



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

“TERMODINÁMICA DE UN GAS DE  
FERMIONES CON INTERACCIÓN EN EL  
RÉGIMEN DE BAJAS TEMPERATURAS,  
CRUCE BEC-BCS”

T E S I S

que para obtener el grado de:

**MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)**

presenta:

**ELEAZAR NERI MEDINA**

DIRECTOR DE TESIS: DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ

COMITE TUTORAL: DR. JOSÉ IGNACIO JIMÉNEZ MIER Y TERÁN

DR. VÍCTOR MANUEL ROMERO ROCHÍN



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

México, D.F.

2011



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.

"... Así, por ejemplo, todos los seres que piensan son diferentes, y sin embargo, todos se parecen en el don de pensar y desear. La materia es la misma en todas partes, pero en cada mundo manifiesta propiedades distintas.  
¿Cuántas propiedades tiene su materia?"

Micromegas, Voltaire

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>7</b>
<b>Abstract</b>	<b>9</b>
<b>Introducción.</b>	<b>11</b>
<b>I. Fundamentos Teóricos</b>	<b>17</b>
<b>1. Sistema de fermiones</b>	<b>19</b>
1.1. Hamiltoniano . . . . .	20
<b>2. Interacción a bajas energías</b>	<b>25</b>
2.1. Problema de la dispersión . . . . .	26
2.2. Amplitud de dispersión, desarrollo en ondas parciales. . . . .	28
2.3. Longitud de dispersión. . . . .	31
2.4. Amplitud de dispersión, desarrollo en serie de Born. . . . .	35
<b>3. Formalismo BCS</b>	<b>41</b>
3.1. Pares de Cooper. . . . .	42
3.2. Función de estado BCS . . . . .	46
3.3. Sistema a $T = 0$ . . . . .	47
3.4. Inclusión de la temperatura. . . . .	50
<b>II. Resultados</b>	<b>55</b>
<b>4. Termodinámica del gas de fermiones.</b>	<b>57</b>
4.1. Gran potencial del sistema de fermiones . . . . .	58
4.2. Relaciones termodinámicas . . . . .	60
4.3. Variable de contacto $\Sigma$ . . . . .	63
4.4. Régimen superfluido. . . . .	65
4.5. Cruce BEC-BCS, $T = 0$ . . . . .	67

4.6. Cruce BEC-BCS, temperatura finita. . . . .	70
<b>5. Conclusiones.</b>	<b>75</b>
<b>Apéndices</b>	<b>79</b>
A. Transformación de Bogoliubov.	81
B. Código del programa.	85
<b>Bibliografía</b>	<b>89</b>

---

## RESUMEN

---

Este trabajo ha sido motivado por la intensa investigación que se ha venido realizando en el área de los gases atómicos ultrafríos. En específico, en el ámbito experimental uno de los resultados más importantes ha sido el de generar un Condensado de Bose-Einstein (BEC) molecular, a partir de un gas de fermiones en dos estados de espín diferente. Esto ha sido posible al aplicar un campo magnético externo, que modifica las propiedades de interacción entre los átomos del gas a través de su longitud de dispersión.

El objetivo de este trabajo consiste en estudiar las propiedades termodinámicas de un gas de fermiones con interacción en dos estados de espín diferentes, en el régimen de bajas temperaturas, incluyendo a la longitud de dispersión como una variable que contribuye al estado termodinámico del sistema. La longitud de dispersión  $a$  es un parámetro que caracteriza las propiedades de interacción entre pares de partículas en el régimen de bajas energías. En un gas de fermiones con interacción atractiva, se pueden producir estados ligados entre fermiones en estados opuestos. Sin embargo, dependiendo del signo de  $a$ , el estado del par presenta propiedades completamente diferentes: cuando  $a < 0$ , los fermiones forman pares de Cooper con una energía de “enlace” que decae exponencialmente con la longitud de dispersión  $a$ ; en el caso contrario:  $a > 0$ , cada par de fermiones forma una molécula con espín entero y por lo tanto con propiedades de bosón, en este caso la energía de enlace varía con la raíz cuadrada de  $a$  y por lo tanto es mucho mayor a la de los pares de Cooper. Este esquema conocido como: “*cruce BEC-BCS*”, consiste en un cambio de régimen en un gas de Fermi. Pasando de un estado tipo BCS (Bardeen Cooper Schrieffer) donde los fermiones forman pares de Cooper ( $a < 0$ ); a un estado BEC (Condensado de Bose-Einstein) donde los fermiones forman moléculas bosónicas compuestas por un par de fermiones en estados opuestos ( $a > 0$ ). Para determinar las propiedades termodinámicas se emplea la teoría BCS y el procedimiento de renormalización propuesto por A. Leggett para obtener la expresión del gran potencial en el ensamble gran canónico, identificando a la longitud de dispersión como una nueva variable. Este esquema permite analizar completamente la termodinámica y conduce al reconocimiento de la variable conjugada a la longitud de dispersión: *el contacto*. Es importante mencionar que esta variable ha sido identificada recientemente como resultado de usar un potencial de contacto en la interacción

---

## ABSTRACT

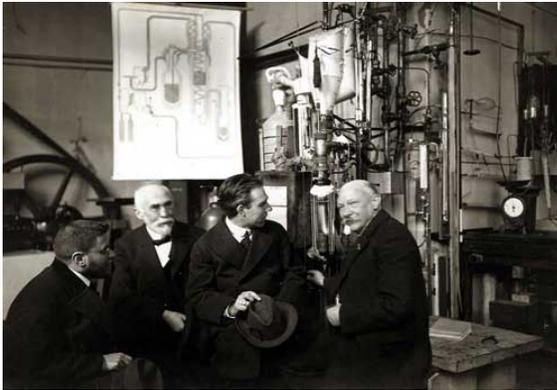
---

This work has been motivated by the intense research in ultracold atomic gases. Specifically, in experimental matter, one of the most important results has been the realization of a molecular Bose-Einstein (BEC) state from a Fermi gas composed of atoms in two different spin states. The essential mechanism to produce this transformation is the application of an external magnetic field, which modifies the interaction properties between the Fermi atoms through the scattering length.

The goal of this work is to study the thermodynamic properties of an interacting Fermi gas composed of atoms in two different spin states in the regime of low temperatures, including the scattering length as a variable that determines the thermodynamic state of the system. The scattering length  $a$  is the parameter that characterizes the interaction properties between pairs of particles in the low energy regime. In a gas of fermions with attractive interaction, pairs of fermions in opposite states can form a bound state. However, depending on the sign of  $a$ , the pair state has completely different properties: when  $a < 0$ , the fermions form Cooper pairs with a “binding energy” that decays exponentially with the scattering length, in the opposite case when  $a > 0$ , the pair of fermions compose a molecule with integer spin and thus having boson properties, in this case the binding energy varies with the square root of  $a$  and is much greater than that of the Cooper pairs. This scheme, known as “*BEC-BCS crossover*”, is a change of regime in a Fermi gas. From a BCS state (Bardeen Cooper Schrieffer) where the fermions form Cooper pairs ( $a < 0$ ), to a BEC state (Bose-Einstein condensate) where the fermions compose bosonic molecules of a pair of fermions with opposite state ( $a > 0$ ). To determine the thermodynamic properties we use the BCS theory and the renormalization procedure proposed by A. Leggett to obtain an expression for the grand potential in the grand canonical ensemble, where the scattering length  $a$  is identified as a new state variable. This scheme will allow us to analyze the whole thermodynamics but it also leads us to recognize the role of the thermodynamic conjugate variable to the scattering length: *the contact*. It is important to mention that such variable has been recently identified as a result of the use of contact interaction potentials.

# Introducción.

EL campo de la física de bajas temperaturas tiene ya una larga historia, y comienza formalmente con los trabajos de H. Kamerlingh Onnes en busca de licuar el Helio tratando de corroborar algunos de los resultados obtenidos por su paisano Van der Waals. En el año 1911, Kamerlingh descubre el fenómeno de la superconductividad al hacer mediciones de la resistividad en el mercurio y algunos años después (1937) el físico ruso Piotr Kapitsa descubre el fenómeno de la superfluidez en el Helio al bajar la temperatura por debajo de su punto de ebullición. Ambos fenómenos representan el paradigma de los sistemas cuánticos compuestos por un número macroscópico de partículas en el régimen de bajas temperaturas. La descripción teórica de estos fenómenos ha sido motivo de grandes esfuerzos, y ante el continuo descubrimiento de nuevas propiedades muchas preguntas quedan por resolver.



Kamerlingh Onnes en su laboratorio, junto con Ehrenfest, Lorentz y Bohr.

La **superconductividad** fue observada por primera vez en mercurio cuando Kamerlingh Onnes detectó que la resistencia eléctrica de dicho material desaparecía bruscamente al enfriarse a 4 K (-269 °C), cuando lo que se esperaba era que disminuyera gradualmente hasta el cero absoluto. La superconductividad ocurre en una gran variedad de materiales incluyendo elementos simples como el estaño y el aluminio, así como diversas aleaciones metálicas y algunos semiconductores fuertemente dopados. La superconductividad no ocurre en metales nobles como el oro y la plata, ni en la mayoría de los metales ferromagnéticos. Apesar de que la propiedad más sobresaliente de los supercon-

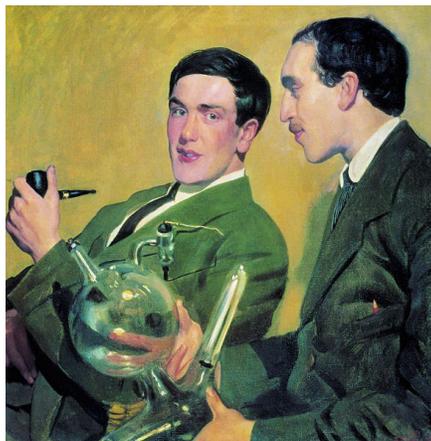
ductores es la ausencia de resistencia, lo cierto es que no podemos decir que se trate de un material de conductividad infinita, ya que este tipo de material por sí sólo no tiene sentido termodinámico. El campo magnético distingue dos tipos de superconductores: los de tipo I, que no permiten en absoluto que penetre un campo magnético externo, y los de tipo II, que son superconductores imperfectos, en el sentido en que el campo realmente penetra a través de pequeñas canalizaciones denominadas vórtices de Abrikosov, o fluxones. Estos dos tipos de superconductores son de hecho dos fases diferentes que fueron predichas por Landau y Abrikósov. Al fenómeno que hace que no permita que penetre el campo se le conoce como *efecto Meissner*. Cuando a un superconductor de

tipo II se le aplica un campo magnético externo débil lo repele perfectamente. Si dicho campo aumenta, el sistema se vuelve inestable y prefiere introducir vórtices para disminuir su energía. Estos van aumentando en número colocándose en redes de vórtices que pueden ser observados mediante técnicas adecuadas. Cuando el campo es suficientemente alto, el número de defectos es tan alto que el material deja de ser superconductor. Este es el campo crítico que hace que un material deje de ser superconductor y que depende de la temperatura.

Por otra parte un **superfluido** es un estado de la materia caracterizado por la ausencia total de viscosidad (lo cual lo diferencia de una sustancia muy “fluida” que tendría una viscosidad cercana a cero, pero no exactamente igual a cero), de manera que, en un circuito cerrado, fluiría interminablemente sin fricción. A excepción del Helio, el resto de los gases nobles a muy bajas temperaturas tiende a solidificarse logrando un mayor orden que en la fase líquida al cristalizar en determinada estructura. El He es el único elemento químico que no solidifica aun a temperaturas cercanas al cero absoluto y a presión atmosférica. En particular, el isótopo del He, el  $^3\text{He}$  también sufre una transición al estado superfluido, pero a temperatura de 4.2 K y con características de transición más similares a las que se observan para los superconductores, por tratarse de un sistema fermiónico. El *modelo de dos fluidos* propuesto por Landau para describir el estado superfluido, considera que en este hay de dos fluidos con propiedades diferentes; por ejemplo, una de las componentes se mueve sin viscosidad, mientras que la otra es un líquido viscoso ordinario. Landau llamó a la primer componente *superfluida* y a la segunda *normal*. Al fluir, solamente la componente normal transporta calor, puede decirse que esta componente es el calor mismo y que se ha separado de la masa del líquido y que se mueve respecto a la componente superfluida. Desde luego, este mecanismo de conducción de calor difiere completamente de nuestra idea usual de este proceso, que está asociada al movimiento térmico desordenado de las moléculas de un sistema. Otra característica del estado superfluido es la capacidad de presentar vórtices cuando es sometido a un movimiento de rotación. Dicha propiedad fue explicada en términos de la ecuación de Gross-Pitaevskii, que contempla la interacción entre pares de partículas a bajas energías a través de un potencial de contacto (delta de Dirac).

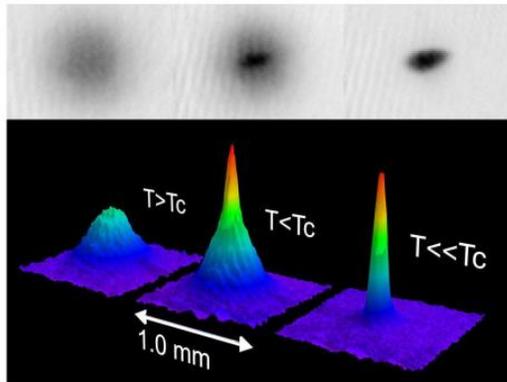
Más recientemente, a través de los trabajos experimentales con gases atómicos neutros ha sido posible obtener temperaturas por debajo de microkelvins. Esto se ha sido posible gracias a los espectaculares avances en las técnicas de confinamiento y enfriamiento de gases, que emplean campos magnéticos y radiación láser. En este régimen de temperaturas el comportamiento cuántico de la materia pone de manifiesto la naturaleza bosónica y fermiónica de un conjunto macroscópico de átomos a través de la fase de condensado de Bose-Einstein y de gas degenerado de Fermi.

La **condensación de Bose-Einstein (BEC)**, que se refiere a la ocupación macroscópica del estado cuántico de menor energía, se logró conseguir en el año 1995 por dos grupos diferentes: uno de ellos empleando un gas con átomos de sodio ( $^{27}\text{Na}$ ) a la temperatura de  $\sim 2 \mu\text{K}$  [Davis et al., 1995]; y el otro con átomos de rubidio ( $^{87}\text{Rb}$ ) a la temperatura de  $\sim 200 \text{nK}$  [Anderson et al., 1995]. Mientras que la obtención de un **gas degenerado de Fermi**, que hace evidente el principio de exclusión

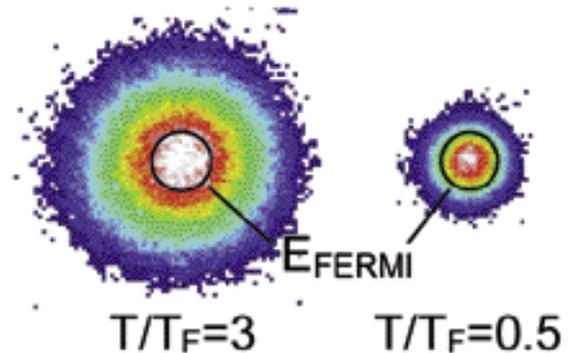


Pyotr Leonídovich Kapitsa (izquierda) junto con Nikolái Semiónov.

de Pauli en un sistema macroscópico, se consiguió en el año 1999 con un gas de átomos de potasio  $^{40}\text{K}$  [DeMarco and Jin, 1999]. Dichos logros motivaron por un lado un exhaustivo análisis teórico de estos sistemas a fin de obtener su descripción, pero también dieron lugar a la posibilidad de manipular estos sistemas a fin de conseguir nuevos estados de la materia, exhibiendo en su esplendor la naturaleza cuántica de la materia.



(a) La imagen muestra la nube del gas, así como su distribución espacial; a tres diferentes temperaturas,  $T_C$  es la temperatura crítica del BEC [Davis et al., 1995]

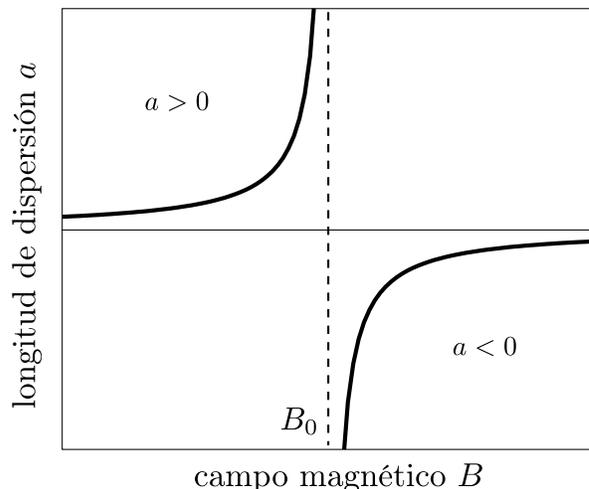


(b) Evidencia del estado degenerado en un gas de Fermi [DeMarco and Jin, 1999].

Observación de la fase de Condensado de Bose-Einstein y gas degenerado de Fermi.

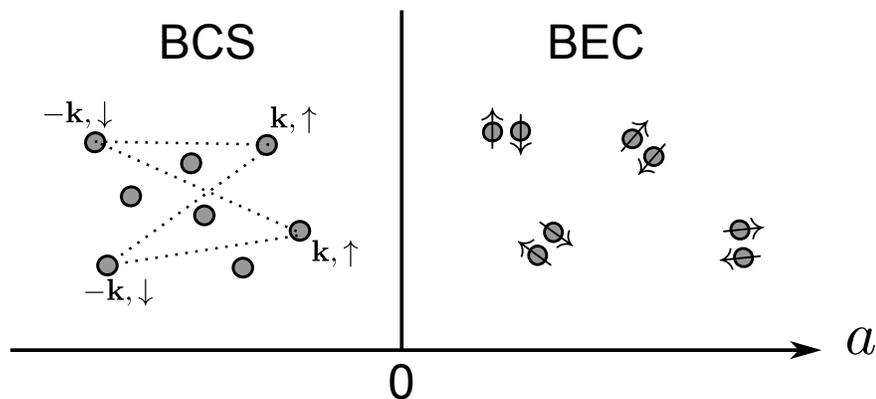
Algunas de las propiedades de esta diversidad de fenómenos que se presentan en los sistemas a muy bajas temperaturas, se ha logrado unificar. En el año 2003 se consiguió generar un condensado de Bose-Einstein a partir de un gas de fermiones en dos estados de espín diferente [Greiner et al., 2003] [Zwierlein et al., 2003a]. Esto fue posible al modificar la interacción -a través de la longitud de dispersión- entre los fermiones del gas aplicando un campo magnético externo. La longitud de dispersión  $a$  es un parámetro que caracteriza la interacción entre pares de partículas en el régimen de bajas energías, y se puede variar aplicando un campo magnético. Esto es posible, debido a la cercanía entre la energía del estado donde un par de partículas son libres y el estado donde el par está ligado; adicionalmente, la propiedad del espín en los fermiones permite que la diferencia de energía entre ambos estados se puede modificar -por *efecto Zeemann*- al aplicar un campo magnético, entonces al disminuir esta diferencia de energía se produce un fuerte acoplamiento entre ambos estados posibles. El efecto resultante es que la longitud de dispersión  $a$ , de los fermiones varía con el campo magnético aplicado y para cierto valor del campo  $B_0$ , esta diverge y cambia de signo (ver figura siguiente). Esta propiedad conocida como *resonancia de Feshbach*, es la que ha permitido modificar y cambiar el signo en la longitud de dispersión en los átomos de un gas de Fermi a muy bajas temperaturas.

En un gas de fermiones con dos estados de espín diferentes y que interactúan atractivamente, los fermiones pueden formar por pares un estado ligado. En este caso, la longitud de dispersión puede



Resonancia de Feshbach.

tomar tanto valores positivos como negativos, y su signo determina de manera importante las propiedades de los fermiones del gas. Cuando  $a$  es negativa, los fermiones forman *pare de Cooper*; mientras que cuando toma valores positivos se produce un estado ligado y un par de fermiones conforma una *molécula bosónica*, debido a que esta compuesta por un par de fermiones. Ambos estados difieren notablemente; por un lado el “tamaño” de los pares de Cooper es mucho mayor, no solo al de una molécula típica, sino a la distancia promedio entre las partículas en un gas. Además, la energía de un par de Cooper es mucho menor a la energía de enlace de una molécula. Sin embargo, una de las diferencia más relevantes es que los pares de Cooper tiene “carácter” fermiónico, mientras que las moléculas son bosones, en este sentido el signo de la longitud de dispersión contribuye de manera especial a las propiedades termodinámicas del gas. Cuando  $a > 0$ , corresponde a un gas de bosones moleculares en la fase de Condensado de Bose-Einstein (**BEC**); en el caso contrario, cuando  $a < 0$  se trata de un gas de Fermi formado por **pares de Cooper**, en un gas de electrones este estado corresponde al superconductor antes descrito y de manera general para un gas de fermiones neutros se le conoce como **BCS** (Bardeen Cooper Schrieffer). De esta manera, modificando el signo de la longitud de dispersión es posible modificar el estado o régimen del gas de fermiones, de un estado “fermiónico” a uno “bosónico”; a este esquema se le conoce como **cruce BEC-BCS**.



Esquema del cruce BEC-BCS.

Este proyecto de investigación esta motivado fundamentalmente en este esquema y los resultados experimentales descritos más arriba, donde al modificar la longitud de dispersión se consiguen ambos regímenes en el gas de fermiones: BEC-BCS. Esto sugiere, con toda propiedad el considerar a la longitud de dispersión como una variable termodinámica que contribuye de manera importante al estado del gas y es lo que se plantea este trabajo.

Así, el sistema que se plantea analizar este trabajo consiste en un gas de fermiones, en dos estados diferentes de espín, que interactúan atractivamente en el régimen de bajas temperaturas. La descripción del gas se aborda en el ensamble gran canónico, tomando como fundamento el formalismo de la teoría BCS -desarrollada para la descripción de la superconductividad [Bardeen et al., 1957]- y el trabajo de A. Leggett [Leggett, 1980] que constituye uno de los primeros trabajos en abordar el cruce BEC-BCS a temperatura cero. El propósito de este trabajo consiste entonces, por un lado en incluir la longitud de dispersión  $a$  en la descripción termodinámica del gas, y por otro en incorporar los efectos de la temperatura. Para ello es necesario comprender y hacer una deducción teórica de las ecuaciones que describen el sistema. En particular, obtener el potencial termodinámico  $\Omega$  en sus variables “adecuadas”:  $\Omega(T, V, \mu, a)$ , a partir del cual es posible describir la termodinámica del sistema. Aquí es necesario mencionar, que además del gran potencial  $\Omega$  se debe incluir la ecuación del gap  $\Delta$  -resultado del formalismo BCS- y que determina la relación  $\Delta = \Delta(T, V, \mu, a)$ ; juntos: el gran potencial y la ecuación del gap determinan la descripción completa del sistema.

El contenido de este trabajo se divide en dos partes principales. La primer parte contiene los fundamentos teóricos necesarios para abordar el gas de fermiones con interacción: en el primer capítulo se plantea más detalladamente las propiedades del sistema y se establece su Hamiltoniano. Aquí, el principal resultado consiste en que la parte de interacción en el Hamiltoniano contiene un factor que depende de la transformada del potencial de interacción; enseguida, en el capítulo 2 se hace una descripción teórica del problema cuántico de la dispersión entre pares de partículas, se demuestra que en el régimen de bajas energías la longitud de dispersión  $a$  caracteriza la dispersión y se establecen sus propiedades, además se obtiene una expresión que relaciona este parámetro con la transformada del potencial, de esta manera se logra introducir la longitud de dispersión en el Hamiltoniano. Finalmente en el capítulo 3 se desarrolla el formalismo BCS para abordar este Hamiltoniano, se encuentra la ecuación del gap y la expresión general del gran potencial como función de las variables del sistema, incluyendo la longitud de dispersión.

En la segunda parte del trabajo se muestran los resultados obtenidos. En el capítulo 4 se hace un análisis termodinámico del gas, se introduce la variable conjugada a la longitud de dispersión: *variable de contacto* y se establecen sus propiedades, se describe también la transición de fase al estado superfluido que presenta el sistema y finalmente se aborda el esquema del cruce BEC-BCS a temperatura cero primero y después a temperatura finita. Finalmente en el último capítulo se plantean las conclusiones del trabajo (capítulo 5).

Parte I.

# Fundamentos Teóricos

# Sistema de fermiones

En este capítulo se establece el Hamiltoniano que describe al gas de fermiones con interacción y para ello es necesario especificar las propiedades que cumple este sistema. Se supone un gas homogéneo y diluido; lo primero significa que las partículas del gas se mueven libremente en un volumen de confinamiento  $V$ , mientras que lo segundo permite considerando únicamente colisiones entre pares de partículas. Es importante decir que el gas a estudiar se compone de fermiones en dos estados diferentes de espín  $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$  en la misma proporción. Es decir, si  $N$  es el número total de fermiones del gas, entonces hay  $N/2$  fermiones en cada estado de espín. Además, se supone que los fermiones no pueden cambiar su estado de espín, lo que simplifica las propiedades del sistema. En este caso, el potencial químico para los de fermiones en cada estado de espín son idénticos:  $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow}$ , y sin pérdida de generalidad se puede considerar únicamente el potencial químico de los  $N$  fermiones:  $\mu$ , de tal forma que el potencial químico para los fermiones en cada estado esta dado por:  $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \mu/2$ .

