



“CALOR ESPECÍFICO DE
CUPRATOS”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIA E INGENIERÍA
DE MATERIALES

P R E S E N T A

M. EN C. PATRICIA SALAS CASALES

TUTOR

DR. MIGUEL ANGEL SOLÍS ATALA



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Dedicatoria

A mis hijos

Luis Eduardo y Citlali

A mi esposo

Miguel Angel

A mis papás

Mario y Amparo

RESUMEN

En esta tesis extendemos la versión más simple, pero al mismo tiempo la más robusta, de la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad, para incluir estructuras periódicas, la cual aplicamos a los superconductores estratificados, en particular a los cupratos.

Previamente desarrollamos la física de gases ideales de fermiones y bosones en estructuras periódicas, las cuales se modelan usando potenciales de Kronig-Penney en el límite en que las barreras de potencial se vuelven deltas de Dirac, para restringir el movimiento de las partículas en una (planos) o dos (tubos) direcciones y permitiéndoles moverse libremente en las direcciones restantes. Aunque damos las expresiones para calcular todas las propiedades termodinámicas de bosones y fermiones en estructuras multicapas planas, nos concentramos en el calor específico como función de la separación entre los planos y de su impenetrabilidad (intensidad de las deltas), para una densidad de partículas dada. El calor específico es importante porque: a) nos permite identificar las transiciones de fase del sistema cuántico y b) es la propiedad termodinámica que regularmente miden los experimentales, convirtiéndose en datos de referencia para nuestros cálculos. Para el gas de bosones entre las multicapas se obtienen resultados novedosos tales como la coexistencia de la condensación Bose-Einstein del sistema infinito (pico en el calor específico) con la señal (máximo en el calor específico) de la condensación Bose-Einstein entre dos planos. Además se manifiesta un "crossover" dimensional donde el sistema cambia su comportamiento tridimensional a uno bidimensional, cuando aumentamos la impenetrabilidad de los planos.

Con la teoría Bosón-Fermión extendida describimos las propiedades termodinámicas del superconductor generadas por la dinámica de los electrones (y huecos) que se encuentran en un cascarón esférico de ancho $2\hbar\omega_D$ alrededor de la energía de Fermi. Como consecuencia de las interacciones repulsiva coulombiana entre los electrones más la atractiva mediada por la red de iones, se forma una mezcla binaria bosón-fermión de: los pares de Cooper (bosones-compuestos) apareados vía la interacción neta atractiva entre electrones, más los electrones que se mantienen desapareados (fermiones).

Nos propusimos reproducir, en base a esta teoría y eligiendo los parámetros adecuados, el calor específico del cuprato superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ para lo cual calculamos por separado, y luego sumamos, los calores específicos de: el gas de pares de Cooper que vienen de los electrones que se aparearon, mismos que después forman el condensado de Bose-Einstein; el gas de fermiones compuesto por los electrones desapareados; y los fonones provenientes de la red cristalina. La suma de los primeros dos constituyentes (electrones apareados más los desapareados), que corresponde al calor específico electrónico C_e , muestran tanto el comportamiento lineal de C_e como el término cuadrático T^2 , ambos para $T < T_c$, que se observan experimentalmente para los cupratos. También reproducimos el salto en el calor específico electrónico en el punto de la transición T_c . Adicionalmente encontramos que la contribución del calor específico electrónico es de aproximadamente el 30% del calor específico total. Reportamos los valores para las constantes: $\gamma_e = 5.1 \text{ mJ/mol K}^2$ de la componente lineal; y $\alpha = 3.7 \text{ mJ/mol K}^3$ de la cuadrática, los cuales son del orden de lo reportado por los experimentos más recientes.

Agradecimientos

Quiero agradecer al Dr. Miguel Ángel Solís Atala por el apoyo que siempre me ha dado y por dirigir mi trabajo de tesis, y a los Drs. Manuel de Llano de la Garza y Dany Pierre Page Rollinet por su disposición académica, estar pendientes de mi desempeño y formar parte de mi Comité Tutor.

Al jurado integrado por: Dra. María de los Angeles Ortiz Flores, Facultad de Ciencias, UNAM; Dr. Miguel Angel Solís Atala, Instituto de Física, UNAM; Dr. Francisco Morales Leal, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM; Dr. Salvador Antonio Cruz Jiménez, Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa y Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez, por sus sugerencias y comentarios sobre el presente trabajo.

A los Drs. Mauricio Fortes Besprosvani, Abel Camacho Galván y Francisco Javier Sevilla por las múltiples aportaciones que hicieron a mi formación y las publicaciones que resultaron de ellas.

Al CONACyT por la beca que me otorgó durante tres años y a la DGEP-UNAM por el complemento de beca que tuve también durante tres años.

Y por último, al Instituto de Física, UNAM, por permitirme el uso de sus instalaciones, y a la misma UNAM por darme la oportunidad de realizar mis estudios de doctorado.

Lista de Publicaciones

- 1.- P. Salas, F. J. Sevilla, and M. A. Solís, “*Specific heat of cuprates*”, en preparación, (2012).
- 2.- P. Salas, F. J. Sevilla, and M. A. Solís, “*Boson gas in a periodic array of tubes*”, J. of Low Temp. Phys. **168**, 258 (2012).
- 3.- P. Salas, F. J. Sevilla, M. Fortes, M. de Llano, A. Camacho, and M. A. Solís, “*Dimensional crossover of a boson gas in multilayers*”, Phy. Rev. A **82**, 033632 (2010).
- 4.- P. Salas, M. Fortes, M. de Llano, F. J. Sevilla, and M. A. Solís, “*Bose-Einstein Condensation in Multilayers*”, J. of Low Temp. Phys. **159**, 540 (2010).
- 5.- P. Salas and M. A. Solís, “*Estrellas de neutrones*”, Rev. Mex. Fis. E **52**, 37 (2006).

Lista de Símbolos ¹

a	separación entre las barreras de KP
a_1	coordenada cristalográfica de la celda unitaria del superconductor
A	sección transversal del material
b	ancho de las barreras de KP
b_1	coordenada cristalográfica de la celda unitaria del superconductor
B	campo magnético externo
$\hat{c}_{\mathbf{k}_i, \sigma_i}^\dagger$	operadores de creación de Fermi
$\hat{c}_{\mathbf{k}_i, \sigma_i}$	operadores de aniquilación de Fermi
c_p	capacidad calorífica a presión constante
c_V	capacidad calorífica a volumen constante
c_1	coordenada cristalográfica de la celda unitaria del superconductor
C_e	calor específico electrónico
C_{en}	calor específico electrónico en el estado normal
C_{es}	calor específico electrónico en el estado superconductor
C_{hip}	calor específico hiperfino
C_l	calor específico de la red
C_{mag}	calor específico magnético
C_V	calor específico a volumen constante
C_1	coeficiente del término lineal de la relación de dispersión
d	dimensión
e_0	$2E_F - \Delta_0$
E_F	energía de Fermi de un gas ideal
E_{F2D}	energía bidimensional de Fermi
E_{F3D}	energía tridimensional de Fermi
E_K	energía total del par con $\mathbf{K} \neq \mathbf{0}$
E_p	energía del par
f	fracción del número de fermiones que se aparean
$f_\sigma(t)$	funciones de Fermi-Dirac
f_k	función de distribución de Fermi-Dirac
F	energía libre de Helmholtz
$\mathbf{g}(E)$	densidad de estados electrónicos
$g_\sigma(t)$	función de Bose
$G(\omega)$	densidad de estados fonónicos
\hbar	constante de Dirac
\hat{H}	Hamiltoniano del sistema
\hat{H}_R	Hamiltoniano reducido
H_{c1}	campo magnético crítico inferior
H_{c2}	campo magnético crítico superior

¹No incluimos aquellos parámetros internos que se utilizan dentro de una única sección ni los coeficientes de las expansiones en series.

$\hbar\mathbf{k}$	momento relativo
$\hbar\mathbf{k}_D$	momento correspondiente a la frecuencia de Debye
$\hbar k_F$	momento de Fermi
$\hbar\mathbf{K}$	momento del centro de masa del par de Cooper
k_B	constante de Boltzman
L^3	volumen
m^*	masa efectiva
m_B	masa del bosón
m_c/m_{ab}	anisotropía en las masas
m_e	masa del electrón
M	masa efectiva para el potencial de KP tomando la primera banda de energía
n_B	densidad de número de bosones
n_{Bf}	densidad de número de pares de Cooper (bosones) en el superconductor
n_{ps}	densidad de número de pares superconductores
n_s	densidad de número de acarreadores de superconductividad
n_{2D}	densidad de número de electrones en 2 dimensiones
n_{3D}	densidad de número de electrones en 3 dimensiones
N_e	número de partículas (ya sean bosones o fermiones) en el estado excitado
N_{fer}	número de fermiones
N_0	número de partículas (ya sean bosones o fermiones) en el estado condensado
P	impenetrabilidad de las barreras de KP
P_0	impenetrabilidad adimensional
\mathbf{r}	coordenada relativa entre dos electrones
\mathbf{R}	coordenada del centro de masa del par
R	resistencia
s	potencia del momento en la relación de dispersión
s_{cel}	número de átomos por celda unitaria
sp	espín
S	entropía
T	temperatura absoluta
T_c	temperatura crítica de superconducción
T_{cexp}	temperatura crítica experimental del superconductor
T^*	temperatura a partir de la cual se empiezan a formar los pares de Cooper
T_F	temperatura de Fermi
T_0	temperatura de condensación Bose-Einstein de un gas ideal
T_{0f}	temperatura de condensación de una fracción del gas ideal de bosones
\tilde{T}_c	T_c/T_0
U	energía interna
\mathbf{v}_{F2D}	velocidad de Fermi bidimensional
\mathbf{v}_{F3D}	velocidad de Fermi tridimensional
v_0	magnitud de la velocidad del sonido en el material
$V(r)$	potencial externo

x	dopaje con huecos
z	fugacidad
α	coeficiente de la componente cuadrática del calor específico electrónico
$\alpha_{a,b,c}$	coeficiente de expansión en las direcciones cristalográficas
α_{KP}	$2m\varepsilon_k/\hbar$
α_l	coeficiente de expansión lineal
β	$1/k_B T$
β_{th}	coeficiente de expansión térmica
$\tilde{\beta}$	$\beta k_B T_0$
$\hat{\beta}$	$\beta k_B T_F$
$\Delta(C_{es} - C_{en})/T_c$	magnitud del salto en el calor específico
$\Delta(T)$	brecha de energía superconductor
Δ_0	brecha de energía de un superconductor a $T = 0$, $\mathbf{K} = 0$, y acoplamiento débil
Δ_K	brecha de energía de un superconductor $\mathbf{K} \neq \mathbf{0}$
ε_k	energía de una partícula en función de su momento $\hbar k$
$\bar{\varepsilon}_k$	energía de una partícula en unidades de $\hbar^2/2ma^2$
$\tilde{\varepsilon}_k$	energía de una partícula en unidades de $k_B T_0$
$\hat{\varepsilon}_k$	energía de una partícula en unidades de $k_B T_F$
ε_p	energía del par relativa al nivel de Fermi
ε_0	energía del estado base de una partícula (se usa tanto para $k = 0$ como para $k \neq 0$)
ε_{\parallel}	energía de la partícula debida a su movimiento en el plano $x - y$
ε_{\perp}	energía de la partícula debida a su movimiento perpendicular al plano $x - y$
κ_S	compresibilidad adiabática
κ_T	compresibilidad isotérmica
γ	$\hbar^2/2ma^2 k_B T_0$
γ_e	coeficiente de la componente lineal del calor específico electrónico
γ_F	$\hbar^2/2m_e a^2 k_B T_F$
$\Gamma(\sigma)$	función Gamma
Θ_D	temperatura de Debye
λ	constante de acoplamiento
λ_L	longitud de penetración de London
λ_0	longitud de onda térmica de un gas ideal de bosones
λ_{0f}	longitud de onda térmica de una fracción de un gas ideal de bosones
Λ	intensidad de la función delta
μ	potencial químico
μ_0	potencial químico del sistema en el estado base
ξ	variable auxiliar de energía
ρ	$(K_x^2 + K_y^2)^{1/2}$
ρ_B	densidad tridimensional de bosones
ρ_f	densidad tridimensional de fermiones
ρ_{xy}	resistividad en el plano $x - y$
ρ_z	resistividad a lo largo del eje z
σ_i	espín del electrón

σ	coeficiente de relajación del espín de los muones
Φ_0	estado vacío
$\phi(\mathbf{r})$	función de onda relativa
$\chi(\sigma_1, \sigma_2)$	función de onda de los espines
$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$	función de onda de un par de electrones
Ψ_N	función de onda de varios pares de electrones
Ψ_{BCS}	función de onda de BCS
ξ_0	la longitud de coherencia a $T = 0$
ω	frecuencia
ω_D	frecuencia de Debye
Ω	gran potencial
Ω_0	gran potencial del estado base

Índice general

Dedicatoria	I
RESUMEN	II
Agradecimientos	III
Lista de Publicaciones	IV
Lista de Símbolos	V
Índice General	IX
1. Introducción	1
2. Teoría Bosón-Fermión de la superconductividad	13
2.1. Apareamiento de Cooper	13
2.2. Teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)	17
2.3. Teoría Bosón-Fermión	26
3. Gases cuánticos en estructuras periódicas	32
3.1. Bosones compuestos en un sistema multicapas	33
3.1.1. Bosones con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.	35
3.1.2. Bosones con relación de dispersión lineal en su movimiento paralelo a los planos	49
3.2. Fermiones en un sistema multicapas	59
4. Algunas propiedades de los cupratos	68
4.1. El cuprato YBaCuO	69
4.2. Propiedades cristalográficas	70
4.3. Anisotropías	72
4.4. Propiedades térmicas	76
4.4.1. Temperatura crítica y gap de energía	76
4.4.2. Calor específico	79

4.4.3. Coeficiente de expansión térmica y la relación entre C_p y C_V	89
4.4.4. Pseudogap	91
4.5. Propiedades superconductoras	93
5. Calor específico del cuprato $YBa_2Cu_3O_{7-x}$	95
5.1. Temperatura crítica: fracción	99
5.2. Calor específico electrónico	103
5.2.1. Calor específico de los pares de Cooper	103
5.2.2. Calor específico de fermiones no apareados	106
5.2.3. Calor específico electrónico total	108
5.3. Calor específico de la red	109
5.3.1. Calor específico de los fonones	110
5.3.2. Modelo de Debye	110
5.3.3. Dispersión inelástica de neutrones	112
5.4. Calor específico total del cuprato $YBa_2Cu_3O_{6.92}$	115
6. Conclusiones	119
A. Relación de dispersión lineal en $x - y$ y cuadrática en z	124
Lista de Figuras	128
Lista de Tablas	134
Bibliografía	135

Capítulo 1

Introducción

Desde que J. G. Bednorz y K. A. Müller [1] descubrieron los superconductores cerámicos de alta temperatura crítica T_c (HTSC) en 1986, se han hecho un sin fin de esfuerzos para tratar de explicar la relación de este fenómeno con sus propiedades microscópicas. La teoría de la superconductividad desarrollada por J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer (BCS) en 1957 [2], basada en la creación de pares de Cooper (PC) formados por dos electrones que interactúan atractivamente a través de la red, fue capaz de describir exitosamente a los superconductores convencionales de baja T_c a través de las llamadas *relaciones universales*, que describiremos en el Capítulo 2. Desde entonces se reconoce que los pares de Cooper son los responsables de la superconductividad, al requerir de una cantidad mínima de energía para excitarse. Sin embargo, la teoría BCS también ha mostrado su incapacidad de describir la superconductividad de alta temperatura crítica, ya que estos superconductores no cumplen ni con las relaciones universales, ni con el valor esperado de T_c/T_F de 0.005 a 0.01. En la búsqueda de un modelo teórico que explique el fenómeno de superconductividad en los HTSC se ha propiciado la aparición, ya sea de nuevas teorías [3–7], o la actualización de aquellas que no se terminaron de desarrollar en los años cincuenta [8–11] debido al éxito contundente de la teoría BCS para explicar la superconductividad convencional.

A partir del descubrimiento del primer superconductor por Kamerlingh Onnes en 1911 [12],

que fue el mercurio con una $T_c = 4.2$ K, se obtuvieron varios superconductores monoatómicos simplemente enfriando los distintos elementos. Pero las temperaturas necesarias para prender la superconductividad resultaron ser extremadamente bajas, del orden de unos cuantos Kelvin (K), siendo el valor máximo obtenido por esta vía la del Niobio con 9.3 K [13]. Posteriormente se crearon los superconductores binarios, los ternarios y las aleaciones, haciendo combinaciones de todos los demás elementos no radioactivos y los átomos de los superconductores ya conocidos hasta que se llegó a lo que parecía ser el tope de 23.2K con el compuesto Nb_3Ge [14, 15]. Éstos representan los superconductores de Tipo I, que a groso modo tienen entre sus características principales: la desaparición de la resistencia eléctrica por debajo de T_c ; la expulsión del interior del material de cualquier campo magnético externo (diamagnetismo perfecto), y cuando el campo magnético penetra la muestra la superconductividad se destruye; tienen estructuras completamente simétricas a lo largo de los tres ejes cristalográficos con celdas unitarias de los tipos cúbica centrada en el cuerpo (BCC), cúbica centrada en la cara (FCC) o hexagonal compacta (HCP); la interacción entre los electrones que forman los pares de Cooper es débil, y por lo tanto su longitud de coherencia es muy grande, del orden de 10^3 Å; el doble del *gap de energía* Δ_0 de un superconductor a $T = 0$ es aproximadamente 3.52 veces $k_B T_c$ [16], que es una de las predicciones de BCS; el calor específico a muy bajas temperaturas tiene un comportamiento exponencial como función de la temperatura, otra predicción exitosa de BCS; y por último, se observa una discontinuidad en T_c también para el calor específico C . No todos los superconductores convencionales son del Tipo I, hay excepciones como por ejemplo el Nb. Entre los superconductores que sí están en esta categoría se encuentran los conocidos como del tipo A15, de los cuales forman parte los compuestos Nb_3Sn con una $T_c = 18$ K y $NbTi$ con una T_c alrededor de 9 K, que soportan campos magnéticos muy fuertes, y son los únicos que se producen a gran escala [17]. Principalmente se utilizan en la construcción de los imanes que se necesitan en las Resonancias Magnéticas Nucleares (NMR), en el Gran Colisionador de Hadrones (VLHC) de CERN y en el Reactor Experimental Termonuclear

Internacional (ITER) de fusión en construcción.

El primer superconductor de alta temperatura crítica en descubrirse fue el La_2CuO_4 por Bednorz y Müller con una $T_c = 35$ K [1]. Unos cuantos meses después se descubrió el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ por Wu *et al.* con una $T_c = 92$ K [18], temperatura mayor que la temperatura de licuefacción del Nitrógeno - lo cual facilita enormemente el manejo de estos materiales - que marca el inicio de los superconductores de *altas temperaturas*. Ambos compuestos fueron construidos a base de combinaciones de materiales de las cuales no se tenía la más mínima sospecha de que serían superconductores. Siguiendo por ese camino se obtuvieron una gran variedad de compuestos conocidos como cupratos, con diferentes temperaturas críticas, siendo la más alta la de un compuesto a base de mercurio, $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ [19], con $T_c = 133$ K a presión atmosférica y $T_c = 164$ K bajo una presión de 30 GPa [20]. Paralelamente se han descubierto otros superconductores con diferentes características como: los orgánico-metálicos, o sales de Bechgaard [21], con una T_c relativamente baja, de 3.5 K, y una estructura que se puede considerar casi unidimensional; superconductores moleculares basados en fullerenos- C_{60} , tales como el Cs_3C_{60} con $T_c = 38$ K [22]; el diboruro de magnesio MgB_2 con $T_c = 39$ K [23], que tiene una estructura celular de capas de magnesio sandwichadas entre capas hexagonales de boro, donde la función de onda de los pares de Cooper obedece a una simetría del tipo de onda-s; los de fermión pesado, llamados así porque la masa efectiva m^* de los portadores de carga es del orden de 100 veces la masa del electrón m_e ; un pequeño grupo de superconductores compuestos con grafito intercalado, como el C_6Yb y C_6Ca , con temperaturas críticas de 6.5 K y 11.5 K respectivamente, por lo que han recibido muy poca atención, que tienen una estructura casi-bidimensional como ocurre con el grafeno [24,25]; y más recientemente los superconductores a base de hierro [26]. Estos últimos están dentro de la categoría de los superconductores Tipo II, que comprenden a los superconductores no convencionales, para los cuales las predicciones hechas por la teoría BCS no se cumplen. En la Fig. 1.1 presentamos un esquema de la evolución de la T_c a través de los años. Los superconductores Tipo II tienen

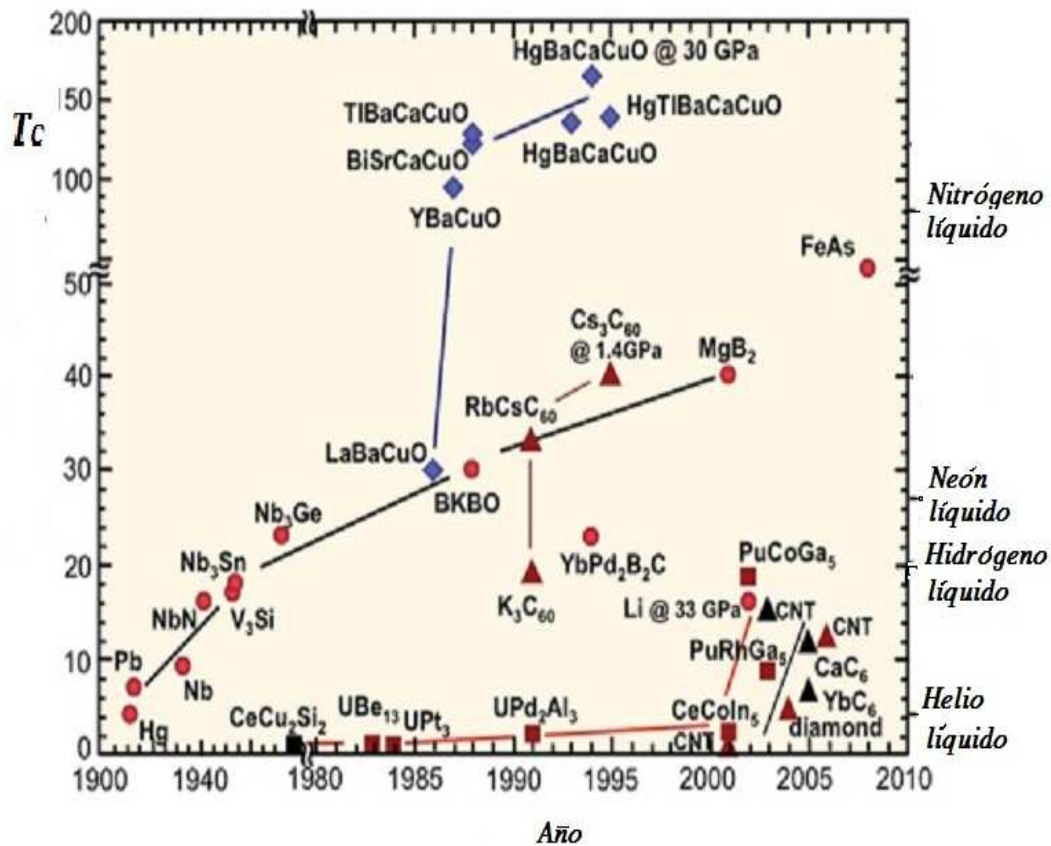


Figura 1.1: Evolución de la temperatura crítica en base al descubrimiento de nuevos superconductores. Figura tomada de [27].

las siguientes características principales: presentan una zona mixta comprendida entre los campos magnéticos críticos H_{c1} y H_{c2} , en la que no se excluye por completo el campo magnético externo, a diferencia de los del Tipo I, sino que lo dejan pasar en forma de red triangular, conocida como red de Abrikosov; la magnitud del gap de energía Δ_0 es mayor a $3.52k_B T_c$; tienen estructuras cristalinas muy complejas y anisotrópicas; la longitud de coherencia es muy pequeña, del orden de 10 Å; y el tipo de parámetro de orden de superconducción aparentemente es del tipo onda-d o más complicada.

Algunos de los superconductores de alta temperatura que ya mencionamos presentan una es-

estructura donde los átomos de la celda unitaria se acomodan en capas, misma que se repite periódicamente, y que favorece la conducción de la superconductividad a lo largo de uno de sus planos cristalográficos. Coloquialmente se les conoce como *superconductores estratificados* y se dividen en tres *familias*: fermión pesado, cupratos y a base de fierro, aunque no todos los superconductores con este tipo de estructuras están incluidos en estas tres familias.

