha cota corresponde a la temperatura crítica máxima para una densidad de estados modelada a través de una delta de Dirac ($\epsilon_1 \rightarrow -0.5D$ y $\rho_1/\rho_2 \rightarrow \infty$).
- Para $|U|$ fijo y $\rho_1/\rho_2 \geq 1$, la densidad de partículas correspondiente a T_c^{opt} (n_{opt}^c), es una función no monotónica de ρ_1/ρ_2 , en general menor que 1, que alcanza su mínimo para algún valor $\rho_1/\rho_2 \sim 1$ y que tiende asintóticamente a $n=1$, cuando $\rho_1/\rho_2 \gg 1$.
- Para $|U|$ fijo y $\rho_1/\rho_2 \geq 1$, el valor de ϵ_1 para el que se obtiene T_c^{opt} (ϵ_1^c), decrece exponencialmente como función de ρ_1/ρ_2 . Es decir, la temperatura crítica óptima se ve favorecida para densidades de estados altamente inhomogéneas, en las que la probabilidad de encontrar una partícula con energía en el intervalo $\epsilon \in (-0.5, \epsilon_1)$ es mayor que la de encontrarla en el resto de la banda.
- Para $|U| \ll D$, $T_c^{max}(|U|)$ crece exponencialmente con $|U|$ mientras que a partir de $|U| \sim D$, T_c^{max} crece de manera aproximadamente lineal.
- Para $\rho_1/\rho_2 \geq 1$, $n_{opt}(|U|)$ permanece casi constante para configuraciones de la densidad de estados lejanas al punto en el que la curva $n_{opt}(\epsilon_1)$ alcanza su mínimo, mientras que cerca de este punto $n_{opt}(|U|)$ decrece cada vez más rápido al disminuir en valor de $|U|$.

Densidades de estados triangulares:

- La temperatura crítica y la brecha superconductor a temperatura cero, son cualitativamente similares bajo las mismas condiciones en los parámetros de cuales dependen. Además, en este caso también se verifica que $\Delta_0 \sim 2k_B T_c$.
- Se encontraron el mismo tipo de simetrías que para el caso de una densidad de estados electrónicos constante por intervalos.
- T_c^{opt} , ϵ_1^c y n_{opt}^c , como función de la energía de interacción electrónica y ρ_1/ρ_2 , se comportan de forma similar a como lo hacen para densidades de estados constantes por intervalos.
- $T_c^{max}(|U|)$ se comporta de forma similar a como lo hace para el caso de una densidad de estados constante por intervalos.
- En contraste con lo que ocurre en el caso de densidades de estados constantes por intervalos, para $|U|$ aproximadamente menor que $0.6D$ y $\rho_1/\rho_2 \geq 1$, n_{opt} se vuelve discontinua en el punto para el que la curva $n_{opt}(\epsilon_1)$ cambia de concavidad. Dicha discontinuidad tiene su origen en el hecho de que las curvas de T_c vs n presentan dos máximos locales.

De forma general, se puede afirmar que $T_c(n)$ y $\Delta_0(n)$ son fuertemente susceptibles a modificaciones en la densidad de estados del sistema para el caso en que $|U| \ll D$, mientras que para el caso contrario la densidad de estados resulta prácticamente irrelevante.

Asimismo, se encontró que en general, para pequeñas energías de interacción, el estado superconductor se ve favorecido para densidades de estados electrónicos altamente inhomogéneas en la que existe una gran cantidad de estados accesibles para energías cercanas a los límites de banda, y este comportamiento se ve maximizado en el límite cuando la densidad de estados se convierte en una delta de Dirac.

Bibliografía

- [1] K. Onnes. (1911). *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, Nos.* **119B**, 122.
- [2] Meissner and Ochsenfeld. (1933). *Eur. J. Phys.* **4**, 117.
- [3] F. London and H. London. (1935). *Proc. R. Soc. London Ser. A* **149**, 71.
- [4] S. Appleyard, J. Bristew, H. London and A. Misener. (1939). *Proc. Roy. Soc. A* **170**, 540.
- [5] V. Ginzburg and L. Landau. (1950). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064.
- [6] J. Bardeen., L. Cooper and J. Schrieffer. (1957). *Phys. Rev.* **106**, 162.
- [7] J. Bardeen., L. Cooper and J. Schrieffer. (1957). *Phys. Rev.* **108**, 1175.
- [8] L. Cooper. (1956). *Phys. Rev.* **104**, 1189.
- [9] J. Bednorz and K. Mueller. (1986). *Z. Phys.* **B64**, 189.
- [10] K. Wu et al. (1987). *Phys. Rev. Lett.* **58**, 908.
- [11] R. Micnas, J. Ranninger and S. Robaszkiewics. (1990). *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113.
- [12] A. Marouchkine. (2004). *Room-Temperature Superconductivity*. CISP.
- [13] W. Little. (1964). *Phys. Rev.* **134**, A1416.
- [14] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault and K. Bechgaard. (1980). *J. Phys. Lett.* **41**, L95.
- [15] J Williams et al. (1990). *Inorg. Chem.* **29**, 2555.
- [16] A. Ganin et al. (2008). *Nature Materials* **7**, 367.
- [17] M. Kocik et al. (2001). *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2416.
- [18] Z. Tang et al. (2001). *Science* **292**, 2462.
- [19] R. Cava et al. (1994). *Nature* **367**, 146.
- [20] N. Mathur, et al. (1998). *Nature* **394**, 39.
- [21] F. Steglich, et al. (1979). *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892.
- [22] K. Takada et al. (2003). *Nature* **422**, 53.

- [23] Z. Ren et al. (2008). *Europhys. Lett.* **83**, 17002.
- [24] X. Chen et al. (2008). *Nature* **453**, 761.
- [25] K. Sasmal et al. (2008). *Phys. Rev. Lett.* **101**, 107007.
- [26] Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda, T. Yamaguchi and Y. Takano. (2008). *Appl. Phys. Lett.* **93**, 152505.
- [27] M. Tinkham. (1996). *Introduction to Superconductivity*. McGraw-Hill.
- [28] H. Ibach and H. Lüth. (1991). *Solid-State Physics An introduction to Theory and Experiment*. Springer-Verlag.
- [29] S. Lundqvist. (1994). *Nobel Lectures. Physics. 1971-1980*. World Scientific Publishing.
- [30] J. Annett. (2003). *Superconductivity, Superfluids and Condensates*. Oxford University Press.
- [31] R. Pathria. (1972). *Statistical Mechanics*. Pergamon Press.
- [32] J. Patterson. (2007). *Solid-State Physics. Introduction to the Theory*. Springer-Verlag.
- [33] J. Hubbard. (1963). *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238.
- [34] F. Essler. (2005). *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press.
- [35] L. Pérez. (2002). *Superconductividad con simetría d en el modelo de Hubbard*. Tesis de doctorado, UNAM.
- [36] E. Dagotto. (1994). *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763.
- [37] C. Kittel. (2005). *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley and Sons.