Una de las propiedades más importantes del gas consiste en considerar que se encuentra en un régimen de muy bajas temperaturas, esto corresponde a suponer que la energía de los fermiones es muy baja:  $\mathbf{k} \approx 0$ , de tal manera que se puede aproximar la transformada de Fourier del potencial de interacción entre fermiones por:  $\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx \tilde{U}(0)$ . Esta aproximación tiene como consecuencia que la principal contribución a la energía de interacción se deba a la colisión entre partículas con estados opuestos (momento y espín). Esta es una propiedad importante ya que en este mismo régimen de bajas energías la dispersión entre pares de partículas esta caracterizada por un solo parámetro:  $a$ , conocido como *longitud de dispersión*. Si la interacción entre fermiones es atractiva entonces pueden formar estados ligados por pares. Dependiendo del signo de la longitud de dispersión, las propiedades de un par de fermiones cambian completamente: por un lado, cuando  $a < 0$  los pares de fermiones forman un *par de Cooper*; mientras que cuando  $a > 0$  se produce un estado ligado y los fermiones conforman una *molécula bosónica*. Ambos conceptos se discuten más a fondo en los siguientes dos capítulos. Lo importante por ahora consiste en establecer que ambos regímenes son determinados por el signo de la longitud de dispersión y aquí, otro elemento importante que debe ser incluido en el Hamiltoniano del sistema: la longitud de dispersión. Esto se logra a través de la misma aproximación:  $\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx \tilde{U}(0)$ , ya que como se muestra en el siguiente capítulo existe una relación entre este factor y la longitud de dispersión.

## 1.1. Hamiltoniano

El Hamiltoniano más general de un sistema de  $N$  partículas que interactúan por pares, a través de un potencial que solo depende de la distancia entre partículas:  $U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ , esta dado por:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + \sum_{i=1}^N U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i), \quad (1.1.1)$$

donde el último término representa el potencial de confinamiento. En un gas o fluido en general, el término de energía cinética y de confinamiento son indispensables y marcan la diferencia con un sólido donde el término cinético es despreciable y el término de confinamiento se puede omitir.

En general las partículas que conforman un gas no se mueven del todo libremente debido al potencial de confinamiento; sin embargo tampoco se encuentran estáticas, sino que se mueven y distribuyen por toda la región que les permite este potencial. Esto ha cobrado relevancia en los últimos años debido a los trabajos experimentales con gases atómicos ultrafríos, donde se confinan a los átomos mediante campos electromagnéticos, de tal manera actúa sobre ellos un potencial externo tipo armónico:  $U(r) = m\omega^2 r^2/2$  o lineal:  $U(r) = Ar$ . En este caso, las propiedades termodinámicas del gas son definidas en términos de variables análogas al volumen y la presión -que ya no son las variables “adecuadas” al sistema- [Sandoval-Figueroa and Romero-Rochín, 2008].

Sin embargo, en este trabajo solo consideraremos el caso más simple de un **gas homogéneo** donde las partículas están confinadas únicamente por un volumen  $V$ , en cuyo caso el potencial externo se escribe como:

$$U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{r} \in V, \\ \infty & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (1.1.2)$$

Para abordar el Hamiltoniano del sistema es conveniente trabajar en el formalismo de segunda cuantización -en el espacio de Fock-, donde se definen los operadores de creación y aniquilación:  $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$  y  $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ , en el estado  $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ ; donde  $\mathbf{k}$  representa el momento de la partícula y  $\sigma$  su estado de espín, que puede tomar dos valores:  $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ . Para fermiones, estos operadores satisfacen las siguientes reglas conmutación:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \right\} &\equiv \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \\ \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'} \right\} &= \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right\} = 0. \end{aligned} \quad (1.1.3)$$

En términos de estos operadores, y tomando en cuenta que el potencial de interacción  $U(r)$  no depende del estado de espín de las partículas, entonces el Hamiltoniano (1.1.1) toma la siguiente expresión<sup>1</sup>:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4; \sigma, \sigma'} U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_1, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_3, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}_4, \sigma}, \quad (1.1.4)$$

donde  $\epsilon_{\mathbf{k},\sigma}$  representa la energía de partícula libre con momento  $\mathbf{k}$ , y es independiente del estado de espín de los fermiones:

<sup>1</sup>El procedimiento para obtener el Hamiltoniano en segunda cuantización se puede consultar en textos avanzados de mecánica cuántica; o más específicamente en textos sobre teoría de muchos cuerpos o estado sólido, por ejemplo: [Fetter and Walecka, 1971][Taylor and Heinonen, 2002].

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}, \sigma | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \mathbf{k}, \sigma \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.1.5)$$

Si se define el operador de número:  $\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ , entonces el término de energía cinética se puede escribir de una forma más clara como la suma del número de partículas en cada estado:  $\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}$ , por su energía:

$$\sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (1.1.6)$$

A partir de los operadores  $\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}$  también se puede escribir el número total de partículas del gas de la siguiente manera:

$$\sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = N. \quad (1.1.7)$$

Por otro lado, para obtener el término de interacción del Hamiltoniano (1.1.4) se consideró que el potencial de interacción no depende del espín de las partículas, lo que permite obtener el siguiente resultado:

$$\langle \mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2 | U | \mathbf{k}_3 \sigma_3, \mathbf{k}_4 \sigma_4 \rangle = \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U | \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \rangle, \quad (1.1.8)$$

y por lo tanto la suma de (1.1.4) se restringe únicamente a los dos índices de espín:  $\sigma, \sigma'$ , donde se define:

$$U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} = \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U | \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \rangle. \quad (1.1.9)$$

Para calcular estos elementos de matriz tomemos los estados de partícula libre con momento  $\mathbf{k}$ :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}, \quad (1.1.10)$$

entonces los elementos (1.1.9) vienen dados por:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U | \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \rangle &\equiv \frac{1}{V^2} \int \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \phi_{\mathbf{k}_1}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{r}_2) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \phi_{\mathbf{k}_3}(\mathbf{r}_2) \phi_{\mathbf{k}_4}(\mathbf{r}_1), \\ &= \frac{1}{V^2} \int \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}_1} U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|); \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

la parte del integrando que contiene exponenciales se puede arreglar de la siguiente manera:

$$e^{\frac{1}{2}i[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) + (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)] \cdot [\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2]} e^{\frac{1}{2}i[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) - (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)] \cdot [\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2]}. \quad (1.1.12)$$

Para realizar el cálculo, se introduce el cambio de coordenadas a las de centro de masa, que para un sistema de dos partículas con igual masa se define como:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

Así, la integral (1.1.11) se puede separar en dos: una correspondiente al centro de masa  $\mathbf{R}$ , y otra a la coordenada relativa  $\mathbf{r}$ :

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int e^{i[(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_1)+(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_2)]\cdot\mathbf{R}} d^3\mathbf{R} \int e^{\frac{1}{2}i[(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_1)-(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_2)]\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3\mathbf{r}, \quad (1.1.14)$$

la integral en la coordenada de centro de masa se anula excepto que  $(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) + (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) = 0$ , es decir:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4, \quad (1.1.15)$$

que representa la conservación del momento en el proceso de colisión entre dos partículas con momentos:  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  antes de la colisión y  $\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$  después de la colisión.

Así, la primer integral de (1.1.14) corresponde al volumen  $V$  y el resultado final para los elementos (1.1.9) es el siguiente:

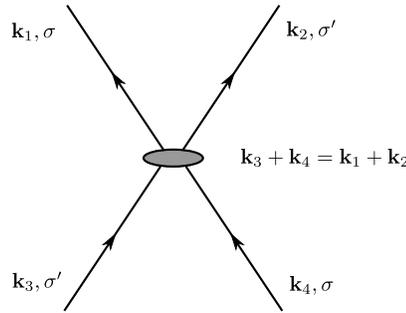
$$\begin{aligned} U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} &= \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \frac{1}{V} \int e^{-i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3\mathbf{r}, \\ &= \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \frac{1}{V} \tilde{U}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2). \end{aligned} \quad (1.1.16)$$

Donde se ha identificado la transformada de Fourier del potencial de interacción:

$$\tilde{U}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) = \int e^{-i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3\mathbf{r}. \quad (1.1.17)$$

Con este resultado, el Hamiltoniano (1.1.4) toma la forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4;\sigma,\sigma'} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \tilde{U}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) \hat{a}_{\mathbf{k}_1,\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_3,\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}_4,\sigma}, \quad (1.1.18)$$



**Figura 1.1.:** Término de interacción, colisión entre dos partículas. Estados iniciales:  $|\mathbf{k}_4, \sigma\rangle$ ,  $|\mathbf{k}_3, \sigma'\rangle$ , y finales:  $|\mathbf{k}_2, \sigma'\rangle$ ,  $|\mathbf{k}_1, \sigma\rangle$ .

El término de interacción del Hamiltoniano (1.1.18) se puede entender como la colisión entre dos partículas cuyos estados iniciales son:  $|\mathbf{k}_4, \sigma\rangle$  y  $|\mathbf{k}_3, \sigma'\rangle$ , y después de la colisión tienen estados:  $|\mathbf{k}_2, \sigma'\rangle$  y  $|\mathbf{k}_1, \sigma\rangle$ . En esta colisión se conserva el momento debido a la ecuación (1.1.15), pero también el espín total de las partículas por la ecuación (1.1.8). Aquí es importante decir que el Hamiltoniano (1.1.18) es la expresión general y exacta para un sistema de fermiones que interactúan por pares, con la única aproximación de que el potencial de interacción  $U(r)$  no tiene dependencia con el espín de las partículas. Debido a la conservación del momento, ecuación (1.1.15), el término de interacción del Hamiltoniano se puede escribir como la suma de los siguientes tres términos:

1. *Término de Hartree*, cuando:  $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4 \equiv \mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 \equiv \mathbf{k}'$ ;

$$\begin{aligned} \frac{1}{2V} \tilde{U}(0) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} &= \frac{1}{2V} \tilde{U}(0) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \\ &= \frac{1}{2V} \tilde{U}(0) \left( \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \right)^2 \sim \frac{1}{2V} \tilde{U}(0) N^2, \end{aligned} \quad (1.1.19)$$

2. *Término de Fock*, cuando:  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4 \equiv \mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_3 \equiv \mathbf{k}'$ ;

$$\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (1.1.20)$$

3. *Término de pares*, cuando:  $\mathbf{k}_3 = -\mathbf{k}_4 \equiv \mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 \equiv \mathbf{k}'$ ;

$$\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma'} \hat{a}_{-\mathbf{k}, \sigma}. \quad (1.1.21)$$

El término de Hartree corresponde a una constante que para fines prácticos se puede ignorar; mientras que el término de Fock se puede demostrar que es despreciable respecto a los otros términos [Leggett, 2006, pp. 211]. Sin embargo, en el régimen de bajas temperaturas, la energía de las partículas que componen al gas es muy pequeña ( $\mathbf{k} \approx 0$ ), y por lo tanto es posible aproximar la transformada de Fourier del potencial por su valor en cero, es decir:

$$\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx \tilde{U}(0), \quad (\text{bajas energías : } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow 0); \quad (1.1.22)$$

en este caso se comprueba explícitamente que el término de Fock (1.1.20) se vuelve una constante, que excepto por un factor de cuatro debido a los dos posibles valores del espín, es idéntico al término de Hartree y por lo tanto también se puede ignorar.

La aproximación (1.1.22) es de gran relevancia ya que permite introducir la longitud de dispersión en la descripción del sistema de fermiones, y que constituye uno de los propósitos de este trabajo. La longitud de dispersión, como veremos en el siguiente capítulo, caracteriza la interacción entre dos partículas en el régimen de bajas energías. Si interactúan atractivamente entonces forman un estado ligado, dependiendo del signo de la longitud de dispersión este estado corresponde a un par de Cooper o a una molécula diatómica.

Es importante aclarar que la aproximación (1.1.22) conlleva a divergencias en algunos de los resultados posteriores<sup>2</sup>; sin embargo, es posible cancelarlas introduciendo otra divergencia a través de la longitud de dispersión (ver ecuación 2.4.28 en la página 39). Este proceso de *renormalización* ha sido introducido en los diferentes trabajos que abordan el problema del cruce BEC-BCS: [Leggett, 1980][Chen et al., 2005], y en este trabajo se procede de la misma manera.

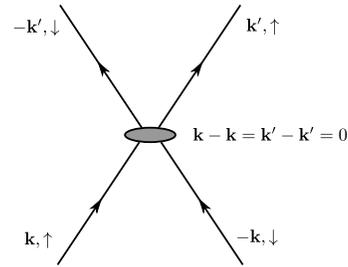
<sup>2</sup>En específico, la ecuación del gap -resultado de la teoría BCS- diverge.

En lo que respecta al término de pares -único al que se reduce el término de interacción-, empleando la misma aproximación (1.1.22), es posible simplificar su expresión ya que entonces  $\tilde{U}(0)$  sale de la suma y aquellos términos con espines iguales ( $\sigma = \sigma'$ ) se anulan debido a las reglas de conmutación de los operadores (1.1.3); mientras que los términos con espín opuesto ( $\sigma \neq \sigma'$ ) aparecen dos veces. Entonces el término de pares (1.1.21) se reduce a la siguiente expresión:

$$\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{-\mathbf{k}, \sigma} \longrightarrow \frac{1}{2V} \tilde{U}(0) 2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow} \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow}. \quad (1.1.23)$$

De esta manera el término de interacción del Hamiltoniano se reduce a considerar únicamente la colisión entre pares de fermiones con momento y espín opuestos. Esto permite simplificar la notación -misma que se empleara en lo que sigue del trabajo- y que corresponde a incluir el estado de espín en el momento de las partículas:

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &\equiv |\mathbf{k}, \uparrow\rangle, \\ -\mathbf{k} &\equiv |-\mathbf{k}, \downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (1.1.24)$$



Finalmente el Hamiltoniano del gas de fermiones queda de la siguiente manera:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}) + \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (1.1.25)$$

En el siguiente capítulo se aborda el problema de la dispersión entre pares de partículas, el principal resultado de este análisis establece que en el régimen de bajas energías ( $\mathbf{k} \approx 0$ ), la colisión entre partículas queda caracterizada por un solo parámetro: la longitud de dispersión. Además se obtiene una expresión que relaciona este parámetro con el factor  $\tilde{U}(0)$ , que aparece en el término de interacción del Hamiltoniano. De esta manera es posible introducir directamente la longitud de dispersión en el Hamiltoniano (1.1.25).

Por otro lado, en el capítulo 3 se presenta el formalismo BCS de la teoría de superconductividad, que representa un método directo para abordar el Hamiltoniano (1.1.25) e incluir los efectos de temperatura en la descripción del sistema.

## Interacción a bajas energías

Uno de los resultados más importantes de la teoría cuántica de la dispersión establece que cuando la colisión entre dos partículas se efectúa en el límite de bajas energías:  $\mathbf{k} \approx 0$ , las propiedades de la dispersión están caracterizadas por un solo parámetro  $a$  conocido como *longitud de dispersión*. Formalmente, este parámetro está determinado por el potencial de interacción entre las partículas  $U(r)$ , al resolver la ecuación de Schrödinger. En un sistema de fermiones que interactúan atractivamente, se forman estados ligados por pares de fermiones en estados opuestos; las propiedades físicas de estos estados dependen notablemente del signo de la longitud de dispersión. Más aún, representan dos conceptos totalmente diferentes: *pares de Cooper*, cuando la longitud de dispersión es negativa, y *molécula diatómica* cuando es positiva. El concepto de par de Cooper es el resultado del carácter fermiónico en un conjunto de partículas que interactúan atractivamente, y en el siguiente capítulo se analiza más a fondo. Por otro lado, una molécula diatómica representa la “*unión espacial*” de un par de partículas, debido a la atracción entre estas, y en este capítulo se describen las propiedades de este estado.

Uno de los logros experimentales con gases de Fermi ha sido la posibilidad de modificar la interacción efectiva entre pares de fermiones a través de campos magnéticos externos. Esto se explica debido a dos factores, por un lado a la propiedad del espín en las partículas; y por otro, a que existen dos estados diferentes de las partículas después de un proceso de colisión: uno que corresponde a las partículas libres dispersadas, y otro al estado ligado entre ellas. Al aplicar un campo magnético se produce un corrimiento en la energía, por efecto Zeeman, que permite variar la brecha de energía entre ambos estados. Esto genera un acoplamiento entre los dos estados que produce una longitud de dispersión efectiva en la dispersión que varía con el campo magnético y para cierto valor del campo magnético la longitud de dispersión diverge y cambia de signo. Esta propiedad -conocida como *resonancia de Feshbach*- es la que ha permitido generar ambos estados en un gas de fermiones: el de pares de Cooper (Estado BCS) y el de moléculas bosónicas (BEC), modificando simplemente la intensidad del campo magnético externo [Greiner et al., 2003][Zwierlein et al., 2003a].

Para incluir la longitud de dispersión en el Hamiltoniano del gas, al final de este capítulo se encuentra una expresión que relaciona el término  $\tilde{U}(0)$  con la longitud de dispersión  $a$ . Este término, como se mostró en el capítulo anterior, está incluido en la parte de interacción del Hamiltoniano. De esta manera, en el capítulo 4 se introduce de manera formal esta variable y se estudian sus propiedades termodinámicas.

## 2.1. Problema de la dispersión

Para plantear el problema de la colisión entre un par de partículas, consideremos la ecuación de Schrödinger estacionaria para un sistema de dos partículas de masas  $m_1$  y  $m_2$ , que interactúan a través de un potencial  $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ :

$$\left[ \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} - U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_T \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.1.1)$$

Donde  $E_T$  corresponde a la energía total de las dos partículas. Para resolver el problema conviene hacer una transformación a coordenadas de centro de masa y relativa, definidas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &\equiv \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, & \hat{\mathbf{P}} &\equiv \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2, & M &\equiv m_1 + m_2, \\ \mathbf{r} &\equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, & \hat{\mathbf{p}} &\equiv \frac{m_1 \hat{\mathbf{p}}_1 - m_2 \hat{\mathbf{p}}_2}{m_1 + m_2}, & m_r &\equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Donde  $m_r$  se refiere a la masa reducida del sistema; con esta transformación la ecuación de Schrödinger toma la siguiente forma:

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_r} + U(r) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_T \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.1.3)$$

que es posible resolver por separación de variables:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}), \quad (2.1.4)$$

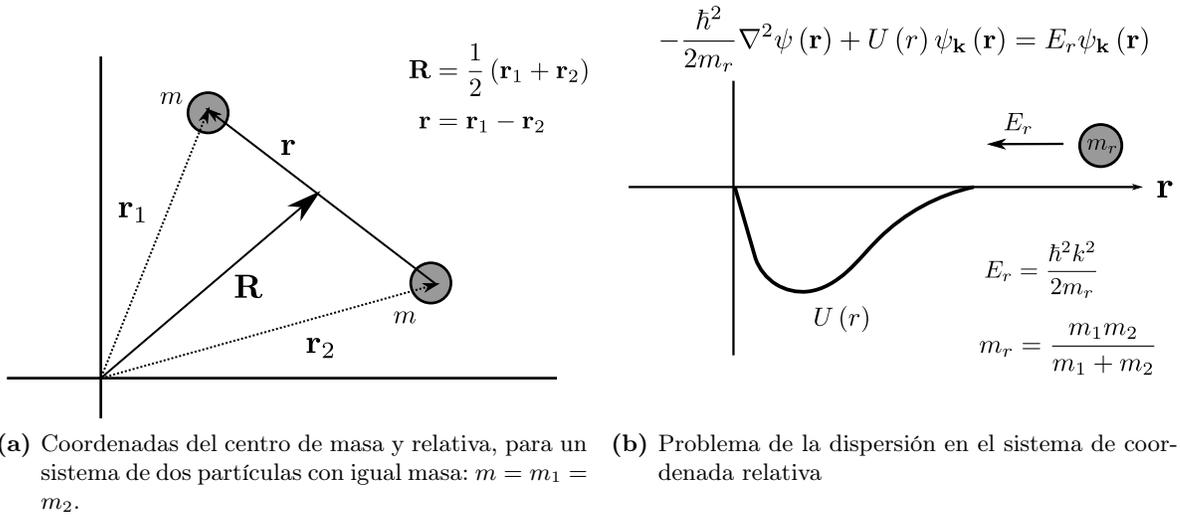
resultando en el siguiente par de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} \right) \Phi(\mathbf{R}) &= E_R \Phi(\mathbf{R}), \\ \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_r} + U(r) \right) \psi(\mathbf{r}) &= E_r \psi(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

la primera representa el estado del sistema en la coordenada de centro de masa ( $\mathbf{R}$ ); mientras que la segunda en la coordenada relativa ( $\mathbf{r}$ ). La energía total del par de partículas está dada por la siguiente relación:  $E_T = E_R + E_r$ .

En la representación de coordenadas el operador de momento en cada sistema está dado por:  $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla_R$  y  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_r$ . La parte que corresponde a la coordenada del centro de masa, queda resuelta directamente y está representado por el de una partícula libre -onda plana- de masa  $M$  y energía  $E_R$ . Entonces el problema general de la dispersión se reduce a la coordenada relativa  $\mathbf{r}$ ; que es equivalente al de una partícula de masa  $m_r$  que interactúa con el potencial  $U(\mathbf{r})$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + U(r) \psi(\mathbf{r}) = E_r \psi(\mathbf{r}). \quad (2.1.6)$$



Para el problema de la dispersión, se supone conocida la energía de la “partícula” (de masa  $m_r$ ):

$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}, \quad (2.1.7)$$

donde  $k = |\mathbf{k}|$  corresponde a la magnitud del vector de onda relativo. El subíndice  $\mathbf{k}$  en la función de onda:  $\psi_{\mathbf{k}}$ , etiqueta la función para este valor de la energía, que en una colisión elástica se mantiene constante antes y después de la dispersión.

El problema de la dispersión entonces se plantea en encontrar la función de onda  $\psi(\mathbf{r})$  que satisface la ecuación de Schrödinger (2.1.6), con la condición de frontera que describa apropiadamente la dispersión. Esta condición se establece imponiendo que la función de onda en el límite asintótico ( $r \gg 1$ ) tenga la siguiente forma:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad r \gg 1; \quad (2.1.8)$$

donde se ha tomado el eje  $z$  al de incidencia de la partícula; el primer término representa una onda plana de momento  $k$  -partícula incidente-, más una onda esférica saliente -partícula dispersada- de igual momento pero cuya amplitud varía en la dirección angular<sup>1</sup> con el factor  $f(\theta)$ . Este factor, que en general depende del momento  $\mathbf{k}$  de la partícula, se le conoce como **amplitud de dispersión** y sus unidades son de longitud.

La amplitud de dispersión  $f(\theta)$  queda determinada al resolver la ecuación de Schrödinger (2.1.6) para un potencial  $U(r)$  más con la condición de frontera (2.1.8). Sin embargo, como se verá más adelante, en el régimen de bajas energías  $f(\theta)$  es una constante  $a$ , conocida como **longitud de dispersión**. En el contexto de este trabajo este resultado es esencial, ya que entonces es posible caracterizar una colisión entre pares de partículas por un simple parámetro. La siguiente sección se concentran en demostrar este resultado y posteriormente se muestra un análisis que permite desarrollar la amplitud de dispersión como una serie en términos de la transformada de Fourier

<sup>1</sup>En general, la amplitud de dispersión depende del ángulo polar y azimutal:  $(\theta, \varphi)$ ; sin embargo para un potencial simétricamente esférico, cuyo caso es el potencial  $U(r)$ , está únicamente depende del ángulo  $\theta$ .

del potencial de interacción:  $\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ , lo que admite insertar la longitud de dispersión en el Hamiltoniano del sistema de fermiones (ver ecuación (1.1.25)).

## 2.2. Amplitud de dispersión, desarrollo en ondas parciales.

A continuación se presenta un método para resolver la ecuación (2.1.6) y cuya solución en el límite asintótico esta determinada por un conjunto de parámetros  $\delta_l$ , conocidos como *corrimientos de fase*, y que dependen del momento angular  $l$  de la partícula. La importancia de estos parámetros consiste en que la amplitud de dispersión se puede desarrollar como una suma de términos *-ondas parciales-*, cada uno de los cuales depende de un valor del momento angular  $l$  y por lo tanto de  $\delta_l$ . Cuando la energía de las partículas es muy pequeña ( $\mathbf{k} \ll 1$ ) -régimen de bajas energías- el término que más contribuye a la dispersión, como veremos más adelante, corresponde a  $l = 0$ . En este caso la amplitud de dispersión contiene un solo término. Esta aproximación se le conoce como de *“onda s”*, ya que en el proceso de dispersión solamente se considera el término  $l = 0$ .

La ecuación de Schrödinger (2.1.6) para un potencial que depende solamente de la coordenada  $r$ , se puede resolver por separación de variables [Merzbacher, 1998]:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (2.2.1)$$

donde la parte angular corresponde a los armónicos esféricos:  $Y_l^m(\theta, \varphi)$ , cuyas expresiones son bien conocidas y que son eigenfunciones del operador de momento angular  $\hat{\mathbf{L}}$  y de su proyección  $\hat{L}_z$ :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 Y_l^m &= l(l+1) Y_l^m, \\ \hat{L}_z Y_l^m &= m Y_l^m; \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

que vienen determinadas por los valores del momento angular  $l$  y de su proyección  $m$ .