La primera familia son los superconductores conocidos como de fermiones pesados, o *Heavy Fermion*, un tipo “exótico” de superconductores que se descubrieron desde 1979, antes que los cupratos, pero que en esa época no se les dio tanta importancia por tener temperaturas críticas bajas. El primer compuesto de este tipo fue el CeCu_2Si_2 con $T_c = 0.5 \text{ K}$ [28]. Los distintos análisis de su calor específico electrónico C_e muestran una componente de tipo lineal en la temperatura, $\gamma_e T$, que es por lo menos un orden de magnitud mayor que la correspondiente a los cupratos. Más aún, la magnitud del salto en el calor específico en el punto de la transición también es muy grande, por lo que al tomar el cociente $(C_e - \gamma_e T_c)/\gamma_e T_c$ se recupera, al parecer por casualidad, un valor cercano al 1.43 predicho por BCS [13]. En la curva del calor específico de uno de estos compuestos, el UPt_3 [29], se puede observar un comportamiento muy inusual, un “doble pico” en T_c que hasta el momento no se ha podido explicar. En la Fig. 1.2 mostramos la estructura del compuesto CeCu_2Si_2 .

La segunda familia está compuesta por los cupratos, de los cuales hay una gran variedad y que hasta hace un par de años eran los que recibían mayor atención. Tienen estructuras preferentemente tetragonal u ortorrómbica y planos de óxido de cobre en los que se forman los pares de Cooper responsables de la superconductividad [13]. Es de notarse que están compuestos a partir de “perovskitas” (cerámicas) que tienen la capacidad de modificar su estructura al llegar a la temperatura crítica y por debajo de ella, siendo esta característica la responsable de que para un mismo compuesto el tener una distinta concentración de oxígeno provoque la diferencia entre producir o no la superconductividad. Para una mejor descripción de las propiedades y clasificaciones cristalo-

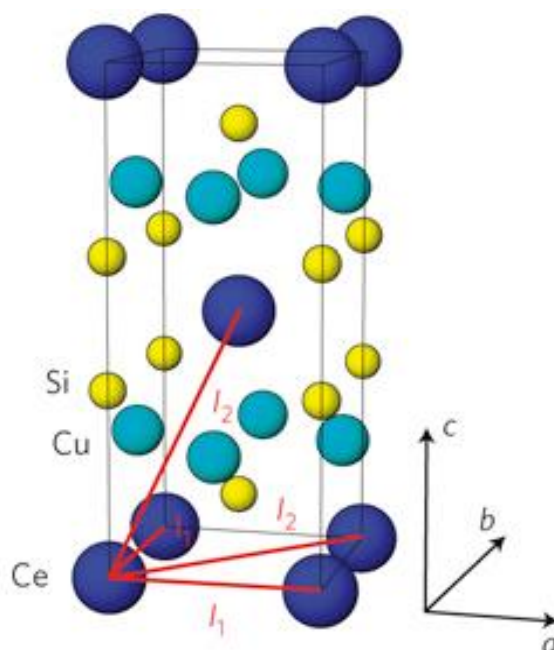


Figura 1.2: Estructura del superconductor de fermión pesado CeCu_2Si_2 .

gráficas de estos y otros superconductores se pueden ver textos como el de Poole [13]. Dentro de esta familia se encuentran, como ya dijimos, los superconductores a base de lantano, de mercurio y otras combinaciones incluyendo las distintas tierras raras como Y o Sr. Pero el compuesto que ha recibido la mayor atención por teóricos y experimentales es el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, donde x representa la contaminación (*dopaje*) del oxígeno con agujeros (Nótese que también se puede contaminar con electrones). Su temperatura crítica para $x = 0.08$ es de $T_c = 92.2$ K, el cual mostramos en la Fig. 1.3. Con este superconductor ponemos a prueba nuestro modelo por contar con el mayor (y presumiblemente más confiable) acervo de datos. En el Capítulo 4 hablaremos con más detalle de las propiedades de los cupratos.

La tercera familia de superconductores estratificados está formada por los constituidos a base de fierro-arsénico, descubiertos recientemente, que son los que actualmente tienen la mayor atención y nos tienen en la llamada “era de hierro”. El primero de esta clase se descubrió apenas en enero de 2008 en el compuesto LaOFeAs (pníctidos) con una $T_c = 26$ K a presión atmosférica [30],

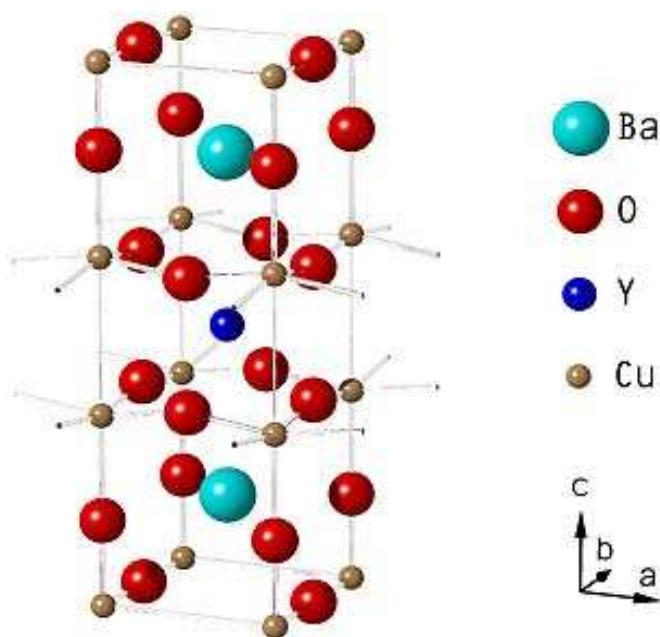


Figura 1.3: Estructura del superconductor cuprato YBaCuO.

y con $T_c = 43$ K bajo presión de 4 GPa [31]. En unos cuantos años se han desarrollado muchos compuestos de este tipo, incluyendo algunos a base de calcógenos (oxígeno, azufre, selenio, etc.) y ponen en tela de juicio la idea de que la superconductividad y el magnetismo son antagónicos, ya que el hierro no sólo no es superconductor, sino que es un material ferromagnético, al contrario de lo que ocurre con los cupratos creados a partir de compuestos magnéticamente aislantes. Más aún, aunque en poco tiempo se han escrito cientos de artículos sobre estos materiales, todavía hay controversia sobre: el tipo de apareamiento que los gobierna, ya que puede no ser del tipo fonónico sino más bien magnético; sobre el tipo de parámetro de orden; sobre la influencia del exacto contenido químico de la fórmula; y especialmente, sobre la posibilidad de que la superconductividad y el magnetismo coexistan [32, 33]. En lo que sí hay consenso es en que la superconductividad ocurre en los planos bidimensionales que forma el Fe con otros elementos, tal y como ocurre en los planos de óxido de cobre de los cupratos, peculiaridad que incorporamos a nuestro modelo. En la Fig. 1.4 se observa la estructura en capas del superconductor $\text{Nd}_x\text{Ca}_{1-x}\text{FeAsF}$ con $T_c = 57.4$ K,

hasta el momento el de mayor temperatura crítica de los de este tipo.

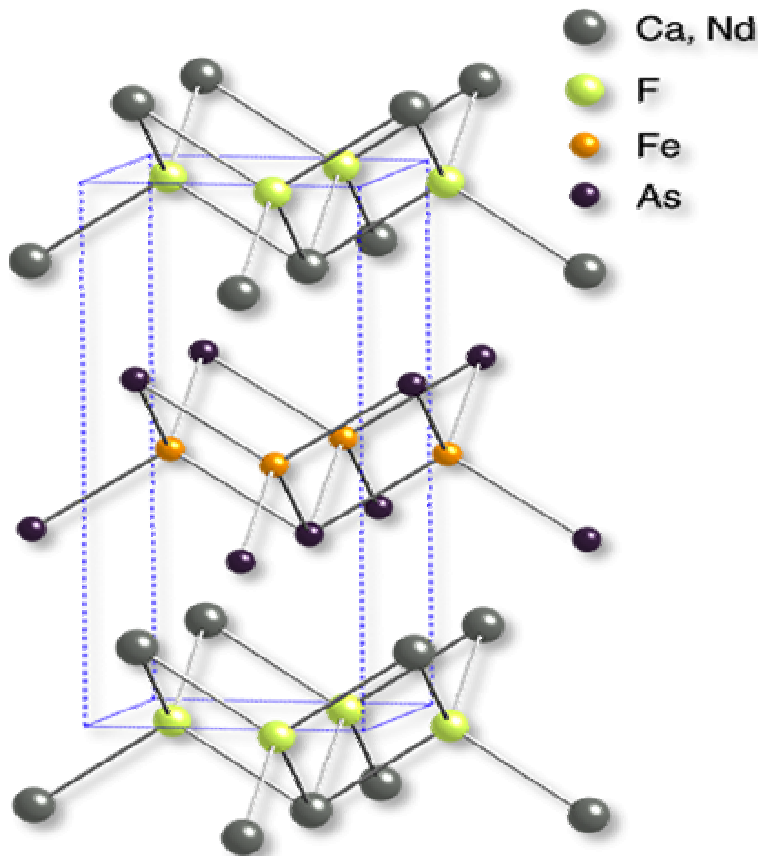


Figura 1.4: Estructura del superconductor $\text{Nd}_x\text{Ca}_{1-x}\text{FeAsF}$.

Ya hemos comentado que no sólo la temperatura crítica caracteriza a los superconductores, sino que el calor específico también da información fundamental sobre ellos. Para los metales el calor específico se divide en el calor específico de la red y el de los electrones de la forma $C(T) = C_l(T) + C_e(T)$. A su vez el calor específico electrónico es de la forma $C_e(T) \propto \gamma_e T$, mientras que el de la red normalmente se puede modelar con teorías como la de Debye, que en el límite de bajas temperaturas es $C_l(T) \propto T^3$, y cuando T es muy grande, el calor específico de la red tiende a un valor $3sR$, donde s es el número de átomos por celda unitaria y R es la constante universal de los gases. En el caso de los superconductores convencionales, el calor específico electrónico por arriba de la temperatura crítica se comporta como el calor específico del material en su estado normal C_{en}

(no superconductor), tiene un salto agudo en $T = T_c$, un exceso de calor específico en el estado superconductor por abajo y cerca de T_c , una baja del calor específico electrónico superconductor C_{es} con respecto a C_{en} para temperaturas muy bajas, y un comportamiento con forma exponencial también para temperaturas muy bajas, lo cual ha sido descrito exitosamente para la mayoría de los superconductores convencionales por la teoría de BCS. Además, la altura del salto en el punto de la transición en el calor específico electrónico tiene un valor determinado que también es explicable dentro del marco de la teoría de BCS. La componente lineal del calor específico electrónico es fácilmente identificable en estos compuestos a partir de la componente normal C_{en} , y el valor de la constante γ_e se obtiene de la intersección de la extrapolación de la curva C_{en}/T al origen. Por su parte, el calor específico de la red $C_l(T)$ no sufre alteraciones al pasar del estado normal al superconductor en estos materiales.

Para los superconductores de HTSC la historia es muy diferente y BCS no describe su comportamiento. Para la mayoría de los cupratos, y en particular para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, se pueden resaltar varias características fundamentales en su calor específico. En primera, la componente lineal del calor específico electrónico C_e/T por debajo de T_c es muy difícil de determinar debido a que se necesitan campos magnéticos muy fuertes para cancelar las demás componentes. Durante años se han manejado cifras muy diversas, pero los últimos reportes [34] dan valores de γ_e entre 2 – 3 mJ/mole K^2 . En segundo lugar tenemos un término cuadrático en T por debajo de T_c , también atribuible al calor específico electrónico $C_e(T) \propto \alpha T^2$, que aunque inicialmente se había dicho que no existía [35], después se confirmó su existencia por varios autores [34, 36, 37]. Este término cambia a un comportamiento $C_e(T) \propto TB^{1/2}$ cuando se aplica un campo magnético externo. Los valores reportados para α son de décimas de mJ/mole K^3 , aunque al igual que para γ_e , dependen fuertemente de las condiciones del experimento y del método teórico que cada experimental utiliza para determinarlo. En tercer lugar, el “salto” en la temperatura de transición, dependiente del calor específico electrónico, representa una confirmación experimental de que ocurre la superconduc-

tividad e indica que tenemos una transición de fase de segundo orden. La altura del salto $\Delta C_e/T_c$ también se ha reportado en la literatura con una gran variedad de valores, y se ha mostrado que para una misma muestra este salto disminuye al aumentar el campo magnético externo [38]. Y finalmente, el “giro hacia arriba” a temperaturas muy bajas (conocido como *upturn* o *fishtail*) que se observa para C_e/T . En el Capítulo 4 hablaremos con más detalle de estas características.

Contrario a lo que normalmente se cree, el calor específico de la red C_l del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ no está completamente descrito por ninguna teoría. Se han hecho una gran cantidad de propuestas diferentes, como: hacer ajustes a los modelos de Debye y de Einstein [39, 40], proponer distintas series de potencias [41–44], o adecuar modelos que han sido relativamente exitosos en otros compuestos [45–47], por citar algunos ejemplos. Todos los autores que recurren a estos métodos basados en ajustes (fits) substraen el calor específico que obtuvieron como si fuera el de la red, y a la curva resultante la consideran como el calor específico electrónico. En el Capítulo 5 obtenemos el calor específico de la red con dos métodos diferentes: el modelo de Debye y el resultado de los experimentos de dispersión inelástica de neutrones. Construimos el calor específico total sumando las distintas componentes que obtuvimos y mostramos que las estimaciones anteriores sobre la contribución de C_e al total son muy bajas.

Recientemente se ha desarrollado la teoría estadística Bosón-Fermión de la superconductividad [3, 6, 7, 48] en el que se modelan los pares de Cooper como bosones-compuestos con momentos totales del centro de masa iguales o diferentes de cero, y que coexisten con un fluido de fermiones formado por los electrones no-apareados. Dicho gas binario se encuentra en equilibrio térmico y químico, y los pares de Cooper experimentan una condensación de Bose-Einstein cuando se llega a la temperatura crítica desde arriba.

Por otro lado, en el 2010 calculamos las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones no-interactuantes inmerso en un arreglo periódico de potenciales del tipo Kronig-Penney (KP) [49, 50], el cual actúa sobre las partículas como agente confinador [51], simulando una estruc-

tura multicapas. Las barreras de KP son tomadas, en el límite, como deltas de Dirac a lo largo de la dirección-z, mientras en las otras dos direcciones, x, y , permitimos que las partículas se muevan libremente. No estamos considerando la influencia de campos magnéticos externos. Una vez que se obtiene el gran potencial para el sistema podemos derivar las propiedades termodinámicas del sistema tales como la temperatura crítica, la fracción condensada, el potencial químico, la energía interna, la entropía y el calor específico a volumen constante.

En este trabajo usamos la estructura multicapas para modelar a los cupratos asumiendo que los pares de Cooper se mueven libremente entre los planos manifiestan una relación de dispersión lineal, en lugar de la cuadrática [7] y en campo cero. A partir del gran potencial para un gas de bosones entre capas, obtenemos las propiedades termodinámicas correspondientes.

Para comparar nuestros resultados del calor específico con los reportados experimentalmente para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ consideramos tres contribuciones: la de un gas de pares de Cooper (bosones) formado por una fracción f de los electrones con la posibilidad de aparearse, que se encuentran en el cascarón de ancho $2\hbar\omega_D$, con ω_D la frecuencia de Debye, alrededor de la energía de Fermi E_F , a partir de los cuales se va a formar el condensado de Bose-Einstein; la de un gas de fermiones constituido por los $(1 - f/2)$ electrones que no se aparearon; y la del gas de fonones (bosones) de la red. Está implícita la idea de que tenemos un gas de fermiones desapareados coexistiendo con el gas de *pares preformados* que empiezan a formarse a alguna temperatura T^* mayor a la temperatura de transición. Esta temperatura ha sido señalada en la literatura en diversas ocasiones, e incluso fue propuesta como $T^* = 2T_c$ por Eagles desde 1969 [52, 53].

Nuestro modelo depende de tres parámetros: la separación entre los planos; la impenetrabilidad de los planos que es introducida a través de la intensidad de las deltas que definen los planos, y que genera la anisotropía observada en los cupratos; y la densidad de portadores de carga. Cuando fijamos los parámetros utilizando los valores experimentales reportados para los cupratos, podemos reproducir más que cualitativamente: la temperatura crítica del superconductor; la altura del salto

de C_V en el punto de la transición; la magnitud del calor específico total en el intervalo que va desde bajas temperaturas hasta T arriba de T_c , en particular nuestro cálculo de C_V total es muy cercano al experimental exactamente en T_c ; y obtenemos los valores de las constantes del calor específico electrónico γ_e y α del orden de los valores reportados. Las pequeñas diferencias que se observan entre el calor específico experimental y el que nosotros obtenemos pueden deberse a que nuestro modelo utiliza partículas sin interacciones (bosones y/o fermiones) entre ellos, y que no estamos incluyendo la presencia de campos magnéticos externos ni internos. En particular, el giro hacia arriba observado para $T < 5$ K es atribuido [54] a contribuciones magnéticas asociadas a centros paramagnéticos, y a contribuciones hiperfinas asociadas a momentos nucleares, por lo que no son predecibles por nuestro modelo.

La tesis se desarrolla de la siguiente forma: en el Capítulo 2 resumimos brevemente la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad, haciendo énfasis en las ventajas que ofrece sobre la Teoría BCS para superconductores de alta T_c . En el Capítulo 3 calculamos el gran potencial y las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones inmerso en una estructura de multicapas, y donde los bosones pueden tener una relación de dispersión cuadrática o una lineal en su movimiento paralelo a los planos. Paralelamente en el mismo Capítulo 3 derivamos las propiedades termodinámicas para un gas ideal de fermiones dentro de la misma estructura periódica. En el Capítulo 4 hacemos un resumen de las principales características de los cupratos y sus propiedades. En el Capítulo 5 aplicamos las expresiones de nuestro modelo al cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, obteniendo la temperatura crítica y las tres componentes principales del calor específico para formar el total. Calculamos las constantes del calor específico electrónico γ_e y α . Y finalmente en el Capítulo 6 damos nuestras conclusiones.

Capítulo 2

Teoría Bosón-Fermión de la superconductividad

Aunque la teoría BCS tuvo mucho éxito al describir algunas propiedades básicas de los superconductores convencionales o de baja temperatura crítica, en términos generales no explica las características de los superconductores de alta temperatura crítica. En este capítulo haremos una breve revisión del problema del apareamiento de Cooper, la teoría BCS, y posteriormente daremos las bases de la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad, dentro de la cual realizamos nuestros cálculos.

2.1. Apareamiento de Cooper

En 1956 Cooper demostró que si se tienen dos electrones con momentos y espines opuestos situados sobre el mar de Fermi lleno, y éstos interactúan atractivamente por medio de la red cristalina, se forma un estado ligado asociado al par de Cooper [55]. Los electrones involucrados dejan de ser “libres”, la esfera del mar de Fermi se contrae y el estado ligado tiene menor energía que la de los constituyentes no apareados. Dicha diferencia de energía propicia la formación de lo que

conocemos, en el contexto de una teoría de muchos cuerpos, como la *brecha de energía* prohibida para los electrones libres. La interacción atractiva entre los electrones se realiza a través del intercambio de un fonón de la red cuya energía puede llegar a ser $\hbar\omega_D$, con ω_D la frecuencia de Debye. Por lo tanto, los electrones que participan en la superconductividad son los que se encuentran en los estados situados en el cascarón esférico de ancho $2\hbar\omega_D$ centrado en la energía de Fermi como se muestra en la Fig. 2.1. Los electrones con energías por debajo de dicha franja ocupan los estados de acuerdo al principio de exclusión de Pauli, y no sufren ninguna alteración cuando el material pasa al estado superconductor.

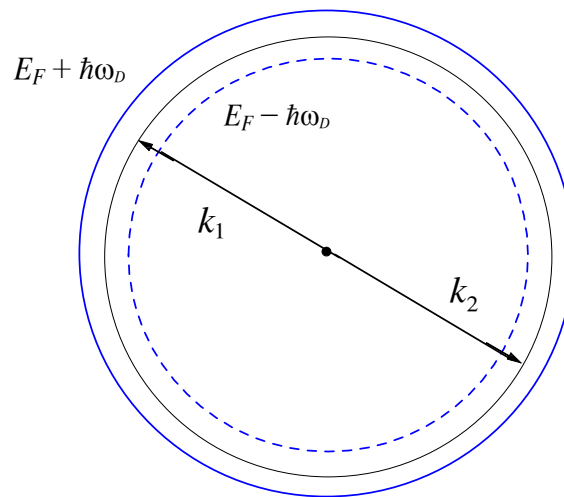


Figura 2.1: Espacio de momentos para dos fermiones formando un par de Cooper.

Al aparearse, los fermiones forman bosones compuestos con momento angular entero, espín total cero y siguen la estadística de Bose-Einstein [6], aunque sus operadores de creación y aniquilación no cumplan con las reglas de conmutación de los bosones convencionales. Los experimentos más representativos que muestran el comportamiento de los bosones compuestos son los de gases ultrafríos de elementos alcalinos que se han logrado condensar en el laboratorio (véanse por ejemplo las referencias en [56]).

Se propone la función de onda de dos electrones con coordenadas \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , y momentos \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 como [?]

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}] \chi(\sigma_1, \sigma_2), \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{R} \equiv \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ es la coordenada del centro de masa, $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ es la coordenada relativa, σ_1 y σ_2 son los espines de los dos electrones, $\phi(\mathbf{r})$ es la función de onda relativa, χ es la función de onda de los espines, $\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ es el momento del centro de masa y $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ el momento relativo. Nótese que la función de onda (2.1) fue construida de manera tal que sea separable en las variables que la componen, facilitando así su manejo.

La ecuación de Schrödinger general para el par de electrones es

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(\varepsilon_p + 2 \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.2)$$

donde ε_p es la energía del par relativa al nivel de Fermi.

Hacemos una expansión en series de Fourier (ondas planas) de $\phi(\mathbf{r})$

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}], \quad (2.3)$$

donde $\mathbf{C}_{\mathbf{k}}$ son coeficientes en términos de la variable en el espacio de momentos \mathbf{k} , y son cero para todos los niveles por debajo del nivel de Fermi. Se introduce (2.3) en (2.2), para obtener

$$\sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} 2k^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] = \left(\varepsilon_p + 2 \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \right) \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)], \quad (2.4)$$

donde se ha supuesto que $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ no es función de los espines σ_1, σ_2 . Suponiendo invariancia traslacional, i. e. $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r})$, multiplicando ambos lados de la ecuación por $\exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]$ e integrando sobre d^3r se llega

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\mathbf{k}} \int \exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] \mathbf{C}_{\mathbf{k}} k^2 d^3r + \int \sum_{\mathbf{k}} V(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] \mathbf{C}_{\mathbf{k}} d^3r \\ &= \left(\varepsilon_p + \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \right) \int \sum_{\mathbf{k}} \exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] \mathbf{C}_{\mathbf{k}} d^3r. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Usando que $\int \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] d^3r$ es L^3 si $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ o cero en otro caso, tenemos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m} \mathbf{C}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{C}_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = (\varepsilon_p + 2\varepsilon_F) \mathbf{C}_{\mathbf{k}}. \quad (2.6)$$

El término $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ es la interacción no-local atractiva entre los dos electrones definida como

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \frac{1}{L^3} \int V(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] d^3r. \quad (2.7)$$

En este desarrollo se considera que todos los estados por debajo del nivel de Fermi están ocupados y por lo tanto $\mathbf{C}_{\mathbf{k}} = 0$ para $k < k_F$. La interacción se puede tomar de la forma más sencilla:

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{si } E_F < \varepsilon_k, \varepsilon_{k'} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (2.8)$$

con V una constante, $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ y $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ la energía de Fermi. Para obtener (2.8) se ha usado el potencial de contacto (o potencial delta) $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -V\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ y se han tomado únicamente los estados con energías por arriba del mar de Fermi, como se observa en la Fig. 2.1. Notemos que cuando $\mathbf{K} = 0$, que es el caso considerado por Cooper, se tiene que los electrones tienen momentos iguales y opuestos, por lo que el área de traslape es máxima, pero más adelante veremos los casos en que $\mathbf{K} \neq 0$ y en que se consideren también los estados con $E_F + \hbar\omega_D$. Se introduce (2.8) en (2.6), se integra sobre el espacio d^3k , y con un poco de álgebra se obtiene

$$\left(\frac{-\hbar^2 k^2}{m} + \varepsilon_p + 2\varepsilon_F \right) \mathbf{C}_{\mathbf{k}} = -\frac{V}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{C}_{\mathbf{k}'}, \quad (2.9)$$

donde se ha eliminado la dependencia en \mathbf{r} . Sumando sobre \mathbf{k} ambos lados de la Ec. (2.9), y como $\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}}$ es una constante, nos queda que

$$1 = \frac{V}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \varepsilon_p - 2\varepsilon_F}. \quad (2.10)$$

Definimos la energía $\xi = (\hbar^2 k^2 / 2m) - \varepsilon_F$, introducimos la densidad de estados por espín $g(\xi)$, e intercambiando la sumatoria por integrales

$$1 = V \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{g(\xi) d\xi}{2\xi - \varepsilon_p}, \quad (2.11)$$

tomando en cuenta que la integral va a ser diferente de cero solamente en los casos especificados por (2.8). Al hacer la integral en (2.11) se obtienen que

$$1 = \frac{1}{2} V g(E_F) \ln \left(\frac{\epsilon_p - 2\hbar\omega_D}{\epsilon_p} \right), \quad (2.12)$$

donde $g(E_F)$ es la densidad de estados electrónicos en el nivel de Fermi (en algunos textos identificada como $N(0)$), la cual tiende a una constante en E_F . Si se toma que $\epsilon_p \ll \hbar\omega_D$, conocido como *acoplamiento débil*, se llega finalmente al resultado del par de Cooper

$$\epsilon_p = -2\hbar\omega_D \exp[-2/\lambda], \quad (2.13)$$

con $\lambda = Vg(E_F)$ conocido como la constante de acoplamiento adimensional y el signo menos indica que tenemos un estado ligado. A su vez, el estado ligado sugiere la existencia de un gap en el espectro de energía, lo que se comprobó en los experimentos de tunelaje en superconductores realizados por Giaever [57]. Además, las curvas experimentales del calor específico electrónico para los superconductores convencionales muestran una forma exponencial a muy bajas temperaturas, consistente con la existencia de un gap para las energías disponibles para el electrón [58].