Para la parte radial, que contiene la dependencia con el potencial  $U(r)$ , se tiene la siguiente ecuación diferencial:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_r r^2} + U(r) \right] R(r) = E_r R(r), \quad (2.2.3)$$

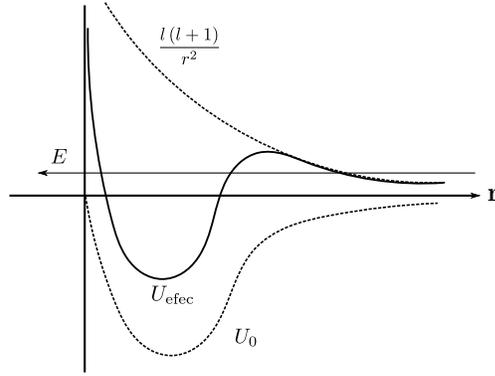
haciendo el cambio de variable:  $u_{l,k}(r) = R(r)r$  y dividiendo por las constantes adecuadas, toma la siguiente forma:

$$\left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \left( U_0(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] u_{l,k}(r) = k^2 u_{l,k}(r). \quad (2.2.4)$$

Donde por comodidad se ha definido:  $U_0(r) \equiv \frac{2m_r}{\hbar^2} U(r)$ . Las soluciones  $u_{l,k}$ , dependen de los parámetros  $k$  y  $l$  que están relacionados con la energía y el momento angular de la partícula. La ecuación (2.2.4) es equivalente a la de Schrödinger unidimensional para una partícula en el potencial efectivo:

$$U_{\text{efec}}(r) = U_0(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (2.2.5)$$

El término  $\frac{l(l+1)}{r^2}$  representa el potencial centrífugo, en la figura 2.1 se muestra cualitativamente la forma del potencial efectivo, debido a la contribución del potencial original  $U_0$  más el centrífugo. La acción del potencial centrífugo es presentar una barrera en la proximidad del alcance del potencial



**Figura 2.1.:** Potencial efectivo  $U_{\text{efec}}(r)$ , el potencial centrifugo:  $\frac{l(l+1)}{r^2}$ , produce una pequeña barrera.

$U_0$ , y cuando la energía de la partícula es pequeña  $k \sim 0$ , entonces la partícula se ve repelida por esta barrera y no interactúa prácticamente con el potencial original  $U_0$ .

Las condiciones de frontera para las soluciones  $u_{l,k}(r)$  son que se anulen en el origen:

$$u_{l,k}(r=0) = 0. \quad (2.2.6)$$

Para resolver la ecuación (2.2.4), supongamos un potencial  $U_0(r)$  de alcance finito  $d$ ; lo que significa que:  $U_0 \approx 0$  o disminuya más rápido que  $1/r$  cuando  $r > d$ . Entonces fuera del alcance del potencial:

$$\frac{d^2 u_{l,k}(r)}{dr^2} + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{l,k}(r) = 0, \quad r > d \quad (2.2.7)$$

cuya solución viene dada por [Roman, 1965, pp. 161][Landau and Lifshitz, 1977, pp. 107]:

$$u_{l,k}(r) = B_l r j_l(kr) + C_l r n_l(kr), \quad r > d; \quad (2.2.8)$$

donde  $j_l(kr)$  y  $n_l(kr)$  son las funciones esféricas de Bessel y Neumann respectivamente. Estas funciones tienen un comportamiento asintótico ( $kr \gg 1$ ) de la siguiente manera [ibid]:

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\approx \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \\ n_l(kr) &\approx -\frac{1}{kr} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \end{aligned} \quad kr \gg 1 \quad (2.2.9)$$

Sustituyendo estas aproximaciones en (2.2.8), se obtienen las soluciones de la ecuación (2.2.7) en la región asintótica:

$$u_{l,k}(r) \approx B_l \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{k} - C_l \frac{\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{k}, \quad kr \gg 1. \quad (2.2.10)$$

Así, la función radial  $R_{l,k}(r)$  en esta región, tiene la siguiente expresión:

$$R_{l,k}(r) \equiv \frac{u_{l,k}}{r} \approx B_l \frac{\text{sen}(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} - C_l \frac{\text{cos}(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} = \frac{\text{sen}(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}, \quad kr \gg 1. \quad (2.2.11)$$

donde se ha introducido el **corrimiento de fase**  $\delta_l$ , cuya relación con los coeficientes  $B_l$  y  $C_l$  es la siguiente:

$$\begin{aligned} B_l &= \cos \delta_l, \\ C_l &= -\text{sen} \delta_l, \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

con lo cual  $R_{l,k}(r)$  se escribe como:

$$R_{l,k}(r) \equiv \frac{u_{l,k}}{r} = j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \text{sen} \delta_l, \quad kr \gg 1. \quad (2.2.13)$$

Al conocer el corrimiento de fase  $\delta_l$  queda completamente determinada la solución  $R_{l,k}(r)$ . Un análisis de la ecuación original (2.2.4) y las soluciones  $j_l(kr)$  fuera del alcance del potencial, ecuación (2.2.9), conducen al siguiente resultado general [Roman, 1965, pp. 166]:

$$\text{sen} \delta_l = -k \int_0^{\infty} j_l(kr) U_0(r) u_{l,k}(r) r dr. \quad (2.2.14)$$

La relevancia de esta expresión consiste en mostrar la relación directa entre los corrimientos de fase  $\delta_l$  con el potencial de interacción  $U_0(r)$ ; además, permite establecer un criterio de validez en el régimen de bajas energías para los corrimientos de fase, como veremos más adelante. Sin embargo, esta ecuación es poco útil para calcular los corrimientos de fase, ya que por un lado  $u_{l,k}(r)$  depende explícitamente de  $\delta_l$ , ecuación (2.2.12), pero además está es válida solamente fuera del alcance del potencial  $r > d$ . Mientras que la integral abarca el intervalo completo:  $r \in [0, \infty]$ .

A continuación se obtiene una expresión general para la amplitud de dispersión en términos de los corrimientos de fase  $\delta_l$ . Para ello es necesario por un lado, desarrollar la función de onda  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ -solución general del problema de la dispersión, ecuación (2.1.6)- en términos de las soluciones radiales y angulares<sup>2</sup>,  $R_{l,k}(r) P_l(\cos \theta)$ :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_l a_l R_{l,k}(r) P_l(\cos \theta), \quad (2.2.15)$$

y por otro, usar la aproximación asintótica de las soluciones  $R_{l,k}(r)$  (ecuación (2.2.11) en forma compleja), para obtener la expresión asintótica de  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ :

$$\psi_{\mathbf{k}} \approx \sum_l a_l P_l(\cos \theta) R_{l,k}(r) = \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_l a_l (-i)^l e^{i\delta_l} P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_l a_l (i)^l e^{-i\delta_l} P_l(\cos \theta). \quad (2.2.16)$$

Comparando esta expresión con la solución asintótica de la dispersión, propuesta al inicio del capítulo:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r}, \quad (2.2.17)$$

<sup>2</sup>En el caso de un potencial central  $U(r)$  los armónicos esféricos  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  se reducen a los polinomios de Legendre  $P_l(\cos \theta)$ .

se encuentra la amplitud de dispersión  $f(\theta)$ . Como se puede notar de las expresiones anteriores, la comparación no es del todo directa por lo que es necesario sustituir el siguiente desarrollo de una onda plana (formula de Bauer [Roman, 1965, pp. 162]):

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_l^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (2.2.18)$$

en la ecuación (2.2.17), para obtener:

$$\psi_{\mathbf{k}} \approx e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_l (2l+1) (-1)^l P_l(\cos \theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (2.2.19)$$

Ahora si, comparando ambas expresiones: (2.2.16) y (2.2.19), se obtienen los coeficientes del desarrollo (2.2.15):  $a_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$ , y la amplitud de dispersión:

$$f(\theta) = \sum_l (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \theta), \quad (2.2.20)$$

que se puede expresar en forma más conveniente:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \text{sen } \delta_l P_l(\cos \theta). \quad (2.2.21)$$

Esta expresión relaciona la amplitud de dispersión con los corrimientos de fase, mismos que están determinados por las propiedades del potencial de interacción, ecuación (2.2.14). La ventaja de este método, como veremos a continuación, es que en el límite de bajas energías solamente el término con  $l=0$  contribuye de manera significativa a la amplitud de dispersión  $f(\theta)$ .

## 2.3. Longitud de dispersión.

Para encontrar una expresión de la amplitud de dispersión en el régimen de bajas energías, es necesario establecer el siguiente resultado [Roman, 1965, pp. 166]:

$$u_{l,k}(r) = r \cos \delta_l j_l(kr) + kr n_l(kr) \int_0^r j_l(kr') U(r') u_{l,k}(kr') r' dr' \\ + kr j_l(kr) \int_r^{\infty} n_l(kr') U(r') u_{l,k}(kr') r' dr', \quad (2.3.1)$$

que consiste en la ecuación integral equivalente a la de Schrödinger<sup>3</sup>. Lo importante de esta ecuación es, por un lado, notar que junto con (2.2.14), representan la solución general del problema de la dispersión<sup>4</sup>. Además, la ventaja de esta ecuación integral consiste en poder aplicar un método iterativo para su solución. Así, cuando el potencial de interacción es pequeño se pueden despreciar

<sup>3</sup>En la sección 2.4 se obtendrá formalmente la ecuación integral equivalente a la de Schrödinger para la solución total  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , conocida como ecuación de Lippmann-Schwinger.

<sup>4</sup>Ambas ecuaciones constituyen un sistema acoplado que determinan  $u_{l,k}(r)$  y  $\delta_l$ ; para cada valor de  $l$ .

los dos últimos términos de (2.3.1) que contienen al potencial; así, el orden cero de aproximación para  $u_{l,k}(r)$  resulta en:

$$u_{l,k}^0 = r \cos \delta_l j_l(kr). \quad U_0 \text{ despreciable.} \quad (2.3.2)$$

Sustituyendo esta aproximación en la ecuación para el corrimiento de fase (2.2.14), obtenemos:

$$\tan \delta_l \approx -k \int_0^\infty \left[ j_l(kr') \right]^2 U(r') r'^2 dr'. \quad (2.3.3)$$

Ahora, si  $l > kd$  donde  $d$  es el alcance del potencial, entonces la función  $j_l(kr)$  se puede aproximar por:

$$j_l(kr) \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} (kr)^l + \dots, \quad (2.3.4)$$

con lo que se obtiene el siguiente resultado:

$$\tan \delta_l \approx - \left[ \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \right]^2 k^{2l+1} \int_0^\infty U(r') r'^{2l+2} dr', \quad U_0 \text{ despreciable.} \quad (2.3.5)$$

Esta expresión relaciona los corrimientos de fase  $\delta_l$  con la energía de la partícula ( $E_r \sim k^2$ ) a partir de la cual se establece que en el límite de bajas energías  $k \rightarrow 0$ , el corrimiento de fase más importante es aquél con  $l = 0$ , y para  $l > 0$ ,  $\delta_l \approx 0$ . Un argumento más intuitivo de verificar este resultado se puede encontrar en [Roman, 1965, pp. 167], en el que se considera el choque semiclásico de una partícula con momento  $k$  que incide sobre un centro de fuerzas dispersora a una distancia  $s$ . De tal manera que su momento angular respecto a este centro es:  $l = p \cdot s = \hbar k \cdot s$ ; sí el alcance de la fuerza dispersora es  $a$ , entonces es de esperar que la partícula sea dispersada principalmente cuando  $s \lesssim a$ . Con esto se obtiene la condición  $l \lesssim \hbar ka$  que, en el límite de bajas energías  $k \approx 0$ , se satisface solamente para  $l = 0$ .

Una vez establecido que el régimen de bajas energías el único término importante es con  $l = 0$ , de (2.3.5) se obtiene:

$$\tan \delta_0 = -ak, \quad (2.3.6)$$

donde se introdujo la constante  $a$ , que viene dada por la integral en (2.3.5). Se puede verificar además, que esta constante debe tener las dimensiones de longitud. Entonces en el límite de bajas energías  $k \approx 0$ , se tiene que  $\tan \delta_0 \approx \delta_0$ , y por lo tanto:

$$\delta_0 = -ka, \quad (2.3.7)$$

que sustituyendo en la expresión (2.2.21), la amplitud de dispersión queda de la siguiente manera:

$$f \approx \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 = \frac{(e^{i2\delta_0} - 1)}{2ik}, \quad \text{régimen de bajas energías } k \sim 0. \quad (2.3.8)$$

Puesto que  $k \approx 0$  y  $\delta_0 \sim k$ , es posible aproximar:  $\sin \delta_0 \approx \delta_0 = -ka$  y  $e^{i\delta_0} \approx 1$ , de donde se obtiene que la amplitud de dispersión:

$$f \approx -a, \quad \text{régimen de bajas energías: } k \approx 0. \quad (2.3.9)$$

Este es el resultado principal, donde se establece que en el régimen de bajas energías la amplitud de dispersión es una constante; que por el momento viene determinada por la integral de (2.3.5), pero que se puede generalizar como veremos a continuación.

En el procedimiento que se ha presentado, la ecuación (2.3.6) fue un resultado que se obtuvo de considerar al potencial  $U_0$  despreciable, esto permite emplear la aproximación de orden cero en la ecuación integral para  $u_{l,k}$ , ecuación (2.3.1), y tomar la solución asintótica de  $j_{l,k}(kr)$ . Entonces, la constante  $a$  viene dada por la integral que aparece en la ecuación (2.3.5) con  $l = 0$ . Sin embargo, la ecuación (2.3.6) se puede considerar como un resultado más general y tomar como una definición para la **longitud de dispersión**. Más específicamente, se define a la longitud de dispersión  $a$ , aquella cantidad que en el régimen de bajas energías satisface la siguiente igualdad [Roman, 1965, pp. 175]:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k} \equiv -a \quad (2.3.10)$$

Definida así la longitud de dispersión, el resultado (2.3.9) es totalmente válido. Debe quedar claro que la longitud de dispersión así definida, dependerán del potencial de interacción a través de resolver la ecuación de Schrödinger de forma completa para cualquier valor de  $r$ , como veremos a continuación. Lo importante de la longitud de dispersión consiste en que es igual a la amplitud de dispersión y por lo tanto determina las propiedades de la dispersión en una colisión entre partículas en el régimen de bajas energías.

En general, la longitud de dispersión se puede calcular como se describe a continuación. En la ecuación diferencial (2.2.4) para  $l = 0$ , se toma el límite de bajas energías:  $k \rightarrow 0$ , de tal manera que se obtiene la siguiente ecuación:

$$u_0''(r) - U_0(r) u_0(r) = 0, \quad k \rightarrow 0, \quad l = 0; \quad (2.3.11)$$

donde se define:  $u_0(r) \equiv u_{l=0, k \rightarrow 0}(r)$ .

En la región fuera del alcance del potencial ( $U \approx 0$ ), se obtiene:

$$u_0''(r) = 0. \quad (2.3.12)$$

La solución de esta ecuación tiene la forma de una recta en la variable radial  $r$ :

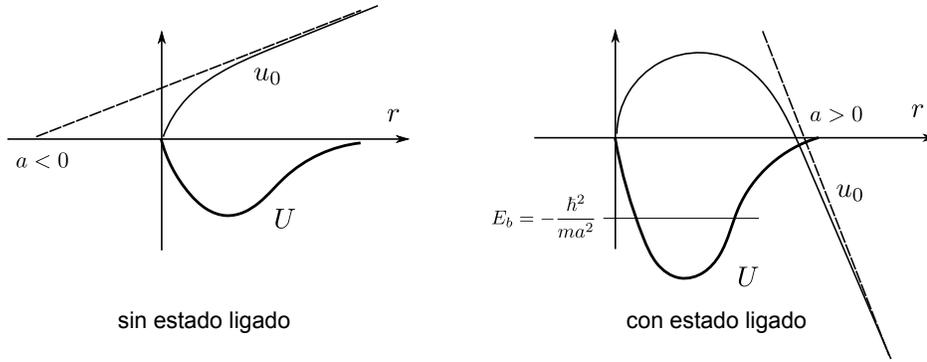
$$u_0(r) = B r + C, \quad (2.3.13)$$

donde para que empalme con la solución asintótica (2.2.10) con  $l = 0$ , y tomando el límite de bajas energías  $k \sim 0$ ; se debe tener que los coeficientes de ambas soluciones deben satisfacer:

$$B = B_0, \quad C = -\frac{C_0}{k}. \quad (2.3.14)$$

Pero a su vez los coeficientes  $B_0$  y  $C_0$  están relacionados con el corrimiento de fase mediante<sup>5</sup>:  $\tan \delta_0 = -C_0/B_0$ , y por lo tanto la longitud de dispersión viene dada por:

$$a \equiv -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k} = \frac{1}{k} \frac{C_0}{B_0} = -\frac{C}{B}. \quad (2.3.15)$$



**Figura 2.2.:** Longitud de dispersión para un potencial atractivo.

Así, al resolver la ecuación (2.3.11) para un potencial  $U(r)$  dado y encontrar una expresión asintótica de la solución que pueda compararse con (2.3.13), se pueden obtener los coeficientes  $B$  y  $C$  que determinan la longitud de dispersión. Esto muestra la fuerte dependencia de la longitud de dispersión  $a$  con el potencial de interacción; sin embargo, es posible caracterizar de manera general la longitud de dispersión según su signo con la forma del potencial, como veremos a continuación.

Para ello hay que notar que la longitud de dispersión corresponde al valor donde la solución asintótica (2.3.13) corta al eje  $r$ :  $a = -C/B$ . Por otro lado, de la ecuación (2.3.11) que contiene el potencial  $U_0(r)$  se obtiene que la curvatura de la solución  $u_0(r)$  es proporcional al potencial  $u_0''/u_0 \sim U_0(r)$ . Entonces se puede esbozar la forma que debe tener  $u_0(r)$  en la región donde actúa el potencial, y junto con la solución asintótica (2.3.13) se puede determinar el signo de la longitud de dispersión, tal como se muestra en la figura 2.2.

Un potencial de interacción repulsivo  $U_0 > 0$  produce una curvatura positiva (convexa) en  $u_0$  y la solución asintótica corta al eje  $r$  en el lado positivo, por lo tanto la longitud de dispersión es positiva  $a > 0$ .

Para un potencial de interacción atractivo, la curvatura de  $u_0$  es negativa (cóncava) y se tienen las dos posibilidades que muestra en la figura 2.2. Si la magnitud del potencial es muy débil, entonces la curvatura de la función  $u_0$  es tal que no hay un cambio de signo en la derivada y la aproximación asintótica corta al eje  $r$  en el lado negativo con lo que la longitud de dispersión es negativa:  $a < 0$ . Por el contrario, si la intensidad del potencial  $U_0$  es mayor entonces produce que la curvatura de  $u_0$  cambie el signo en la derivada y la aproximación asintótica corta al eje  $r$  en la región positiva y por lo tanto la longitud de dispersión es positiva  $a > 0$ . Este caso, se puede demostrar que corresponde a un estado ligado  $s$  ( $l = 0$ ) [Roman, 1965, pp. 177].

$$\begin{array}{l}
 \text{potencial atractivo: } U < 0 \\
 \text{potencial repulsivo: } U > 0
 \end{array}
 \quad
 \left\{
 \begin{array}{ll}
 \text{sin estado ligado:} & a < 0, \\
 \text{estado ligado:} & a > 0,
 \end{array}
 \right.
 \quad (2.3.16)$$

$$\text{potencial repulsivo: } U > 0 \quad a > 0.$$

El caso de un potencial de interacción atractivo ( $U_0 < 0$ ) es de gran interés en este trabajo, ya que si las partículas que interactúan son fermiones dependiendo del signo de  $a$ , pares de fermiones

<sup>5</sup>Ver ecuaciones (2.2.12)

puede formar dos estados diferentes: *par de Cooper* o *estado molecular*. Este resultado es fundamental para la descripción del gas de fermiones que estudiamos, pues determina sus propiedades termodinámicas dependiendo del signo de la longitud de dispersión como veremos en el capítulo 4. El concepto de pares de Cooper está íntimamente relacionado con el fenómeno de la superconductividad, y en el capítulo siguiente se discute más a fondo; por ahora, basta mencionar que se presenta de manera general cuando la longitud de dispersión es negativa:  $a < 0$ .

En el caso contrario, cuando la longitud de dispersión es positiva:  $a > 0$ , corresponde al estado ligado  $s$  ( $l = 0$ ) con energía [Petrov et al., 2004] [Roman, 1965, pp. 177]:

$$E_b = -\frac{\hbar^2}{2m_r a^2} = -\frac{\hbar^2}{m a^2}, \quad (2.3.17)$$

donde para la última igualdad se considero partículas de igual masa  $m$  ( $m_r = m/2$ ), y  $a$  corresponde a la longitud de dispersión. Además, se puede demostrar que para este estado ligado, la función radial decae exponencialmente para  $r$  grande [ibid]:

$$R_0(r) \sim e^{-r/a}, \quad (2.3.18)$$

y es posible únicamente para valores positivos de la longitud de dispersión ( $a > 0$ ). Este resultado es muy importante, ya que muestra que la función de onda está “localizada” y por lo tanto representa un *estado molecular* para el sistema de dos partículas; si ambas partículas son fermiones con espín opuesto, entonces el estado corresponde a un *bosón molecular*. Esta propiedad del estado molecular establece una diferencia notable con las propiedades de un par de Cooper como veremos en el siguiente capítulo.

## 2.4. Amplitud de dispersión, desarrollo en serie de Born.

Una vez establecido que en el régimen de bajas energías la amplitud de dispersión es igual a la longitud de dispersión:  $f \approx -a$ , es necesario ligar este resultado a la descripción del gas de fermiones. Esto se hace a través de la transformada de Fourier del potencial y su aproximación en el régimen de bajas energías:

$$\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx \tilde{U}(0), \quad (\text{bajas energías : } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow 0). \quad (2.4.1)$$

Este factor, como se estableció en el capítulo anterior (ver 1.1.25 en la página 24), está contenido en la expresión del Hamiltoniano del gas de fermiones. En lo que sigue, se presenta un análisis que permite encontrar una relación entre la amplitud de dispersión con este factor, y por lo tanto introducir la longitud de dispersión directamente en el Hamiltoniano.

El siguiente análisis permite encontrar una expresión general para la amplitud de dispersión  $f(\theta)$  como una serie, cuyos términos contienen la transformada de Fourier del potencial a diferentes órdenes. Para esto, es necesario regresar a la ecuación de Schrödinger del sistema de dos partículas en la coordenada relativa, que en se puede escribir como (utilizando la definición:  $U_0(r) \equiv 2m_r U(r) / \hbar^2$ ):

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_0(r) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.4.2)$$

equivalente a esta ecuación diferencial, se tiene la siguiente ecuación integral:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U_0(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}', \quad (2.4.3)$$

donde  $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es una solución de la ecuación homogénea:

$$(\nabla^2 + k^2) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.4.4)$$

mientras que  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  es la función de Green que satisface la ecuación:

$$(\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r}). \quad (2.4.5)$$

La ecuación (2.4.3) -conocida como de *Lippmann-Schwinger*- contiene las condiciones de frontera del problema a través de la función de Green. La ventaja de esta ecuación, es que permite resolverla mediante una serie iterativa (*Serie de Born*):

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = & \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U_0(r') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' + \\ & + \int \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') U_0(r'') G(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') U_0(r') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'') d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r}'' + \dots \end{aligned} \quad (2.4.6)$$

Para el problema de una partícula dispersada por el potencial  $U_0(r)$ , se puede demostrar que la función de Green tiene la siguiente expresión [Roman, 1965, pp 153]:

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.4.7)$$

mientras que la solución de la ecuación homogénea (2.4.4), corresponde al de una partícula libre:

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.4.8)$$

Tomando como eje  $z$  al de la trayectoria de la partícula incidente, la ecuación de Lippmann-Schwinger toma la siguiente expresión:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U_0(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (2.4.9)$$

Desarrollando una expresión asintótica ( $r \gg 1$ ) del término que se encuentra dentro de la integral ( $\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ ), entonces:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ir}}{r} \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} U_0(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}', \quad r \gg 1; \quad (2.4.10)$$

que comparando con la expresión (2.1.8), se obtiene la amplitud de dispersión como:

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} U_0(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (2.4.11)$$

Estrictamente, esta ecuación se acopla con la ecuación de Lippmann-Schwinger (2.4.3) a través de la función  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , lo que permite desarrollar la amplitud de dispersión también como una serie de Born. El primer término corresponde en aproximar la solución general como una partícula libre:  $\psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) \approx \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , entonces la amplitud de dispersión a primer orden queda como<sup>6</sup>:

<sup>6</sup>Recordemos que en el sistema relativo  $m_r$ , corresponde a la masa reducida; en el caso de partículas idénticas:  $m_1 = m_2 = m$ , entonces  $m_r = m/2$  y para regresar al potencial original:  $U_0(r) \equiv 2m_r U(r)/\hbar^2 = mU(r)/\hbar^2$ ,

$$f^{(1)}(\theta) \approx -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \int e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}), \quad (2.4.12)$$

donde se ha identificado a la integral como la transformada de Fourier del potencial. En el régimen de bajas energías, se emplea la aproximación de la transformada (2.4.1) y de la amplitud de dispersión (2.3.9), con lo cual se obtiene:

$$-a \approx -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \tilde{U}(0), \quad \Rightarrow \quad \tilde{U}(0) \approx \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}; \quad (\text{primer orden a bajas energías}). \quad (2.4.13)$$

Este resultado representa la primera aproximación de Born para la amplitud de dispersión junto con el régimen de bajas energías y permite introducir directamente la longitud de dispersión en el Hamiltoniano (1.1.25).

Sin embargo, a este orden de aproximación se presenta un problema de divergencia en una de las ecuaciones que resulta del Formalismo BCS -*ecuación del gap*-, el cual se presenta en el siguiente capítulo. Entonces es necesario calcular la amplitud de dispersión al siguiente orden de aproximación en la serie de Born.

Puesto que la divergencia ocurre en el espacio de momentos, es conveniente adoptar un formalismo más general en términos de operadores. Así, en notación de Dirac la ecuación (2.4.11) se escribe como ( $U_0 = 2m_r U(r)/\hbar^2$ ):

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U_0 | \psi_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.4.14)$$

donde los estados  $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$  son eigenfunciones del operador Hamiltoniano de partícula libre ( $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m_r$ ), con energía:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}, \quad (2.4.15)$$

(donde  $m_r$  es la masa reducida del sistema de dos partículas) es decir:

$$\hat{H}_0 |\phi_{\mathbf{k}}\rangle = \epsilon_{\mathbf{k}} |\phi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.4.16)$$

Por otra parte, los estados  $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$  son las eigenfunciones del Hamiltoniano total:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + U_0$ , con energía  $E_{\mathbf{k}}$ :

$$\hat{H} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = E_{\mathbf{k}} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.4.17)$$

Entonces la ecuación de Lippmann-Schwinger se escribe de manera general como:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + \left( E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha \right)^{-1} U_0 |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.4.18)$$

donde para que este bien definido el operador:  $\left( E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha \right)^{-1}$ , debe satisfacer las siguientes propiedades:

1. El parámetro  $\alpha$ , es por definición una cantidad real positiva que evita las singularidades de este operador y al final de los cálculos se debe tomar el límite cuando  $\alpha \rightarrow 0$ .

2. Este operador tiene como eigenestados a  $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$ , lo cual se puede verificar si consideramos la siguiente operación:

$$\left(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha\right) |\phi_{\mathbf{k}'}\rangle = (E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + i\alpha) |\phi_{\mathbf{k}'}\rangle, \quad (2.4.19)$$

entonces, si aplicamos el operador inverso  $\left(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha\right)^{-1}$  en ambos lados de la ecuación, llegamos al siguiente resultado:

$$\left(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha\right)^{-1} |\phi_{\mathbf{k}'}\rangle = (E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + i\alpha)^{-1} |\phi_{\mathbf{k}'}\rangle, \quad (2.4.20)$$

el cual muestra que los estados:  $|\phi_{\mathbf{k}'}\rangle$ , son eigenestados del operador  $\left(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha\right)^{-1}$  con eigenvalores  $(E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + i\alpha)^{-1}$ .

De la expresión (2.4.14) y la ecuación de Lippmann-Schwinger (2.4.18), se obtiene la serie de Born para la amplitud de dispersión en forma general como:

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \left[ \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U_0 | \phi_{\mathbf{k}} \rangle - \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U_0 \left(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha\right)^{-1} U_0 | \phi_{\mathbf{k}} \rangle + \dots \right] \quad (2.4.21)$$

Ahora consideremos una vez más la colisión de dos partículas de igual masa  $m$ , por lo que entonces:  $U_0 = mU(r)/\hbar^2$ , y el primer término de la serie viene dado por:

$$f^{(1)}(\theta) \approx -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U | \phi_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.4.22)$$

empleando los estados de partícula libre:  $\langle \mathbf{r} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ; entonces la amplitud de dispersión corresponde a la transformada de Fourier del potencial:

$$f^{(1)}(\theta) \approx -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad (2.4.23)$$

y se verifica el resultado encontrado antes: ecuación(2.4.12). La expresión (2.4.21) permite calcular de manera inmediata el siguiente orden para la amplitud de dispersión:

$$f^{(2)}(\theta) \approx -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \left[ \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U | \phi_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U \left(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha\right)^{-1} U | \phi_{\mathbf{k}} \rangle \right], \quad (2.4.24)$$

insertando la completitud de los estados  $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$  dentro del segundo término y la ecuación de eigenvalores (2.4.20), se llega al siguiente resultado (tomando  $\alpha \rightarrow 0$ ):

$$-\frac{4\pi\hbar^2}{m} f^{(2)}(\theta) \approx \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U | \phi_{\mathbf{k}} \rangle + \sum_{\mathbf{k}''} \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U | \phi_{\mathbf{k}''} \rangle \frac{\langle \phi_{\mathbf{k}''} | U | \phi_{\mathbf{k}} \rangle}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}''}}. \quad (2.4.25)$$

Si otra vez se emplean los estados de partícula libre:  $\langle \mathbf{r} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , entonces se obtiene:

$$-\frac{4\pi\hbar^2}{m} f^{(2)}(\theta) \approx \tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'') \tilde{U}(\mathbf{k}'' - \mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}''}}; \quad (2.4.26)$$

finalmente, aplicando el régimen de bajas energías que establece:  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  y  $E_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ , además que la amplitud de dispersión toma el valor:  $f \approx -a$ , resulta la siguiente expresión:

$$\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \approx \tilde{U}(0) - \tilde{U}(0)^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.4.27)$$

Debido a que este resultado ha sido obtenido en el sistema relativo, entonces para partículas de igual masa:  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m_r = \hbar^2 k^2 / m$ . Sin embargo, en el capítulo anterior para el Hamiltoniano del gas de fermiones se considero  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  como la energía de los fermiones individuales; para evitar confusiones simplemente agregamos un factor de 2 al término  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  de la ecuación anterior. Para finalizar, de la ecuación anterior se obtiene la siguiente resultado, que se empleara en el siguiente capítulo ( $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ ):

$$\frac{1}{\tilde{U}(0)} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.4.28)$$

Esta ecuación contiene una divergencia, pero es la necesaria para cancelar la otra divergencia que resulta de aproximar:  $\tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \tilde{U}(0)$  en el Hamiltoniano del gas de fermiones, ecuación (1.1.25). Este procedimiento de *renormalización*, introducido por Leggett [Leggett, 1980] en la descripción del cruce BEC-BCS a temperatura cero, representa -junto con el formalismo BCS que se describe en el siguiente capítulo- la base del tratamiento del sistema de fermiones con interacción.

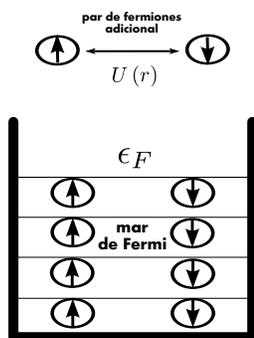
## Formalismo BCS

EL objetivo de este capítulo consiste en presentar el formalismo BCS para abordar el problema del gas de fermiones interactuantes. Este formalismo está basado en la teoría microscópica de la superconductividad que fue desarrollada por Bardeen, Cooper y Schrieffer [Bardeen et al., 1957]. Ya en el capítulo 1, se planteó el Hamiltoniano que describe al gas de fermiones con interacción; allí se mostró que en el régimen de bajas temperaturas la interacción contiene el factor  $\tilde{U}(0)$ , que corresponde a la transformada de Fourier del potencial de interacción  $U(r)$  en el límite de bajas energías:  $\mathbf{k} \approx 0$ . También se estableció una relación entre este factor y la longitud de dispersión  $a$ , lo que permite introducir esta cantidad en el Hamiltoniano de manera directa y por lo tanto en la descripción del gas. Así, el problema planteado ahora consiste en resolver este Hamiltoniano y la teoría BCS de la superconductividad ofrece una manera de hacerlo. A pesar de que esta teoría originalmente ha sido motivada en el contexto del estado sólido para describir el fenómeno de la superconductividad, es posible aplicar este mismo formalismo, como se muestra en este capítulo, para un gas de fermiones cuya interacción por pares está caracterizada por la longitud de dispersión.

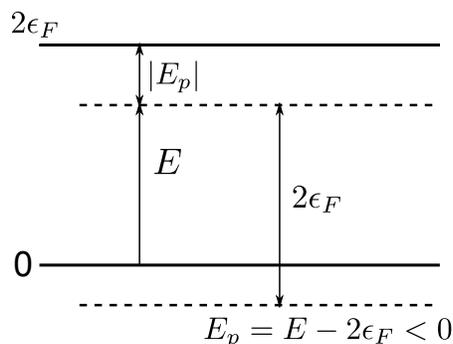
La idea principal sobre la que se fundamenta la teoría BCS de la superconductividad consiste en que un par de electrones -en general un par de fermiones- que interactúan atractivamente, en presencia de un sistema de fermiones ideales en el estado base (*mar de Fermi*), producen un estado con energía negativa respecto a la energía de Fermi. Este resultado descubierto por Cooper [Cooper, 1956] establece que en general para un sistema de fermiones que interactúan atractivamente, el estado más estable -de menor energía- corresponde a aquel donde los fermiones conforman dichos estados de par, conocidos como: “*pares de Cooper*”. Este estado del sistema de fermiones lo designaremos por *estado o régimen BCS*. Estos pares tienen la propiedad de que su momento de centro de masa es nulo y los fermiones que lo componen tienen estado de espín opuesto. Como se verá en este capítulo, las propiedades de los pares de Cooper difieren notablemente de las del estado molecular descrito en el capítulo anterior: por una parte, el “tamaño” de un par de Cooper es mucho mayor al de una molécula; lo cual se ve reflejado en que la energía de “enlace” de un par de Cooper sea mucho menor al de una molécula. Tal como se mostró en el capítulo anterior, el estado ligado molecular se presenta cuando la longitud de dispersión toma valores positivos; en este capítulo se muestra que cuando la longitud de dispersión es negativa, los fermiones del gas conforman pares de Cooper. De esta manera, el signo de la longitud de dispersión determina de manera importante el estado termodinámico en un gas de Fermi y en el siguiente capítulo se hace este análisis.

### 3.1. Pares de Cooper.

Para abordar el concepto de los pares de Cooper, supongamos un sistema de fermiones ideales (que no interactúan) en el estado base; es decir, que ocupan toda la esfera de Fermi y la energía máxima que pueden tener corresponde a la energía de Fermi  $\epsilon_F$ . Ahora consideremos un par de fermiones adicionales que interactúan atractivamente a través de un potencial  $U(r)$ , siendo  $r$  la coordenada relativa. Debido al principio de Pauli, este par de fermiones están restringidos a ocupar los estados con energía mayor a la de Fermi, si los fermiones no interactúan entonces la energía del par sería mayor o igual a  $2\epsilon_F$ . Sin embargo si este par de fermiones interactúan atractivamente, como veremos más adelante, entonces la energía del par es menor respecto a la energía de Fermi por una cantidad  $E_p$  y componen lo que se conoce como “*par de Cooper*”. Esto es parecido a un estado ligado con energía negativa; sin embargo, las propiedades de un par de Cooper difieren notablemente de las de una molécula, como se verá más adelante.



(a) Par de fermiones que interactúan atractivamente, en presencia del mar de Fermi.



(b) Energía del estado ligado:  $E_p$ , medida respecto de la energía de Fermi  $2\epsilon_F$ .

La solución de este problema consiste esencialmente en resolver la ecuación de Schrödinger del par de fermiones en el espacio de momentos, ya que en este espacio es inmediato introducir la restricción de que los estados con energía menor a la de Fermi están prohibidos.

Puesto que estamos interesados en la posibilidad de un “estado ligado”, entonces supongamos que la energía del par es negativa respecto de la energía de Fermi:  $E_p = E - 2\epsilon_F < 0$ . Así la ecuación de Schrödinger en coordenadas relativas del par de Cooper viene dada por (ver sección 2.1 en la página 26):

$$\left( -\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 + U(r) \right) \psi_p(\mathbf{r}) = -|E_p| \psi_p(\mathbf{r}), \quad (3.1.1)$$

donde se ha supuesto que las partículas que forman el par tienen igual masa, por lo tanto su masa reducida es:  $m_r = m/2$ . En el espacio de momentos la ecuación anterior se transforma en:

$$-\frac{\hbar^2}{m} (i\mathbf{q})^2 \tilde{\psi}_p(\mathbf{q}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}'} \tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \tilde{\psi}_p(\mathbf{q}') = -|E_p| \tilde{\psi}_p(\mathbf{q}), \quad (3.1.2)$$

donde se ha definido la transformada de Fourier y su inversa, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\mathbf{q}) &= \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}), \\ f(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tilde{f}(\mathbf{q}).\end{aligned}\quad (3.1.3)$$

En estas definiciones se está considerando que los estados en  $\mathbf{q}$  representan un conjunto discreto, tal como sucede con una partícula ligada. Entonces introduciendo la completitud de estos estados y tomando el límite termodinámico:  $\sum \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q}$ , la ecuación (3.1.2) se transforma en:

$$\tilde{\psi}_p(\mathbf{q}) = \frac{1}{-q^2 \frac{\hbar^2}{m} - |E_p|} \int \frac{d^3\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \tilde{\psi}_p(\mathbf{q}'). \quad (3.1.4)$$

Esta ecuación contiene dos incógnitas: la función del par de Cooper:  $\tilde{\psi}_p(\mathbf{q})$ , y su energía:  $E_p$ . Para eliminar la dependencia con la función  $\tilde{\psi}_p(\mathbf{q})$ , primero es necesario aproximar  $\tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$  por una constante  $\tilde{U}_0$  que puede salir de la integral (más adelante se justifica esta aproximación); entonces integrando nuevamente sobre la coordenada  $\mathbf{q}$  en ambos lados de la ecuación y dividiendo por el factor común:  $\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \psi_p(\mathbf{q})$ , se obtiene:

$$-\frac{1}{\tilde{U}_0} = \int_{\Gamma} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2 \frac{\hbar^2}{m} + |E_p|}, \quad (3.1.5)$$

que representa finalmente la ecuación para la energía  $E_p$ . La presencia del mar de Fermi se introduce en la región de integración  $\Gamma$ , de la siguiente manera. Si  $\mathbf{q}_1$  y  $\mathbf{q}_2$  representan a los momentos de los fermiones que componen al par, entonces debido al principio de Pauli:  $|\mathbf{q}_1|, |\mathbf{q}_2| > k_F$  (donde  $k_F$  es el momento de Fermi). Por otra parte, el momento de centro de masa y relativo se definen como (partículas de igual masa):

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, & \text{momento del centro de masa;} \\ \mathbf{q} &= \frac{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2}{2}, & \text{momento relativo.}\end{aligned}\quad (3.1.6)$$

De donde se obtienen las siguientes relaciones:  $\mathbf{Q}/2 + \mathbf{q} = \mathbf{q}_1$  y  $\mathbf{Q}/2 - \mathbf{q} = \mathbf{q}_2$ , entonces la región de integración  $\Gamma$  viene dada por:

$$\Gamma \equiv \left| \frac{\mathbf{Q}}{2} \pm \mathbf{q} \right| > k_F, \quad (3.1.7)$$

que depende del momento del centro de masa reduciendo la región de integración. Se puede demostrar que el valor de la energía  $E_p$  alcanza su valor máximo cuando el momento del centro de masa es nulo  $\mathbf{Q} = 0$  [Fetter and Walecka, 1971, pp. 324], y es lo que consideraremos en adelante.

Para expresar la ecuación (3.1.5) en términos de la energía se introduce la densidad de estados  $g(\epsilon)$ , que midiendo respecto de la energía de Fermi ( $\frac{\hbar^2 q^2}{m} = 2 \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = 2\epsilon, \Rightarrow \frac{\hbar^2 q^2}{m} = 2(\epsilon - \epsilon_F)$ ) resulta:

$$-\frac{1}{\tilde{U}_0} = \frac{1}{V} \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \epsilon_c} \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{2(\epsilon - \epsilon_F) + |E_p|}, \quad (3.1.8)$$

donde la *energía de corte*:  $\epsilon_c$ , representa un límite en el valor de la energía que puede tomar los fermiones del par. Esta limitación en la energía está relacionada con la aproximación que se hizo de

la transformada de Fourier del potencial por una constante:  $\tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \approx \tilde{U}_0$ . Ahora consideremos las siguientes dos posibilidades que permiten esta aproximación:

1. En el contexto de la superconductividad la interacción atractiva entre los electrones es resultado de su interacción con los fonones de la red. En este caso, es válido aproximar [Cooper, 1956]:  $\tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = -|\tilde{U}_0|$ , dentro de un pequeño rango de interacción:  $|\epsilon - \epsilon_F| < \hbar\omega_D$ , donde  $\omega_D$  corresponde a la frecuencia de Debye. En este caso es inmediato tomar la energía de corte:  $\epsilon_c = \hbar\omega_D$ , y como  $\hbar\omega_D \ll \epsilon_F$ , entonces la integración de la ecuación (3.1.8) se efectúa en una pequeña banda por encima de la energía de Fermi y es posible emplear la siguiente aproximación:  $g(\epsilon) \approx g(\epsilon_F)$ , con lo cual se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{|\tilde{U}_0|} \approx \frac{g(\epsilon_F)}{V} \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{2(\epsilon - \epsilon_F) + |E_p|}, \quad (3.1.9)$$

cuya solución da el valor la energía del par de Cooper:

$$E_p = -2\hbar\omega_D e^{-2V/g(\epsilon_F)|\tilde{U}_0|}. \quad (3.1.10)$$

Esta energía decae exponencialmente con la interacción:  $|\tilde{U}_0|$ ; sin embargo, aún cuando la interacción sea débil existe un valor finito para la energía  $E_p$ . De esta expresión también se puede verificar la necesidad del mar de Fermi para la aparición del estado ligado, ya que su ausencia equivale a tener:  $\epsilon_F = 0$ , y para un gas homogéneo de partículas libres (3 dimensiones):  $g(\epsilon) \sim \epsilon^{1/2}$ , entonces el valor de  $E_p$  se anula.

2. Por otro lado, en el contexto de los gases de Fermi a muy bajas temperaturas, donde el estado de los fermiones es tal que su energía es muy baja: ( $\mathbf{q} \rightarrow 0$ ), entonces es posible aproximar la transformada del potencial por su valor en cero <sup>1</sup>:

$$\tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \approx \tilde{U}(0), \quad (\text{bajas energías : } \mathbf{q}, \mathbf{q}' \rightarrow 0); \quad (3.1.11)$$

en este caso:  $\tilde{U}_0 = \tilde{U}(0)$ . A partir de la relación que se encontró en el capítulo anterior (ecuación 2.4.28):

$$\frac{1}{\tilde{U}(0)} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (3.1.12)$$

se introduce la longitud de dispersión  $a$ , y la ecuación para la energía  $E_p$  (ecuación 3.1.8) queda en este caso de la siguiente forma:

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \approx \frac{1}{V} \int_{\epsilon_F}^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{2(\epsilon - \epsilon_F) + |E_p|} d\epsilon - \frac{1}{V} \int_0^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{2\epsilon}, \quad (3.1.13)$$

donde la energía de corte  $\epsilon_c$  se ha tomado como infinita:  $\epsilon_c \rightarrow \infty$ ; aquí no es posible restringir el rango de interacción entre los fermiones. Esta ecuación muestra la necesidad de haber tomado

<sup>1</sup>Esto mismo ya se empleó al establecer el Hamiltoniano del sistema en el capítulo 1, ver ecuación (1.1.22).

a segundo orden de aproximación la amplitud de dispersión en la serie de Born, y que dio como resultado la expresión (3.1.12), ya que la primer integral de la ecuación anterior diverge pero con la segunda -que también diverge- se cancela.

Para resolver la ecuación (3.1.13), se considera un gas homogéneo de partícula libre. En este caso la densidad de estados esta dada por:

$$g(\epsilon) = \frac{2\pi V (2m)^{2/3}}{h^3} \epsilon^{1/2}, \quad (3.1.14)$$

suponiendo además que:  $\epsilon_F \gg E_p$  y la longitud de dispersión es negativa:  $|a| = -a$ , entonces la energía del par de Cooper en un gas de Fermi esta dada por:

$$E_p = -\frac{8}{e^2} \epsilon_F e^{-\pi/k_F |a|}. \quad (3.1.15)$$

Esta expresión es análoga a (3.1.10) y establece la energía de un par de Cooper para un gas de Fermi, como función de la longitud de dispersión. Para obtenerla se ha supuesto que la longitud de dispersión es negativa:  $a < 0$ ; en caso contrario, se puede demostrar que no existe este estado ligado ya que entonces  $E_p > 0$ . En el capítulo anterior se mostró que en este caso ( $a > 0$ ) existe un estado ligado con energía:  $E_b = -\hbar^2/ma^2$ , y que corresponde a la formación de una molécula bosónica (ver 2.3.17 en la página 35). Ambos resultados son de gran importancia y en el capítulo 4 se retoman al estudiar el cruce BEC-BCS.

Un elemento importante a considerar corresponde al tamaño promedio de los pares de Cooper. Este se puede obtener a partir de la función del par  $\psi_p(r)$ , y es posible demostrar que esta función en el límite asintótico ( $r$  grande) decae algebraicamente con  $r$  [Cooper, 1956]:

$$\psi_p(r) \sim 1/r, \quad (3.1.16)$$

esto marca una diferencia notable respecto al estado molecular entre un par de partículas que se discutió en la sección 2.3 en la página 31; en este caso, se mostró que la función decae exponencialmente [Petrov et al., 2004]:  $\sim e^{-r/a}$ . Este comportamiento en la función de los pares de Cooper da como resultado que el tamaño promedio de un par ( $\sim 10^3 \text{Å} = 2000a_0$ , cuando  $\Delta \approx k_B T_c$  [Cooper, 1956]) no solo sea mayor al de una molécula diatómica ( $\sim 3a_0$  [Dembroder, 2006]); sino también a la separación promedio entre las partículas que conforman un gas ( $\sim 100a_0$ ).

Así, se ha demostrado que un par de fermiones que interactúan atractivamente, ante la presencia de un mar de Fermi, forman un **par de Cooper** con energía  $E_p$ . La formación de este estado es consecuencia del mar de Fermi que limita la ocupación de estados en el espacio  $\mathbf{k}$  debido al principio de Pauli. Sin embargo, esta restricción es una propiedad del carácter fermiónico de las partículas y por lo tanto se puede generalizar este resultado para un sistema de muchos fermiones que interactúan atractivamente; estos pares, como se ha mencionado, tienen momento cero y por lo tanto están formados por fermiones con momento opuesto:  $\mathbf{k}$  y  $-\mathbf{k}$ , pero además por el principio de exclusión de Pauli debe tener espín opuesto también:  $\uparrow$  y  $\downarrow$ .

Debido a la “*extensión*” de los pares de Cooper, entonces el estado de un gas de fermiones que interactúan atractivamente corresponde a la superposición de todos los pares de Cooper posibles; es decir, cada fermión en el estado  $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$  esta “*apareado*” con todos y cada uno de los fermiones que se encuentran en el estado  $|\mathbf{k}, \downarrow\rangle$ . Este estado del sistema -**estado BCS**- se presenta, como se

muestra en el capítulo siguiente, por debajo de cierta temperatura crítica y es posible para valores negativos de la longitud de dispersión, como se ha dicho antes.

En la siguiente sección se presenta la función de onda BCS, que describe al estado BCS del sistema de fermiones a temperatura cero. Esta función, como veremos, contiene unos parámetros que son determinados variacionalmente a partir del Hamiltoniano del sistema.

## 3.2. Función de estado BCS

La función más general para un sistema de  $N$  fermiones, que contenga la propiedad de apareamiento entre pares de fermiones, todos con todos, se puede escribir como [Annett, 2004, pp. 114]:

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \phi(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2\sigma_1\sigma_1) \phi(\mathbf{r}_3\mathbf{r}_4\sigma_3\sigma_4) \cdots \phi(\mathbf{r}_{N-1}\mathbf{r}_N\sigma_{N-1}\sigma_N), \quad (3.2.1)$$

donde la suma es sobre todas las permutaciones  $P$  de los  $N$  fermiones individuales denotados por  $\mathbf{r}_i\sigma_i$ . Para mantener la antisimetría de la función  $\Psi$ , necesaria en un sistema de fermiones, ante el intercambio de dos partículas entonces:  $(-1)^P = 1$ , para una permutación par; mientras que para una permutación impar  $(-1)^P = -1$ .

La función (3.2.1) es muy general, por lo tanto se consideran las siguientes dos propiedades respecto a los estados de pares de fermiones:

1. Los estados  $\phi(\mathbf{r}_i\mathbf{r}_j\sigma_i\sigma_j)$  deben ser función únicamente de la coordenada relativa  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ . Lo cual equivale a que el movimiento del centro de masa del par es nulo y por lo tanto:  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$ .
2. La estructura de espín de los estados  $\phi(\mathbf{r}_i\mathbf{r}_j\sigma_i\sigma_j)$  es singlete; es decir que las partículas que forma al par tienen espines opuestos.

Estas propiedades están de acuerdo con la expresión del Hamiltoniano al que se llegó en el capítulo 1, y que describe al sistema de fermiones. Allí se indicó que la principal contribución al término de interacción es aquel que contiene la dispersión entre partículas con momento y espín opuestos. Con estas dos propiedades, la función (3.2.1) se simplifica y se reduce a la **función BCS** propuesta originalmente por Schrieffer en el contexto de la teoría microscópica de la superconductividad, y que en segunda cuatización se escribe como [Bardeen et al., 1957]:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger) |0\rangle, \quad (3.2.2)$$

donde el operador  $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger$  se define de la siguiente forma:

$$\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger = \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad (3.2.3)$$

y que corresponde a la creación de un par de fermiones con las propiedades antes descritas. Estas propiedades en los pares de fermiones permite simplificar la notación como se estableció en el capítulo 1 (ecuación 1.1.24 en la página 24):

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &\equiv \{\mathbf{k}, \uparrow\}, \\ -\mathbf{k} &\equiv \{-\mathbf{k}, \downarrow\}. \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

De esta manera, el estado del espín esta contenido en el signo del vector  $\mathbf{k}$ . La normalización de la función de onda BCS establece la siguiente relación:

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1, \quad (3.2.5)$$

La función BCS (3.2.2) contiene la idea de los pares de Cooper que se describió al final de la sección anterior, y representa una propuesta variacional para describir el estado de un sistema de fermiones que interactúan por pares, en el estado base (temperatura cero). Los parámetros  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$  quedan determinados al minimizar la energía del sistema:  $E_0 = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{BCS}$ , y en la siguiente sección se describe este proceso variacional. Para incluir los efectos de temperatura se emplea una transformación que permite diagonalizar el Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}$ ; esta transformación introduce el concepto de cuasipartículas y con ellas la temperatura, tal como se describe en la sección 3.4.