Recordemos que en la deducción de la Ec. (2.13) se hicieron las siguientes consideraciones: se partió de la ecuación de Schrödinger para dos electrones; se supuso que la interacción entre ellos es constante; se tomó el momento del centro de masa igual a cero; se propuso que los estados por debajo del nivel de Fermi están todos ocupados, y que gracias a ello se obtiene un estado ligado aunque V sea pequeña; y se tomó el acoplamiento débil.

2.2. Teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)

El mecanismo desarrollado por Cooper, si bien es efectivo, tiene el problema de que considera la función de onda de únicamente un par de electrones, olvidándose de que dentro del espacio que ocupa el par se encuentran del orden de 10^{11} electrones más que están involucrados en la

dinámica. Teniendo esto en mente, Bardeen, Cooper y Schieffer [2], recurren a los métodos de muchos cuerpos y formulan la teoría de la superconductividad con base en una función de onda para N pares de electrones que presumiblemente debe ser de la forma:

$$\Psi_N = \psi(1, 2)\psi(3, 4)\dots\psi(N-1, N), \quad (2.14)$$

donde cada una de las funciones de onda tiene la forma descrita en la Ec. (2.1). En este esquema se debe garantizar que dicha función sea antisimétrica y se restringen los estados considerados al apareamiento de un electrón con espín hacia arriba (\uparrow) con uno de espín hacia abajo (\downarrow).

En la búsqueda de un lenguaje más sencillo para manejar las ecuaciones como (2.14), la teoría BCS se desarrolla en el espacio de momentos, por lo que es necesario recurrir al lenguaje de la segunda cuantización con operadores de creación y aniquilación de fermiones $\hat{c}_{\mathbf{k}_i, \sigma_i}^\dagger$ y $\hat{c}_{\mathbf{k}_i, \sigma_i}$, donde \mathbf{k}_i es el momento del i -ésimo electrón con proyección de espín $\sigma (= \uparrow \text{ o } \downarrow)$. En base a estos operadores se construye la función de onda BCS de la forma [16]

$$\Psi_N = \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_{N/2}} C_1 \dots C_{N/2} \hat{c}_{\mathbf{k}_1, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}_1, \downarrow}^\dagger \dots \hat{c}_{\mathbf{k}_{N/2}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}_{N/2}, \downarrow}^\dagger \Phi_0, \quad (2.15)$$

con Φ_0 el estado vacío donde no hay partículas presentes. Bardeen, Cooper y Schieffer introducen una notación más fácil de manejarse, que es

$$\Psi_{BCS} = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger) \Phi_0, \quad (2.16)$$

donde $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ son coeficientes que pueden ser complejos, pero deben cumplir con que $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, que viene de la condición de normalización de $\langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle$. $|v_{\mathbf{k}}|^2$ se toma como la probabilidad de que el par esté ocupando el estado $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ y $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |v_{\mathbf{k}}|^2$ es la probabilidad de que no esté ocupando ese estado. Nótese que Ψ_{BCS} ya no está restringida a $N/2$ pares como lo estaba (2.15). Es decir, para (2.16) el número de electrones no está fijo, por lo que la teoría BCS introduce un número promedio \bar{N} de partículas que está dado por $\bar{N} = \langle \Psi_{BCS} | \hat{N} | \Psi_{BCS} \rangle$, donde \hat{N} es el operador de número definido como $\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$. La restricción sobre el promedio del

número de partículas, es decir, $\bar{N} = \langle \Psi_{BCS} | \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \Psi_{BCS} \rangle$ se introduce en el Hamiltoniano a través del multiplicador de Lagrange μ , el cual se conoce como el potencial químico. Pero con todas estas consideraciones, el Hamiltoniano resultante es

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},\sigma,\sigma'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\mathbf{K},\sigma,\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{K},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{K},\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (2.17)$$

el cual sigue siendo muy complejo, y es necesario hacer más simplificaciones.

Con la finalidad de que se analice correctamente el sistema con muchos cuerpos, BCS retoma la teoría de líquidos de Fermi-Landau, donde los operadores de creación crean *cuasi-partículas* en lugar de electrones (a veces llamados *bogolones*), con una masa efectiva m^* donde se suele incluir la mayor parte de la contribución de la interacción electrón-electrón, la cual se idealiza como una “nube” alrededor del electrón que contiene el movimiento de los demás electrones tratando de alejarse del primero, ya sea por repulsión coulombiana o por el principio de exclusión de Pauli [59]. Con esta interpretación se puede considerar al resto del potencial electrón-electrón como una interacción débil. Además de la interacción electrón-electrón, es necesario incluir la contribución de la interacción electrón-fonón, que se debe a la polarización de los iones de la red por el paso del electrón. Como resultado de considerar ambas componentes, se tiene una *interacción atractiva* a energías de excitación bajas.

Agregando las restricciones que mencionamos arriba (la de tomar únicamente pares con momentos y espines opuestos), construimos el Hamiltoniano reducido \hat{H}_R , que incluye únicamente la parte de la interacción atractiva como

$$\hat{H}_R = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \quad (2.18)$$

donde la variable auxiliar ξ que introdujimos en la sección anterior es ahora $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \hbar^2 k^2 / 2m^* - \mu$. Este Hamiltoniano es el contribuye a la superconductividad.

La energía del estado base está dada por el valor de expectación de (2.18):

$$E_0 = E - \mu \bar{N} = \langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_R | \Psi_{BCS} \rangle, \quad (2.19)$$

la cual se debe minimizar con respecto a la condición $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Esto nos lleva a tomar $|u_{\mathbf{k}}| = \cos \theta_{\mathbf{k}}$ y $|v_{\mathbf{k}}| = \sin \theta_{\mathbf{k}}$, con $\theta_{\mathbf{k}}$ un parámetro. Entonces, en (2.19)

$$\langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_R | \Psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (2.20)$$

Minimizando la ecuación anterior con respecto a $\theta_{\mathbf{k}}$, y después de un poco de álgebra, se llega a que

$$\xi_{\mathbf{k}} \tan 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}, \quad (2.21)$$

de donde se define la *brecha de energía* (gap) como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (2.22)$$

Substituyendo en (2.21) se puede ver que $\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}/\xi_{\mathbf{k}}$, o su equivalente $\sin 2\theta_{\mathbf{k}} = 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}/\varepsilon_{\mathbf{k}}$, y que $\cos 2\theta_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = \xi_{\mathbf{k}}/\varepsilon_{\mathbf{k}}$, donde se introdujo la variable $\varepsilon_{\mathbf{k}} = (\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}$. A $\sin 2\theta_{\mathbf{k}}$ y $\cos 2\theta_{\mathbf{k}}$ se les conoce como los *factores de coherencia*. Se puede demostrar [59] que $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es la energía requerida para agregar un electrón al sistema en el estado \mathbf{k} .

Substituyendo en (2.22) tenemos la relación

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2(\xi_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2)^{1/2}}, \quad (2.23)$$

la cual es conocida como la ecuación del gap.

La ecuación (2.23) tiene una solución trivial $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$, que implica que $v_{\mathbf{k}} = 1$ y $u_{\mathbf{k}} = 0$ para $\xi_{\mathbf{k}} < 0$, y $v_{\mathbf{k}} = 0$ y $u_{\mathbf{k}} = 1$ para $\xi_{\mathbf{k}} > 0$. Lo anterior nos lleva a una función de onda del estado base (2.16)

$$\Psi_{BCS}^0 = \prod_{\mathbf{k} < k_F} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger \Phi_0, \quad (2.24)$$

que corresponde a un mar de Fermi lleno (también conocido como el vacío de Fermi).

La otra solución de (2.23) se obtiene al tomar el mismo tipo de potencial del modelo de Cooper

(2.8), pero incluyendo el cascarón por debajo del nivel de Fermi con ancho $\hbar\omega_D$

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{si } E_F - \hbar\omega_D < \varepsilon_{k_1}, \varepsilon_{k_2} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (2.25)$$

Entonces la brecha $\Delta_{\mathbf{k}}$ es una constante Δ cuando $\xi_k < \hbar\omega_D$ y es igual a cero si $\xi_k > \hbar\omega_D$. Se procede en la misma forma que se hizo con el par de Cooper para llegar a la Ec. (2.11), pero ahora la integral se hace de $E_F - \hbar\omega_D$ a $E_F + \hbar\omega_D$, o sea

$$\begin{aligned} 1 &= g(E_F)V \int_{E_F - \hbar\omega_D}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{d\xi}{2(\xi_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta^2)^{1/2}} \\ &= g(E_F)V \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

despejando

$$\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} = \left[\sinh \left(\frac{1}{g(E_F)V} \right) \right]^{-1}. \quad (2.27)$$

Como $\Delta \ll \hbar\omega_D$ la última ecuación se puede aproximar por

$$\Delta \cong 2\hbar\omega_D \exp[-1/\lambda], \quad (2.28)$$

que corresponde a la Ec. (2.13) del par de Cooper, pero con un signo menos (dada la definición de ε_p) y con el argumento de la exponencial igual a $-1/\lambda$ en lugar de a $-2/\lambda$.

Del mismo modo que se hizo para el caso del par de Cooper, la ecuación de la brecha de energía para el par de BCS se obtuvo tomando el momento del centro de masa K igual a cero y el límite de acoplamiento débil $\lambda \ll 1$, pero se consideró que los electrones que forman el par pueden estar en el cascarón esférico que va de $E_F - \hbar\omega_D$ a $E_F + \hbar\omega_D$, y esta diferencia se aprecia en la exponencial de la Ec. (2.28).

Retomamos la energía del par ε_p relativa al nivel de Fermi definida en la Ec. (2.2) y la reescribimos como $\varepsilon_p = E_p - 2E_F$ ($= -(2E_F - E_p) < 0$), con E_p la energía total del par. Existen dos casos límites conocidos como *acoplamiento débil* y *acoplamiento fuerte*. Para el primero, que es

el que está dentro de la teoría de BCS [2], se tomó la constante de acoplamiento adimensional $\lambda \ll 1$, entonces la energía total del par es

$$E_p = 2E_F - 2\hbar\omega_D \exp[-1/\lambda]. \quad (2.29)$$

Mientras que para acoplamiento fuerte, $\lambda \gg 1$, se tiene que

$$E_p = 2E_F - \lambda\hbar\omega_D. \quad (2.30)$$

Se puede ver que en ambos casos la energía del par es menor a la suma de las energías de los dos electrones libres, por eso se dice que su apareamiento en los superconductores representa un estado de menor energía .

Por otro lado, vamos a redefinir la Ec. del gap (2.28) que se obtuvo para $\mathbf{K} = 0$, $T = 0$ y acoplamiento débil, como

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D \exp[-1/\lambda], \quad (2.31)$$

en el entendimiento de que hasta aquí todo lo que se ha hecho ha sido a $T = 0$.

A partir del Hamiltoniano reducido del sistema en apareamiento, se puede obtener las propiedades termodinámicas, incluyendo los estados excitados, con la ayuda de la función de distribución de Fermi-Dirac de las cuasipartículas

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)] + 1}, \quad (2.32)$$

donde $\beta = 1/k_B T$ y $\epsilon_{\mathbf{k}}$ es la energía de la cuasipartícula que definimos arriba. El valor de expectación del Hamiltoniano reducido es

$$\langle \hat{H}_R \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}}^2 + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2)] + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - 2f_{\mathbf{k}})(1 - 2f_{\mathbf{k}'}). \quad (2.33)$$

La energía libre de Helmholtz es

$$F = \langle \hat{H}'_R \rangle - TS, \quad (2.34)$$

donde la entropía para los fermiones está dada por

$$S = -2k_B \sum_{\mathbf{k}} [f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}} + (1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}})]. \quad (2.35)$$

En la ecuación anterior el 2 viene de considerar las posibilidades para el espín.

Minimizando (2.34) con respecto a los parámetros $\theta_{\mathbf{k}}$, y siguiendo los mismos pasos que se hicieron para obtener la Ec. (2.23) se obtiene la ecuación de la brecha correspondiente

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \tanh \left(\frac{(\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}}{2k_B T} \right), \quad (2.36)$$

donde la dependencia en la temperatura aparece de manera explícita.

Tomando de nuevo el potencial de (2.25) se obtiene el equivalente a (2.26)

$$1 = g(E_F) V \int_{E_F - \hbar\omega_D}^{E_F + \hbar\omega_D} d\xi \frac{1 - 2f((\xi^2 + \Delta^2(T))^{1/2})}{2[\xi^2 + \Delta^2(T)]^{1/2}}, \quad (2.37)$$

de donde $\Delta(T)$ se debe extraer numéricamente [16]. La función $\Delta(T)$ comienza en Δ_0 , se mantiene casi constante por un intervalo amplio de temperaturas y después decrece rápidamente, hasta hacerse cero en $T = T_c$, la temperatura de la transición, como mostramos en la Fig. 2.2.

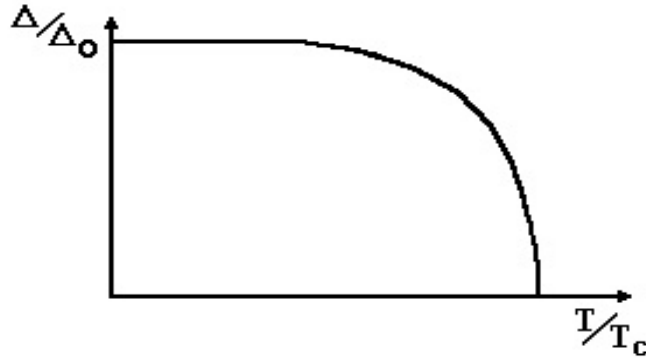


Figura 2.2: Forma de la brecha de energía $\Delta(T)$ en función de la temperatura.

Para obtener T_c se toma $\Delta(T_c) = 0$ en (2.37), y con un poco de álgebra

$$1 = g(E_F) V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T_c}. \quad (2.38)$$

Cuando ξ es grande $\tanh(\xi/2k_B T_c) \rightarrow 1$, y se puede hacer la integral anterior para tener

$$1 = g(E_F)V \ln \frac{1.14\hbar\omega_D}{k_B T_c}, \quad (2.39)$$

que reescribimos como

$$k_B T_c = 1.14\hbar\omega_D \exp[-1/\lambda], \quad (2.40)$$

y usando la Ec. (2.31) obtenemos

$$\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = 3.53, \quad (2.41)$$

que es la primera de las *relaciones universales* de la teoría BCS.

Cuando se compara este resultado con los resultados experimentales de los superconductores convencionales se encuentra una notable coincidencia, y ese es el primer logro de la teoría BCS.

Al hacer un análisis de la función $\Delta(T)$ se encuentra que

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta_0} \approx 1.74 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.42)$$

como se muestra en la Fig. 2.2. A $\Delta(T)$ también se le conoce como *parámetro de orden*, mientras que a $1/2$ como el *exponente crítico*.

Ahora derivamos el calor específico electrónico a volumen constante a partir de la ecuación obtenida para la entropía. Primero, para $T > T_c$, donde $\Delta(T) = 0$, y el material es no superconductor, el calor específico de los electrones en la fase normal, C_{en} , está dado por

$$C_{en} = \frac{2\pi^2}{3} g(E_F) k_B^2 T \simeq \gamma_e T, \quad (2.43)$$

donde γ_e la constante de Sommerfeld, que es del orden de mJ/mole K² para los superconductores convencionales. Para el calor específico electrónico de la fase superconductora se parte de la en-

tropía, Ec. (2.35),

$$\begin{aligned}
 C_{es} &= T \frac{dS}{dT} \\
 &= -2k_B T \sum_{\mathbf{k}} [\ln f_{\mathbf{k}} - \ln(1 - f_{\mathbf{k}})] \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial T} \\
 &= 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{k_B T} \frac{d}{dT} \left(\frac{1}{\exp[\varepsilon_{\mathbf{k}}/k_B T] + 1} \right),
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}(T)$. Haciendo un poco de álgebra, se llega a

$$C_{es} = \frac{2}{k_B T^2} g(E_F) \int_0^\infty d\xi f(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon)] \left(\varepsilon^2 - T \Delta \frac{d\Delta}{dT} \right). \tag{2.45}$$

A muy bajas temperaturas, $f_k \ll 1$ y $\Delta d\Delta/dT \simeq 0$, entonces el calor específico es de la forma

$$\begin{aligned}
 C_{es} &= \frac{2g(E_F)\Delta_0^2 \exp[-\Delta_0/k_B T]}{k_B T^2} \int_0^\infty d\xi \exp[-(\xi^2/2k_B T \Delta_0)] \\
 &= 2g(E_F)\Delta_0 (2\pi)^{1/2} k_B (\Delta_0/k_B T)^{3/2} \exp[-(\Delta_0/k_B T)].
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

Finalmente

$$\frac{C_{es}}{\gamma_e T_c} = 1.34 \left[\frac{\Delta_0}{k_B T} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{\Delta_0}{k_B T} \right], \tag{2.47}$$

que es el comportamiento exponencial que se observa en el calor específico de los superconductores convencionales a bajas temperaturas.

Usando las ecuaciones de los calores específicos electrónicos Ecs. (2.43) y (2.47) se puede ver que en el punto de la transición existe una discontinuidad, cuya magnitud está dada por $\Delta C \equiv C_{es} - C_{en}$

$$\frac{\Delta C}{\gamma_e T_c} = 1.43, \tag{2.48}$$

conocida como el *salto* en el calor específico, y que representa la segunda de las *relaciones universales* de la teoría BCS. Al ser el calor específico una propiedad termodinámica discontinua en

el punto de la transición, se puede determinar que, en ausencia de campos magnéticos externos, la superconductividad es una transición de fase de *segundo orden*.

Como dijimos anteriormente, la teoría de BCS describe con éxito el comportamiento de la mayoría de los superconductores convencionales con acoplamiento presumiblemente débil. Pero cuando alguno de estos elementos presenta valores muy lejanos a los predichos por las Ecs. (2.41) y (2.48), como es el caso por ejemplo del Pb con $2\Delta_0/k_B T_c = 4.4$ y $\Delta C/\gamma T_c = 2.71$, se dice que esto se debe a que es un material con acoplamiento fuerte. Lo mismo suele decirse de otros superconductores que no cumplen con dichas relaciones, incluidos los cupratos, pero en el presente trabajo mostramos que existen otras características que también contribuyen en la descripción de las propiedades termodinámicas de los superconductores de alta T_c .

2.3. Teoría Bosón-Fermión

Varios han sido los intentos por extender la teoría de BCS, como por ejemplo el trabajo de Eliashberg [60], que utiliza una interacción electrón-fonón fuerte y el formalismo de las teorías de campo no relativistas. O el modelo de Hubbard [61] que consiste en construir un hamiltoniano basado en el modelo de amarre fuerte, e incluir la posibilidad de que las partículas *salten* de un sitio a otro de la red, y tomar un término con un potencial de interacción en el mismo sitio (on-site). Las extensiones de este modelo que consideran interacciones entre las partículas en diferentes sitios de la red se conocen como modelo de Hubbard extendido. Este modelo también puede considerar interacciones fuertes entre los pares.

Desde hace algunos años el grupo de Teoría de Muchos Cuerpos de la UNAM [4, 6, 7, 62, 63] ha venido desarrollando la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad, que para describir las propiedades electrónicas del superconductor se parte del gas de electrones que pueden interactuar entre ellos a través de la red de iones más el potencial coulombiano entre ellos mismos, dando

como resultado una interacción atractiva que propicia la formación de pares de Cooper, de la misma forma que se hizo en la teoría de BCS. Haciendo la suposición de que los pares de Cooper son bosones-compuestos [3, 48], el gas de electrones interactuantes se comporta como una mezcla de dos gases que coexisten: el de bosones (pares de Cooper) y el de fermiones (electrones desapareados). Los bosones compuestos tienen la particularidad de que, al disminuir la temperatura, pueden presentar una condensación de Bose-Einstein (BEC) [7]. Tomamos aquellos electrones cuyas energías se encuentren en el cascarón esférico alrededor de la energía de Fermi y de ancho $2\hbar\omega_D$ cuando T es ligeramente diferente de cero, ya que si tuviéramos $T = 0$ todos los fermiones estarían apareados y en el estado condensado.

La teoría Bosón-Fermión considera que las dos partículas que forman el par están inmersas en un medio de $N - 2$ fermiones dentro del cascarón esférico de Fermi con radio k_F , con un momento del centro de masa $\hbar\mathbf{K} \neq 0$. Una de las particularidades de esta teoría es que considera que se puede tener una BEC de los bosones compuestos aún cuando su número no sea fijo, siempre y cuando el número total de fermiones si lo sea [6]. Retomamos la función de onda (2.1), pero ahora el término correspondiente a $\exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}]$ tiene una contribución significativa. Procedemos de la misma forma que se hizo en el caso del apareamiento de Cooper para llegar a la Ec. (2.5) pero incluyendo los términos con \mathbf{K} [62]:

$$\sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{m^*} k^2 + \frac{\hbar^2}{4m^*} K^2 \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \int d\mathbf{r}' V_K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} - E_K e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right\} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = 0, \quad (2.49)$$

donde $V_K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es en general la interacción no local entre los pares. Definimos la variable $\varepsilon_{\ell} \equiv \hbar^2 \ell^2 / 2m^*$, multiplicamos (2.49) por $\exp[-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}]$, se integra sobre $d^3 r$ y se cancelan los términos con $\exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}]$, entonces tenemos

$$(2\varepsilon_{k'} + \frac{1}{2}\varepsilon_K) C_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^K C_{\mathbf{k}} = E_K C_{\mathbf{k}'}, \quad (2.50)$$

donde

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^K \equiv \frac{1}{L^3} \int d^3 r \int d^3 r' \exp[-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}] V_K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] \quad (2.51)$$

es la transformada de Fourier de $V_K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ [6]. Retomamos la interacción del modelo de Cooper (2.8), pero con un momento de centro de masa diferente de cero:

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^K = \begin{cases} -V \theta(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - K) & \text{si } k_F < |\mathbf{k} \pm \frac{1}{2}\mathbf{K}|, |\mathbf{k}' \pm \frac{1}{2}\mathbf{K}| < \sqrt{k_F^2 + k_D^2} \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (2.52)$$

donde k_D es el momento relativo a la frecuencia de Debye de los fonones, definido por $\hbar\omega_D \equiv \hbar^2 k_D^2 / 2m^*$, y θ es la función escalón que asegura que la interacción ocurre sólo si $0 \leq K \leq 2\sqrt{k_F^2 + k_D^2}$. La restricción anterior está indicando que los dos electrones tienen una atracción $-V$ cuando la punta del vector de momento relativo cae en algún lugar de la intersección de los dos cascarones esféricos de ancho $\hbar\omega_D$, la cual se muestra sombreada en la Fig. 2.3. Nótese que la zona de traslape es mucho menor que la correspondiente al caso en que $\mathbf{K} = 0$ de la Fig. 2.1.

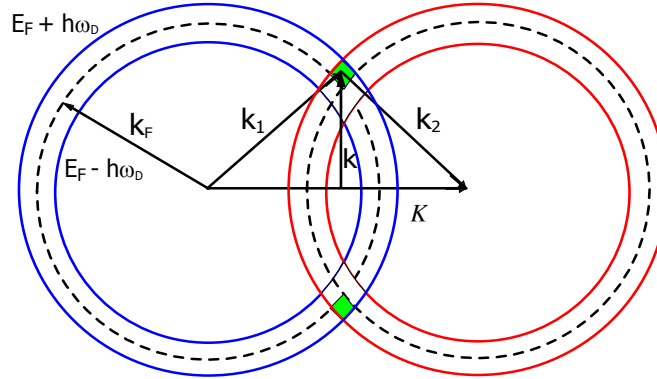


Figura 2.3: Espacio de momentos para dos fermiones formando un par de Cooper con $\mathbf{K} \neq 0$ (zona sombreada).