### 3.3. Sistema a $T = 0$ .

Una vez que se han establecido las propiedades de la función de onda BCS, a continuación se aplica el método variacional para encontrar el valor de los parámetros  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$  que minimizan la energía del sistema. Para ello se establece el Hamiltoniano que describe al sistema de fermiones con interacción por pares<sup>2</sup>:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}) + \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad (3.3.1)$$

que contiene la aproximación de bajas energías:  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx \tilde{U}(0)$ , misma que ya se empleo al inicio del capítulo al calcular la energía de ligadura para un par de Cooper (3.1.11). Esta aproximación tiene una relevancia ya que introduce la longitud de dispersión -a través de la ecuación (2.4.28)- en la descripción del gas de fermiones y que representa uno de los objetivos de este trabajo.

El problema variacional consiste en minimizar la energía del estado BCS:  $E_0 = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{BCS}$  respecto de los parámetros  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  de la función BCS; sujetos a dos restricciones:

1. La función del estado BCS debe estar normalizada, lo que corresponde a la siguiente ecuación:

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (3.3.2)$$

2. El número de partículas del sistema  $N$  es constante:

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = N. \quad (3.3.3)$$

La segunda restricción se puede eliminar planteando el problema en el ensamble gran canónico, lo que introduce el potencial químico  $\mu$ , y que a temperatura cero define el operador <sup>3</sup>:

<sup>2</sup>Continuando con la notación:  $\mathbf{k} = \{\mathbf{k}, \uparrow\}$  y  $-\mathbf{k} = \{-\mathbf{k}, \downarrow\}$

<sup>3</sup>Esto corresponde a un cambio de representación, para dejar como variable independiente el potencial químico  $\mu$ , y entonces el número de partículas  $N$  queda determinado por el valor de  $\mu$ . Esto se consigue de manera general para cualquier temperatura  $T$ , a través del potencial termodinámico:  $\Omega(T, V, \mu)$  -gran potencial-; y que se define por la siguiente transformación de Legendre:  $\Omega(T, V, \mu) \equiv E - \mu N - TS$ . Sin embargo, el operador  $\hat{\mathcal{K}}$  no corresponde estrictamente al gran potencial con  $T = 0$ , sino más bien a una transformación intermedia:  $\mathcal{K} = E - \mu N$ .

$$\hat{\mathcal{K}} \equiv \hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N}; \quad (3.3.4)$$

que designaremos como Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{K}}$  y de (3.3.1), junto con:  $\hat{N} = \hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}$ , se encuentra su expresión:

$$\hat{\mathcal{K}} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[ \hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}} \right] + \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (3.3.5)$$

Así el problema variacional consiste en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial u_{\mathbf{k}}} + 2E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial v_{\mathbf{k}}} + 2E_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = 0, \\ u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \end{cases} \quad (3.3.6)$$

donde  $\mathcal{K} = \langle \hat{\mathcal{K}} \rangle_{BCS}$ , y  $E_{\mathbf{k}}$  representa el multiplicador de Lagrange asociado a la restricción (3.3.2). Este sistema determina por completo los valores de  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  y  $E_{\mathbf{k}}$ . Como primer paso para resolver el sistema, es necesario encontrar el valor de  $\langle \hat{\mathcal{K}} \rangle_{BCS}$  que se puede calcular de la expresión (3.3.5) y la función BCS:

$$\mathcal{K} = \langle \hat{\mathcal{K}} \rangle_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[ \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle_{BCS} + \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle_{BCS} \right] + \frac{\tilde{U}(0)}{V} \left\langle \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \right\rangle_{BCS}. \quad (3.3.7)$$

El primer término de esta expresión se encuentra fácilmente de la siguiente propiedad de la función BCS:

$$\langle \Psi_{BCS} | \hat{n}_{\mathbf{k}} | \Psi_{BCS} \rangle = \langle \Psi_{BCS} | \hat{n}_{-\mathbf{k}} | \Psi_{BCS} \rangle = v_{\mathbf{k}}^2, \quad (3.3.8)$$

entonces:

$$\sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[ \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle_{BCS} + \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle_{BCS} \right] = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) v_{\mathbf{k}}^2. \quad (3.3.9)$$

Así, el problema se reduce en calcular el producto de los cuatro operadores:  $\hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}$  con la función de estado BCS, y que conduce a la siguiente expresión:

$$\left\langle \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \right\rangle_{BCS} = u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}. \quad (3.3.10)$$

Con estos resultados se obtiene finalmente la expresión de  $\mathcal{K}$  en términos de los parámetros  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$ :

$$\mathcal{K} = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{V} \tilde{U}(0) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}. \quad (3.3.11)$$

A partir del cual se obtiene el sistema de ecuaciones (3.3.6) que resuelve el problema variacional. Multiplicando las dos primeras ecuaciones de este sistema, se llega a la siguiente ecuación:

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + \frac{\tilde{U}(0)}{V}(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} = 0. \quad (3.3.12)$$

Si se define el parámetro  $\Delta$  de la siguiente manera:

$$\Delta = -\frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}, \quad (3.3.13)$$

entonces la ecuación (3.3.12) se escribe como:

$$2(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - \Delta(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) = 0, \quad (3.3.14)$$

que junto con la restricción:  $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ , determinan los parámetros  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$ . Este par de ecuaciones conlleva a las siguientes expresiones:

$$\left. \begin{array}{l} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (3.3.15)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}.$$

Estas expresiones no determinan los valores de  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  y  $E_{\mathbf{k}}$  explícitamente, ya que  $\Delta$  depende de los parámetros  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$ , y por lo tanto representan un sistema de ecuaciones implícitas y acopladas para estos parámetros. Sin embargo, al conocer el valor de  $\Delta$  en términos de los parámetros del sistema:  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  y  $\mu$ , entonces  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  y  $E_{\mathbf{k}}$  quedan completamente determinados (de aquí la ventaja de introducir  $\Delta$ ). Para encontrar  $\Delta$ , simplemente se sustituyen las expresiones de  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$  dados por (3.3.15) en la ecuación (3.3.13); con lo cual se obtiene la siguiente ecuación:

$$\Delta = -\frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}}. \quad (3.3.16)$$

Esta ecuación determina  $\Delta$  en términos de las variables del sistema, que sustituyéndolo en las expresiones (3.3.15) especifican completamente  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  y  $E_{\mathbf{k}}$ ; y por lo tanto la solución completa del problema variacional planteado por el sistema (3.3.6).

Aquí es necesario establecer la relevancia del parámetro  $\Delta$  no solo como un elemento “técnico” para resolver el sistema de ecuaciones (3.3.6); sino como una propiedad física del sistema y que más adelante, cuando se resuelva el sistema a temperatura  $T \neq 0$  y en el siguiente capítulo cuando se analice más extensamente, quedara más claro. Por ahora, basta con notar que sus dimensiones deben ser de energía y por lo tanto atribuirle esta propiedad. Al parámetro  $\Delta$  se le conoce como “*gap*” y a la ecuación (3.3.16) como “*ecuación del gap*”.

A pesar de que no es posible encontrar explícitamente  $\Delta$  a partir de la ecuación del gap, se puede introducir este parámetro -a partir de su definición (3.3.13)- directamente en la expresión de  $\mathcal{K}$ , ecuación(3.3.11) y obtener:

$$\mathcal{K} = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 - \frac{V}{\tilde{U}(0)} \Delta^2, \quad (3.3.17)$$

que junto con el par de ecuaciones (3.3.12), se puede expresar completamente en términos de las variables del sistema y el gap como:

$$\mathcal{K} = \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] - \frac{V}{\tilde{U}(0)} \Delta^2. \quad (3.3.18)$$

A partir de esta expresión se puede verificar que la ecuación del gap (3.3.18), se obtiene simplemente derivando respecto a  $\Delta$  e igualando a cero:  $(\partial\mathcal{K}/\partial\Delta) = 0$ . Por lo tanto el estado del sistema de fermiones a temperatura cero queda caracterizado por el par de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] - \frac{V}{\tilde{U}(0)} \Delta^2, \\ 0 &= \left( \frac{\partial\mathcal{K}}{\partial\Delta} \right)_{V,\mu}, \quad \text{ecuación del gap.} \end{aligned} \quad (3.3.19)$$

Para incluir la longitud de dispersión  $a$  en la descripción del sistema, se sustituye el valor de  $\tilde{U}(0)$  dado por la ecuación (2.4.28), con lo cual se obtiene:

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] + \left( \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right) V \Delta^2, \\ 0 &= \left( \frac{\partial\mathcal{K}}{\partial\Delta} \right)_{V,\mu,a}, \quad \text{ecuación del gap.} \end{aligned} \quad (3.3.20)$$

Este par de ecuaciones determina las propiedades del sistema de fermiones a  $T = 0$ . Por un lado, la ecuación del gap determina el valor de  $\Delta$  en términos de las variables del sistema:  $V, \mu, a$  (la dependencia con  $\epsilon$  se elimina al tomar el límite termodinámico), y de forma autoconsistente se introduce en la expresión de  $\mathcal{K}$ .

Este resultado se ha obtenido a partir de la función de onda BCS que representa el estado base del sistema de fermiones. La propuesta de Leggett para describir el cruce BEC-BCS [Leggett, 1980] a temperatura cero consiste en emplear este mismo tratamiento -a través de la función BCS- para describir el estado de Condensado de Bose-Einstein (en el límite  $1/a \rightarrow +\infty$ ) para moléculas formadas por pares de fermiones con espín opuesto; como veremos en el capítulo 4, esto es posible. Para incluir la temperatura en la descripción del sistema, este trabajo sigue el mismo procedimiento que se emplea en el formalismo BCS; es decir, a través de una transformación de Bogoliubov como se muestra a continuación.

### 3.4. Inclusión de la temperatura.

El procedimiento para incluir la temperatura consiste en hacer una transformación de Bogoliubov a los operadores  $\{\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{-\mathbf{k}}\}$  que aparecen en el Hamiltoniano (3.3.1), o más convenientemente en el Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{K}}$  (3.3.11). Esta transformación tiene como finalidad diagonalizar el Hamiltoniano e introduce el concepto de cuasipartícula; estas cuasipartículas -como se muestra más adelante- no interactúan y son fermiones por lo que obedecen la estadística de Fermi-Dirac. Así, es posible introducir la temperatura al sistema de fermiones con interacción.

La transformación de Bogoliubov que diagonaliza el Hamiltoniano de fermiones con interacción, se define como:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}\hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, \\ \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\hat{a}_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}.\end{aligned}\tag{3.4.1}$$

Los coeficientes  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$ , se escogen de tal manera que digonalicen el Hamiltoniano y son independientes de los coeficientes variacionales de la función BCS que se analizó en la sección anterior -aunque se emplea la misma notación-. Como se mostrará, los valores que diagonalizan el Hamiltoniano son los mismos que se encontraron al minimizar la función BCS (3.3.15). Esto es de esperar ya que ambos tratamientos deben ser compatibles.

Para que la transformación de Bogoliubov sea canónica es necesario que satisfaga las mismas reglas de conmutación de los operadores de fermiones  $\{\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{-\mathbf{k}}\}$ , es decir:

$$\begin{aligned}\{\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} &= \{\hat{a}_{-\mathbf{k}}, \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^{\dagger}\} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \\ \{\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}\} &= \{\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{-\mathbf{k}'}\} = \{\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{a}_{-\mathbf{k}'}\} = 0.\end{aligned}\tag{3.4.2}$$

Así, los operadores  $\{\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{-\mathbf{k}}\}$  también tienen carácter fermiónico. De estas reglas de conmutación se obtiene la siguiente relación entre los coeficientes:

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1,\tag{3.4.3}$$

misma que se encontró para los coeficientes de la función BCS, resultado de su normalización. A partir de la definición (3.4.1), se obtiene la transformación inversa:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}.\end{aligned}\tag{3.4.4}$$

En el apéndice A, se muestran detalladamente los pasos de aplicar la transformación de Bogoliubov al operador gran potencial (3.3.11) y cuyo resultado final es que el Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{K}}$  se puede escribir como la suma de dos términos:

$$\hat{\mathcal{K}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2,\tag{3.4.5}$$

donde cada término esta definido como:

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \\ &\quad + \frac{1}{V} \tilde{U}(0) \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}), \\ \hat{H}_2 &= \sum_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \left[ 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \frac{1}{V} \tilde{U}(0) \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) \right].\end{aligned}\tag{3.4.6}$$

y en los que se han introducido los operadores:

$$\begin{aligned}\hat{m}_{\mathbf{k}} &= \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \\ \hat{m}_{-\mathbf{k}} &= \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}.\end{aligned}\tag{3.4.7}$$

Es inmediato identificar estos operadores como de número (en analogía al operador:  $\hat{n}_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}$ ). En este sentido, podemos asignarle el carácter de cuasipartículas a los operadores  $\{\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{-\mathbf{k}}\}$  y por lo tanto  $\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle$  y  $\langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle$  corresponde al número medio de *cuasipartículas* en los estados  $\{\mathbf{k}, \uparrow\}$  y  $\{\mathbf{k}, \downarrow\}$  respectivamente. Estas cuasipartículas, no son de ninguna manera los pares de Cooper que identificamos en la sección 3.1; sino, de acuerdo a su definición, una superposición de los fermiones individuales que componen al sistema. Esto tiene una analogía con una red cristalina donde los fonones -cuasipartículas de la red- se definen como la superposición de los modos normales de la red que desacoplan o diagonalizan el Hamiltoniano del sistema.

Analizando el primer término de (3.4.6)  $\hat{H}_1$ , notamos que tiene la forma diagonal que buscamos, ya que contiene únicamente operadores de número; mientras que  $\hat{H}_2$  contiene los elementos diagonales:  $\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$  y  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger$ . Además, cuando  $\hat{m}_{\mathbf{k}} = \hat{m}_{-\mathbf{k}} = 0$ ,  $\hat{H}_1$  recupera la expresión (3.3.11) que describe al sistema en  $T = 0$ . Así, es inmediato determinar los coeficientes  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$  imponiendo que:  $\hat{H}_2 = 0$ , lo que conduce a la siguiente ecuación:

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + \frac{\tilde{U}(0)}{V} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} (1 - \langle \hat{m}_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}'} \rangle) = 0, \quad (3.4.8)$$

donde ya se ha tomado el valor medio. En el caso:  $\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle = 0$ , esta ecuación corresponde a la que se encontró en el análisis a  $T = 0$ , ecuación (3.3.12). Entonces, si ahora se define al gap como:

$$\Delta = -\frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} (1 - \langle \hat{m}_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}'} \rangle), \quad (3.4.9)$$

la ecuación (3.4.8) queda idéntica a la obtenida en  $T = 0$ , ecuación (3.3.14):

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Delta V (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) = 0. \quad (3.4.10)$$

lo que conduce a los mismos resultados (3.3.12), tal como se había mencionado al inicio de la sección.

$$\left. \begin{aligned} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{aligned} \right\} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (3.4.11)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}.$$

A partir de la definición del gap, ecuación (3.4.9), y los valores de  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$ , se obtiene la ecuación del gap:

$$\Delta = -\frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}} (1 - \langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle - \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle). \quad (3.4.12)$$

Al conocer las distribuciones de cuasipartículas:  $\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle$  y  $\langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle$ , entonces el problema queda resuelto de la misma manera que antes: la ecuación anterior determina el gap  $\Delta$  en término de las variables del sistema, que sustituido en (3.4.11) determina los coeficientes  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$ .

Para mostrar las propiedades de las cuasipartículas, que han sido introducidas a través de la transformación de Bogoliubov, conviene escribir el Hamiltoniano  $\mathcal{K}$  en términos de las variables del sistema y del gap  $\Delta$ . Puesto que  $\hat{\mathcal{K}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ , entonces sustituyendo la definición del gap (3.4.9)

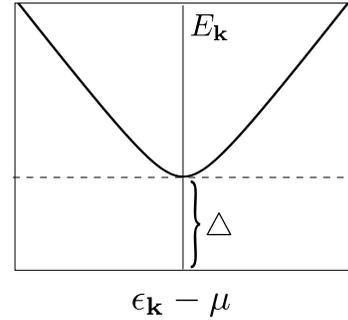
en  $\langle \hat{H}_1 \rangle$ , y manipulando la ecuación (3.4.8) junto con la restricción (3.4.3) se obtiene el siguiente resultado:

$$\mathcal{K} = \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] - \frac{V}{\tilde{U}(0)} \Delta^2 + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle). \quad (3.4.13)$$

Cuando  $\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle = 0$  se recupera la expresión (3.3.18) del sistema a  $T = 0$ , y esto corresponde a que el sistema a temperatura cero no contiene cuasipartículas; esto mismo se puede verificar directamente de la función de onda BCS y de la definición de los operadores  $\{\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{-\mathbf{k}}\}$  calculando:  $\langle \hat{m}_{\pm\mathbf{k}} \rangle_{BCS} = 0$ . Entonces el término  $\sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle)$  en el Hamiltoniano  $\mathcal{K}$  corresponde a la contribución de energía cinética de las cuasipartículas, donde  $E_{\mathbf{k}}$  representa su espectro de energía y cuya expresión está dada por (ecuación 3.4.11):

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}. \quad (3.4.14)$$

Espectro de energía de las cuasipartículas.



En este sentido es posible interpretar al gap  $\Delta$  como una brecha de energía en el espectro de las cuasipartículas. Estas cuasipartículas no interactúan entre ellas, pues no hay término de interacción en la expresión (3.4.13). Puesto que los operadores de las cuasipartículas  $(\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{-\mathbf{k}})$  satisfacen las mismas reglas de anticonmutación que los fermiones originales  $(\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{-\mathbf{k}})$ , entonces tiene carácter fermiónico y por lo tanto obedecen la estadística de Fermi-Dirac con potencial químico nulo:

$$\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1}; \quad (3.4.15)$$

( $\beta \equiv 1/k_B T$ ) esto se debe a que en  $T = 0$ , tal como se ha mostrado, hay ausencia de cuasipartículas:  $\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle = 0$ . Esto es igual a que en el sistema no se conserve el número de cuasipartículas<sup>4</sup>.

De esta manera, al identificar estas cuasipartículas que satisfacen la estadística de Fermi-Dirac, se introduce la temperatura al gas de fermiones. Al introducir la temperatura debe quedar claro que ahora el gap  $\Delta$  tiene una dependencia con esta a través de la ecuación (3.4.12).

Finalmente se hace un cambio de representación al *gran potencial*  $\Omega$ , a través de la siguiente transformación de Legendre:

$$\Omega \equiv E - \mu N - TS, \quad (3.4.16)$$

<sup>4</sup>Algo similar ocurre en un gas de fotones (bosones), donde el potencial químico es nulo en cuyo caso no hay conservación de fotones.

donde  $S$  representa la entropía de las cuasipartículas, en términos del Hamiltoniano  $\mathcal{K} = E - \mu N$ , se obtiene el gran potencial como:

$$\Omega = \mathcal{K} - TS. \quad (3.4.17)$$

Para las cuasipartículas, en dos estados posibles:  $\mathbf{k} \equiv |\mathbf{k}, \uparrow\rangle$  y  $-\mathbf{k} \equiv |-\mathbf{k}, \downarrow\rangle$ , la entropía esta dada por:

$$S = -k_B \sum_{\mathbf{k}} \left[ \langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle \ln \langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle + (1 - \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle) \ln (1 - \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle) \right], \quad (3.4.18)$$

sustituyendo la distribución de Fermi-Dirac (3.4.15), resulta:

$$S = 2k_B \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 + e^{-\beta E_{k\nu}} \right). \quad (3.4.19)$$

Entonces la expresión del gran potencial se escribe como:

$$\Omega = \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] - \frac{V}{\tilde{U}(0)} \Delta^2 - 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}} \right). \quad (3.4.20)$$

Ahora, introduciendo explícitamente la longitud de dispersión  $a$ , a través de la ecuación (2.4.28), se obtiene:

$$\Omega = \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] + \left( \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right) V \Delta^2 - 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 + e^{-\beta \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}} \right), \quad (3.4.21)$$

De la misma manera que se obtuvo antes, se puede verificar que la ecuación general del gap (3.4.9) se obtiene como:  $(\partial\Omega/\partial\Delta) = 0$ , entonces el par de expresiones que caracterizan el sistema de fermiones con interacción a cualquier temperatura esta dado por:

$$\Omega(T, V, \mu, a) = \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] + \left( \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right) V \Delta^2 +$$

$$- 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 + e^{-\beta \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}} \right), \quad (3.4.22)$$

$$0 = \left( \frac{\partial\Omega}{\partial\Delta} \right)_{T, V, \mu, a}, \quad \text{ecuacion del gap.}$$

La ecuación del gap determina:  $\Delta = \Delta(T, V, \mu, a)$ , que debe sustituirse de manera autoconsistente en  $\Omega(T, V, \mu, a)$ . Así, las propiedades termodinámicas se obtiene directamente de este par de ecuaciones -aplicando el límite termodinámico- y en el siguiente capítulo se presenta este análisis.

Parte II.

Resultados

## Termodinámica del gas de fermiones.

HA han sido comentados los trabajos experimentales con gases de fermiones en los que se ha evidenciado el estado BCS (pares de Cooper) y BEC molecular (condensado de Bose-Einstein). Esto ha sido factible aplicando un campo magnético que permite variar la interacción efectiva de los fermiones, a través de la longitud de dispersión. Esta propiedad, en la que variando la interacción entre los fermiones del gas se obtienen ambos estados, se le conoce como “*cruce BEC-BCS*”. Así, es natural atribuirle a la longitud de dispersión  $a$ , el carácter de variable termodinámica, puesto que es posible modificarla externamente y determina el estado del gas de fermiones. Junto con el reconocimiento de esta nueva variable, debe tomarse en cuenta el papel de su conjugada termodinámica. Esta variable, ha sido introducida reciente por S. Tan [Tan, 2008] con el nombre de “*variable de contacto*”, y se estudia de manera general en [Romero-Rochín, 2011]; además de que se ha logrado medir experimental [Stewart et al., 2010].

En este capítulo se hace una descripción de las propiedades termodinámicas del gas de fermiones incluyendo a la longitud de dispersión -más apropiadamente su inversa:  $1/a$ - y su conjugada, como variables de estado. El tratamiento aquí presentado esta basado en el formalismo BCS, descrito en el capítulo anterior; y la inclusión de la longitud de dispersión en el Hamiltoniano del gas de fermiones, junto con el procedimiento de “*renormalización*” definido por la expresión que se obtuvo en el capítulo 1:  $\frac{1}{\bar{U}(0)} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}$ . Esta forma de abordar el cruce BEC-BCS fue desarrollado por Leggett [Leggett, 1980] a temperatura cero; mientras que a temperatura finita se suelen utilizar métodos más sofisticados que incluyen funciones de Green [Perali et al., 2004] o métodos Monte Carlo [Astrakharchik et al., 2004b], entre otros.

Una de las propiedades más interesantes de este sistema, independientemente del signo de la longitud de dispersión, es que presenta el fenómeno de *superfluididez*. Este carácter se establece de acuerdo al criterio de Landau en el espectro de las cuasipartículas:  $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}$ , que está caracterizado por el parámetro gap. Esta propiedad ha sido verificada experimentalmente en ambos regímenes, a través de la aparición de vórtices cuando se hace rotar al gas [Zwierlein et al., 2005a].

## 4.1. Gran potencial del sistema de fermiones

En el capítulo anterior se obtuvo la expresión para el gran potencial  $\Omega$  del gas de fermiones:

$$\Omega(T, V, \mu, a) = \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] + \left( \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right) V \Delta^2 +$$

$$- 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 + e^{-\beta \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}} \right), \quad (4.1.1)$$

que junto con la ecuación del gap:

$$\left( \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} \right)_{T, V, \mu, a} = 0, \quad (4.1.2)$$

determinan las propiedades termodinámicas del sistema. Para ello es necesario aplicar el límite termodinámico:  $N, V \rightarrow \infty$ ; de tal manera que  $N/V = \text{constante}$ . Este límite produce que los niveles de energía  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  formen casi un continuo y las sumas de la expresión (4.1.1) son reemplazadas por integrales con el factor de la densidad de estados  $g(\epsilon)$ . Para un gas homogéneo de partículas libres confinadas en una caja de volumen  $V$ , la densidad de estados viene dada por:

$$g(\epsilon) = \frac{2\pi V (2m)^{2/3}}{h^3} \epsilon^{1/2}. \quad (4.1.3)$$

Como se ha mencionado el estado del gas de fermiones puede presentar dos regímenes con propiedades diferentes: régimen BCS, o BEC, dependiendo del signo de la longitud de dispersión. Esto motiva la introducción de la longitud de dispersión  $a$  como una variable que contribuye al estado del sistema, por lo tanto es conveniente recordar algunos de los resultados que se obtuvieron en el capítulo 2 respecto de esta cantidad.

El primer resultado establece que en el régimen de bajas energías la amplitud de dispersión es una constante a la que se le conoce como **longitud de dispersión**:

$$f \approx -a, \quad (4.1.4)$$

la importancia de esta cantidad es que caracteriza la interacción entre las partículas. Por otra parte, se encontró que la amplitud de dispersión en general puede ser desarrollada como una serie de Born, ecuación (2.4.21), donde el primer término de esta serie viene dado por:

$$f^{(1)} \approx -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad (4.1.5)$$

siendo  $m$ , la masa de los fermiones. Entonces en el límite de bajas energías:  $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow 0$ , y con resultado de que en este régimen:  $f = -a$ , se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{1}{\tilde{U}(0)} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a}, \quad (4.1.6)$$

a siguiente orden en la serie de Born se obtiene al siguiente resultado (ecuación 2.4.28 en la página 39):

$$\frac{1}{\tilde{U}(0)} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (4.1.7)$$

Ambos resultados relacionan la transformada del potencial  $\tilde{U}(0)$ , con la longitud de dispersión  $a$ , lo que permite introducir esta variable en el gran potencial, tal como se hizo en el capítulo anterior y dio como resultado la expresión (4.1.1). Si se sustituye el primer orden de aproximación (4.1.6) en el gran potencial  $\Omega$ , entonces la ecuación del gap:  $\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\Delta}\right)_{T,V,\mu,a} = 0$ , diverge. Esto se puede ver al reemplazar (4.1.6) en el gran potencial y tomar el límite termodinámico, con lo cual se obtiene la ecuación del gap:

$$\frac{1}{a} \sim \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{1/2} \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{(\epsilon-\mu)^2 + \Delta^2}\right)}{\sqrt{(\epsilon-\mu)^2 + \Delta^2}}, \quad (4.1.8)$$

en el límite  $\epsilon \rightarrow \infty$ , se tiene que:  $\tanh(\epsilon) \rightarrow 1$ . Entonces el integrando tiende a  $\epsilon^{-1/2}$  y por lo tanto la integral diverge:

$$(\epsilon \rightarrow \infty) \Rightarrow \frac{1}{a} \sim \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{-1/2} \sim \epsilon^{1/2} \rightarrow \infty. \quad (4.1.9)$$

Esta divergencia se resuelve al sustituir el segundo orden de aproximación (4.1.7) en el gran potencial  $\Omega$ , y cuya expresión corresponde a la ecuación (4.1.1). Para estudiar las propiedades termodinámicas del gas de fermiones, es más conveniente definir el inverso de la longitud de dispersión:  $\eta \equiv 1/a$ . Así, el gran potencial se escribe como:

$$\begin{aligned} \Omega(T, V, \mu, \eta; \Delta) = & \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \right] + \left( \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{m}{4\pi\hbar^2} \eta \right) V \Delta^2 + \\ & - 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 + e^{-\beta\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}} \right), \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

que en el límite termodinámico, reemplazando las sumas por integrales con la densidad de estados (4.1.3), se transforma en:

$$\begin{aligned} \Omega(T, V, \mu, \eta; \Delta) = & \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{\hbar^3} \left\{ \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{1/2} \left[ (\epsilon - \mu) - \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2} \right] + \frac{\Delta^2}{2} \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{\epsilon} + \right. \\ & \left. - 2k_B T \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{1/2} \ln \left( 1 + e^{-\beta\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \right) \right\} - \frac{m}{4\pi\hbar^2} V \Delta^2 \eta. \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

Una propiedad que se verifica de inmediato es que cuando  $\Delta = 0$ , el gran potencial corresponde al de un gas de  $2N$  fermiones ideales (sin interacción):  $\Omega = -2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}]$ . Esta propiedad establece una transición de fase del gas de fermiones, entre el régimen ideal -sin interacción- y el superfluido que se describe en la sección 4.4.

## 4.2. Relaciones termodinámicas

Para establecer las propiedades de la longitud de dispersión como variable de estado, recordemos que esta magnitud caracteriza la interacción entre pares de partículas que componen al gas. Entonces, esta variable debe ser intensiva, ya que si se divide al sistema entero en pequeños subsistemas las propiedades de interacción entre las partículas en cada uno de estos subsistemas no tienen por que cambiar -serán las mismas- y por lo tanto la longitud de dispersión es la misma en cada uno de los subsistemas. Esto es precisamente lo que caracteriza a una variable intensiva.

Sin embargo, por cada variable de estado existe su variable conjugada. Entonces, al introducir a la longitud de dispersión como variable de estado, es completamente válido definir su variable conjugada -que denotaremos por  $\Sigma$ - como:

$$\Sigma \equiv - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \right)_{T,V,\mu}, \quad (4.2.1)$$

esta nueva variable, al ser conjugada de una variable intensiva, debe ser extensiva; lo cual se puede verificar de inmediato a partir de la expresión anterior, ya que  $\Omega$  es extensiva y  $\eta$  es intensiva. También se puede verificar que las unidades de esta variable son de energía por longitud. A partir de estas dos nuevas variables:  $(\eta, \Sigma)$ , se puede definir el trabajo debido al cambio en la variable extensiva  $\Sigma$  como:

$$\delta w_\eta \equiv -\eta d\Sigma. \quad (4.2.2)$$

A la variable  $\Sigma$  se le conoce como “*variable de contacto*” [Tan, 2008], y más adelante se ampliarán sus propiedades. De esta manera, las propiedades de interacción entre los fermiones que componen al gas se introducen en la termodinámica, a través del par de variables conjugadas:  $(\eta$  y  $\Sigma)$ ; entonces el conjunto de variables que determinan el estado del gas de fermiones son:

$$\begin{array}{l} \text{variables} \\ \text{intensivas} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} T \text{ temperatura,} \\ \mu \text{ potencial químico,} \\ P \text{ presión,} \\ \eta \text{ longitud de dispersión.} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{variables} \\ \text{extensivas} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} S \text{ entropía,} \\ N \text{ número de partículas,} \\ V \text{ volumen,} \\ \Sigma \text{ contacto,} \end{array} \right. \quad (4.2.3)$$

Las variables  $\{T, \mu, P\}$ , con sus correspondientes conjugadas  $\{S, N, V\}$ , son las usuales para un gas ideal homogéneo; mientras que las dos variables adicionales  $\{\Sigma, \eta\}$  son una consecuencia de la interacción entre los fermiones del gas. Adicionalmente, como resultado de la teoría BCS, se encontró el parámetro:  $\Delta$  (gap), que esta determinado por la ecuación:  $\left( \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} \right) = 0$ .

Con este conjunto de variables la ecuación de Gibbs se escribe como:

$$dE = TdS - pdV + \mu dN + \eta d\Sigma. \quad (4.2.4)$$

A partir de la cual se establece que la energía, en su representación fundamental, es función de las variables extensivas:  $E = E(S, V, N, \Sigma)$ . Para cambiar de representación al gran potencial  $\Omega$ , donde las variables independientes sean ahora:  $T, V, \mu, \eta$ ; se realiza la siguiente transformación de Legendre:

$$\Omega(T, V, \mu, \eta) = E - TS - \mu N - \eta \Sigma, \quad (4.2.5)$$

que junto con la ecuación de Euler (que establece la extensividad de las variables  $S, V, N, \Sigma$ ):

$$E = TS - pV + \mu N + \eta \Sigma, \quad (4.2.6)$$

permite llegar al siguiente resultado:

$$\Omega = -pV. \quad (4.2.7)$$

Diferenciando la ecuación (4.2.5), y utilizando la ecuación de Gibbs (4.2.4) se obtiene la diferencial del gran potencial  $\Omega$ :

$$d\Omega = -SdT - Nd\mu - p dV - \Sigma d\eta, \quad (4.2.8)$$

de esta expresión se obtiene el conjunto de ecuaciones (más la ecuación del gap) que relacionan todas las variables del sistema:

$$\begin{aligned} -N(T, \mu, \eta; \Delta) &= \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V, \eta}, \\ -p(T, \mu, \eta; \Delta) &= \left( \frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \mu, \eta}, \\ -S(T, \mu, \eta; \Delta) &= \left( \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu, \eta}, \\ -\Sigma(T, \mu, \eta; \Delta) &= \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \right)_{T, V, \mu}, \\ 0 &= \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} \right)_{T, V, \eta, \mu}, \quad \text{ecuación del gap.} \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

Este conjunto de ecuaciones relaciona todas las variables del sistema y determina completamente el estado termodinámico del gas. Es importante resaltar que la ecuación del gap ha sido obtenida independientemente de la termodinámica, como resultado de la teoría BCS. Esta ecuación determina al gap como función de las variables del sistema:  $\Delta = \Delta(T, V, \mu, \eta)$ , cuyo valor debe ser sustituido consistentemente en el resto de las ecuaciones. En este sentido el formalismo BCS introduce un nuevo parámetro:  $\Delta$ , pero a su vez una ecuación más:  $\left( \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} \right)_{T, V, \eta, \mu} = 0$ , y por lo tanto el sistema queda completo.

Es conveniente recordar que estamos analizando un gas de fermiones en dos estados de espín diferentes ( $\uparrow, \downarrow$ ) en la misma proporción:  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = N/2$ , donde  $N$  representa el número total de fermiones. En el análisis de este trabajo se considera un sistema aislado, por lo que entonces la densidad es una constante:  $N/V = \text{constante}$ .

Para simplificar un poco las ecuaciones, es posible adimensionalizar el gran potencial (4.1.11) introduciendo los parámetro  $\epsilon_0$  y  $k_0$ , cuyas unidades sean de energía e inverso de longitud, respectivamente; relacionados además a través de la siguiente ecuación (siendo  $m$  la masa de las partículas):

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \quad (4.2.10)$$

Con esto, el gran potencial adquiere la siguiente expresión:

$$\frac{\tilde{\Omega}}{V} = \frac{k_0^3}{4\pi^2} \left[ \int_0^\infty \left\{ x^{1/2} \left[ (x - \tilde{\mu}) - \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right] + \frac{\tilde{\Delta}^2}{2x^{1/2}} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2x^{1/2}}{\tilde{\beta}} \ln \left( 1 + e^{-\tilde{\beta}\sqrt{(x-\tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right) \right\} dx - \frac{\pi \tilde{\Delta}^2 \tilde{\eta}}{2} \right], \quad (4.2.11)$$

donde la variable de integración esta definida adimensionalmente como:  $x = \epsilon/\epsilon_0$ ; y las variables del sistema se adimensionan de la siguiente manera:

$$\tilde{\Omega} \equiv \Omega/\epsilon_0, \quad \tilde{\beta} \equiv \beta/\epsilon_0, \quad \tilde{\mu} \equiv \mu/\epsilon_0, \quad \tilde{\Delta} \equiv \Delta/\epsilon_0, \quad \tilde{\eta} \equiv \eta/k_0. \quad (4.2.12)$$

Toda la expresión dentro de los corchetes del gran potencial (4.2.11) es adimensional, y se nota claramente que el parámetro  $k_0$  debe tener unidades de inverso de longitud. Debido a que los parámetros  $\epsilon_0$  y  $k_0$  están relacionados por la ecuación (4.2.10), entonces únicamente uno de ellos define la adimensionalización de todas las variables. Uno de las propiedades importantes que caracterizan un sistema de fermiones es la energía de Fermi, de tal manera que es inmediato tomar esta cantidad como unidades del sistema:

$$\epsilon_0 = \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}, \\ k_0 = k_F = \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}. \quad (4.2.13)$$

Puesto que la energía de Fermi depende de la densidad  $N/V$  -que consideraremos como constante- entonces es más conveniente trabajar con cantidades específicas en las variables extensivas del sistema. Así, de la expresión (4.2.11) con  $k_0 = k_F$ , el gran potencial específico  $\tilde{\omega} \equiv \tilde{\Omega}/N$  queda como:

$$\tilde{\omega} \equiv \frac{\tilde{\Omega}}{N} = \frac{3}{4} \left[ \int_0^\infty \left\{ x^{1/2} \left[ (x - \tilde{\mu}) - \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right] + \frac{\tilde{\Delta}^2}{2x^{1/2}} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2x^{1/2}}{\tilde{\beta}} \ln \left( 1 + e^{-\tilde{\beta}\sqrt{(x-\tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right) \right\} dx - \frac{\pi \tilde{\Delta}^2 \tilde{\eta}}{2} \right]. \quad (4.2.14)$$

A partir de esta expresión las ecuaciones (4.2.9), quedan de la siguiente forma:

### Densidad de partículas

( $\rho = N/V = \text{constante}$ ):

$$1 = \frac{3}{4} \int_0^\infty dx x^{1/2} \left[ 1 - \frac{(x - \tilde{\mu})}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left( \frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right) \right]. \quad (4.2.15)$$

### Presión:

$$p = -\rho\omega. \quad (4.2.16)$$

**Entropía**

$$(\tilde{s} = \frac{S}{Nk_B}):$$

$$\tilde{s} = \frac{3}{4} \left[ 2\tilde{\beta} \int_0^\infty dx x^{1/2} \frac{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}}{e^{\tilde{\beta}\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} + 1} + 2 \int_0^\infty dx x^{1/2} \ln \left( 1 + e^{-\tilde{\beta}\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right) \right]. \quad (4.2.17)$$

**Variable de contacto**

$$(\tilde{\zeta} = \frac{k_F \Sigma}{\epsilon_F N}):$$

$$\tilde{\zeta} = \frac{3}{4} \pi \tilde{\Delta}^2. \quad (4.2.18)$$

**Ecuación del gap:**

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dx \left\{ \frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left( \frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right) \right\} - \tilde{\eta} = 0. \quad (4.2.19)$$

Este conjunto de ecuaciones esta acoplado en todas las variables del sistema. En este trabajo se estudian principalmente el potencial químico y el gap, como función de la temperatura y la longitud de dispersión:  $(T, \eta)$ . Para ello, en el apéndice B se describe el procedimiento para resolver numéricamente el par de ecuaciones (4.2.15) y (4.2.19), ambas ecuaciones determinan por completo:  $\mu(T, \eta)$  y  $\Delta(T, \eta)$ . Las curvas que se presentan en las siguientes secciones son resultado de este procedimiento.

**4.3. Variable de contacto  $\Sigma$ .**

Como se ha venido insistiendo, el motivo de este trabajo consiste en introducir la longitud de dispersión  $\eta$  ( $= 1/a$ ) como una variable de estado que contribuye a la termodinámica del sistema. Esto permite definir la variable conjugada  $\Sigma$  a través de la ecuación (4.2.1). Esta variable ha sido identificada independientemente en un trabajo de Shina Tan [Tan, 2008] desde otro enfoque, al analizar un gas de fermiones con interacción, y que se describe a continuación.

El principal resultado del trabajo de S. Tan establece la siguiente relación:

$$\frac{\hbar^2 V \mathcal{C}}{4\pi m} = \left( \frac{dE}{d(-1/a)} \right)_S. \quad (4.3.1)$$

donde, se identifica a la **variable de contacto** como:

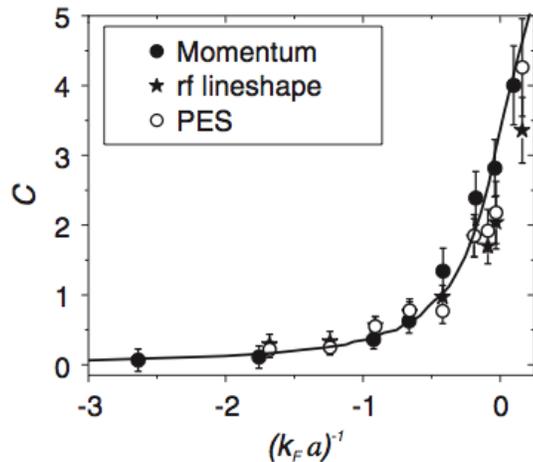
$$\mathcal{C} \equiv \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \infty} k^4 n_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (4.3.2)$$

Esta definición considera el hecho que en el límite de momentos muy grandes ( $\mathbf{k} \rightarrow \infty$ ), la distribución de partículas  $n_{\mathbf{k}\sigma}$  en un gas de Fermi con interacción decae como:  $1/k^4$  [ibid]. Entonces la relación:  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \infty} k^4 n_{\mathbf{k}\sigma}$ , tiende a una constante que se identifica como  $\mathcal{C}$ . Así, la relación (4.3.1) representa una igualdad entre dos propiedades diferentes en un gas de Fermi con interacción: por una parte la distribución de partículas en el gas; y por el otro, la variación adiabática del gas respecto

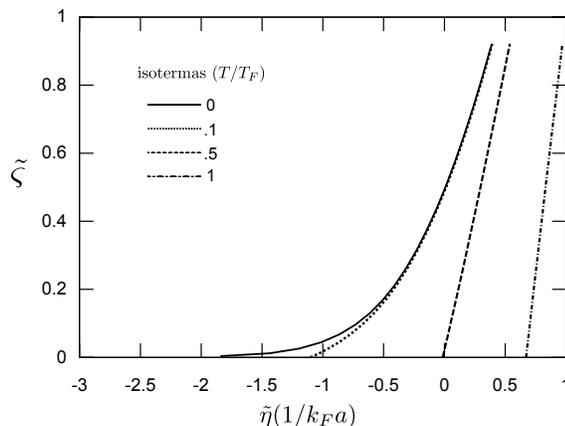
a la longitud de dispersión (más preciso:  $1/a$ ). Esta relación ha sido verificada experimentalmente, midiendo ambos lados de la ecuación [Stewart et al., 2010].

Sin embargo, de acuerdo al reconocimiento de la longitud de dispersión  $\eta$  como variable de estado, entonces el lado derecho de la expresión (4.3.1) es precisamente la definición de su variable conjugada<sup>1</sup>:  $\Sigma$ , tal como establece la ecuación (4.2.1). Entonces, se tiene que la variable que hemos denominado como de *contacto*:  $\Sigma$ , corresponde a la misma que ha identificada S. Tan:  $\mathcal{C}$ , es decir  $\Sigma \sim \mathcal{C}$ .

La relevancia del trabajo de S. Tan ha sido ampliamente considerada, ya que repercute de manera importante en el campo de los gases de Fermi; en lo que respecta a este trabajo, ha motivado corroborar experimentalmente la ecuación (4.3.1), y por lo tanto a la medición directa de la variable de contacto en un gas de Fermi al que se le varía la longitud de dispersión [Stewart et al., 2010]. La figura 4.1c muestra los resultados de medir ambos lados de la ecuación (4.3.1) al variar la longitud de dispersión:  $1/k_F a$  [ibid]. Los círculos negros en esta gráfica, corresponden a la medición de  $\mathcal{C}$ , de acuerdo a su definición (4.3.2); mientras que los círculos vacíos corresponden a la medición en la energía, al variar adiabáticamente la longitud de dispersión  $1/k_F a$ , es decir a la definición termodinámica de la variable de contacto. Por otra parte, la figura 4.1d presenta los resultados numéricos de la variable de contacto  $\Sigma$ , como función de la longitud de dispersión  $\eta$  para diferentes temperaturas, y obtenidos a partir del par de ecuaciones (4.2.15) y (4.2.19), ambas gráficas muestran una correspondencia cualitativa.



(c) Medición experimental de la variable de contacto (círculos vacíos) en función de la longitud de dispersión ( $1/k_F a$ ), en un gas de átomos de  $^{40}\text{K}$  a una temperatura de:  $T/T_F = 0,11$  ( $T_F$  es la temperatura de Fermi) [Stewart et al., 2010].



(d) Curvas de la variable de contacto:  $\zeta \equiv \frac{k_F}{\epsilon_F} \frac{\Sigma}{N}$ , como función de la longitud de dispersión:  $\tilde{\eta} \equiv 1/k_F a$ , para diferentes valores de la temperatura, a partir de resolver numéricamente el par de ecuaciones acopladas (4.2.15) y (4.2.19).

**Figura 4.1.:** Comportamiento de la variable de contacto.

<sup>1</sup>En la representación de la energía:  $E(S, V, N, \eta)$ , se tiene que  $\Sigma = - \left( \frac{dE}{d\eta} \right)_S$ .

## 4.4. Régimen superfluido.

Uno de los resultados más importantes de la teoría BCS, tal como se mostró en el capítulo anterior, es la de introducir el parámetro **gap**  $\Delta$ . Este parámetro, está relacionado con el espectro de energía de las cuasipartículas:

$$E_{\mathbf{k}}(k) = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right)^2 + \Delta^2}. \quad (4.4.1)$$

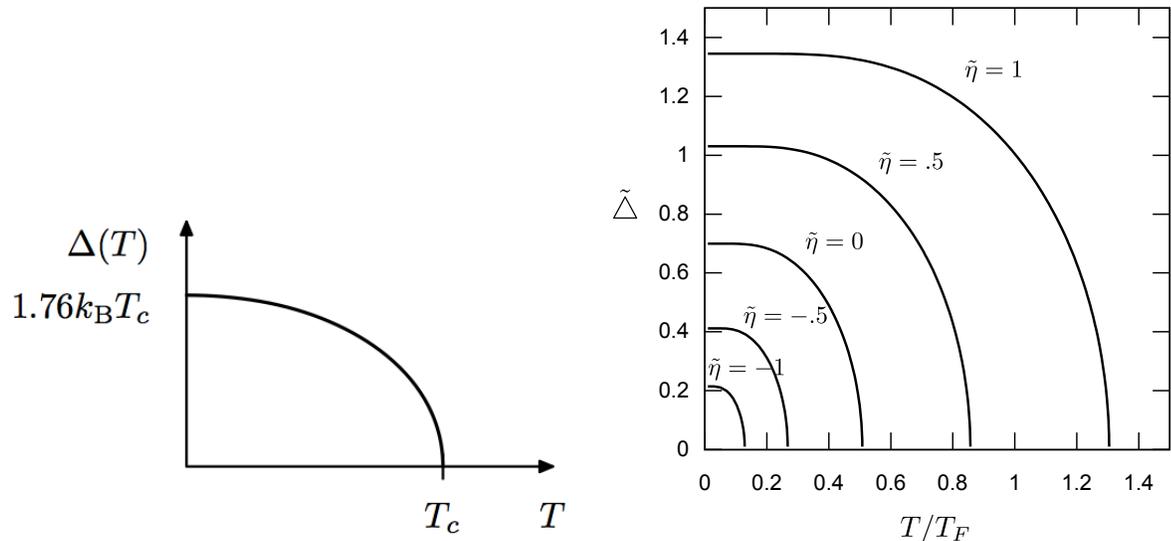
Estas cuasipartículas se definen a través de la transformación de Bogoliubov<sup>2</sup>, cuya propiedad permite diagonalizar el Hamiltoniano del gas de fermiones con interacción. Este concepto es de gran relevancia, ya que permite cambiar de esquema: de un sistema de fermiones con interacción y difícil de tratar, al de un sistema de cuasipartículas -también fermiones- libres que no interactúan<sup>3</sup>. Esta representación del sistema, en términos de cuasipartículas conlleva la simplicidad de que se conocen sus expresiones termodinámicas, y que corresponden a las de un gas de fermiones ideales, cuyo espectro está dado por (4.4.1). Esto además permite introducir la temperatura en el sistema, algo que no parece tan directo a partir de la función BCS. Por último hay que decir que la forma del espectro de las cuasipartículas (4.4.1) determina que el sistema presenta la propiedad de **superfluidez**.

Tal como se ha hecho notar antes, cuando  $\Delta = 0$  el gran potencial se reduce al de un gas de  $2N$  fermiones ideales y por lo tanto representa un cambio de comportamiento en el gas. En la teoría BCS el gap tiene una dependencia con la temperatura, como lo muestra la figura 4.2a: alcanza un valor máximo en  $T = 0$  y, se anula a partir de cierta temperatura crítica  $T_c$ . Por otro lado, la figura 4.2b contiene los resultados obtenidos numéricamente a partir del par de ecuaciones (4.2.15) y (4.2.19), del gap como función de la temperatura, para diferentes valores de  $\eta$ . De estas gráficas, se observa el mismo comportamiento para los diferentes valores de  $\eta$ ; y en el régimen de interacción débilmente atractiva ( $\eta < 0$ ) se verifica el resultado de la teoría BCS, como era de esperar. En el régimen de interacción fuertemente atractiva ( $\eta > 0$ ),  $\Delta$  toma valores mayores; sin embargo, como se muestra en la siguiente sección, la magnitud del gap -en este régimen- es despreciable respecto al potencial químico.

La importancia del comportamiento del gap con la temperatura, es que corresponde al de una transición de fase (se anula abruptamente y con pendiente vertical en  $T_c$ ). Esta propiedad es bien conocida dentro de la fenomenología de la superconductividad, donde  $\Delta$  representa el *parámetro de orden* que describe la transición de fase al estado superconductor. Sin embargo, esta transición es de carácter más general y se presenta en ambos regímenes del gas de fermiones: BCS ( $\eta < 0$ ) y de bosones moleculares ( $\eta > 0$ ), como se puede ver del comportamiento del gap para diferentes valores de  $\eta$  y representa una transición de fase al **estado superfluido**.

<sup>2</sup>Ver sección 3.4 en la página 50

<sup>3</sup>Esto tiene una analogía cuando se resuelve un sistema de osciladores acoplados cambiando a las coordenadas de modos normales, y que en una red cristalina definen a los fonones.



(a) Comportamiento del gap en la teoría BCS, de la superconductividad, con la temperatura. (b) Comportamiento del gap con la temperatura, para diferentes valores de la longitud de dispersión  $\eta = 1/k_F a$

**Figura 4.2.:** Comportamiento del gap con la temperatura.

El estado superfluido se caracteriza por la ausencia de viscosidad en un fluido, y es un fenómeno que representa por sí mismo todo un campo dentro de la física. Para los propósitos de este trabajo, simplemente mencionaremos que existe el “*criterio de superfluidéz*” propuesto por Landau [Landau and Lifshitz, 1980, pp. 89] para determinar si un sistema es capaz de presentar este fenómeno. Este criterio establece ciertas propiedades que debe cumplir la relación de dispersión de la partículas o cuasipartículas del sistema y que satisface la expresión (4.4.1), cuando  $\Delta \neq 0$ . De esta manera, la transición de fase viene dada cuando el parámetro  $\Delta$  se anula y esto define la temperatura crítica de la transición  $T_c$ . La temperatura crítica es función de la longitud de dispersión  $\eta$ , y la figura 4.3a muestra esta curva crítica ( $\Delta = 0$ ). La posibilidad de esta transición de fase para cualquier valor de la longitud de dispersión, se verifica también en la presencia de una discontinuidad en la derivada del potencial químico que se aprecia en la figura 4.3b, y que coincide con la curva  $\Delta = 0$  mostrada en la figura 4.3b. De ambas figuras se puede notar la predominancia del estado superfluido en el régimen  $\eta > 0$ , y que corresponde al de bosones moleculares, como se verá en la siguiente sección.