Usando (2.52) en (2.53)

$$(2\varepsilon_k - E_K + \frac{\hbar^2 K^2}{4m^*})C_{\mathbf{k}} = V \theta(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - K) \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'} = -A_K, \quad (2.53)$$

y resolviendo para obtener $C_{\mathbf{k}}$, se tienen que

$$C_{\mathbf{k}} = \frac{-A_K}{2\varepsilon_k - E_K + \hbar^2 K^2 / 4m^*}. \quad (2.54)$$

Multiplicando ambos lados por $V\theta(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - K)$ y sumando sobre \mathbf{k} para eliminar los coeficientes A_K , tenemos

$$1 = V\theta(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2} - K)\sum'_{\mathbf{k}} (2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_K + \hbar^2 K^2/4m^*)^{-1}, \quad (2.55)$$

donde E_K es la energía total del par

$$E_K = 2E_F - \Delta_K. \quad (2.56)$$

Al tomar $K = 0$ en (2.55) tenemos

$$1 = V\sum'_{\mathbf{k}} [2\varepsilon_{\mathbf{k}} - 2E_F + \Delta_0]^{-1} = V\int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{2\varepsilon - 2E_F + \Delta_0}, \quad (2.57)$$

de donde se recupera

$$\Delta_0 = \frac{2\hbar\omega_D}{\exp[2/Vg(E_F)] - 1} \xrightarrow{Vg(E_F) \rightarrow 0} 2\hbar\omega_D \exp[-2/Vg(E_F)], \quad (2.58)$$

en el límite de acoplamiento débil.

En un sistema bidimensional se puede resolver la Ec. (2.55) para cualquier K pequeña ($K \ll k_F$) [6] tomando la densidad de estados en la superficie 2D de Fermi como $L^2 m/2\pi\hbar^2$, entonces la energía de amarre del par es

$$\Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} \Delta_0 - \frac{2}{\pi} \left[1 + \frac{\Delta_0}{2\hbar\omega_D} (1 + \sqrt{1 + v}) \right] \hbar v_{F2D} K + O(K^2),$$

donde $v = \Theta_D/T_F$, y v_{F2D} es la velocidad de Fermi dada por $E_F = \frac{1}{2}m v_{F2D}^2$. En el límite de acoplamiento débil tenemos la *relación de dispersión* para un par de fermiones en 2D

$$\Delta_K \xrightarrow{Vg(E_F) \rightarrow 0} \Delta_0 - \frac{2}{\pi} \hbar v_{F2D} K + O(K^2), \quad (2.59)$$

con Δ_0 definida en (2.41). En (2.59) el término *lineal* es dominante sobre los de orden superior. Si tomamos la Ec. (2.59) y la introducimos en la energía total del par de electrones de Cooper (2.56), llegamos a que

$$E_K = e_0 + \frac{2}{\pi} \hbar v_{F2D} K + O(K^2) \quad (2.60)$$

con $\epsilon_0 \equiv 2E_F - \Delta_0$, siendo esta última ecuación la que usaremos más adelante como la relación de dispersión de los pares de Cooper en 2D.

La versión en 3D de (2.60), descrita por Schrieffer en [64], es $E_K = \epsilon_0 + \frac{1}{2}\hbar v_{3DF}K + O(K^2)$, con v_{3DF} la velocidad de Fermi en 3 dimensiones.

Sin perder generalidad podemos expresar la relación de dispersión para cualquier bosón en cualquier dimensión como $\epsilon_K = C_s K^s$, donde s es el orden de la relación de dispersión. Tradicionalmente se considera a los cupratos como sistemas en 2D, y el hecho de que no exista CBE en dimensiones d iguales o menores a 2 para bosones con relación de dispersión cuadrática $s = 2$ ha sido uno de los argumentos en contra de tomar la transición de fase superconductor como una BEC. Sin embargo, se ha demostrado [65] que cuando el orden de la relación de dispersión s es menor que d sí se puede tener una temperatura crítica T_c distinta de cero. De aquí que los pares de Cooper con relación de dispersión lineal $s = 1$ puedan condensarse en los cupratos.

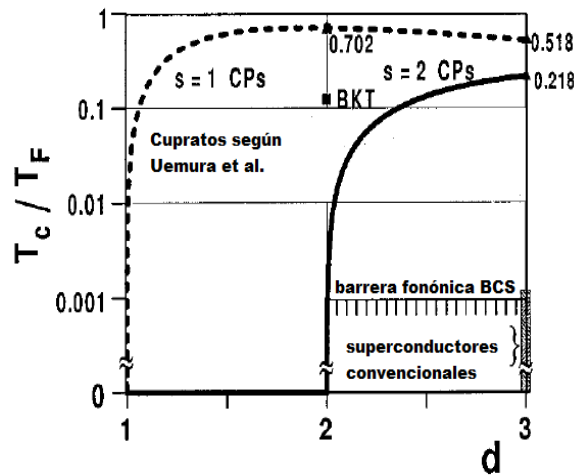


Figura 2.4: Temperatura crítica de los superconductores en función de la dimensión. Figura tomada de [65].

La expresión general para T_c de un gas ideal de bosones libres para cualquier $d > 0$, a partir de la cual el número de bosones n_B con $\mathbf{K} = 0$ se vuelve una parte considerable del total, está dada

por [5]

$$T_c = \frac{C_s}{k_B} \left[\frac{s\Gamma(2/s)(2\pi)^d n_B}{2\pi^{d/2}\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)} \right]^{s/d}. \quad (2.61)$$

con $\Gamma(\sigma)$ la función gama y $g_\sigma(t)$ las funciones de Bose. Casos especiales de (2.61) son:

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m_B k_B} \left[\frac{n_B}{2\pi^{d/2}g_{d/2}(1)} \right]^{2/d} \quad (2.62)$$

para una relación de dispersión cuadrática, y

$$T_c = \frac{a(d)\hbar^2 v_F}{k_B} \left[\frac{\pi^{\frac{d+1}{2}} n_B}{\Gamma(\frac{d+1}{2})g_d(1)} \right]^{1/d} \quad (2.63)$$

cuando la relación de dispersión es lineal. Al tomar $d = 3$ en (2.62) se recupera la relación $T_c \simeq 3.31\hbar^2 n_B^{2/3} / m_B k_B$ para un gas ideal de bosones. En la Fig. 2.4 mostramos como varía la temperatura crítica, en unidades de la temperatura de Fermi, en función de la dimensión del sistema, y para $s = 1, 2$, para un gas de N fermiones de masa m que se han apareado para formar bosones de masa $2m$.

Aunque en el desarrollo de la teoría Bosón-Fermión que presentamos utilizamos el potencial descrito por el apareamiento de Cooper, se puede hacer la extensión para el potencial utilizado en BCS. Tampoco hemos incluido la versión con pares de huecos. Nótese también que en esta tesis no utilizamos ninguna de las relaciones anteriores para T_c , ya que parte de nuestro trabajo es obtener una expresión para T_c a partir de nuestro modelo, solamente hacemos énfasis en el hecho de que se puede tener una CBE al considerar un gas ideal de bosones libres en 2D con $s = 1$. Por otro lado, en nuestros cálculos del Capítulo 5, la constante e_0 la obtenemos de los reportes experimentales de Δ_0 y E_F .

Capítulo 3

Gases cuánticos en estructuras periódicas

Como en este trabajo estamos interesados en las propiedades termodinámicas de los cupratos, y en particular en su calor específico, el cual proponemos que viene principalmente de la contribución de tres gases cuánticos: un gas de bosones, constituido por pares de electrones apareados en pares de Cooper; uno de fermiones, que son los electrones también apareables pero que no lo hicieron; y el de los fonones de la red cristalina, en este capítulo desarrollamos la teoría para gases cuánticos (bosones y fermiones) en estructuras periódicas multicapas parecida a la de los cupratos.

Primero tomamos un gas ideal de bosones dentro de una estructura multicapas simulada con un potencial de Kronig-Penney en una dirección, y permitimos a los bosones moverse libremente en las otras dos. Se obtiene el gran potencial a partir del cual es posible derivar, entre otras propiedades, la temperatura de condensación Bose-Einstein, la energía interna, la entropía y el calor específico del gas. Desarrollamos las expresiones para dos casos: cuando la relación de dispersión para las direcciones libres tiene un comportamiento cuadrático y cuando el término dominante en la relación de dispersión es el lineal, tal como lo describimos en el Capítulo 2. Posteriormente obtenemos el gran potencial para un gas ideal de fermiones en las mismas condiciones y derivamos sus propiedades termodinámicas. En el Capítulo 5 aplicaremos los resultados obtenidos a los cupratos utilizando los parámetros observados experimentalmente.

3.1. Bosones compuestos en un sistema multicapas

En esta sección describimos un gas de N bosones no interactuantes de masa m que está inmerso en un sistema de capas de ancho B modeladas por un potencial de Kronig-Penney (KP) [51] en la dirección- z , mientras que los bosones son libres en las otras dos direcciones x y y . La ecuación de Schrödinger correspondiente es separable en las direcciones x , y y z , por lo que la energía de cada partícula como función del momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ está dada por

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z}, \quad (3.1)$$

con $\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y}$ la energía debida al movimiento de las partículas paralelo a los planos, y ε_{k_z} la correspondiente al movimiento perpendicular a los planos. La energía ε_{k_z} se obtiene implícitamente de la ecuación de Schrödinger con un potencial de KP en el límite de deltas conocido como peine de Dirac, de la forma $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \Lambda \delta(z - na)$, donde Λ es la intensidad del potencial delta y a es la separación entre ellas. En la Fig. 3.1 mostramos gráficamente el potencial de KP y su límite de deltas que se obtiene cuando la altura de la barrera V_0 va a infinito y b tiende a cero, de tal manera que el producto $\Lambda = V_0 b$ se mantiene finito.

La relación energía-momento de de las partículas en el peine de Dirac es

$$(P/\alpha_{KP}a) \sin(\alpha_{KP}a) + \cos(\alpha_{KP}a) = \cos(k_z a), \quad (3.2)$$

donde se ha definido $P \equiv m\Lambda a/\hbar^2$ y $\alpha_{KP}^2 \equiv 2m\varepsilon_{k_z}/\hbar^2$ (donde α_{KP} tiene dimensiones de número de onda), siguiendo la notación de Kronig-Penney. La longitud de onda térmica de un gas de bosones en 3D es $\lambda_0 \equiv h/\sqrt{2\pi mk_B T_0}$, con $T_0 = 2\pi\hbar^2 n_B^{2/3}/mk_B \zeta(3/2)^{2/3}$ la temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein del gas ideal libre en el límite termodinámico y $n_B \equiv N/L^3$ la densidad de número de bosones. Nótese que el parámetro P depende explícitamente de la intensidad Λ y de la separación a entre las deltas. Para separar estas dependencias definimos el parámetro de “impenetrabilidad” adimensional $P_0 \equiv P\lambda_0/a = m\Lambda\lambda_0/\hbar^2$. También nótese que recuperamos la

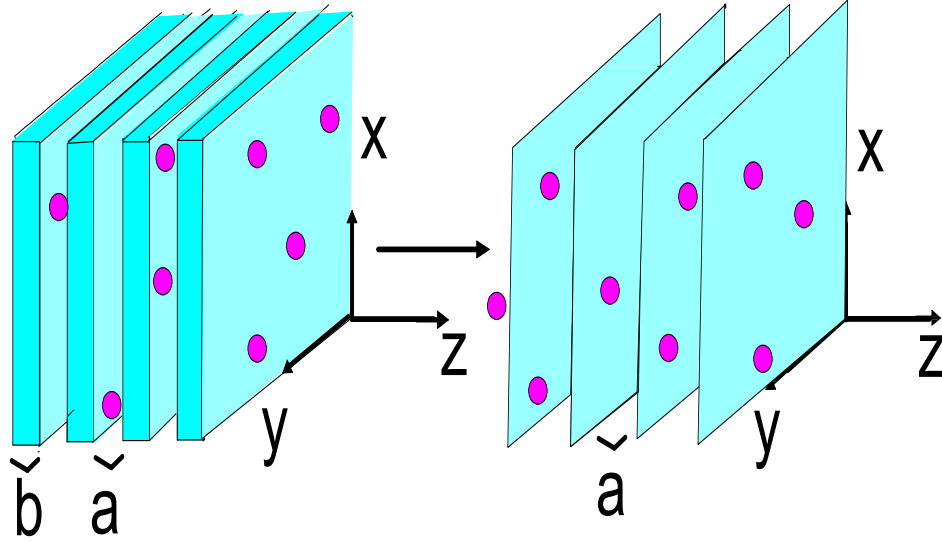


Figura 3.1: Bosones inmersos en un arreglo de multicapas periódicas generadas con potenciales tipo Kronig-Penney en la dirección z .

energía de partícula libre $\varepsilon_{k_z} \rightarrow \hbar^2 k_z^2 / 2m$ en la dirección- z en el caso en que $P_0 \rightarrow 0$, mientras que cuando $P_0 \rightarrow \infty$ el término $\sin(\alpha_{KP} a) \rightarrow 0$, y el sistema representa paralelepípedos semi-infinitos no acoplados. Para el caso de energías menores que el borde de la primera banda, es decir $\varepsilon_{k_z} < \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$, se obtiene la aproximación

$$\varepsilon_{k_z} \cong \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{Ma^2} (1 - \cos k_z a), \quad (3.3)$$

donde $\varepsilon_0 \equiv \hbar^2 \alpha_0^2 / 2m$ es la solución de la Ec. (3.2) cuando $k_z \rightarrow 0$, y [50]

$$M = m \left[\frac{\sin \alpha_0 a}{\alpha_0 a} + \frac{P}{(\alpha_0 a)^2} \left(\frac{\sin \alpha_0 a}{\alpha_0 a} - \cos \alpha_0 a \right) \right] \quad (3.4)$$

es la masa efectiva. La relación de dispersión (3.3) es la que comúnmente se utiliza en la literatura para desarrollar modelos de superconductores casi-bidimensionales (como por ejemplo en [66]), pero es muy limitado ya que incluye sólo la primera banda de energía y $\varepsilon_0 = 0$. Aquí usamos la solución exacta para la Ec. (3.2). En la Fig. 3.2 mostramos un ejemplo de la forma de las bandas de energía para un potencial de KP en la forma de peine de Dirac.

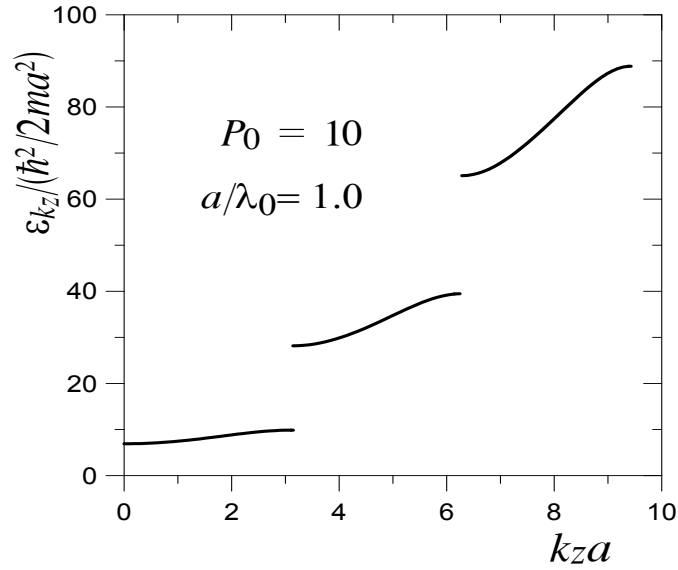


Figura 3.2: Tres primeras bandas de energía para el peine de Dirac en la dirección z , con $P_0 = 10$ y separación entre las deltas $a/\lambda_0 = 1.0$

3.1.1. Bosones con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.

En el primer caso, las partículas (los pares) tienen una relación de dispersión cuadrática en el plano $x-y$, es decir, se comportan como partículas libres

$$\epsilon_{k_x} + \epsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}, \quad (3.5)$$

con $k_{x,y} = 2\pi n_{x,y}/L$ y $n_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, suponiendo condiciones periódicas en una caja de lado L . Reportamos este caso en las Refs. [49] y [50].

Gran potencial y propiedades termodinámicas

El gran potencial $\Omega(T, L^3, \mu)$ para un gas de bosones [67] contenido en un volumen $V \equiv L^3$ está dado por

$$\Omega(T, L^3, \mu) = U - TS - \mu N = \Omega_0 + k_B T \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \ln \left\{ 1 - \exp[-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)] \right\}, \quad (3.6)$$

donde U es la energía interna, T la temperatura absoluta, S la entropía, μ el potencial químico, $\beta \equiv 1/k_B T$ y $\Omega_0 \equiv k_B T \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 - \mu)]\}$ es la contribución del estado base $\mathbf{k} = 0$. Expandiendo el logaritmo en una serie de potencias $\ln(1+x) = -\sum_{l=1}^{\infty} (-x)^l/l$ válida para $|x| < 1$, tenemos

$$\Omega(T, L^3, \mu) = k_B T \ln(1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 - \mu)]) - k_B T \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\{-\exp[-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)]\}^l}{l}. \quad (3.7)$$

Usando (3.5) en (3.7)

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) &= k_B T \ln(1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 - \mu)]) \\ &\quad - k_B T \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp[\beta\mu l]}{l} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \exp\{-\beta l [(\hbar^2/2m)(k_x^2 + k_y^2) + \epsilon_{k_z}]\}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

En el límite continuo donde $\hbar^2/mL^2 \ll k_B T$, esto es que la separación entre los niveles de energía es despreciable comparada con la energía térmica, la suma sobre los momentos \mathbf{k} se puede aproximar por integrales de la forma $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (L/2\pi)^3 \int d^3\mathbf{k}$. Entonces

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) &= k_B T \ln(1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 - \mu)]) - k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp[\beta\mu l]}{l} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \exp\{-\beta l(\hbar^2/2m)k_x^2\} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \exp\{-\beta l(\hbar^2/2m)k_y^2\} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \exp\{-\beta l\epsilon_{k_z}\}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Las integrales sobre k_x, k_y se pueden realizar fácilmente, dando

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) &= k_B T \ln(1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 - \mu)]) - k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp[\beta\mu l]}{l} \left(\frac{2\pi m}{\beta\hbar^2 l}\right)^{1/2} \left(\frac{2\pi m}{\beta\hbar^2 l}\right)^{1/2} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \exp\{-\beta l\epsilon_{k_z}\} \\ &= k_B T \ln(1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 - \mu)]) - \frac{1}{\beta^2} \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp\{\beta l(\mu - \epsilon_{k_z})\}}{l^2}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

La suma infinita da lugar a las funciones de Bose $g_{\sigma}(t)$ [67] (llamadas polylogarítmicas $PolyLog[\sigma, z]$ en [68])

$$g_{\sigma}(t) \equiv \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(t)^l}{l^{\sigma}}, \quad (3.11)$$

entonces

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp[\beta(\mu - \epsilon_{k_z})l]}{l^2} = g_2\{\exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\}. \quad (3.12)$$

Combinando (3.10) y (3.12) obtenemos el gran potencial para pares con relación de dispersión cuadrática:

$$\Omega(T, L^3, \mu) = k_B T \ln(1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 - \mu)]) - \frac{1}{\beta^2} \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}. \quad (3.13)$$

A partir del gran potencial, Ec. (3.13), se pueden obtener las propiedades termodinámicas del gas usando $d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu$

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, L^3}, \quad S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{L^3, \mu}, \quad p = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \mu} = - \frac{\Omega}{L^3}. \quad (3.14)$$

Adicionalmente podemos derivar la energía interna

$$U(T, L^3) = -k_B T^2 \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\Omega}{k_B T} \right) \right]_{L^3, z}, \quad (3.15)$$

donde $z \equiv \exp[\beta\mu]$ es la fugacidad, y el calor específico a volumen constante

$$C_V = \left[\frac{\partial}{\partial T} U(T, L^3) \right]_{N, L^3}. \quad (3.16)$$

Fracción del condensado

El número total de bosones N del sistema se obtiene a partir de la primera ecuación de (3.14) y el gran potencial (3.13):

$$\begin{aligned} N &= k_B T \beta \frac{\exp\{-\beta(\epsilon_0 - \mu)\}}{1 - \exp\{-\beta(\epsilon_0 - \mu)\}} - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\} \\ &= \frac{1}{\exp\{\beta(\epsilon_0 - \mu)\} - 1} - \frac{L^3}{(2\pi)^2 \tilde{\beta} \gamma a^2} \int_0^{\infty} dk_z \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

donde introdujimos los parámetros adimensionales $\gamma \equiv \hbar^2/2ma^2k_B T_0 = 1/4\pi(a/\lambda_0)^2$, $\tilde{\beta} \equiv \beta k_B T_0$.

El primer término en (3.17), $N_0(T) = 1/(\exp[\beta(\epsilon_0 - \mu)] - 1)$, es el número de partículas en el estado condensado, el segundo término corresponde al número de bosones en el estado excitado

$N_e(T)$. Si dividimos (3.17) entre el número total de bosones N obtenemos la fracción del condensado N_0/N , que por debajo de la temperatura crítica T_c es el factor dominante

$$\frac{N_0}{N} = 1 + \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{1}{\gamma a^3} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu_0)]\}, \quad (3.18)$$

donde $\mu = \mu_0 = \epsilon_0$ es la energía del estado base del sistema (no necesariamente igual a cero, dada la presencia del potencial tipo KP). En la Fig. 3.3 mostramos la fracción del condensado para varios valores de P_0 , comenzando por el caso sin barreras $P_0 = 0$, con una $\gamma = 0.1$.

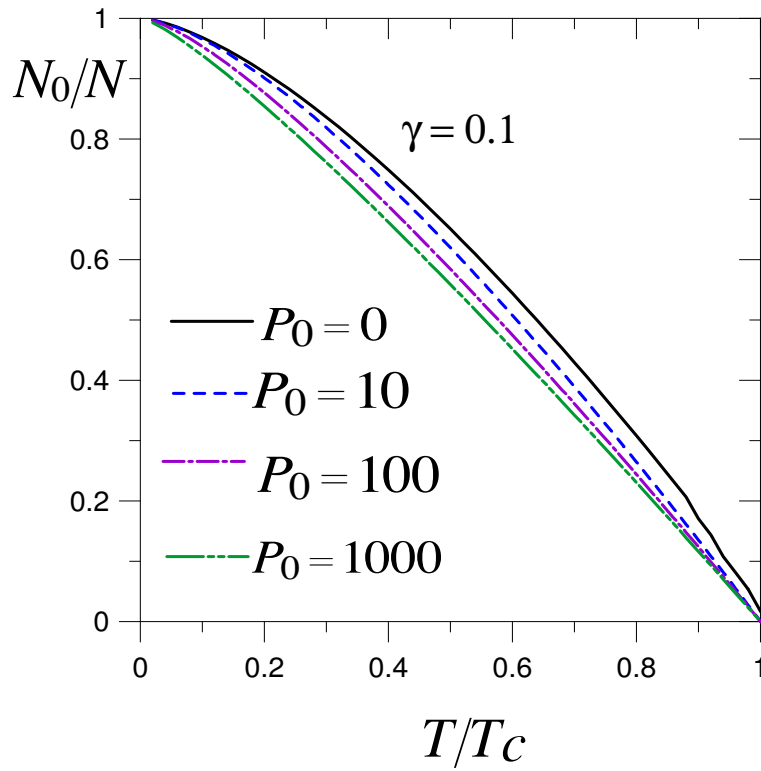


Figura 3.3: Fracción del condensado para $\gamma = 0.1$ y distintos valores de P_0 para pares con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos. $\gamma \equiv \hbar^2/2ma^2k_B T_0 = 1/4\pi(a/\lambda_0)^2$.

Temperatura crítica

Para obtener la temperatura crítica T_c tomamos la Ec. (3.17) y hacemos $T = T_c$, entonces $\mu = \mu_0$, $N_0(T_c) \simeq 0$ y $N \simeq N_e$. Así obtenemos

$$N = -\frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\gamma a^3} \frac{1}{\tilde{\beta}_c} \int_0^\infty adk_z \ln\{1 - \exp[-\beta_c(\epsilon_{k_z} - \mu_0)]\}. \quad (3.19)$$

Vamos a utilizar el hecho de que la integral infinita de cualquier función $F(\epsilon_{k_z})$ sobre dk_z la podemos tomar como dos veces la suma de las integrales sobre las bandas permitidas sobre la mitad de la primera zona de Brillouin (de 0 a π), $\int_{-\infty}^\infty dk_z F(\epsilon_{k_z}) = 2 \sum_{j=1}^\infty \int_0^{\pi/a} dk_z F(\epsilon_{k_z j})$. La sumatoria infinita se puede trunca después de un cierto número de bandas J , para el cual se observa que el valor de la integral converge. De esta manera podemos reexpresar (3.19) como

$$N = -\frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\gamma a^3} \frac{1}{\tilde{\beta}_c} \sum_{j=1}^J \int_{(j-1)\pi}^{j\pi} adk_z \ln\{1 - \exp[-\beta_c(\epsilon_{k_z j} - \mu_0)]\}, \quad (3.20)$$

que al dividirla entre N , y usando la relación $2L^3 m/N (2\pi)^2 \hbar^2 = 2\gamma^{1/2} a/\sqrt{\pi} \zeta(3/2) k_B T_0$, nos lleva a

$$-1 = \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}_c} \sum_{j=1}^J \int_{(j-1)\pi}^{j\pi} \ln\{1 - \exp[-\tilde{\beta}_c \gamma(\bar{\epsilon}_{\xi j} - \bar{\mu}_0)]\} d\xi \quad (3.21)$$

con el cambio de variable $\xi \equiv ak_z$, donde $\bar{\epsilon}_{\xi j}$ es la energía en la j -ésima banda y $\bar{\mu}_0$ el potencial químico abajo de T_c ambos en unidades de $(\hbar^2/2ma^2)$. Renombrando $\xi \equiv \eta + (j-1)\pi$, $d\xi = d\eta$, entonces cuando $\xi = (j-1)\pi$ tenemos $\eta = 0$, y cuando $\xi = j\pi$ $\eta = \pi$, y en (3.21)

$$-1 = \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}_c} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi d\eta \ln\{1 - \exp[-\tilde{\beta}_c \gamma(\bar{\epsilon}_{\eta j} - \bar{\mu}_0)]\}. \quad (3.22)$$

Recordando que $\tilde{\beta}_c \equiv \beta_c k_B T_0 = T_0/T_c = \tilde{T}_c^{(-1)}$, entonces la última ecuación nos da

$$-\frac{\zeta(3/2)}{2(\gamma/\pi)^{1/2}} = \tilde{T}_c \sum_{j=1}^J \int_0^\pi d\eta \ln\{1 - \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{\eta j} - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c]\}, \quad (3.23)$$

que es la relación implícita para T_c/T_0 de la cual se extraen los valores de T_c como función de P_0 utilizando métodos numéricos. A lo largo de esta tesis vamos a seguir utilizando la misma

metodología para evaluar las integrales infinitas como la suma de las integrales sobre las bandas de energía, aunque no lo indiquemos explícitamente. En la Fig. 3.4 mostramos T_c vs P_0 para varios valores del parámetro γ .