La evidencia del estado superfluido en ambos regímenes (BEC-BCS) se ha demostrado experimentalmente, al variar la longitud de dispersión a través de campos magnéticos en un gas de fermiones, en la aparición de vórtices cuantizados cuando se hace rotar el gas (ver figura 4.4) [Zwierlein et al., 2005a]. La presencia de estos vórtices en un líquido cuántico que rota es un resultado de que el estado superfluido se puede representar por una función de onda “macroscópica”; es decir, el sistema entero se puede representar por un función de onda simple:  $\psi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0(\mathbf{r})}e^{i\theta}$ , con una amplitud y una fase que dependen de la densidad espacial [Landau and Lifshitz, 1980, pp: 117].

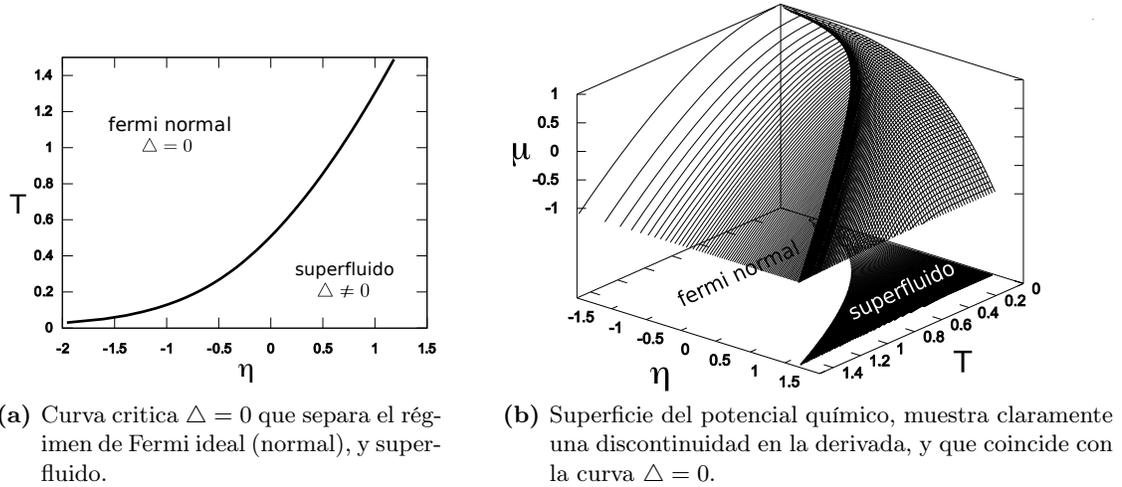
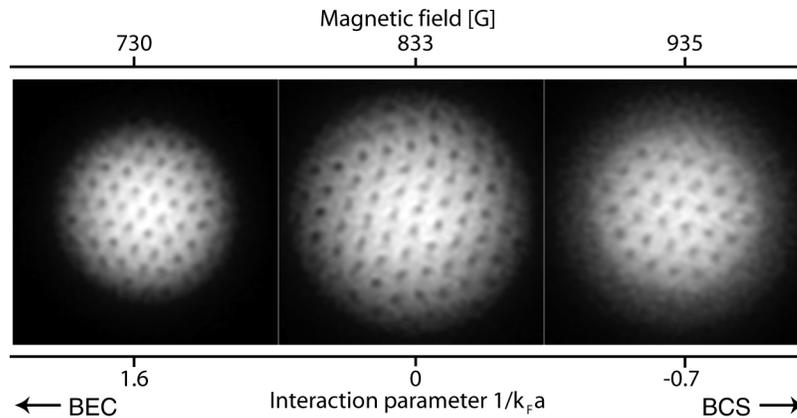


Figura 4.3.: Transición de fase.

Figura 4.4.: Vórtices cuantizados en un gas de Fermi en ambos regímenes: BCS y BEC (imagen tomada del sitio: [http://cua.mit.edu/ketterle\\_group/Nice\\_pics.htm](http://cua.mit.edu/ketterle_group/Nice_pics.htm))

## 4.5. Cruce BEC-BCS, $T = 0$ .

Uno de los logros experimentales más recientes en el área de los gases atómicos ultrafríos, ha sido la de observar la fase de condensado de Bose-Einstein (BEC) a partir de un gas de fermiones en dos estados de espín opuestos [Greiner et al., 2003][Zwierlein et al., 2003a]. Esto ha sido posible mediante la aplicación de campos magnéticos externos a partir de los cuales es posible modificar la longitud de dispersión en los fermiones del gas, a través de una resonancia de Feshbach tal como ha sido descrito en la introducción de esta tesis. Lo importante es que ha permitido observar ambos estado en un gas de Fermi: pasando de un régimen donde la longitud de dispersión es negativa  $a < 0$ , en cuyo caso los fermiones forman pares de Cooper; a un régimen donde la longitud de

dispersión toma valores positivos  $a > 0$ , y los fermiones forman moléculas bosónicas en la fase BEC (Condensado de Bose-Einstein). La existencia de estas moléculas ha sido probada a través de técnicas disociativas que permiten medir la energía de ligadura [Regal et al., 2003]. Este esquema, en el que a partir de un gas de fermiones se logra obtener un gas de bosones moleculares en fase BEC, con solo modificar la longitud de dispersión de los fermiones se le conoce como “*cruce BEC-BCS*” (*crossover*), debido a que el sistema pasa de un estado de pares de Cooper: **estado BCS**, a un estado de moléculas bosónicas en **fase BEC**.

Un primer acercamiento teórico al cruce BEC-BCS se debe a Leggett [Leggett, 1980], bajo la propuesta de que la función BCS -originalmente empleada para describir un sistema de fermiones débilmente interactuantes en el estado base ( $T = 0$ )- tiene un carácter más general y puede ser empleada independientemente de la forma en como interactúan los fermiones. Entonces, introduciendo la longitud de dispersión:  $\eta = 1/a$ , en la descripción del sistema, es posible obtener las propiedades de un régimen BCS de pares de Cooper o BEC de bosones moleculares, dependiendo del signo de  $\eta$ . Los resultados obtenidos por Leggett, y que se verifican a partir de las relaciones termodinámicas (4.2.15) y (4.2.19), se describen a continuación.

### Régimen BCS.

Cuando la longitud de dispersión es negativa:  $\eta < 0$ , los fermiones forman pares de Cooper tal como se mostró en el capítulo 3. En este caso, se obtiene que el valor del gap decae exponencialmente con  $\eta$  de la siguiente manera:

$$\Delta \approx \frac{8}{e^2} \epsilon_F e^{-\pi/2k_F a} \sim e^{-\eta}, \quad (4.5.1)$$

lo cual esta de acuerdo al resultado de la teoría BCS en la cual el gap decae exponencialmente con una constante  $\lambda$  que esta relacionado con las propiedades de interacción atractiva entre electrones [Annett, 2004, pp. 143]:  $\Delta_{\text{superconductor}}(T = 0) \sim \hbar\omega_D e^{-1/\lambda}$ .

Más importante aún es notar que la expresión del gap en este régimen (4.5.1), corresponde a la energía de los pares de Cooper en un gas de fermiones, y que se obtuvo en el capítulo 3 (ecuación 3.1.15 en la página 45):

$$|E_p| = \frac{8}{e^2} \epsilon_F e^{-\pi/k_F |a|} = \Delta. \quad (4.5.2)$$

Por otro lado, el potencial químico es positivo y conforme  $\eta \rightarrow -\infty$ , éste tiende a la energía de Fermi :

$$\mu \approx \epsilon_F, \quad (\eta \rightarrow -\infty); \quad (4.5.3)$$

lo que caracteriza el estado fermiónico del gas a temperatura cero.

También se puede notar a partir del espectro de las cuasipartículas:  $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}$  (ecuación 4.4.1), que su valor mínimo ( $\epsilon_0 = 0$ ) corresponde precisamente a  $\Delta$  (si medimos  $k$  respecto de la energía de Fermi) tal como se establece en la teoría BCS:

$$E_{\min} = \Delta = |E_p|, \quad \text{energía mínima de las cuasipartículas.} \quad (4.5.4)$$

En este régimen el parámetro importante es el gap, ya que por un lado coincide con la energía de “*ligadura*” de un par de Cooper (4.5.2); y también con la energía mínima necesaria para producir una cuasipartícula. Como se muestra a continuación, en el régimen BEC el parámetro importante y que establece las propiedades del gas es el potencial químico.

**Régimen BEC.**

Cuando la longitud de dispersión es positiva:  $\eta > 0$ , tal como se vio en el capítulo 2, se produce un estado ligado  $s$  ( $l = 0$ ) y los fermiones forman una molécula bosónica. En este caso, a partir de las ecuaciones (4.2.15) y (4.2.19) se obtiene que el gap se puede aproximar de la siguiente manera<sup>4</sup>:

$$\Delta \approx \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \frac{\epsilon_F}{(k_F a)^{1/2}} \sim \eta^{1/2}, \quad (4.5.5)$$

( $\eta \equiv 1/a$ ) mientras que el potencial químico lo hace de la siguiente:

$$\mu \approx -\frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\pi\hbar^2 a N}{m V} \sim -\eta^2. \quad (4.5.6)$$

Para la última igualdad se desprecia el segundo término, que va como:  $\sim 1/\eta$ . En este régimen, pares de fermiones con espín opuesto componen estados moleculares con espín entero, y es de esperar las propiedades de un gas de Bose o BEC en el sistema, debido a la presencia de estos bosones moleculares. Esto está totalmente de acuerdo a la expresión del potencial químico (4.5.6). Para verificarlo, recordemos que el gas está compuesto por igual número de fermiones en ambos estados de espín:  $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$ , y por lo tanto el potencial químico de cada especie es el mismo:  $\mu_\uparrow = \mu_\downarrow \equiv \mu$ . Si cada molécula bosónica está compuesta por un par de fermiones con espines opuestos, entonces el potencial químico de estas moléculas debe ser<sup>5</sup>:  $\mu_b = 2\mu$ , y de la expresión anterior tenemos:

$$\mu_b \approx -\frac{\hbar^2}{ma^2} + \frac{4\pi\hbar^2 (2a) N}{2m V}. \quad (4.5.7)$$

El primer término se puede identificar con la energía del estado ligado molecular<sup>6</sup>:  $E_b = -\hbar^2/ma^2$ , y proviene del hecho que los bosones están compuestos por un par de fermiones; mientras que el segundo término está relacionado con la interacción propia entre los bosones, lo cual se establece de la expresión para el potencial químico a temperatura cero de un gas de bosones “simples” que interactúan [Landau and Lifshitz, 1980, pp. 101]:  $\mu \approx \frac{4\pi\hbar^2 a N}{m V} \left[ 1 + \frac{32}{3} \sqrt{\frac{a^3 N}{\pi V}} \right]$ , aquí notamos que el primer término de esta expresión coincide con el segundo de (4.5.7) para un gas con  $N/2$  bosones, lo cual está de acuerdo a la proporción que debe haber de bosones moleculares, y longitud de dispersión  $2a$ . Este resultado establece además que la longitud de dispersión en la interacción entre moléculas es  $2a$ ; que es una aproximación al valor que se obtiene de un cálculo más detallado que considera la interacción entre moléculas diatómicas  $\approx 0,6a$  [Petrov et al., 2004].

De esta manera la expresión (4.5.7) corresponde a la de un gas con  $N/2$  bosones moleculares con energía de enlace  $E_b$ , a temperatura cero y que interactúan a través de una longitud de dispersión  $2a$ .

En este régimen se puede apreciar que el parámetro importante, y que establece la propiedad “bosónica”, es el potencial químico. Por una parte su valor es negativo, ecuación (4.5.6), además en esta variable aparece de manera natural la energía de enlace  $E_b$  del estado ligado molecular; además

<sup>4</sup>Para encontrar este resultado se supone que el potencial químico es negativo:  $\mu = -|\mu|$  y además que  $\mu \gg \Delta$  (ambos resultados se verifican después); lo que permite desarrollar hasta primer orden de  $\Delta$  en la ecuación (4.2.15) y sustituirlo en (4.2.19).

<sup>5</sup>Esto es una condición sobre la conservación de partículas, y representa el equilibrio químico:  $\mu_\uparrow + \mu_\downarrow = \mu_b$ , de donde  $\mu_b = 2\mu$ .

<sup>6</sup>En la sección 2.3 en la página 31 se mostró que:  $E_b = -\hbar^2/ma^2$ , corresponde a la energía del estado ligado  $s$  en un potencial atractivo, donde  $a$  corresponde a la longitud de dispersión.

en este caso la energía mínima en el espectro de las cuasipartículas corresponde precisamente al valor del potencial químico. Para verificar esto, notemos de las expresiones (4.5.5) y (4.5.6) que:

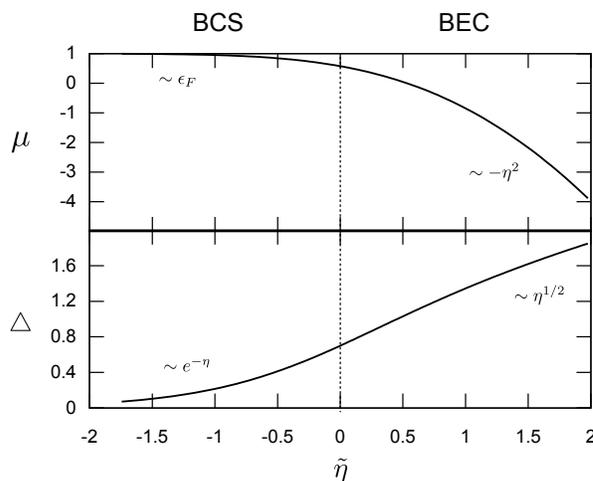
$$\begin{aligned} \frac{\Delta}{|\mu|} &\sim \eta^{-3/2}, \\ \Rightarrow \frac{\Delta}{|\mu|} &\sim 0, \quad (\eta \gg 1). \end{aligned} \quad (4.5.8)$$

Por lo tanto de la ecuación (4.4.1) con  $\epsilon_0 = 0$ , se obtiene que:

$$E_{min} \approx \mu \approx \frac{E_b}{2}. \quad \text{energía mínima de las cuasipartículas.} \quad (4.5.9)$$

Este resultado es el análogo al obtenido en el régimen BCS (4.5.4), es ese caso la energía mínima correspondía al valor del gap.

El resultado general, a través de resolver numéricamente las ecuaciones (4.2.15) y (4.2.19), del potencial químico y el gap como función de la longitud de dispersión ( $\eta \equiv 1/a$ ) a  $T = 0$  se muestra en la figura 4.5.



**Figura 4.5.:** Potencial químico y gap como función de la longitud de dispersión:  $\tilde{\eta} = 1/k_F a$ , en  $T = 0$  ( $\Delta$  y  $\mu$  están en unidades de Fermi).

## 4.6. Cruce BEC-BCS, temperatura finita.

Para incluir los efectos de temperatura en el cruce BEC-BCS, se han desarrollado diferentes acercamientos que incluyen uso de funciones de Green [Perali et al., 2004] o métodos Monte Carlo [Astrakharchik et al., 2004b]; en el artículo: [Chen et al., 2005], se hace una revisión de estos métodos, así como de otros y sus relaciones con la superconductividad. En este trabajo la forma en que se incluye la temperatura, sigue el mismo formalismo de la teoría BCS que se describió en el capítulo 3. Esto se consigue a través de la diagonalización del Hamiltoniano con la transformación de Bogoliubov y que permite cambiar de representación al de cuasipartículas. Estas cuasipartículas

no interactúan y por lo tanto las ecuaciones que satisfacen son las de un gas de ideal de Fermi, que se conocen perfectamente.

De esta manera, para obtener los resultados análogos a los que se mostraron a temperatura cero -del potencial químico y gap- se emplean el par de ecuaciones (4.2.15) y (4.2.19), para diferentes valores de la temperatura. Las curvas de la figura 4.6 muestran los resultados numéricos de resolver este par de ecuaciones para diferentes temperaturas (en unidades de temperatura de Fermi).

En lo que respecta al **régimen BCS** ( $\eta < 0$ ), se puede ver que el gap se anula para valores por encima de cierta temperatura:

$$\Delta = 0, \quad (T \gtrsim .5 T_F); \quad (4.6.1)$$

mientras que el potencial químico toma un valor constante:

$$\mu = \text{constante} < \epsilon_F, \quad (4.6.2)$$

(en  $T = 0$  se tiene que:  $\mu \approx \epsilon_F$ ), conforme aumenta la temperatura. Esto es de acuerdo al hecho que en el régimen BCS el gap se anula a partir de cierta temperatura; además, el hecho que el potencial químico sea constante con respecto a  $\eta$ , se debe a que el estado del sistema corresponde al de un gas ideal de Fermi ( $\Delta = 0$ ) y por lo tanto ya no depende de las propiedades de interacción contenidas en la longitud de dispersión  $\eta$ .

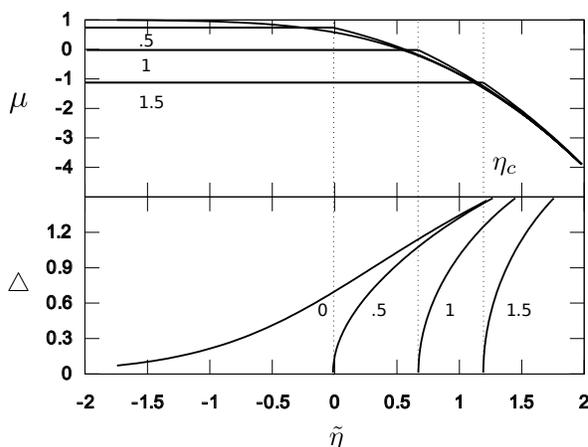
Por otra parte en el **régimen BEC** ( $\eta > 0$ ), se puede ver que el gap mantiene aproximadamente la misma dependencia con  $\eta$  que a  $T = 0$ : ecuación (4.5.5), excepto que se desplaza una constante  $\eta_c$ :

$$\Delta \sim \begin{cases} 0 & \eta \leq \eta_c, \\ \eta^{1/2} & \eta \geq \eta_c, \end{cases} \quad (4.6.3)$$

mientras que para el potencial químico sucede algo parecido. Es constante para valores de  $\eta$  menores que  $\eta_c$ , y tiene la misma dependencia que a  $T = 0$ , ecuación (4.5.6), para valores mayores a  $\eta_c$ :

$$\mu \sim \begin{cases} \text{constante} & \eta \leq \eta_c, \\ -\eta^2 & \eta \geq \eta_c, \end{cases} \quad (4.6.4)$$

Este comportamiento se debe a que existe una longitud de dispersión crítica  $\eta_c$ , por debajo de la cual el estado del sistema corresponde al de un gas ideal de Fermi ( $\eta \leq \eta_c$ ). Esto ya se vio en la sección 4.4 (ver figura 4.3a) donde se mostró que existe una curva crítica en las variables:  $(T, \eta)$ , que separa el estado superfluido, del gas ideal de Fermi. Entonces, para temperatura diferente de cero el esquema del cruce BEC-BCS se mantiene de la siguiente manera: conforme aumenta la temperatura, el régimen BCS -que es posible para  $\eta < 0$ - desaparece; mientras que el régimen de bosones moleculares -válido para  $\eta > 0$ - solo es posible para valores mayores de la longitud de dispersión crítica:  $\eta \geq \eta_c$ .

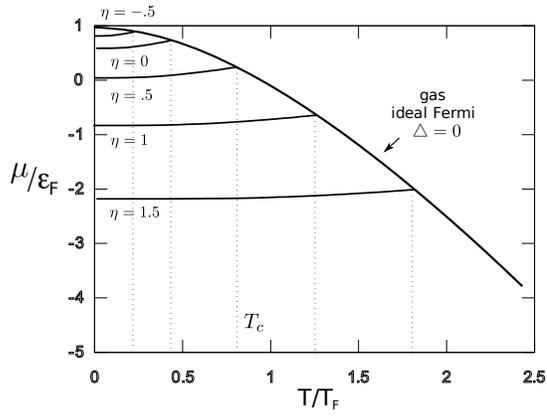


**Figura 4.6.:** Potencial químico y gap como función de la longitud de dispersión para diferentes temperaturas:  $T/T_F = 0, .5, 1, 1.5$  (en temperatura de Fermi:  $\epsilon_F \equiv k_B T_F$ ).

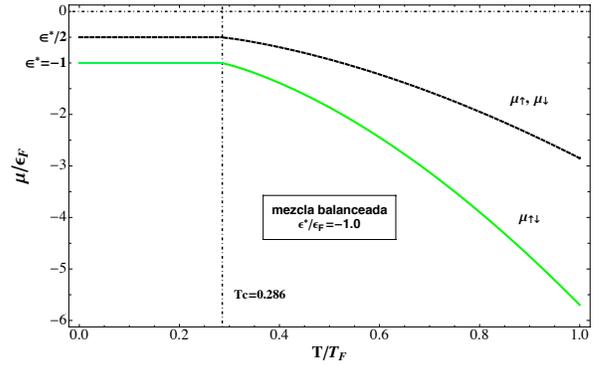
Para finalizar se hace una comparación del potencial químico en función de la temperatura para diferentes valores de la longitud de dispersión  $\eta$ , con un trabajo previo [Eleazar, 2009] donde se analiza una mezcla de *fermiones ideales* (sin interacción) de dos especies (estados) con espín opuesto y que se pueden ligar químicamente por pares y formar un bosón molecular, este enlace requiere de una energía  $\epsilon^*$ . Dicho trabajo es una versión simplificada del presente, ya que no considera el término de interacción en el Hamiltoniano -se trata de fermiones ideales- y la formación de los bosones se introduce como el resultado de un enlace químico -con energía  $\epsilon^*$ - entre pares de fermiones de especie diferente.

En la figura 4.7 se muestran ambos resultados. La figura 4.7a contiene los resultados obtenidos en el presente trabajo para diferentes valores de  $\eta$ : aquí se puede ver que el valor del potencial químico se mantiene aproximadamente constante hasta la temperatura crítica  $T_c$ , cuyo valor depende de  $\eta$ ; a partir de esta temperatura todas las curvas para los diferentes valores de  $\eta$  coinciden con la del gas ideal de Fermi -que corresponde a  $\Delta = 0$ - donde el potencial químico decrece conforme aumenta  $T$ .

Por otra parte, la figura 4.7b contiene los resultados para la mezcla de fermiones ideales; en este caso se trata de una mezcla balanceada (mismo número de fermiones en ambos estados) y que corresponde al caso estudiado aquí; para un valor de la energía de enlace:  $\epsilon^*/\epsilon_F = -1$ . Las curvas corresponden al potencial químico de los fermiones:  $\mu_\uparrow = \mu_\downarrow$ , que son idénticos para ambos estados (mezcla balanceada) y el de los bosones:  $\mu_{\uparrow\downarrow}$ , donde se satisface la relación que establece el equilibrio químico:  $\mu_\uparrow + \mu_\downarrow = \mu_{\uparrow\downarrow}$ . Lo importante es notar que el potencial químico de los fermiones tiene un comportamiento semejante al obtenido en este trabajo (figura 4.7a), ya que se mantiene constante hasta una temperatura crítica  $T_c$  y después decrece conforme aumenta  $T$ . Aunque hay una diferencia notable, la temperatura crítica significa cosas diferentes en ambas tratamientos. En el presente trabajo se trata de la temperatura de transición entre el estado superfluido y el de un gas ideal de Fermi; mientras que en el caso de la mezcla de fermiones ideales se trata de la temperatura de transición entre el condensado de Bose-Einstein de los bosones moleculares y el estado normal de la mezcla (fermiones más bosones ideales).



(a) Potencial químico vs  $T$ , para diferentes valores de la longitud de dispersión ( $\eta = 1/k_F a$ ).  $\mu$  se mantiene constante hasta  $T_c$ , a partir de este valor todas las curvas con diferente  $\eta$  coinciden con la del gas ideal de Fermi.



(b) Potencial químico vs  $T$ , para una mezcla de fermiones ideales. El potencial químico es constante hasta la temperatura crítica del condensado de Bose-Einstein de los bosones moleculares.

**Figura 4.7.:** Potencial químico en función de la temperatura.

# CAPÍTULO 5

## Conclusiones.

EN este trabajo se ha estudiado un gas de fermiones que interactúan, en dos estados de espín opuestos -con igual número de fermiones en ambos estados-, y en el régimen de bajas temperaturas. Debido a que las propiedades de interacción entre pares de partículas en el régimen de bajas energías se puede caracterizar por la longitud de dispersión, entonces es posible introducir este parámetro como una variable que contribuye al estado termodinámico del gas. Para abordar el sistema de fermiones con interacción se ha tomado como base el formalismo BCS de la teoría de la superconductividad, junto con un proceso de *renormalización* determinado por la relación:  $\frac{1}{\bar{U}(0)} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}$ . Esto es necesario para que la ecuación del gap no tenga divergencias al introducir la longitud de dispersión en el Hamiltoniano del sistema.

Con la introducción de la longitud de dispersión  $\eta$  como una variable de estado; entonces se ha identificado su conjugada  $\Sigma$  (“*variable de contacto*”). Esta variable ha sido ya estudiada en un reciente trabajo (Shina Tan [Tan, 2008]) y se ha medido experimentalmente. Los resultados experimentales muestran una concordancia cualitativa con los obtenidos en este trabajo.

La propiedad principal del gas de fermiones es la de presentar una **transición de fase** a un régimen **superfluido**. Esta transición esta caracterizada por una curva crítica en las variables:  $T$  y  $\eta$ , determinada cuando se anula el gap  $\Delta = 0$ . La transición es una consecuencia directa del formalismo BCS, donde el gap representa un parámetro de orden del sistema. Esto se ha mostrado a través del comportamiento del gap, con la temperatura (se anula abruptamente y con pendiente vertical en  $T_c$ ); y en la discontinuidad en la derivada del potencial químico. El estado superfluido, ha sido verificado experimentalmente en la observación de vórtices cuando se hace rotar el gas.

Uno de los resultados más interesantes y que ha motivado este trabajo, se obtiene al introducir a la longitud de dispersión:  $\eta \equiv 1/a$ , como una variable. Entonces es posible distinguir las propiedades de interacción entre los fermiones y por lo tanto el estado del gas, dependiendo del signo de esta variable. Esto representa el **cruce BEC-BCS**, en la figura 5.1 de la siguiente página se muestran los principales resultados, mismos que se describen después.

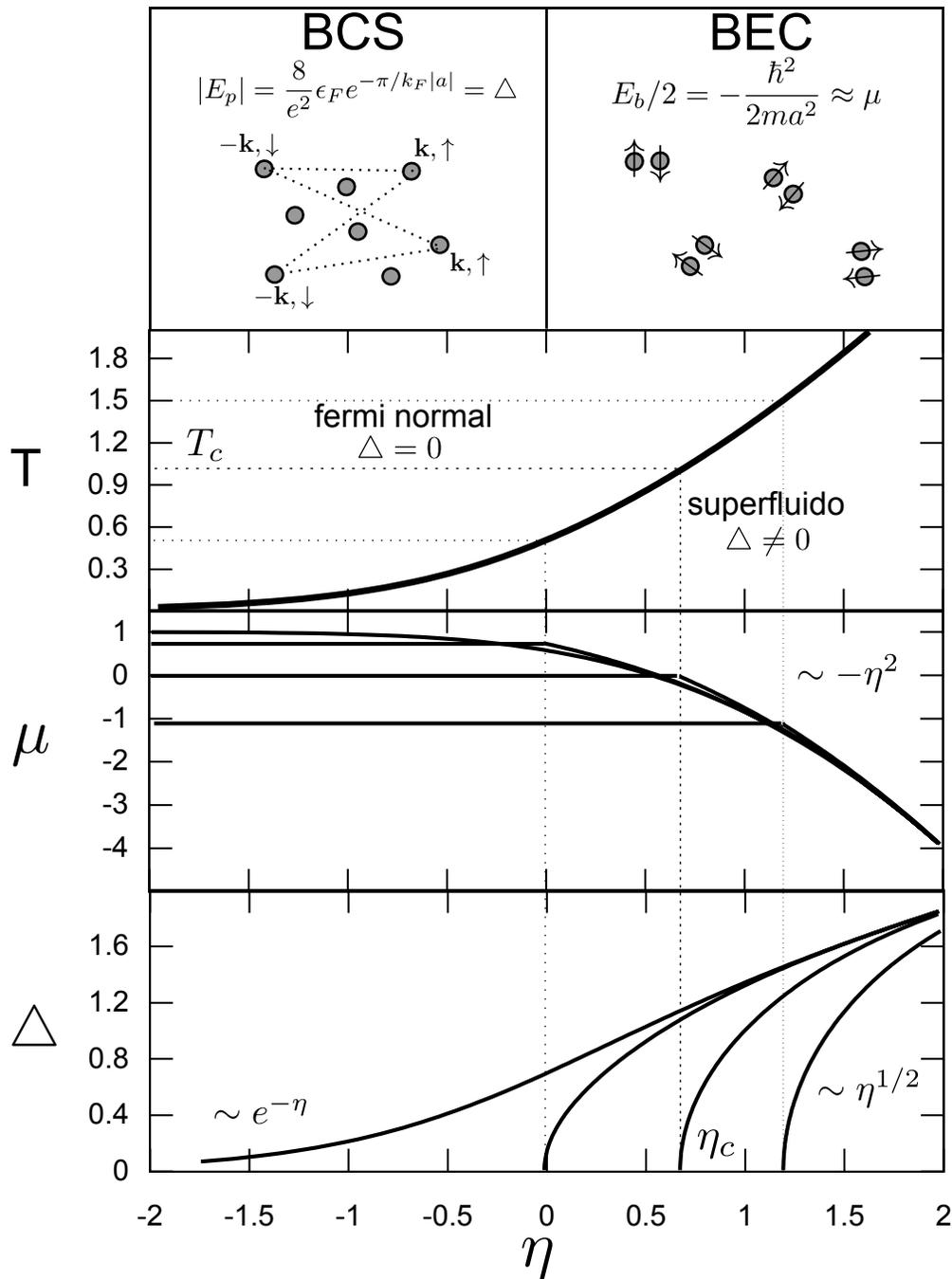


Figura 5.1.: Cruce BEC-BCS

#### Régimen BCS:

Cuando  $\eta < 0$  los fermiones del gas forman pares de Cooper y corresponde a un estado BCS. Esto se ha corroborado a partir de los siguientes resultados:

- El gap toma la siguiente expresión:

$$\Delta \approx \begin{cases} |E_P| = \frac{8}{e^2} \epsilon_F e^{-\pi/2k_F a} \sim e^{-\eta}, & T \lesssim .5 T_F \\ 0, & T \gtrsim .5 T_F \end{cases} \quad (5.0.1)$$

- El potencial químico esta dado por:

$$\mu \approx \begin{cases} \epsilon_F, & T \lesssim .5 T_F \\ \text{constante } (< \epsilon_F), & T \gtrsim .5 T_F \end{cases} \quad (5.0.2)$$

- La energía mínima del espectro de las cuasipartículas:

$$E_{\min} \approx \begin{cases} \Delta = |E_P|, & T \lesssim .5 T_F \\ 0, & T \gtrsim .5 T_F \end{cases} \quad (5.0.3)$$

Estos resultados están de acuerdo a la teoría BCS: por una parte cuando  $T \lesssim .5 T_F$ , el gap corresponde a la energía  $E_P$  de los pares de Cooper y al valor mínimo en el espectro de las cuasipartículas, mientras que el potencial químico toma el valor:  $\epsilon_F$ , propiedad de un gas de Fermi a temperatura cero. Para temperaturas mayores:  $T \gtrsim .5 T_F$ , entonces  $\Delta = 0$ , y por lo tanto las propiedades del gas corresponden a las de un gas ideal de Fermi (sin interacción), lo cual se nota en el hecho que el potencial químico es independiente de la longitud de dispersión. En este régimen BCS, el parámetro relevante es el gap.

#### Régimen BEC:

Cuando  $\eta > 0$ , los fermiones forman **moléculas bosónicas**. Lo cual se corrobora también de los siguientes resultados:

- El gap toma la siguiente expresión:

$$\Delta \sim \begin{cases} \eta^{1/2}, & T \lesssim .5 T_F \\ \sim \begin{cases} 0 & \eta \leq \eta_c \\ \eta^{1/2} & \eta \geq \eta_c \end{cases}, & T \gtrsim .5 T_F \end{cases} \quad (5.0.4)$$

- El potencial químico esta dado por:

$$\mu \approx \begin{cases} \frac{E_b}{2} = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{ma^2} \sim -\eta^2, & T \lesssim .5 T_F \\ \sim \begin{cases} \text{constante} & \eta \leq \eta_c \\ -\eta^2 & \eta \geq \eta_c \end{cases}, & T \gtrsim .5 T_F \end{cases} \quad (5.0.5)$$

- La energía mínima del espectro de las cuasipartículas:

$$E_{\min} \approx \mu = 2E_b. \quad (5.0.6)$$

En este régimen el parámetro relevante es el potencial químico y concuerda con las propiedades de un gas de bosones: toma valores negativos y corresponde a un medio de la energía de enlace molecular  $E_b$  entre un par de fermiones. Esto corresponde a que el potencial químico de los bosones sea precisamente  $E_b$ , lo que está de acuerdo al hecho que cada bosón está compuesto por un par de fermiones. En este caso además, la energía mínima del espectro de las cuasipartículas corresponde al potencial químico, es decir a la energía del estado ligado.

La manera de abordar el cruce BEC-BCS tal como se ha presentado en este trabajo; es decir, basado en el formalismo BCS e introduciendo a la longitud de dispersión a través de la expresión:  $\frac{1}{\bar{U}(0)} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}$ , constituye la continuación del trabajo de Leggett [Leggett, 1980] -que aborda el sistema a temperatura cero-, al incluir los efectos de temperatura. De esta manera, los resultados previos de este trabajo [ibid] se verifican, pero además se obtiene el estudio a temperatura finita.

# Apéndices

## Transformación de Bogoliubov.

A continuación se detalla el proceso de aplicar la transformación de Bogoliubov al Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{K}}$  del gas de fermiones, definido en el capítulo 3 como:  $\hat{\Omega} = \hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N}$ , y cuya expresión es la siguiente (ecuación 3.3.5 en la página 48) :

$$\hat{\mathcal{K}} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[ \hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}} \right] + \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} . \quad (\text{A.0.1})$$

Donde  $(\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}})$  corresponden a los operadores de los fermiones del gas, y  $\hat{n}_{\mathbf{k}}$  al operador de número de estos fermiones. La transformación de Bogoliubov para un sistema de fermiones se define de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger, \\ \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.0.2})$$

Esta transformación es canónica solo si los operadores  $(\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{-\mathbf{k}})$  obedece las mismas reglas de anticonmutación que los operadores de fermiones  $(\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{-\mathbf{k}})$ , y en este sentido también tienen carácter fermiónico:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger \right\} &= \left\{ \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \right\} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \\ \left\{ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'} \right\} &= \left\{ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'} \right\} = \left\{ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.0.3})$$

De la primera regla de anticonmutación se obtiene la siguiente relación:

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (\text{A.0.4})$$

La transformación inversa se obtiene de la definición (A.0.2):

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger, \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.0.5})$$

Para proceder a transformar al Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{K}}$ , ecuación (A.0.1), en término de los nuevos operadores:  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger$ ; es conveniente separar la parte cinética y a parte de interacción:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{K}}_T &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[ \hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}} \right], \\ \hat{\mathcal{K}}_V &= \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}.\end{aligned}$$

Para la parte cinética, aplicando la transformación de Bogoliubov inversa al operador de número  $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ , se obtiene el siguiente resultado:

$$\begin{aligned}\hat{n}_{\mathbf{k}} \equiv \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= \left( u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \right) \left( u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right), \\ &= u_{\mathbf{k}}^2 \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger,\end{aligned}\tag{A.0.6}$$

reemplazando:  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ , se obtiene la transformación del operador  $\hat{n}_{-\mathbf{k}}$ . Agrupando términos, se obtiene para la parte cinética  $\hat{\mathcal{K}}_T$ :

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{K}}_T &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[ u_{\mathbf{k}}^2 \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \right) + v_{\mathbf{k}}^2 \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) + \right. \\ &\quad \left. + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \right) - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \right) \right].\end{aligned}\tag{A.0.7}$$

Utilizando las propiedades de anticonmutación (A.0.3) para los operadores  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ , y definiendo de forma análoga los operadores de número para las cuasipartículas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\hat{m}_{\mathbf{k}} &= \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \\ \hat{m}_{-\mathbf{k}} &= \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}};\end{aligned}\tag{A.0.8}$$

entonces se llega al resultado final para la parte cinética:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{K}}_T &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \\ &\quad + 2 \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \right).\end{aligned}\tag{A.0.9}$$

Para la parte de interacción  $\hat{\mathcal{K}}_V$ , calculamos primero por separado el producto de dos operadores y que haciendo uso de los operadores de número de cuasipartículas:  $\hat{m}_{\mathbf{k}}, \hat{m}_{-\mathbf{k}}$ , dan como resultado:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger &= \left( u_{\mathbf{k}'} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'} \right) \left( u_{\mathbf{k}'} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'} \right) \\ &= u_{\mathbf{k}'}^2 \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'}^\dagger - v_{\mathbf{k}'}^2 \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}); \\ \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= \left( u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \right) \left( u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \\ &= u_{\mathbf{k}}^2 \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^2 \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}).\end{aligned}\tag{A.0.10}$$

Así, multiplicando ambos resultados se obtiene el producto de los cuatro operadores, cuyo resultado consta de los siguientes nueve términos:

$$\left. \begin{aligned} & + (u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'})^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ & + (v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'})^2 \hat{a}_{-\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ & - (u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}})^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ & - (v_{\mathbf{k}'}u_{\mathbf{k}})^2 \hat{a}_{-\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.0.11})$$

$$\left. \begin{aligned} & + u_{\mathbf{k}'}^2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) \\ & - v_{\mathbf{k}'}^2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.0.12})$$

$$\left. \begin{aligned} & + u_{\mathbf{k}}^2 u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) \\ & - v_{\mathbf{k}}^2 u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.0.13})$$

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}). \quad (\text{A.0.14})$$

Como cada término es una suma sobre  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$ , entonces el par de términos (A.0.12) y (A.0.13) se pueden escribir como:

$$\begin{aligned} & \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{k}'} \left( u_{\mathbf{k}'}^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger - v_{\mathbf{k}'}^2 \hat{a}_{-\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'} \right), \\ & \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) \sum_{\mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}}^2 \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^2 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \right); \end{aligned}$$

que se pueden sumar (haciendo un intercambio del índice mudo  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ ), resultando:

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \left( \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right). \quad (\text{A.0.15})$$

Así el resultado exacto para la parte de interacción  $\hat{\mathcal{K}}_V$ , consiste de los siguientes términos:

$$\hat{\mathcal{K}}_V = \frac{\tilde{U}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left\{ \begin{aligned} & + (u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'})^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ & + (v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'})^2 \hat{a}_{-\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ & - (u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}})^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ & - (v_{\mathbf{k}'}u_{\mathbf{k}})^2 \hat{a}_{-\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ & + u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) \left( \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \\ & + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) \end{aligned} \right. \quad (\text{A.0.16})$$

Ahora, se puede demostrar que los términos que contienen el producto de cuatro operadores  $\hat{a}_{\mathbf{k}}$  (los cuatro primeros términos de arriba), son despreciable respecto de los otros y el resultado final para la parte interacción corresponde a los dos últimos términos. De esta manera, sumando el resultado para la parte cinética (A.0.9) y el de interacción se puede escribir de manera conveniente el Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{K}}$ , como la suma de dos términos:

$$\hat{\mathcal{K}} \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad (\text{A.0.17})$$

donde, cada término esta dado por las siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 = & 2 \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}), \\ \hat{H}_2 = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left( \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \left[ 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.0.18})$$

Este resultado constituye la expresión final del Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{K}}$  en terminos de los operadores  $\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}^\dagger$ , y al que se refiere en el capítulo 3 ( en la página 51).

# APÉNDICE **B**

## Código del programa.

Para resolver el sistema de ecuaciones termodinámicas que se obtuvieron en el capítulo 4, se emplea el software de Mathematica versión 6.0 como se describe a continuación.

Puesto que los resultados descritos en el capítulo 4, se refieren al potencial químico y al gap, entonces se emplearán el par de ecuaciones:

$$\begin{aligned} N(T, V, \mu, \eta; \Delta) &= \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V, \mu} && N \text{ constante.} \\ 0 &= \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} \right)_{T, V, \mu} && \text{ecuación del gap.} \end{aligned} \quad (\text{B.0.1})$$

Cuyas expresiones adimensionalizadas se obtuvieron en dicho capítulo, y son las siguientes:

$$1 = \frac{3}{4} \int_0^{\infty} dx x^{1/2} \left[ 1 - \frac{(x - \tilde{\mu})}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left( \frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right) \right], \quad (\text{B.0.2})$$

$$0 = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dx \left\{ \frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left( \frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right) \right\} - \tilde{\eta}. \quad (\text{B.0.3})$$

donde todas las variables se adimensionan con la energía y momento de Fermi:

$$\tilde{\Delta} \equiv \frac{\Delta}{\epsilon_F}; \quad \tilde{\mu} \equiv \frac{\mu}{\epsilon_F}; \quad \tilde{\beta} \equiv \frac{\beta}{\epsilon_F}; \quad \tilde{\eta} \equiv \frac{\eta}{\epsilon_F}; \quad (\text{B.0.4})$$

( $\beta \equiv 1/k_B T$ ) además se considera densidad constante:  $N/V = \text{constante}$ . Ambas ecuaciones están acopladas en todas las variables y determinan al gap y el potencial químico como función del par de variables:  $T$  y  $\eta$ . Estas ecuaciones, además de acopladas son trascendentales y hay que integrar sobre el parámetro  $x$ .

La forma de resolver el par de ecuaciones a través del software de Mathematica se realiza de la siguiente manera:

Se definen los integrandos del par de ecuaciones (B.0.2) y (B.0.3) con el siguiente código:

---

```
(*Se definen las siguientes funciones*)

(*espectro de las cuasiparticulas*)
Ek[mu_, delta_, x_] := Sqrt[(x - mu)^2 + delta^2]

(*integrando de la densidad de particulas*)
InRho[beta_, mu_, delta_, x_] := Sqrt[x] * (1 - ((x - mu) *
  Tanh[beta * Ek[mu, delta, x] / 2]) / Ek[mu, delta, x])

(*integrando de la ecuacion del gap*)
InEta[beta_, mu_, delta_, x_] := (1 / Sqrt[x] - (Sqrt[x] *
  Tanh[beta * Ek[mu, delta, x] / 2]) / Ek[mu, delta, x])
```

---

Entonces las ecuaciones integradas se define de la siguiente manera:

---

```
(*se definen los limites de integracion:[0, ~ infinito] en un arreglo*)
LimInt = {0.001, 1000000};

(*densidad de particulas*)
Rho[beta_, mu_, delta_] := 3/4 * NIntegrate[InRho[beta, mu, delta, x],
  {x, LimInt[[1]], LimInt[[2]]}];

(*ecuacion del gap*)
Eta[beta_, mu_, delta_] := 1/Pi * NIntegrate[InEta[beta, mu, delta, x],
  {x, LimInt[[1]], LimInt[[2]]}];
```

---

Definidas estas funciones, entonces con la función `FindRoot[]` de Mathematica, que calcula la raíz de una ecuación trascendental, se puede calcular -a partir de la ecuación (B.0.2)- una de las variables en función de las otras dos:

$$\begin{aligned}\mu &= \mu(\beta, \Delta), \\ \Delta &= \Delta(\beta, \mu),\end{aligned}$$

con el siguiente código:

---



---

```

RHO = 1; (*valor constante de la densidad*)

MuTDelta[beta_, delta_] :=
  mu /. FindRoot[Rho[beta, mu, delta] == RHO, {mu, 1.0}];

DeltaTMu[beta_, mu_] :=
  delta /. FindRoot[Rho[beta, mu, delta] == RHO, {delta, 1.0}];

```

---

Entonces se puede calcular la curva crítica de la siguiente manera:

---



---

```

(*Se define el rango de temperaturas*)
Tinicial=0.;
Tfinal=2.0;
DeltaT=.2; (*tamaño del paso*)
NumT=DeltaT/Tfinal; (*numero de pasos*)

(*el valor de Delta=0 en curva critica se aprox por 0.01
para evitar divergencias*)

Tcritica={}; (*arreglo para contener los datos*)

Do[
  {
    Mu=MuTDelta[1/temperatura, 0.01];
    ETa=Eta[1/temperatura, Mu, 0.01];
    AppendTo[Tcritica, {temperatura, ETa}]
  },
  {temperatura, Tinicial, Tinicial, DeltaT}
]

Export["curva_critica.dat", Tcritica]; (*se exportan los datos a un archivo*)

```

---

Para calcular el potencial químico y el gap, se toman como parámetros independientes la temperatura y el gap:  $\{\beta, \Delta\}$ . Así, se calcula el potencial químico:  $\mu$ , con la ecuación (B.0.2), a través de un `FindRoot` de Mathematica; y la longitud de dispersión:  $\eta$ , directamente con la ecuación (B.0.3), simplemente sustituyendo la terna de valores:  $(\beta, \Delta, \mu)$ . Otra posibilidad sería tomar como parámetros independientes a la temperatura y el potencial químico:  $\{\beta, \mu\}$  y de la misma manera se calculan las otras dos variables. Sin embargo, sí se toman como parámetros independientes la temperatura y la longitud de dispersión  $\{\beta, \eta\}$  se complica el cálculo, ya que es necesario emplear dos `FindRoot` anidados.

Entonces considerando como parámetros independientes la temperatura y el gap:  $\{\beta, \Delta\}$ , se calcula el potencial químico y la longitud de dispersión que se guardan en un archivo de datos con la siguiente estructura:

$$T \quad \eta \quad \mu \quad \Delta$$

con el siguiente código:

---

```
(* parametros: temperatura y Delta , que con dos Do anidados se varian *)
(* REGIMEN SUPERFLUIDO, Delta diferente de cero *)
TERMODINAMICA = {}; (*arreglo para contener los datos*)
Do[
  {
    Do[
      {
        Mu=MuTDelta[1/temperatura ,delta ];
        ETa=Eta[1/temperatura ,Mu,delta ];
        AppendTo[TERMODINAMICA,{ temperatura ,ETa,Mu,delta }]
      },
      {delta ,0.01 ,2 ,0.1}
    ],
    (*linea de separacion entre bloques de datos*)
    AppendTo[TERMODINAMICA,{ }]
  }
  ,{temperatura ,.01 ,2.5 ,0.1}
];
Export [" termodinamica .dat " ,TERMODINAMICA];
```

---

Una vez que se tiene el archivo de datos es posible obtener las gráficas correspondientes con diversos softwares, o con el mismo Mathematica. Las gráficas presentadas en este trabajo se realizarán con gnuplot.

# Bibliografía

---

- [Anderson et al., 1995] Anderson, M., Ensher, J., Matthews, M., Wieman, C., and Cornell, E. (1995). Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *science*, 269(5221):198.
- [Annett, 2004] Annett, J. F. (2004). *Superconductivity, Superfluids and Condensates*. Oxford University Press.
- [Astrakharchik et al., 2004b] Astrakharchik, G., Boronat, J., Casulleras, J., and Giorgini, S. (2004b). Equation of state of a fermi gas in the bec-bcs crossover: A quantum monte carlo study. *Physical review letters*, 93(20):200404.
- [Bardeen et al., 1957] Bardeen, J., Cooper, L., and Schrieffer, J. (1957). Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108(5):1175–1204.
- [Chen et al., 2005] Chen, Q., Stajic, J., Tan, S., and Levin, K. (2005). BCS-BEC crossover: From high temperature superconductors to ultracold superfluids. *Physics reports*, 412(1):1–88.
- [Cooper, 1956] Cooper, L. N. (1956). Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.*, 104(4):1189–1190.
- [Davis et al., 1995] Davis, K., Mewes, M., Andrews, M., Van Druten, N., Durfee, D., Kurn, D., and Ketterle, W. (1995). Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, 75(22):3969–3973.
- [DeMarco and Jin, 1999] DeMarco, B. and Jin, D. (1999). Onset of Fermi degeneracy in a trapped atomic gas. *Science*, 285(5434):1703.
- [Demtroder, 2006] Demtroder, W. (2006). *Atoms, Molecules and Photons*. Springer.
- [Eleazar, 2009] Eleazar, N. M. (2009). Propiedades termodinámicas de una mezcla producida por la reconversión entre fermiones y bosones a bajas temperaturas. Tesis de licenciatura, UNAM.
- [Fetter and Walecka, 1971] Fetter, A. and Walecka, J. (1971). *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill.

- [Greiner et al., 2003] Greiner, M., Regal, C., and Jin, D. (2003). Emergence of a molecular bose–einstein condensate from a fermi gas. *Nature*, 426(6966):537–540.
- [Landau and Lifshitz, 1977] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1977). *Quantum Mechanics*, volume 3 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, 3 edition.
- [Landau and Lifshitz, 1980] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1980). *Statistical Physics Part 2 Theory of Condensate State*, volume 9 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, 1 edition.
- [Leggett, 2006] Leggett, A. (2006). *Quantum liquids: Bose condensation and Cooper Pairing in condensed-matter systems*. Oxford University Press, USA.
- [Leggett, 1980] Leggett, A. J. (1980). Diatomic molecules and cooper pairs. *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, pages 13–27.
- [Merzbacher, 1998] Merzbacher, E. (1998). *Quantum Mechanics*. John Wiley, 3 edition.
- [Perali et al., 2004] Perali, A., Pieri, P., Pisani, L., and Strinati, G. (2004). BCS-BEC crossover at finite temperature for superfluid trapped Fermi atoms. *Physical review letters*, 92(22):220404.
- [Petrov et al., 2004] Petrov, D., Salomon, C., and Shlyapnikov, G. (2004). Weakly bound dimers of fermionic atoms. *Physical review letters*, 93(9):90404.
- [Regal et al., 2003] Regal, C., Ticknor, C., Bohn, J., and Jin, D. (2003). Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms. *Nature*, 424(6944):47–50.
- [Roman, 1965] Roman, P. (1965). *Advanced Quantum Theory*. Addison Wesley, 1 edition.
- [Romero-Rochín, 2011] Romero-Rochín, V. (2011). Thermodynamic origin of the contact. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44:095302.
- [Sandoval-Figueroa and Romero-Rochín, 2008] Sandoval-Figueroa, N. and Romero-Rochín, V. (2008). Thermodynamics of trapped gases: Generalized mechanical variables, equation of state, and heat capacity. *Physical Review E*, 78(6):061129.
- [Stewart et al., 2010] Stewart, J. T., Gaebler, J. P., Drake, T. E., and Jin, D. S. (2010). Verification of universal relations in a strongly interacting fermi gas. *Phys. Rev. Lett.*, 104(23):235301.
- [Tan, 2008] Tan, S. (2008). Large momentum part of a strongly correlated Fermi gas. *Annals of Physics*, 323(12):2971–2986.
- [Taylor and Heinonen, 2002] Taylor, P. L. and Heinonen, O. (2002). *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press.
- [Zwierlein et al., 2005a] Zwierlein, M., Abo-Shaeer, J., Schirotzek, A., Schunck, C., and Ketterle, W. (2005a). Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas. *Nature*, 435(7045):1047–1051.
- [Zwierlein et al., 2003a] Zwierlein, M., Stan, C., Schunck, C., Raupach, S., Gupta, S., Hadzibabic, Z., and Ketterle, W. (2003a). Observation of Bose-Einstein condensation of molecules. *Physical review letters*, 91(25):250401.