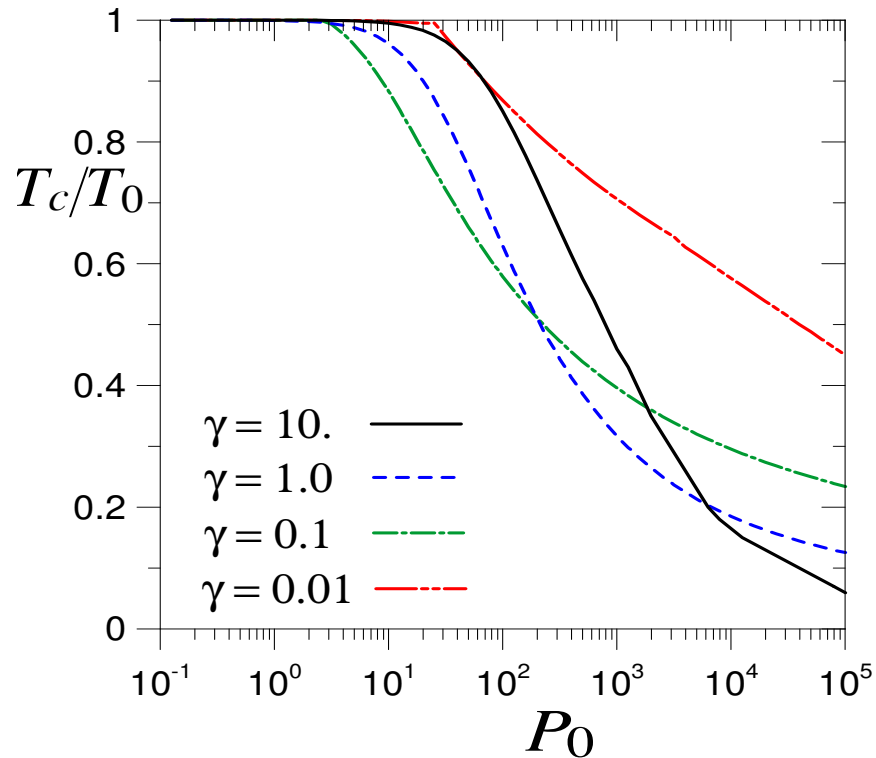


Figura 3.4: Temperatura crítica como función de P_0 para varios valores de γ para pares con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.

Observamos en la Fig. 3.4 que la temperatura crítica es una función que decrece monotónicamente con respecto a P_0 y que algunas de las curvas se cruzan entre ellas, mostrando que T_c no decrece de la misma manera en función del parámetro γ . Más aún, para una P_0 dada, T_c en función de la separación a llega a un mínimo y luego vuelve a crecer, como se mostró en [49].

Potencial químico

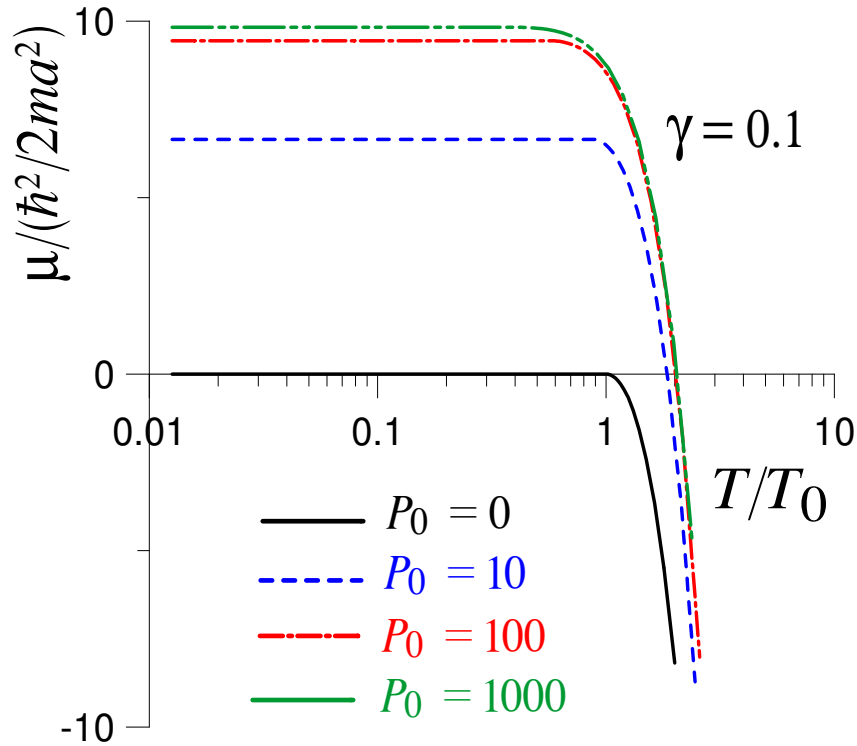


Figura 3.5: Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de T/T_0 para varios valores de P_0 para pares con relación de dispersión cuadrática para el movimiento paralelo a los planos.

El potencial químico es la cantidad de energía que el sistema bosónico pierde cuando se agrega una partícula manteniendo la entropía constante. Lo podemos encontrar partiendo de (3.17) tomando en cuenta que para $T < T_c$, $\mu = \mu_0$, y para $T > T_c$

$$1 = -\frac{L^3}{(2\pi)^3 N} \frac{2\pi}{\gamma a^3} \frac{1}{\beta} \int_0^\infty a dk_z \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\}, \quad (3.24)$$

o en su forma adimensional

$$1 = -\frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \int_0^\infty a dk_z \ln\{1 - \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}]\}, \quad (3.25)$$

de donde extraemos μ numéricamente. En la Fig. 3.5 mostramos el potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para una $\gamma = 0.1$ y distintos valores de P_0 . Se ha observado [50] que entre más grande sea γ (a/λ_0 pequeño), mayor es la temperatura T_{min} a la que se comienzan a observar los efectos del confinamiento. Ahí mismo se muestra que la estructura de capas se hace evidente en las propiedades termodinámicas a bajas temperaturas cuando $\gamma \leq 0.1$, y son aún más notorias cuando P_0 es mayor.

Para obtener algunas de las propiedades termodinámicas, en particular el calor específico, es necesario obtener la derivada del potencial químico con respecto a la temperatura, $d\mu/dT$. Sabemos que cuando $T < T_c$, $\mu = \mu_0$ y por lo tanto $d\mu_0/dT = 0$. Pero para $T > T_c$, $N_0/N \simeq 0$ y si derivamos (3.25) obtenemos

$$-\frac{d\tilde{\beta}}{dT} = \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty adk_z \frac{\exp\{-\gamma(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})/\tilde{T}\}}{1 - \exp\{-\gamma(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})/\tilde{T}\}} \{(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu}) \frac{d\tilde{\beta}}{dT} - \tilde{\beta} \frac{d\tilde{\mu}}{dT}\}. \quad (3.26)$$

Rearreglando,

$$T \frac{d\tilde{\mu}}{dT} = -\frac{1 + \{2(\gamma/\pi)^{1/2}/\zeta(3/2)\} \int_0^\infty adk_z (\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu}) / \{\exp[\gamma(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})/\tilde{T}] - 1\}}{\{2(\gamma/\pi)^{1/2}/\zeta(3/2)\} \int_0^\infty adk_z / \{\exp[\gamma(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})/\tilde{T}] - 1\}} \quad (3.27)$$

en el caso de pares con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.

Energía interna

La energía interna se obtiene derivando (3.13) con respecto a T

$$\begin{aligned} \left(\frac{d(\Omega/k_B T)}{dT} \right)_{L^3, z} &= \frac{\epsilon_0 \exp\{-\beta(\epsilon_0 - \mu)\}}{1 - \exp\{-\beta(\epsilon_0 - \mu)\}} \frac{d\beta}{dT} \\ &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^\infty dk_z \epsilon_{k_z} \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\} \frac{d\beta}{dT} \\ &\quad + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_0^\infty dk_z g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \frac{d\beta}{dT}, \end{aligned}$$

y usando que $\beta' = d\beta/dT = -\beta/T$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d(\Omega/k_B T)}{dT} \right)_{L^3, z} &= -\frac{\beta}{T} \frac{\varepsilon_0}{\exp\{\beta(\varepsilon_0 - \mu)\} - 1} \\ &+ \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{T} \int_0^\infty dk_z \varepsilon_{k_z} \ln\{1 - \exp[-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)]\} \\ &- \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta T} \int_0^\infty dk_z g_2 \{\exp[-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)]\}. \end{aligned}$$

Entonces, en la Ec. (3.15)

$$\begin{aligned} U(T, V) &= \frac{\varepsilon_0}{\exp\{\beta(\varepsilon_0 - \mu)\} - 1} \\ &- \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty dk_z \varepsilon_{k_z} \ln\{1 - \exp[-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)]\} \\ &+ \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^\infty dk_z g_2 \{\exp[-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)]\}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Dividiendo entre $Nk_B T$ y restando de ambos lados de la Ec. (3.28) el término correspondiente al primer estado multiplicado por el número total de partículas, tenemos

$$\begin{aligned} \frac{(U - \varepsilon_0 N)}{Nk_B T} &= -\frac{1}{N} \frac{2L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_{k_z} - \varepsilon_0) \ln\{1 - \exp[-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)]\} \\ &+ \frac{1}{Nk_B T} \frac{2L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_0^\infty dk_z g_2 \{\exp[-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)]\}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Adimensionalizando

$$\begin{aligned} \frac{(U - \varepsilon_0 N)}{Nk_B T} &= -\frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{k_B T_0} \int_0^\infty adk_z \gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\varepsilon}_0) \ln\{1 - \exp[-\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}]\} \\ &+ \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \int_0^\infty adk_z g_2 \{\exp[-\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}]\}, \end{aligned}$$

y reescribimos la integral infinita en términos de la sumatoria sobre las bandas de energía permitidas, para finalmente llegar a

$$\begin{aligned} \frac{(U - \varepsilon_0 N)}{Nk_B T} &= -\frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{k_B T_0} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z \gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\varepsilon}_0) \ln\{1 - \exp[-\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}]\} \\ &+ \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z g_2 \{\exp[-\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}]\}, \end{aligned}$$

la cual graficamos en la Fig. 3.6 para $\gamma = 0.1$, que equivale a $a/\lambda_0 = 0.89$, y varios valores de P_0 . En [50] mostramos que la energía interna tiene un comportamiento muy singular al tomar una γ mayor a la utilizada en la Fig. (3.6). Por ejemplo, para $\gamma = 10$, la curva de energía interna vs. T pasa suavemente del valor clásico $U = u_0 pV$, con $u_0 = 3/2$ para un gas cuántico ideal, a uno bidimensional con $u_0 = 1$ dentro de cierto intervalo de temperaturas, y luego regresa al $u_0 = 3/2$ tridimensional, lo que llamamos *cruce dimensional*.

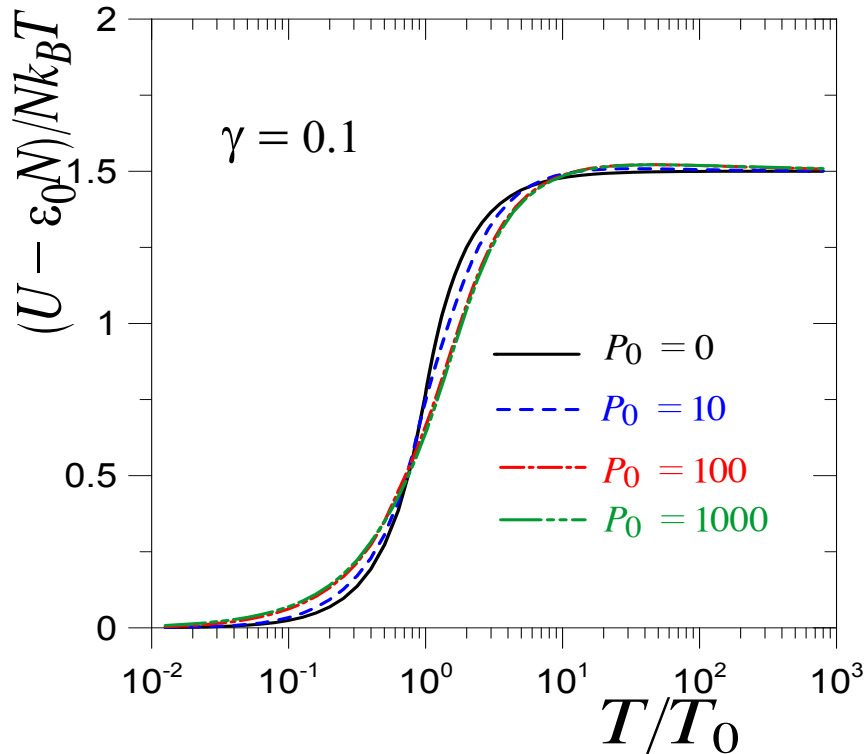


Figura 3.6: Energía interna como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$ ($a/\lambda_0 = 0.89$), y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática para su movimiento paralelo a los planos.

Calor específico

Para obtener el calor específico tomamos la energía interna (3.28) y dividimos entre N , entonces

$$\begin{aligned} \frac{U(T, V)}{N} &= \frac{N_0 \epsilon_0}{N} \\ &\quad - \frac{L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty dk_z \epsilon_{k_z} \ln \{ 1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\ &\quad + \frac{L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^\infty dk_z g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

donde $N_0 \epsilon_0 = \epsilon_0 / (\exp[\beta(\epsilon_0 - \mu)] - 1)$. Para obtener la derivada del primer término de (3.30), usamos (3.18)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dT} \left(\frac{N_0 \epsilon_0}{N} \right) &= \frac{d}{dT} \left[\left(1 - \frac{N_e}{N} \right) \epsilon_0 \right] \\ &= \epsilon_0 \frac{d}{dT} \left\{ 1 + \frac{L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty adk_z \ln \{ 1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \right\} \\ &= -\epsilon_0 \frac{L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \left\{ \frac{1}{\beta^2} \int_0^\infty adk_z \ln \{ 1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \frac{d\beta}{dT} \right\} \\ &\quad - \epsilon_0 \frac{L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \left\{ \frac{1}{\beta} \int_0^\infty adk_z \frac{ \{ -(\epsilon_{k_z} - \mu) \frac{d\beta}{dT} + \beta \frac{d\mu}{dT} \} }{ \exp \{ \beta(\epsilon_{k_z} - \mu) \} - 1 } \right\}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

donde hemos utilizado las propiedades de las funciones de Bose, $t(dg_2(t)/dt) = g_1(t) = -\ln(1-t)$.

Derivando la energía interna Ec.(3.30) y reagrupando términos se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dT} \left(\frac{U}{N} \right) &= \frac{d}{dT} \left(\frac{N_0 \epsilon_0}{N} \right) - \frac{2L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta T} \int_0^\infty dk_z \ln \{ 1 - \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \{ 2\epsilon_{k_z} - \mu + T \frac{d\mu}{dT} \} \\ &\quad + \frac{2L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{T} \int_0^\infty dk_z \frac{ \epsilon_{k_z} \{ (\epsilon_{k_z} - \mu) + T \frac{d\mu}{dT} \} }{ \exp \{ \beta(\epsilon_{k_z} - \mu) \} - 1 } \\ &\quad + \frac{2L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta T} \int_0^\infty dk_z g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Para obtener el calor específico introducimos (3.31) y (3.32) en la Ec.(3.16), y con un poco de

álgebra

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{2L^3m}{N(2\pi)^2\hbar^2} 2\tilde{T} \int_0^\infty adk_z g_2 \{ \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}] \} \\
&\quad - \frac{2L^3m}{N(2\pi)^2\hbar^2} \int_0^\infty adk_z \ln \{ 1 - \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}] \} \gamma \{ 2\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu} - \bar{\mu}_0 + T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \} \\
&\quad + \frac{2L^3m}{N(2\pi)^2\hbar^2} \frac{1}{\tilde{T}} \int_0^\infty adk_z \frac{\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_0) \gamma \{ (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \}}{\exp \{ \gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T} \} - 1}
\end{aligned} \tag{3.33}$$

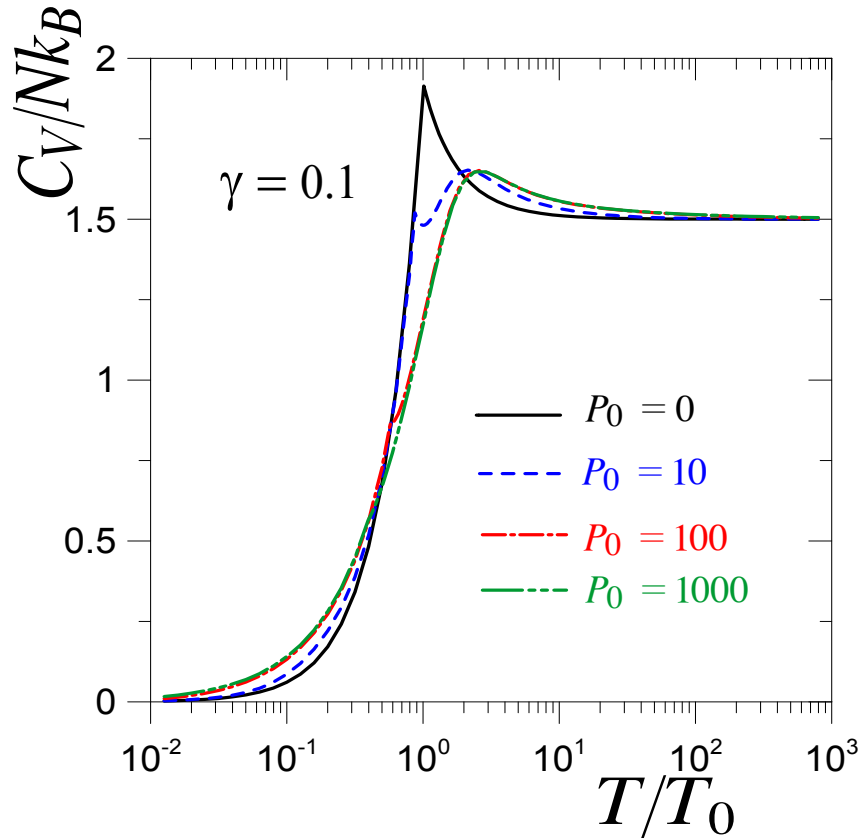


Figura 3.7: Calor específico en unidades de Nk_B como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$, $a/\lambda_0 = 0.89$, y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática para su movimiento paralelo a los planos.

Una vez más transformando las integrales en sumas sobre las bandas permitidas, y de forma

adimensional

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} 2\tilde{T} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z g_2 \{ \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}] \} \\
&- \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z \ln \{ 1 - \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}] \} \gamma \{ 2\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu} - \bar{\mu}_0 + T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \} \\
&+ \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{T}} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z \frac{\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_0) \gamma \{ (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \}}{\exp \{ \gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T} \} - 1}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

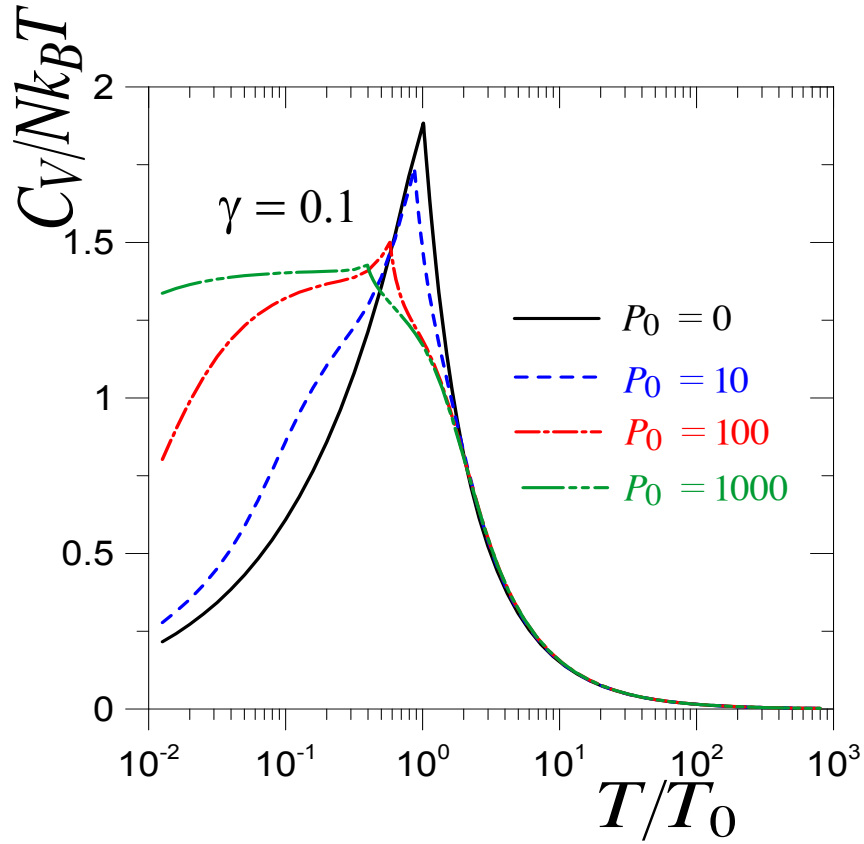


Figura 3.8: Calor específico sobre T en unidades de Nk_B como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$, $a/\lambda_0 = 0.89$, y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática para su movimiento paralelo a los planos.

Para el caso especial en que $T < T_c$ el potencial químico $\mu = \mu_0$ es una constante, $d\tilde{\mu}/dT = 0$ y el calor específico C_V es

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} 2\tilde{T} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z g_2 \{ \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}] \} \\ &\quad - \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z \ln \{ 1 - \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}] \} \gamma \{ 2\bar{\epsilon}_{k_z} - 2\bar{\mu}_0 \} \\ &\quad + \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{T}} \sum_{j=1}^J \int_0^\pi adk_z \frac{\gamma^2 \{ \bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_0 \}^2}{\exp \{ \gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_0)/\tilde{T} \} - 1}. \end{aligned}$$

En las Figs. 3.7 y 3.8 graficamos C_V/Nk_B y $C_V/Nk_B T$ respectivamente. Al igual que se observó en la energía interna, en el caso del calor específico entre mayores sean los valores de γ , son más evidentes los efectos del confinamiento, como se observa en la Fig. 7 de [50]. En esa publicación se hace énfasis la transición de 3D - 2D - 3D que ocurre en el sistema, la cual es más notoria para ciertos valores de γ (a/λ_0), de la intensidad de las barreras P_0 , y en ciertos intervalos de temperatura, pero siempre por arriba de la temperatura de condensación de BE. Esto último nos lleva a la conclusión de que la presencia de las multicapas también tienen influencia sobre las propiedades termodinámicas del gas cuántico más allá de la región del condensado.

Entropía

La entropía se obtiene al hacer la derivada con respecto a T del gran potencial (3.13), Ec. (3.14), de donde

$$\begin{aligned} \frac{S}{Nk_B} &= \frac{1}{N} \ln \{ N_0 + 1 \} + \frac{\beta}{N} \frac{(\epsilon_0 - \mu)}{\exp \{ \beta(\epsilon_0 - \mu) \} - 1} \\ &\quad - \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^J \int_0^\infty adk_z \gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) \ln \{ 1 - \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}] \} \\ &\quad + \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} 2\tilde{T} \sum_{j=1}^J \int_0^\infty adk_z g_2 \{ \exp[-\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu})/\tilde{T}] \}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Los primeros dos términos del lado derecho de (3.35) son cero en el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ pero manteniendo $N/V = cte$. En la Fig. 3.9 mostramos el comportamiento típico creciente

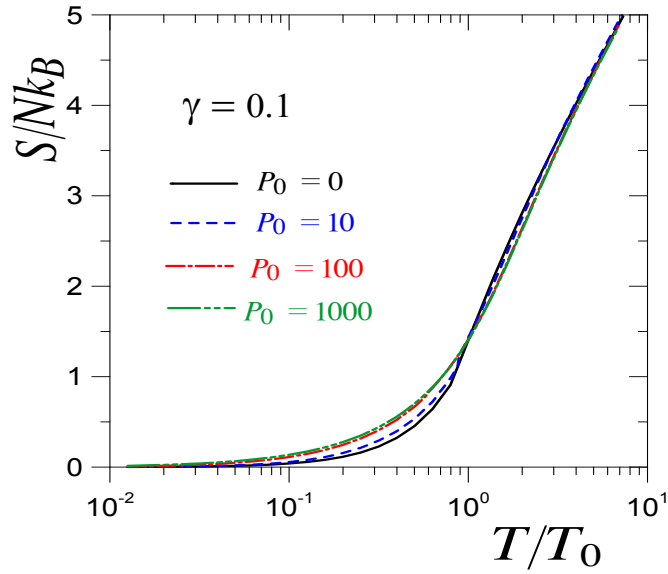


Figura 3.9: Entropía en unidades de Nk_B como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$ ($a/\lambda_0 = 0.89$), y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática.

de la entropía como función de la temperatura para una $\gamma = 0.1$, $a/\lambda_0 = 0.89$, y distintos valores de P_0 .

3.1.2. Bosones con relación de dispersión lineal en su movimiento paralelo a los planos

En el segundo caso que analizamos en este capítulo, tomamos a los bosones, cuyo momento de centro de masa está dado por $\mathbf{K} = (K_x, K_y, K_z)$, con una relación de dispersión lineal para la energía en la dirección paralela al plano $x - y$ dada por la Ec. (2.60), mientras que en la dirección perpendicular al plano, la energía ε_{K_z} se obtiene de resolver la Ec. de K-P (3.2). Entonces, la energía de las partículas Ec. (3.1) en función de \mathbf{K} es

$$\varepsilon_{K_x, K_y} + \varepsilon_{K_z} = e_0 + C_1(K_x^2 + K_y^2)^{1/2} + \varepsilon_{K_z}, \quad (3.36)$$

donde ϵ_0 lo definimos en la Sec. 2.3 como $2E_F - \Delta_0$, y $C_1 = (2/\pi)\hbar v_{F2D}$ es el coeficiente del término lineal dependiente de la velocidad bidimensional de Fermi v_{F2D} . La relación (3.36) es, como señalamos en la Sec. 2.3, la que describe a las parejas de electrones en el mar de Fermi.

En el Apéndice A analizamos el caso límite en que tenemos la relación de dispersión lineal en el plano $x-y$ más la cuadrática en z , es decir $P_0 = 0$.

Gran potencial

Obtenemos el gran potencial para los bosones con una relación de dispersión lineal en su movimiento paralelo a los planos y K-P en la dirección perpendicular, dada por la Ec. (3.36) como

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) = & U - TS - \mu N = k_B T \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + \epsilon_0 - \mu)]\} \\ & + k_B T \sum_{\mathbf{K} \neq 0} \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + C_1(K_x^2 + K_y^2)^{1/2} + \epsilon_{K_z} - \mu)]\}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

donde separamos el término correspondiente al estado base con $\mathbf{K} = 0$ de la sumatoria del lado derecho de la ecuación. Siguiendo la misma notación utilizada en la sección anterior, llamamos $\Omega_0 = k_B T \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + \epsilon_0 - \mu)]\}$ a dicho término. Substituyendo (3.36) en (3.37) obtenemos

$$\Omega(T, L^3, \mu) = \Omega_0 + k_B T \sum_{\mathbf{K} \neq 0} \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + C_1(K_x^2 + K_y^2)^{1/2} + \epsilon_{K_z} - \mu)]\}. \quad (3.38)$$

Haciendo el desarrollo en series del logaritmo, y con un poco de álgebra, tenemos que

$$\Omega(T, L^3, \mu) = \Omega_0 - k_B T \sum_l \sum_{\mathbf{K} \neq 0} \frac{\exp\{\beta(\mu - \epsilon_0)l\}}{l} \exp\{-\beta(C_1(K_x^2 + K_y^2)^{1/2} + \epsilon_{K_z})l\}. \quad (3.39)$$

Tomando el límite continuo y aproximando las sumatorias por integrales

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) = & \Omega_0 - k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp\{\beta(\mu - \epsilon_0)l\}}{l} \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dK_x \int_{-\infty}^{\infty} dK_y \exp\{-\beta l C_1(K_x^2 + K_y^2)^{1/2}\} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z \exp\{-\beta l \epsilon_{K_z}\} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Las integrales sobre dK_x, dK_y se hacen con el cambio de variable $\rho = K_x^2 + K_y^2$, de tal manera que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dK_x \int_{-\infty}^{\infty} dK_y \exp\{-\beta l C_1 (K_x^2 + K_y^2)^{1/2}\} &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} \rho d\rho \exp[-\beta l C_1 \rho] \\ &= \frac{2\pi}{(\beta l C_1)^2} \Gamma(2), \end{aligned}$$

ya que $\int_0^{\infty} x^{v-1} \exp[-\mu x] dx = 1/\mu^v \Gamma(v)$ [69]. Entonces

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) &= k_B T \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\} - k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{2\pi}{(\beta C_1)^2} \Gamma(2) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp\{\beta(\mu - e_0)l\}}{l^3} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dK_z \exp\{-\beta \epsilon_{K_z} l\} \\ &= k_B T \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\} - \frac{k_B T}{\beta^2} \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dK_z \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\{\exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)]\}^l}{l^3}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Usando las funciones de Bose (3.11) en (3.41) tenemos el gran potencial para los bosones con una relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos y restringido por un potencial K-P para su movimiento perpendicular a los planos:

$$\Omega(T, L^3, \mu) = k_B T \ln\{1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\} - \frac{1}{\beta^3} \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_3\{\exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)]\}. \quad (3.42)$$

Fracción del condensado

Obtenemos la ecuación de número usando (3.42) en (3.14)

$$N = \frac{1}{\exp\{\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)\} - 1} + \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_2\{\exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)]\}, \quad (3.43)$$

donde el primer término del lado derecho es el número de partículas en el condensado $N_0(T)$ y el segundo es el número en el estado excitado $N_e(T)$.

Dividiendo (3.43) por N y despejando, obtenemos la fracción del condensado

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_2\{\exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)]\}. \quad (3.44)$$

Para poder calcular las constantes de la ecuación anterior y de las siguientes ecuaciones, tomamos la energía de Fermi de un gas de fermiones en 2D en términos de la velocidad de Fermi bidimensional v_{F2D} como $E_{F2D} = \frac{1}{2}m_e v_{F2D}^2$, y que está relacionada con la energía de Fermi para el gas de fermiones en 3D por medio de $E_{F3D} = [(3\pi^2)^{2/3}/2\pi]E_{F2D} = k_B T_F$. Las densidades de número están relacionadas a través de $n_{2D} = n_{3D}^{2/3}$. Tomando en cuenta que la masa del bosón es 2 veces la masa del fermión, $m = 2m_e$, la constante $C_1^2 = (4/\pi^2)\hbar^2 v_{F2D}^2$ se puede escribir como $C_1^2 = (4/\pi^2)(\hbar^2/2ma^2)2m v_{F2D}^2 a^2 = (8/\pi^2)(\hbar^2/2ma^2)2m_e v_{F2D}^2 a^2 = (32/\pi^2)(\hbar^2/2ma^2)a^2 2\pi/(3\pi^2)^{2/3}E_{F3D} = (64/\pi(3\pi^2)^{2/3})\gamma a^2 E_{F3D} k_B T_0$. Substituyendo en (3.44), tenemos

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{\Gamma(2)}{(2\pi)^2} \frac{2^{5/2} 3\pi^3 (3\pi^2)^{2/3}}{32} \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_2 \left\{ \exp[-(k_B T_F \beta) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right) (\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{e}_0 - \bar{\mu})] \right\}, \quad (3.45)$$

donde las cantidades con barra están en términos de la unidad de energía ($\hbar^2/2ma^2$), como las definimos en la sección anterior. De la definición de $e_0 = 2E_F - \Delta_0$, podemos suponer que $\Delta_0 \ll E_F$, y entonces $e_0 \cong 2E_F = 2k_B T_F$, cantidad que utilizamos con frecuencia en esta sección.

Temperatura crítica

La temperatura crítica para bosones con relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos y K-P en el movimiento perpendicular a los mismos, se obtiene haciendo $T = T_c$ en (3.43), y tomando el potencial químico $\mu_0 = \mu_{0z} + e_0 = \epsilon_0 + e_0$ tenemos

$$1 = \frac{\Gamma(2)}{(2\pi)^2} \frac{2^{5/2} 3\pi^3 (3\pi^2)^{2/3}}{32} \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta_c)^2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_2 \left\{ \exp[-(k_B T_F \beta_c) (\gamma T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu}_{0z})] \right\}. \quad (3.46)$$

Utilizando la relación $T_0/T_F = 0.218$ para un gas ideal de bosones en 3D [65], cuando el gas se encuentra en 3D y las partículas tienen una relación de dispersión cuadrática ($d = 3, s = 2$), y calculando el equivalente numérico $\Gamma(2)2^{5/2}3\pi^3(3\pi^2)^{2/3}/(32(2\pi)^2) = 3.9864$, llegamos a

$$1 = 3.9864 (0.218\gamma)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta_c)^2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_2 \left\{ \exp[-k_B T_F \beta_c \gamma (0.218) (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu}_{0z})] \right\}, \quad (3.47)$$

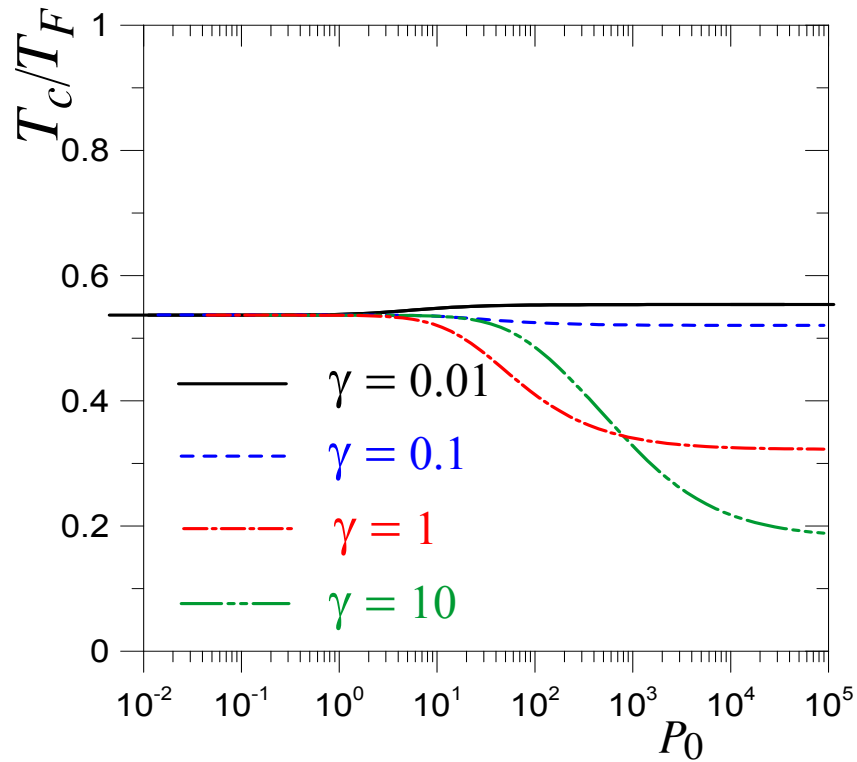


Figura 3.10: Temperatura crítica como función de P_0 para varios valores de γ para pares con relación de dispersión lineal para el movimiento paralelo a los planos.

de donde, al igual que en el caso anterior, se pueden obtener los valores de la temperatura crítica por medio de métodos numéricos, lo que graficamos en la Fig. 3.10.

En la Fig. 3.10 observamos que cuando $P_0 \rightarrow 0$, y/o $a/\lambda_0 \rightarrow 0$ reobtenemos el valor $T_c/T_F = 0.537$ que reportamos en el Apéndice A para el caso de bosones con relación de dispersión lineal en el plano $x - y$ mas cuadrática en la dirección z . Nótese que en este caso referimos las temperaturas calculadas a la temperatura de Fermi T_F , en lugar de referirlas a la temperatura de condensación del gas ideal de bosones T_0 , como hicimos en la Fig. 3.4. Esto se hace porque, dada la presencia de la velocidad de Fermi en el coeficiente C_1 , resulta *natural* adimensionalizar las usando la energía de Fermi. Sin embargo, estamos concientes de que al comparar las Figuras 3.10 y 3.4 se debe hacer

el cambio de unidades correcto. Lo mismo aplica para las demás propiedades termodinámicas.

Potencial químico

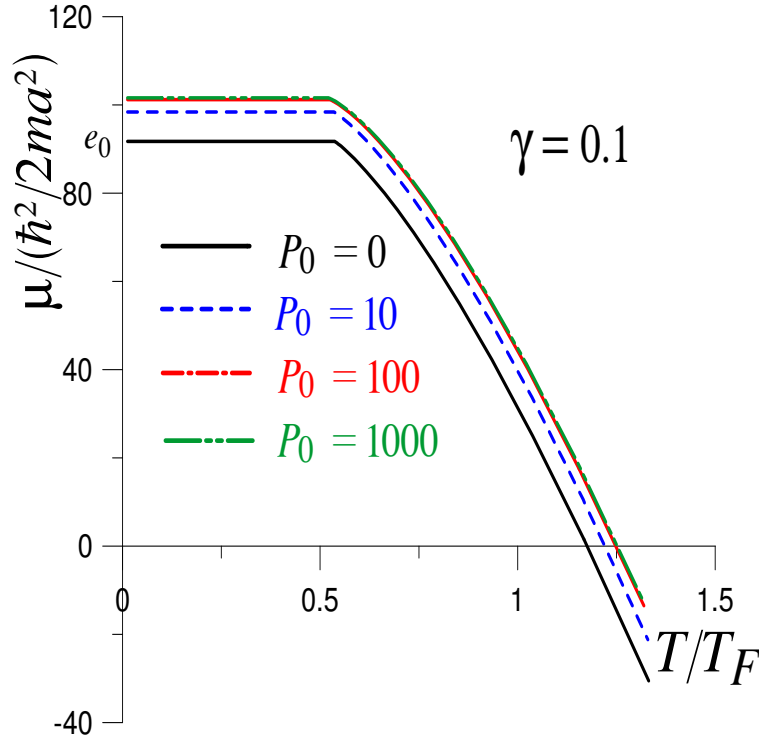


Figura 3.11: Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de T/T_0 para varios valores de P_0 para pares con relación de dispersión lineal para el movimiento paralelo a los planos.

A partir de la Ec. (3.43), y recordando que cuando $T < T_c$ $\mu_0 = \mu_{0z} + e_0$, mientras que para $T > T_c$ tenemos que

$$1 = 3.9864 \left(\frac{\gamma T_0}{T_F} \right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_2 \left\{ \exp[-(k_B T_F \beta) \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{k_z} + \bar{e}_0 - \bar{\mu})] \right\}, \quad (3.48)$$

es la relación implícita de la cual se obtiene el potencial químico μ . En la Fig. 3.11 mostramos el comportamiento de μ para $\gamma = 0.1$ y $e_0 = 2k_B T_F$, de donde se observa que el potencial químico

es igual a e_0 cuando el gas de bosones es libre (es decir $P_0 = 0$) y se mantiene constante hasta T_c , después de la cual decrece monótonamente y se vuelve negativo. Al hacerse presente la estructura de multicapas, es decir $P_0 > 0$, el potencial químico comienza en un valor positivo constante mayor a e_0 hasta T_c , y posteriormente disminuye de la misma forma que ocurre cuando $P_0 = 0$. Nótese que cuando $e_0 = 0$ y $P_0 = 0$, μ es cero hasta $T = T_c$, y luego se hace negativo.

Para obtener la derivada del potencial químico partimos de (3.48) y obtenemos

$$T \frac{d\bar{\mu}}{dT} = \frac{2k_B T_F \beta - (3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z \ln\{1 - \exp[-k_B T_F \beta \gamma(T_0/T_F)(\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu} + \bar{e}_0)]\} \{\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu} + \bar{e}_0\}}{(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z \ln\{1 - \exp[-k_B T_F \beta \gamma(T_0/T_F)(\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu} + \bar{e}_0)]\}}. \quad (3.49)$$

Energía interna

Para calcular la energía interna tomamos la derivada de la Ec. (3.42) con respecto a la temperatura a volumen y fugacidad constantes

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\Omega}{k_B T} \right) &= \frac{(\epsilon_0 + e_0) \exp\{-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)\} d\beta}{1 - \exp\{-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)\} dT} \\ &+ \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z (\epsilon_{K_z} + e_0) g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \frac{d\beta}{dT} \\ &+ 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^3} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_3 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \frac{d\beta}{dT}. \end{aligned}$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en el caso anterior, llegamos a

$$\begin{aligned} U(T, V) &= \frac{(\epsilon_0 + e_0)}{\exp\{\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)\} - 1} \\ &+ \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z (e_0 + \epsilon_{K_z}) g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \\ &+ 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{2}{\beta^3} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_3 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

El primer término del lado derecho corresponde a $(\epsilon_0 + e_0)N_0$ de la Ec. de número (3.43), mientras

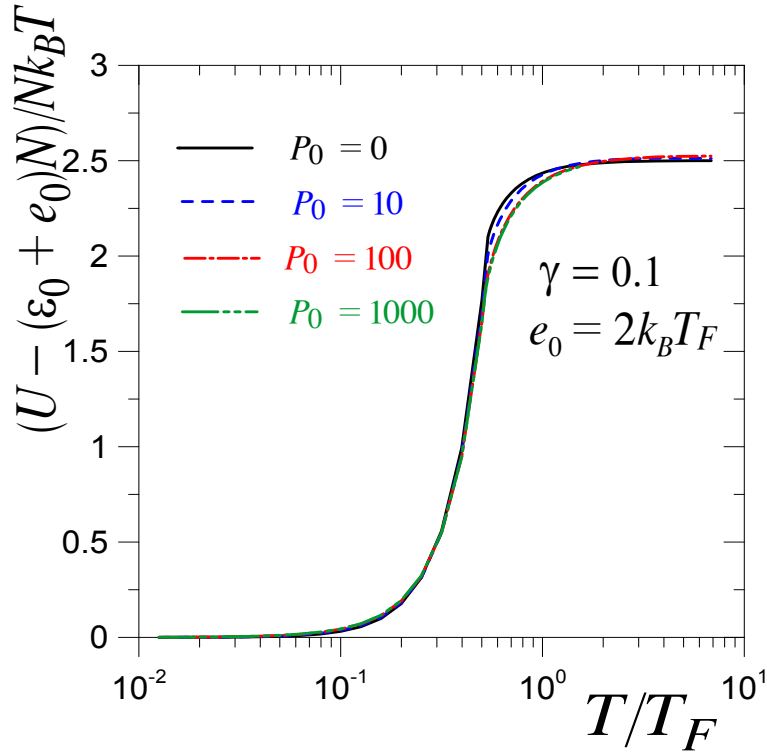


Figura 3.12: Energía interna como función de T/T_F para $e_0 = 2E_F$ y varios valores de P_0 , usando una relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos.

que el segundo es $(e_0 + \epsilon_{K_z})N_e$. Si sumamos y restamos al lado derecho de (3.50) la cantidad $\epsilon_0 N_e$, podemos agrupar los términos correspondientes a $(\epsilon_0 + e_0)N_0 + (\epsilon_0 + e_0)N_e = (\epsilon_0 + e_0)N$, entonces

$$\begin{aligned}
 U &= (\epsilon_0 + e_0)N \\
 &+ \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z (\epsilon_{K_z} - \epsilon_0) g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \\
 &+ 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{1\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{2}{\beta^3} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_3 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \}. \tag{3.51}
 \end{aligned}$$

Restando el total de partículas en el estado base y dividiendo entre $Nk_B T$

$$\begin{aligned} \frac{(U - (\epsilon_0 + e_0)N)}{Nk_B T} &= \frac{L^3}{N} \frac{2\Gamma(2)}{(2\pi)^2 C_1^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z (\epsilon_{K_z} - \epsilon_0) g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \\ &+ 2 \frac{L^3}{N} \frac{\Gamma(2)}{(2\pi)^2 C_1^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_3 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Adimensionalizando

$$\begin{aligned} \frac{(U - (\epsilon_0 + e_0)N)}{Nk_B T} &= \frac{2^{5/2} (3\pi^2)^{5/3} \Gamma(2)}{64 (2\pi)} \left(\frac{\gamma T_0}{T_F} \right)^{3/2} \frac{1}{k_B T_F \beta} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} adK_z (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\epsilon}_0) g_2 \{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma T_0 / T_F (\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{e}_0 - \bar{\mu})] \} \\ &+ 2 \frac{2^{5/2} (3\pi^2)^{5/3} \Gamma(2)}{64 (2\pi)} \left(\frac{\gamma T_0}{T_F} \right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_3 \{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma T_0 / T_F (\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{e}_0 - \bar{\mu})] \}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

En la Fig. (3.12) graficamos la Ec. (3.53) para $\gamma = 0.1$, distintos valores de P_0 y $e_0 = 2k_B T_F$. Observamos que las curvas de la energía interna son prácticamente iguales para distintos valores de e_0 -por lo que que presentamos sólo un caso- y que para temperaturas $T > T_F$ tienden al valor 2.5, en concordancia con lo reportado en [70].

Calor específico

El calor específico lo obtenemos derivando la energía interna, Ec. (3.50), y reagrupando términos, tal que

$$\begin{aligned} C_V &= 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^2 T} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z (\epsilon_{K_z} - \epsilon_0) g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \\ &+ 6 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{2\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta^3 T} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_3 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \\ &- \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{2\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta T} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z (\epsilon_{K_z} - \epsilon_0) \ln \{ 1 - \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \{ \epsilon_{K_z} + e_0 - \mu + T \frac{d\mu}{dT} \} \\ &+ 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{2\Gamma(2)}{C_1^2} \frac{1}{\beta T} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z g_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \} \{ \epsilon_{K_z} + e_0 - \mu + T \frac{d\mu}{dT} \}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Después de un poco de álgebra, y adimensionalizando

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= 2(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{3/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_2 \left\{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{e}_0 - \bar{\mu})] \right\} \\
&\quad \times \left\{ 2\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{e}_0 + \bar{e}_0 - \bar{\mu} + T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right\} \\
&\quad - (3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{5/2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{e}_0) \ln \left\{ 1 - \exp[-k_B T_F \beta \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{e}_0 - \bar{\mu})] \right\} \\
&\quad \times \left\{ \bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{e}_0 - \bar{\mu} + T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right\} \\
&\quad + 6(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_3 \left\{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{e}_0 - \bar{\mu})] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Si $T < T_c$, $\mu_0 = \mu_{0z} + e_0$ y $T d\mu/dT = 0$, entonces la ecuación anterior se convierte en

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= 2(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{3/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_2 \left\{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu}_{0z})] \right\} \left\{ 2\bar{\epsilon}_{K_z} - 2\bar{\mu}_{0z} \right\} \\
&\quad - (3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{5/2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu}_{0z})^2 \ln \left\{ 1 - \exp[-k_B T_F \beta \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu}_{0z})] \right\} \\
&\quad + 6(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_3 \left\{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu}_{0z})] \right\}.
\end{aligned}$$

En la Fig. 3.13 graficamos C_V/Nk_B contra T/T_F para $\gamma = 0.1$, varios valores de P_0 , y $e_0 = 2E_F$.

Nótese que la gráfica tienden al valor $(d + \delta)/2 = 5/2$, en concordancia con lo publicado en [71].

Entropía

A partir del gran potencial Ec.(3.42) para pares con relación de dispersión lineal, se llega a

$$\begin{aligned}
\frac{S}{Nk_B} &= -\frac{1}{N} \ln \left\{ 1 - \exp[\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \right\} + \frac{\beta}{N} \frac{(\epsilon_0 + e_0 - \mu)}{\exp\{\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)\} - 1} \\
&\quad + \frac{L^3}{N} \frac{2\Gamma(2)}{(2\pi)^2 C_1^2 \beta} \int_0^{\infty} dK_z (\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu) g_2 \left\{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \right\} \\
&\quad + 3 \frac{L^3}{N} \frac{2\Gamma(2)}{(2\pi)^2 C_1^2 \beta^2} \int_0^{\infty} dK_z g_3 \left\{ \exp[-\beta(\epsilon_{K_z} + e_0 - \mu)] \right\},
\end{aligned} \tag{3.56}$$

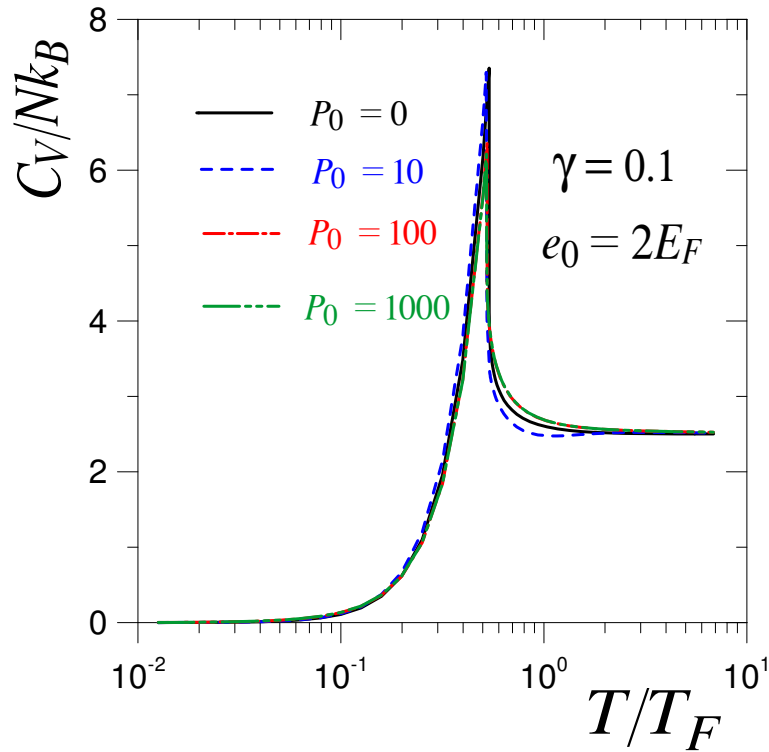


Figura 3.13: Calor específico a volumen constante como función de T/T_F , $e_0 = 2E_F$ y varios valores de P_0 , para pares con una relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos.

donde los primeros dos términos son despreciables en el límite termodinámico. En la Fig. 3.14 mostramos la entropía como función de la temperatura para $\gamma = 0.1$, $e_0 = 0$ y distintos valores de P_0 .

3.2. Fermiones en un sistema multicapas

La segunda componente fundamental de nuestro sistema está formada por el conjunto de electrones que no se aparearon, y que constituyen un gas de fermiones sin interacción entre ellos con momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$. Los fermiones están atrapados en un sistema de planos en la dirección z ,

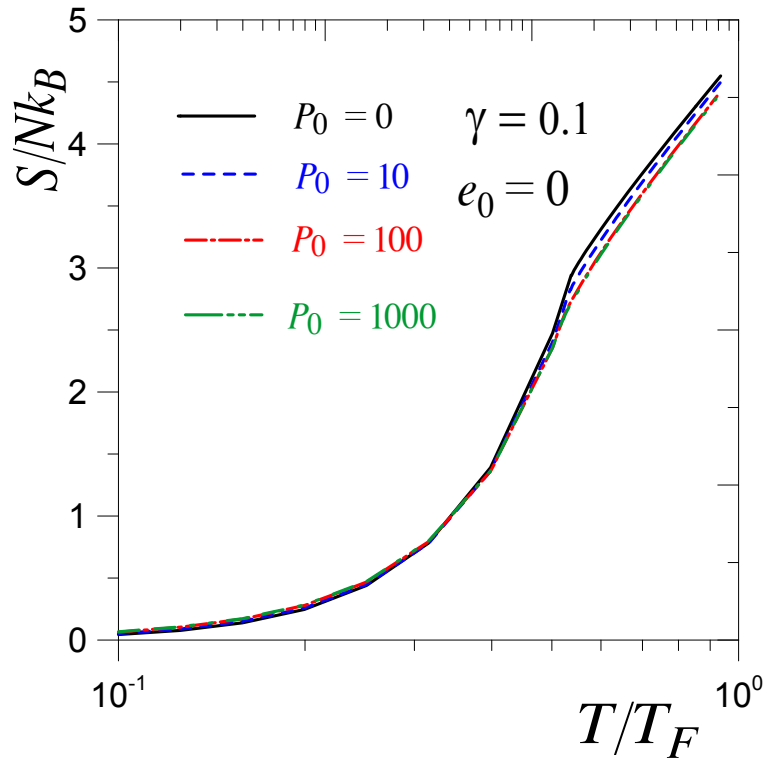


Figura 3.14: Entropía como función de T/T_F para la relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos.

mientras en las otras dos direcciones x, y se mueven libremente con una relación de dispersión del tipo

$$\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e}, \quad (3.57)$$

donde $k_{x,y} = 2\pi n_{x,y}/L$ para una caja de longitud L muy grande, $n_{x,y} = \pm 1, \pm 2, \dots$ y m_e es la masa de los fermiones. De la misma forma que se hizo para el caso del gas de bosones en la sección anterior, la relación de dispersión ε_{k_z} para los fermiones es la que se obtienen a partir de la ecuación de Kronig-Penney (3.2).

Gran potencial y propiedades termodinámicas

En el caso de un gas de fermiones el gran potencial $\Omega(T, V, \mu)$ es [67]

$$\Omega(T, L^3, \mu) = -k_B T \sum_{\mathbf{k}=0} \ln\{1 + \exp[-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)]\}. \quad (3.58)$$

Usando la expansión $\ln(1+x) = -\sum_{l=1}^{\infty} (-x)^l/l$ para $|x| < 1$

$$\Omega(T, L^3, \mu) = k_B T \sum_{\mathbf{k}=0} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\{-\exp[-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)]\}^l}{l} \quad (3.59)$$

$$\Omega(T, L^3, \mu) = k_B T \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-\exp[\beta\mu])^l}{l} \sum_{\mathbf{k}=0} \exp\{-\beta l [(\hbar^2/2m_e)(k_x^2 + k_y^2) + \epsilon_{k_z}]\}. \quad (3.60)$$

En el límite termodinámico $\hbar^2/m_e L^2 \ll k_B T$ reemplazamos las sumas sobre k_x, k_y y k_z por integrales de la siguiente forma $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (2sp+1)(L/2\pi)^3 \int d^3\mathbf{k}$, donde sp es el espín en unidades de \hbar .

Entonces

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) &= 2k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-\exp[\beta\mu])^l}{l} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \exp[-\beta l (\hbar^2/2m_e) k_x^2] \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \exp[-\beta l (\hbar^2/2m_e) k_y^2] \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \exp[-\beta l \epsilon_{k_z}]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Haciendo las integrales sobre k_x y k_y

$$\begin{aligned} \Omega(T, L^3, \mu) &= 2k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{2\pi m_e}{\beta \hbar^2 l}\right) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-\exp[\beta\mu])^l}{l} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \exp[-\beta l \epsilon_{k_z}] \\ &= 2k_B T \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2 l} \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-\exp[\beta\mu])^l}{l} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \exp[-\beta l \epsilon_{k_z}] \\ &= 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-\exp[\beta(\mu - \epsilon_{k_z})])^l}{l^2}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Usando las funciones de Fermi-Dirac $f_{\sigma}(t)$ (que en la Ref. [68] corresponden a la función $-PolyLog[\sigma, -t]$)

$$f_{\sigma}(t) \equiv \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} \frac{t^l}{l^{\sigma}} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1) \frac{(-t)^l}{l^{\sigma}} = - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-t)^l}{l^{\sigma}} \quad (3.63)$$

Entonces

$$\Omega(T, L^3, \mu) = -2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}. \quad (3.64)$$

Potencial químico

Para obtener el potencial químico de un gas de fermiones en un sistema multicapas, es necesario desarrollar la ecuación de número correspondiente. El número de partículas N_{fer} se obtiene de usar la Ec. (3.64) en la Ec. (3.14)

$$\begin{aligned} N_{fer} &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, L^3} \\ &= 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

donde usamos las propiedades de las funciones de Fermi-Dirac [67]

$$t \frac{\partial}{\partial t} f_{\sigma}(t) = \frac{\partial}{\partial(\ln t)} f_{\sigma}(t) = f_{\sigma-1}(t), \quad (3.66)$$

y $f_1(t) = \ln(1+t)$.

La densidad de número para un gas de fermiones en un sistema de multiplanos en la dirección z , es

$$n_{fer} = \frac{N_{fer}}{L^3} = \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}. \quad (3.67)$$

La energía de Fermi para el gas ideal de fermiones es $E_F = (3\pi^2)^{2/3} (\hbar^2/2m_F) \rho_f^{2/3} = k_B T_F$ [67], de donde $\rho_f = (k_B T_F)^{3/2} / 3\pi^2 a^2 (\hbar^2/2m_e a^2)^{3/2}$ es la densidad de fermiones para el gas ideal. Pero estamos considerando que $m_e = m/2$ y $\rho_f = 2\rho_B$, con m la masa y ρ_B la densidad de bosones, entonces $E_F = (3\pi^2)^{2/3} (\hbar^2/2m) 2(2\rho_B)^{2/3}$, que en la Ec. (3.67) nos da

$$1 = \frac{3}{4} \gamma_F^{1/2} \frac{1}{k_B T_F \beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}, \quad (3.68)$$

donde hemos definido $\gamma_F \equiv \hbar^2 / (2m_e a^2 k_B T_F)$. Este parámetro adimensional γ_F está relacionado con el parámetro γ utilizado en la sección anterior (en términos de la masa del bosón y la temperatura

T_0) por medio de $\gamma_F = 0.436\gamma$. Para expresar la Ec. (3.68) en términos de los parámetros que usamos en la sección anterior, la reescribimos como

$$1 = \frac{3}{4} (0.436\gamma)^{1/2} \frac{1}{\hat{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\hat{\beta}(\hat{\epsilon}_{k_z} - \hat{\mu})] \}, \quad (3.69)$$

donde definimos $\hat{\beta} \equiv k_B T_F \beta = k_B T_F / k_B T$, y $\hat{\epsilon}_{k_z} = \epsilon_{k_z} / k_B T_F$ y $\hat{\mu} = \mu / k_B T_F$ son la energía y el potencial químico en unidades de la energía de Fermi.

En la Fig 3.15 mostramos comportamiento del potencial químico, en unidades de la energía de Fermi, para el gas ideal de fermiones en un sistema de planos separados por una distancia $a/\lambda_0 = 0.89$, $\gamma = 0.1$ y distintos valores de P_0 (λ_0 la longitud de onda térmica del gas de bosones con masa $2m_e$ y temperatura T_0). Nótese que cuando las barreras desaparecen, es decir $P_0 = 0$, se obtiene el potencial químico para un gas ideal de fermiones en tres dimensiones con $\mu(T = 0) = E_F$, y cuya curva cruza el eje x en $T/T_F = 0.989$, como se reportó en [72].

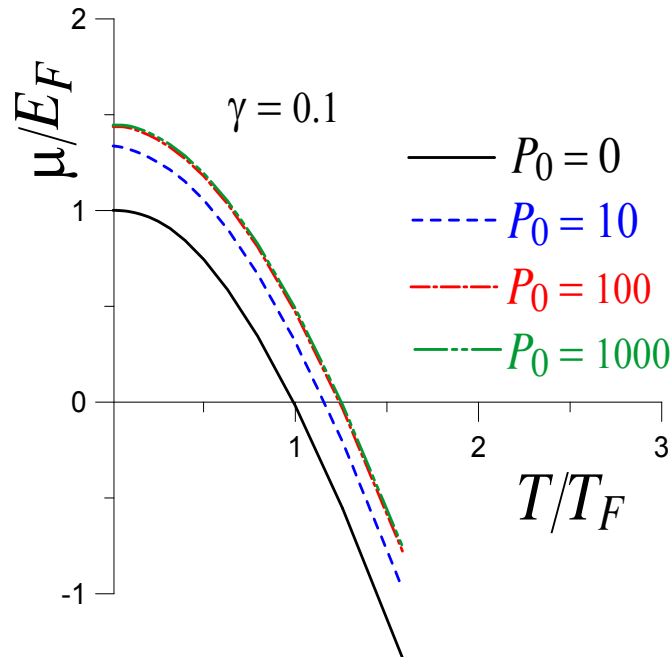


Figura 3.15: Potencial químico en unidades de E_F para un gas ideal de fermiones dentro de la estructura de capas con separación $a/\lambda_0 = 0.89$ ($\gamma = 0.1$).

También en el caso del gas de fermiones es útil calcular la derivada del potencial químico,

$d\mu/dT$, la cual se va a usar en el calor específico. De la Ec. (3.67)

$$\frac{\partial\beta}{\partial T} = \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{L^3}{N_{fer}} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln\{1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\} \right\}. \quad (3.70)$$

Haciendo las derivadas del lado derecho de la ecuación anterior:

$$\frac{\partial\beta}{\partial T} = \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{L^3}{N_{fer}} \frac{m_e}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \{ -(\epsilon_{k_z} - \mu) \frac{d\beta}{dT} + \beta \frac{d\mu}{dT} \}}{1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]}. \quad (3.71)$$

Después de un poco de álgebra,

$$T \frac{d\mu}{dT} = - \frac{1 + \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{L^3}{N_{fer}} \frac{m_e}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{(\epsilon_{k_z} - \mu)}{\exp\{\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)\} + 1}}{\frac{2}{(2\pi)^2} \frac{L^3}{N_{fer}} \frac{m_e}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z / \{ \exp[\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] + 1 \}}. \quad (3.72)$$

Adimensionalizando

$$T \frac{d\hat{\mu}}{dT} = - \frac{1 + \frac{3}{4} (0.436\gamma)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} adk_z \frac{(\hat{\epsilon}_{k_z} - \hat{\mu})}{\exp[\hat{\beta}(\hat{\epsilon}_{k_z} - \hat{\mu})] + 1}}{\frac{3}{4} (0.436\gamma)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} adk_z / \{ \exp[\hat{\beta}(\hat{\epsilon}_{k_z} - \hat{\mu})] + 1 \}}. \quad (3.73)$$

Energía interna

La energía interna para el gas de fermiones se obtiene a partir de las Ecs. (3.15) y (3.64), para lo que necesitamos

$$\frac{\Omega}{k_B T} = -2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}. \quad (3.74)$$

Y su derivada

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\Omega/k_B T)}{\partial T} \right)_{V, e\beta\mu} &= 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \frac{d\beta}{dT} \\ &\quad + 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \epsilon_{k_z} \ln\{1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\} \frac{d\beta}{dT}, \end{aligned}$$

y usando $d\beta/dT = -\beta/T$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\Omega/k_B T)}{\partial T} \right)_{V, e\beta\mu} &= -2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\ &\quad - 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \epsilon_{k_z} \ln\{1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)]\}. \end{aligned}$$

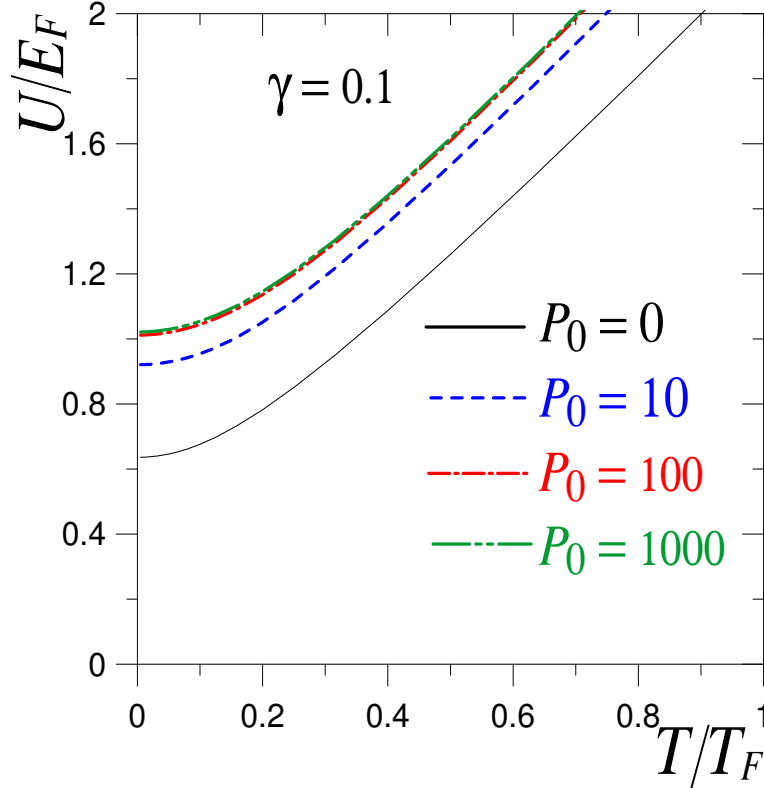


Figura 3.16: Energía interna en unidades de E_F para un gas ideal de fermiones dentro de la estructura de capas con separación $a/\lambda_0 = 0.89$ ($\gamma = 0.1$).

En la Ec. (3.15)

$$\begin{aligned}
 U(T, L^3) &= 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e k_B T^2}{\hbar^2 \beta T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\
 &\quad + 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e k_B T^2}{\hbar^2 T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \epsilon_{k_z} \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\
 &= 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\
 &\quad + 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \epsilon_{k_z} \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \}. \quad (3.75)
 \end{aligned}$$

Finalmente, dividiendo entre $Nk_B T_F = NE_F$ e introduciendo nuestras constantes, tenemos

$$\begin{aligned}
 \frac{U}{NE_F} &= \frac{3}{4} (0.436\gamma)^{1/2} \frac{1}{\hat{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\hat{\beta}(\hat{\epsilon}_{k_z} - \hat{\mu})] \} \\
 &\quad + \frac{3}{4} (0.436\gamma)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \hat{\epsilon}_{k_z} \ln \{ 1 + \exp[-\hat{\beta}(\hat{\epsilon}_{k_z} - \hat{\mu})] \}, \quad (3.76)
 \end{aligned}$$

que graficamos en la Fig. 3.16. Recordemos que la energía de Fermi que estamos utilizando para adimensionalizar es la de un gas ideal de fermiones.

Calor específico

El calor específico se obtiene de las Ecs. (3.76) y (3.16)

$$\begin{aligned}
C_V &= -4 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \frac{d\beta}{dT} \\
&+ 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \left\{ -(\epsilon_{k_z} - \mu) \frac{d\beta}{dT} + \beta \frac{d\mu}{dT} \right\} \\
&- 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \epsilon_{k_z} \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \frac{d\beta}{dT} \\
&+ 2 \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\epsilon_{k_z} \exp \{ -\beta(\epsilon_{k_z} - \mu) \} \left\{ -(\epsilon_{k_z} - \mu) \frac{d\beta}{dT} + \beta \frac{d\mu}{dT} \right\}}{1 + \exp \{ -\beta(\epsilon_{k_z} - \mu) \}},
\end{aligned}$$

y dividiendo entre Nk_B

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= 4 \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta^2 k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\
&+ 2 \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \left\{ (\epsilon_{k_z} - \mu) + T \frac{d\mu}{dT} \right\} \\
&+ 2 \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \epsilon_{k_z} \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\
&+ 2 \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\epsilon_{k_z} \left\{ (\epsilon_{k_z} - \mu) + T \frac{d\mu}{dT} \right\}}{\exp \{ \beta(\epsilon_{k_z} - \mu) \} + 1}.
\end{aligned}$$

Finalmente

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= 4 \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \\
&+ 2 \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu)] \} \left\{ 2\epsilon_{k_z} - \mu + T \frac{d\mu}{dT} \right\} \\
&+ 2 \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \beta \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\epsilon_{k_z} \left\{ \epsilon_{k_z} - \mu + T \frac{d\mu}{dT} \right\}}{\exp \{ \beta(\epsilon_{k_z} - \mu) \} + 1}. \tag{3.77}
\end{aligned}$$

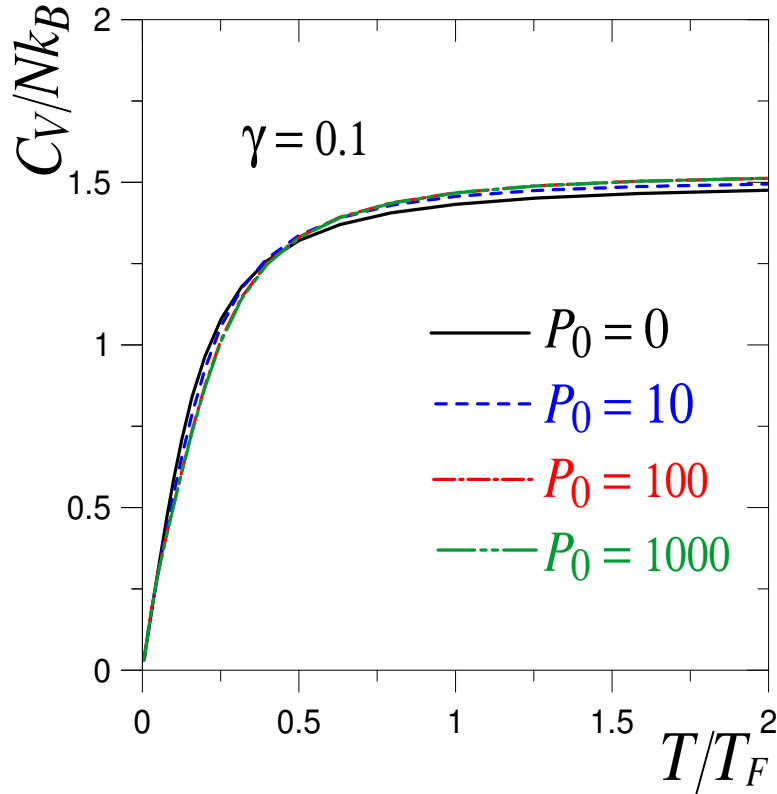


Figura 3.17: Calor específico entre Nk_B para un gas ideal de fermiones dentro de la estructura de capas con separación $a/\lambda_0 = 0.89$ ($\gamma = 0.1$).

En la Fig. 3.17 mostramos el calor específico para un gas ideal de fermiones dentro de una estructura de capas. Se puede observar que cuando las barreras desaparecen, $P_0 = 0$, se recupera el caso de un gas ideal de fermiones, cuyo calor específico tiende al valor clásico de 1.5.

De las Figs. 3.13 y 3.17 es evidente que mientras el gas de bosones en la estructura multicapas presenta una CBE, el gas de fermiones dentro de la misma estructura sólo modifica un poco su comportamiento con respecto al del gas ideal de fermiones.

Capítulo 4

Algunas propiedades de los cupratos

Los cupratos son superconductores de alta temperatura crítica con la característica de que la superconductividad se da planarmente, es decir, paralelamente a sus planos de CuO_2 [13]. Actualmente se cuenta con una gran variedad de ellos y son los que hasta ahora han presentado las mayores T_c 's, por lo que existe una basta literatura sobre las características y propiedades de estos materiales [13,54,73,74], sin embargo, aún no existe una teoría capaz de describirlos exitosamente. En la actualidad, las investigaciones se centran en la búsqueda de una explicación del fenómeno microscópico generador de la superconductividad de alta T_c .

En este capítulo retomaremos algunas de las propiedades de los cupratos que ya hemos mencionado, pero no pretendemos dar una descripción detallada de todas ellas; mas bien nos limitaremos a hacer una revisión tanto de las que nos proporcionen los parámetros pertinentes para la aplicación de nuestro modelo, como de aquellas propiedades con las que podemos cotejar los resultados obtenidos. Las que veremos, son: propiedades cristalográficas, anisotropías, propiedades térmicas - donde incluimos la influencia que sobre ellas ejerce el campo magnético externo-, y las superconductoras. Existen otras propiedades, como las mecánicas, las ópticas y las químicas, que no son relevantes para comparar nuestros cálculos, y por lo tanto no las vamos a incluir.

4.1. El cuprato YBaCuO

El cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, también conocido como YBCO-123, es una cerámica que fue descubierta en 1986 por Wu *et al.* [18] con una temperatura crítica de $T_c = 92\text{K}$ a presión atmosférica. Es el primer superconductor que se pudo obtener a una temperatura por encima del punto de ebullición del nitrógeno líquido (77 K) y que presenta cierta estabilidad magnética, lo que contribuye a que sea el superconductor más estudiado. Entre sus particularidades está la facultad de cambiar su estructura cristalina de tetragonal (no superconductor) a ortorrómbica (superconductor) aumentando la concentración de oxígeno (*dopando*) en las cadenas de óxido de cobre, y que a su vez se traduce en un cambio en el número de agujeros (portadores de carga) [54]. Por otro lado, el número de portadores de carga se puede variar contaminando la muestra con otros materiales, como por ejemplo plata u oro. Pero quizá el estudio más completo sobre la influencia del dopaje sobre el calor específico electrónico del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ es el realizado por Loram *et al* [75, 103] que agregan distintas concentraciones de Ca a la muestra. El dopaje se subdivide en dos clases: es del tipo *p* si se tiene la presencia de agujeros sin sus correspondientes electrones, o es del tipo *n* si lo que predomina son los electrones sin los correspondientes agujeros. En la Fig. 4.1 mostramos el diagrama de fases de los cupratos como función del dopaje. La estructura es tetragonal cuando $x \geq 0.5$ y ortorrómbica cuando $x < 0.5$. También se ha mostrado que con el dopaje otras propiedades cristalográficas cambian ligeramente, como son los parámetros de la red a_1 , b_1 y c_1 (véase por ejemplo [13]). No confundir la constante cristalográfica a_1 con la a de nuestro modelo.

Se observa que mientras que el compuesto $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ es no superconductor, los compuestos $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ e $\text{YBa}_2\text{Cu}_7\text{O}_{15}$ sí lo son, y se han podido diseñar experimentos para obtener propiedades como el calor específico electrónico y la densidad de estados fonónica utilizando estos compuestos como referencia.

En este capítulo también revisamos las anisotropías que estos materiales presentan, tanto en la resistividad como en las masas efectivas de los portadores de carga a lo largo de las distintas

direcciones cristalográficas. Por último mencionaremos las propiedades térmicas y las magnéticas de estos cupratos.

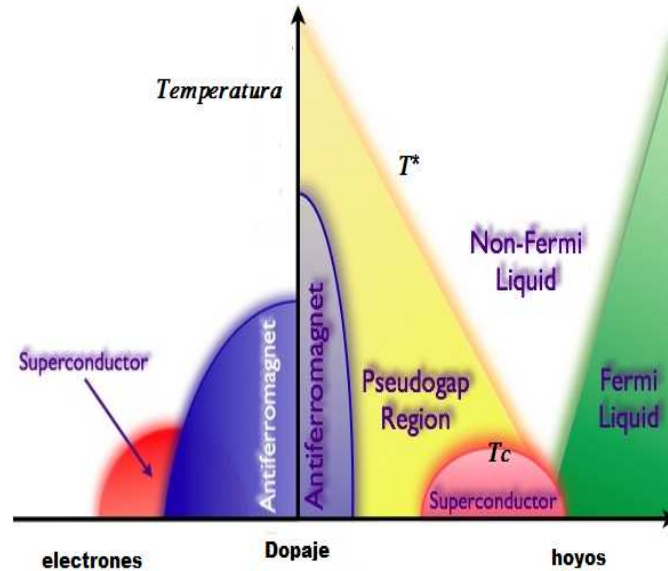


Figura 4.1: Diagrama de fase para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ en función del dopaje. El lado izquierdo corresponde al dopaje con electrones y el derecho al dopaje con hoyos. Diagrama tomado de [77].

4.2. Propiedades cristalográficas

Mientras los superconductores convencionales son monoatómicos o compuestos con estructuras cristalográficamente simples, ya sea cúbica (BCC, FCC) o hexagonal compacta (HCP), los nuevos superconductores presentan estructuras más variadas.

Mencionamos en la introducción que existen hasta ahora tres familias de superconductores estratificados, y que los cupratos forman parte de la segunda familia. También se les conoce como óxidos de cobre, debido a la composición de los primeros cupratos que se descubrieron. Están formados por cerámicas del tipo perovskitas cuyas estructuras se mantienen unidas vía los electrones

que forman enlaces iónicos o covalentes, mientras que los electrones de conducción se encuentran libres en los planos formados por el óxido de cobre CuO_2 , donde se aparean para formar los pares de Cooper. Posteriormente, al encontrarse otros superconductores que contienen únicamente O, y no CuO, su nombre cambió a superconductores óxidos. Éstos forman estructuras cúbicas, tetragonales u ortorrómbicas, ya sea alineadas o escalonadas, y su celda tiene uniformidad en el plano a_1, b_1 , mientras que en la dirección c_1 tienen variaciones en la composición de las capas, que pueden ser la inclusión de un ion trivalente, como el La^{3+} o el Y^{3+} , o una reducción en el contenido de oxígeno, o ambas posibilidades. Desde 1991 ha habido en la literatura clasificaciones de estas distintas capas como las superconductoras (capas de CuO_2), las aislantes (p.e. Y o Ca) y las donantes de agujeros (tipo CuO o BiO) [78]. Los cupratos cuentan además con un plano de reflexión sobre el eje z , colocado en el centro de la celda unitaria. En la Tabla 4.1 presentamos las dimensiones de la celda para algunos superconductores óxidos, incluyendo algunos superconductores convencionales, el tipo de simetría y su densidad.

El cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, conocido como 123, tiene dos posibles configuraciones: tetragonal y ortorrómbica, siendo ésta última la que presenta superconductividad con $T_c = 92\text{K}$ (según [13]). La diferencia entre sus constantes cristalográficas a_1 y b_1 , así como entre sus dos configuraciones, está directamente relacionada con el dopaje de oxígeno tipo agujeros en los planos de CuO. Para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ todos sus átomos de Cu están “alineados” uno sobre otro a lo largo de la misma línea vertical. Se le considera como un compuesto de tres perovskitas apiladas, BaCuO_3 , YCuO_2 y BaCuO_2 , cuyo tamaño de celda se caracteriza por que $c_1 \approx 3a_1$. En la Fig. 4.2 mostramos el esquema de capas para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ortorrómbico.

Se observa que con los distintos dopajes del oxígeno el tamaño de la celda varía ligeramente, al igual que ocurre con la T_c , pero más adelante mostraremos que la influencia de dichas variaciones no es significativa sobre las propiedades termodinámicas resultantes.

Material	a_1 Å	b_1 Å	c_1 Å	sime- tría	densidad g cm^{-3}
Cu	3.61				
Al	4.05			C	
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$	3.9		11.94	T	
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.56}$	3.834	3.881	11.735	O	6.28
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$	3.821	3.888	11.693	O	
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$	3.818	3.885	11.68	O	6.39
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$	5.41	5.41	30.91	T	6.52
$\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$	3.87	3.87	23.24	T	8.06
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$	3.86		17.7	T	

Tabla 4.1: Propiedades cristalográficas de algunos superconductores.
C = cúbica, O = ortorrómbica, T = tetragonal

4.3. Anisotropías

Cuando se habla de anisotropías, normalmente se piensa en la producida por la diferencia tan marcada de resistividad en las dos direcciones preferenciales del cuprato, pero también existe la anisotropía en las masas efectivas de los portadores de carga entre la de la dirección c_1 y la que se mide a lo largo del plano a_1b_1 .

Resistividad

La resistividad es la suma de las contribuciones que vienen de la arquitectura de la red de iones y de los defectos del material, tales como impurezas y dislocaciones. Los cupratos pueden tener una gran variedad de combinaciones de arquitecturas y defectos. Para metales comunes la resistividad

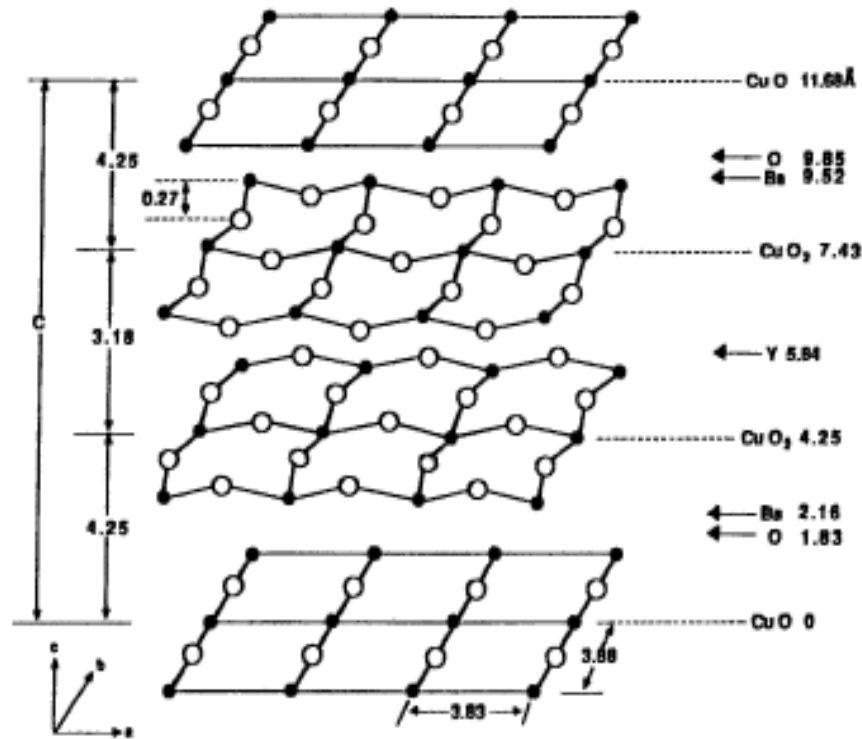


Figura 4.2: Esquema de capas para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ortorrómbico. Las capas son perpendiculares al eje c_1 . Tomado de la Ref [13].

depende linealmente de la temperatura cuando se encuentra a temperaturas altas, mientras que a temperaturas muy por debajo de la temperatura de Debye obedece la ley de Bloch que va como T^5 [13]. Los superconductores convencionales están en la región de la ley de Bloch, mientras que los de alta T_c se encuentran en la región lineal. Experimentalmente se observa que en los cupratos existe una anisotropía entre la resistividad a lo largo de la dirección c_1 perpendicular a los planos de CuO_2 , ρ_z , y la resistividad en los planos a_1, b_1 , ρ_{xy} . ρ_z es dos órdenes de magnitud mayor que ρ_{xy} en el caso de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, y hasta cinco órdenes de magnitud mayor para $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+x}$. La resistividad paralela a los planos está dada por

$$\rho_{x,y} = \frac{A_{x,y}}{T} + B_{x,y}T, \quad (4.1)$$

Material	T K	ρ_{xy} $\Omega \times 10^{-6} \text{cm}$	ρ_z $\Omega \times 10^{-3} \text{cm}$	ρ_z/ρ_{xy}
Cu	77	0.2		
Cu	273	1.56		
Al	77	0.3		
Al	273	2.45		
YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	100	200	18	90
YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x}	300	450	13	28.9
Bi ₂ Sr ₂ CuO _{6+x}	25	90	14,000	1.56×10^5
Bi ₂ Sr ₂ CuO _{6+x}	290	275	6,000	2.2×10^4

Tabla 4.2: Resistividad a lo largo de dos direcciones para algunos superconductores. Nótese el cambio del exponente de las unidades para ρ_{xy} y para ρ_z .

para cualquiera de las dos direcciones en el plano x,y , donde las $A_{x,y}, B_{x,y}$ son constantes que dependen del material. En la Tabla 4.2 mostramos algunas resistividades medidas a diferentes temperaturas, ya sea ligeramente arriba de T_c o cerca de la temperatura ambiente. Como referencia ponemos un par de superconductores convencionales con resistividad isotrópica. Nótese la diferencia de tres órdenes de magnitud entre las unidades de ρ_{xy} y ρ_z .

La resistencia R se define en términos de la resistividad ρ como

$$R = \frac{\rho d}{A}, \quad (4.2)$$

donde d es la distancia entre los dos puntos de medición y A la sección transversal del material.

Masas de los portadores de carga

La anisotropía en las masas efectivas medidas a lo largo del eje z y sobre los planos de CuO_2

es mucho menos marcada, pero también representa uno de los parámetros definitorios del sistema. Aplicando campos magnéticos de distintas intensidades a los cupratos a lo largo de las direcciones cristalográficas, Junod *et al.* [38, 46] han podido mostrar que la anisotropía en las masas es $(m_{c_1}/m_{a_1b_1})^{1/2} = 5.3 \pm 0.5$ para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, y de $(m_{c_1}/m_{a_1b_1})^{1/2} = 7 \pm 0.5$ para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$, lo que indica que la anisotropía aumenta conforme la concentración de oxígeno baja. Esta cantidad está relacionada con la masa efectiva obtenida en la Ec. (3.4). En la Fig. 4.3 mostramos la anisotropía de las masas en función de la concentración de oxígeno.

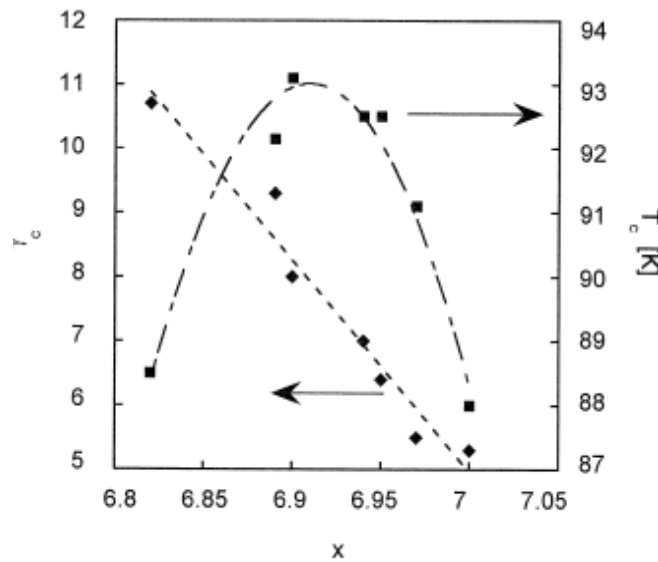


Figura 4.3: Anisotropía en las masas γ_c (diamantes) y temperatura crítica del bulbo (cuadrados) para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ como función de la concentración de oxígeno. Figura tomada de [46].

Existen otros tipos de anisotropías basadas en: la distorsión a partir de la tetragonalidad o la ortorrumbilidad que tienen los átomos en el plano a_1, b_1 , la cual es muy pocas veces utilizada; las que tienen que ver con la longitud de penetración y las relacionadas con las propiedades magnéticas.

4.4. Propiedades térmicas

Las características térmicas en los superconductores, tales como la temperatura crítica y el calor específico, son especialmente importantes ya que gracias a ellas se puede identificar el punto de la transición en que el material bajo estudio pasa a la fase superconductor. Algunas de ellas incluso son definitorias al escoger los materiales que se han de usar en las aplicaciones tecnológicas.

4.4.1. Temperatura crítica y gap de energía

La temperatura crítica de transición para los cupratos también ha sido escrupulosamente estudiada teóricamente y medida experimentalmente.

Como comentamos en la Secc. 2.2, la teoría de BCS encuentra la relación entre el gap de energía $\Delta(T)$ y la temperatura crítica a través de las relaciones universales, Ecs. (2.41) y (2.48), $2\Delta_0 = 3.52k_B T_c$ y $\Delta C = 1.43\gamma_e T_c$. Recordemos que dichas relaciones fueron obtenidas tomando el límite de acoplamiento débil entre los electrones que forman el par de Cooper y son válidas para la mayoría de los superconductores convencionales.

Pero, como ya dijimos, estas relaciones universales no aplican para los superconductores de alta temperatura, lo que es un indicador de que alguna de las suposiciones que se hicieron para calcularlas no son válidas en este caso. Por ejemplo, para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ la relación es $2\Delta_0/k_B T_c = 4.0$, para $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ es 5.7, y para $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ es 4.3, con valores de Δ_0 del orden de 1 meV, ya que $\Delta_0 \approx 10^{-4} E_F$ y E_F es de unos cuantos eV.

Entre las propiedades térmicas del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ que varían se encuentran: la temperatura crítica en función del dopaje $7-x$ que forma una especie de parábola invertida, como se muestra en la Fig. 4.3, dando origen a lo que se conoce como *dopaje óptimo* en $7-x \approx 6.9$ con una T_c máxima de 93 K [46]; o la temperatura de Debye que varía con la temperatura y con el dopaje [79], como se muestra en la Fig. 4.4. Nótese que el significado de la variable x en la Fig.

4.3 es diferente al que hemos venido manejando, y equivale a nuestra $7 - x$.

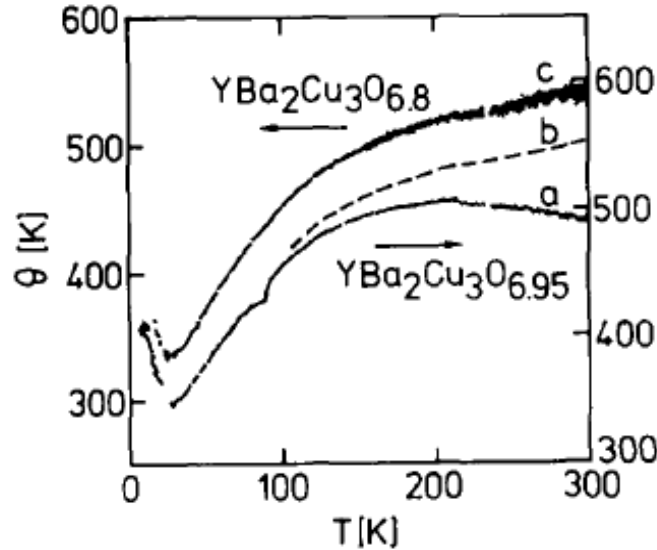


Figura 4.4: Temperatura de Debye para YBCO (a) oxidado y (c) ligeramente reducido; (b) con un término $\gamma_e T$ permitido. No se observa pico en T_c . Figura tomada de [79].

Para un gas de electrones en 3D, se tiene que la relación para las energías de Fermi E_F es [67,80]

$$E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3} n_s^{2/3}}{2 m^*}, \quad (4.3)$$

donde m^* es la masa efectiva y n_s es la densidad de portadores de superconductividad. Recordemos que $1/m^* = 1/\hbar^2 (d^2 E_k / dk^2)$ con E_k la energía de las partículas como función de la magnitud de su vector de onda \mathbf{k} . Más aún, se muestra [80] que esa misma energía de Fermi es proporcional al coeficiente de relajación σ (relajación de los espines de los muones que se detienen en los campos internos del cuprato creados por un campo magnético externo) y a la constante de Sommerfeld como $\sigma^{3/4} \gamma_e^{-1/4}$; y que $\gamma_e \propto n_s^{1/3} m^*$. En la Fig. 4.5 se muestra la relación que existe entre las temperaturas críticas y las energías de Fermi, para los distintos grupos de superconductores [80]. Se estima [81] que la temperatura de Fermi de los cupratos como el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, en la región

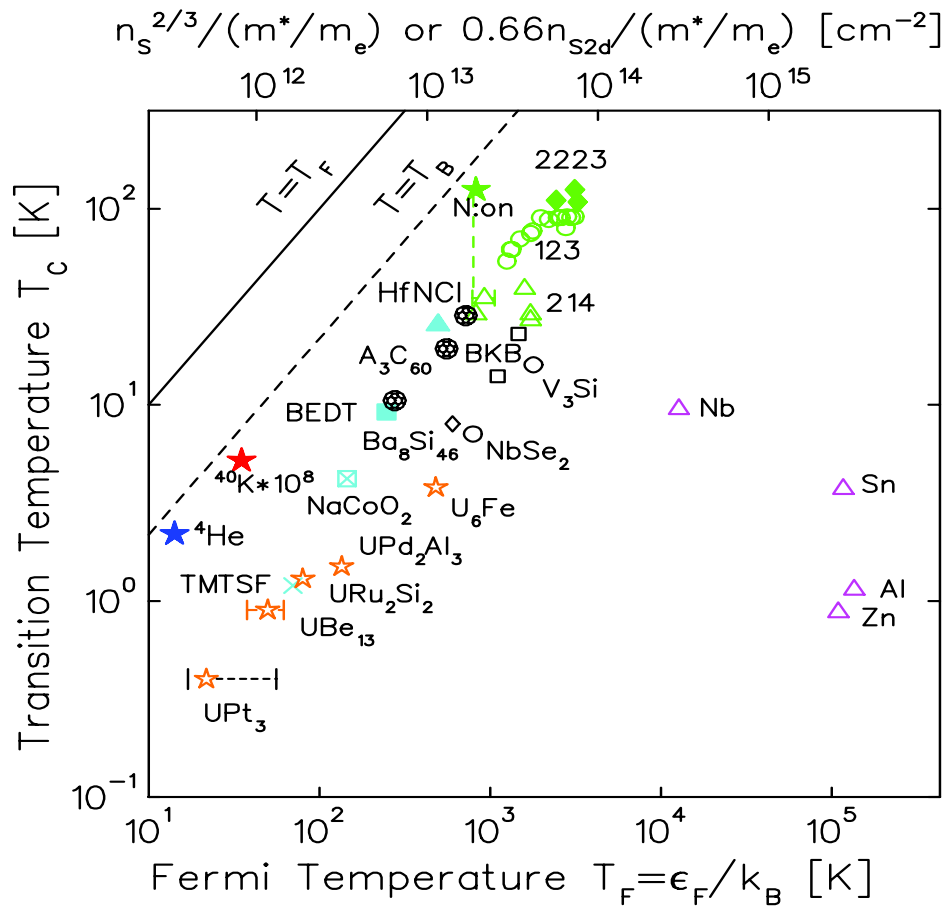


Figura 4.5: Temperatura crítica y densidad de número de portadores de superconductividad en función de la temperatura de Fermi. Figura tomada de [82].

óptima (donde T_c es mayor), se encuentra entre los 2000 y 4000 K. En dicha figura también podemos observar que la línea punteada, correspondiente a $T = T_B$, es la que cumple con la relación $T_B = 0.218T_F$ de [65] que usamos frecuentemente en nuestros cálculos, donde T_B (T_0 en nuestra notación) es la temperatura de condensación de un gas ideal de bosones con masa $2m^*$ y densidad $n_s/2$. Los autores de la Ref. [82] identifican $T_c/T_F \sim 0.05$ como el límite superior para que se tenga un superconductor.

4.4.2. Calor específico

Existen en la literatura muchos reportes experimentales y análisis teóricos sobre el calor específico de los cupratos, lo que se debe en parte a que proporciona información sobre el material, y en parte porque el calor específico es una cantidad relativamente fácil de medir experimentalmente, a diferencia de, por ejemplo, la energía interna. En la Introducción hablamos brevemente de las distintas contribuciones al calor específico del cuprato, que son: el debido a la red cristalina o fonónico C_l , el electrónico C_e , el magnético C_{mag} , que se asocia a centros paramagnéticos y el hiperfino C_{hip} , proveniente de los momentos nucleares [54]:

$$C = C_l + C_e + C_{mag} + C_{hip}. \quad (4.4)$$

A su vez el calor específico electrónico se divide en: calor específico del estado normal C_{en} , el del estado superconductor C_{es} y a veces se habla de la existencia de un estado mixto [54]. Las componentes del calor específico electrónico dependen de la intensidad del campo magnético externo. Unas de las mejores revisiones que se pueden encontrar al respecto están en [54] y [73].

En esta sección enumeramos las principales características experimentales observadas para el calor específico fonónico y el electrónico. En el Capítulo 5 daremos nuestra interpretación de estas componentes y su relación, ya sea con el calor específico fonónico, o las componentes normal o superconductoras del calor específico electrónico.

Calor específico electrónico

No ha sido una tarea fácil la de identificar las distintas componentes del calor específico electrónico de los superconductores de alta temperatura crítica, ya que existen muchas dificultades al manipularlos, tales como impurezas, el conservar experimentalmente el mismo dopaje a lo largo del intervalo completo de temperatura, fluctuaciones térmicas y fluctuaciones superconductoras (que provienen de los centros paramagnéticos introducidos por otras sustancias) existentes aún

sin presencia de campo magnético externo [54, 83]. Pero en general al calor específico electrónico de los cupratos se le atribuyen las siguientes características:

Componente lineal

Actualmente, aunque ya no existe duda [34, 54] sobre la existencia de la componente lineal en los HTSC para temperaturas por debajo de la temperatura de transición (distinguirlo experimentalmente de entre las otras componentes de C más fuertes a muy bajas temperaturas resultó muy difícil), su significado teórico todavía no está claro, ya que la mayoría de los modelos para este tipo de superconductores no lo predicen. En algunas ocasiones se hace referencia al término γ_e como un término residual en campo cero $\gamma(B = 0)$, que viene exclusivamente de los electrones normales que no participaron en la superconductividad (vease, por ejemplo, [73] p.85, y las referencias ahí citadas). En el Cap. 5 mostramos cómo este término lineal, junto con el cuadrático surgen directamente a partir del modelo que usamos.

La importancia de determinar γ_e está en que se relaciona directamente con la densidad de estados (EDOS) alrededor del mar de Fermi. Además, se cree que γ_e puede proporcionar información acerca de la interacción electrón-fonón [54]. Por otro lado, Anderson *et al.* [84], en la formulación de la teoría *Resonating-Valence-Bond* (RVB) predice un término con este tipo de comportamiento (lineal). En dicho modelo Anderson cataloga la superconductividad como una condensación Bose Einstein de agujeros cuando se tiene un dopaje pequeño.

Se sabe que para sistemas metálicos, incluidos los superconductores en su estado normal, el calor específico electrónico a bajas temperaturas es de la forma [85] $C_e = \gamma_e T$. De ahí que tradicionalmente se obtenga el valor de γ_e como la ordenada al origen de la gráfica de C/T vs T . Se debe tener cuidado con la notación, ya que algunos autores definen al calor específico electrónico como $\gamma(T) = C/T$, mientras otros utilizan el término γ_n para denotar la densidad de estados electrónicos del estado normal, lo que puede prestarse a confusiones.

En el caso de los superconductores de alta T_c cuando se quiere obtener γ_e , es necesario primero suprimir el giro hacia arriba a muy bajas temperaturas (upturn), debido al desdoblamiento hiperfino y a las interacciones internas, lo cual experimentalmente resulta muy complicado, ya que se requieren campos externos muy grandes para lograrlo [54]. Como alternativa, hay autores que incluyen un término $\approx T^{-2}$ [54] (contribución de Schottky), el cual substraen directamente de la curva experimental, dando como resultado un comportamiento semejante a una recta. Como dijimos anteriormente, estos factores influyen fuertemente en el valor de γ_e que cada grupo experimental reporta, por lo que los resultados son muy variados [13] -existen más de 50 datos-, y van desde décimas de mJ/mole K^2 (pero nunca es igual a cero) hasta decenas de mJ/mole K^2 .

Entre los reportes de esta componente lineal para $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ está el de Wright *et al.* [36] de 1999, que al estudiar la influencia del campo magnético en el calor específico electrónico, Fig. 4.6, obtienen el término lineal, cuando el campo externo es cero, del orden de 0.2 mJ/mole K^2 . Con el tiempo se han ido mejorando las muestras experimentales, y se observa que los valores de γ_e , tienden a 2 – 3 mJ/mole K^2 , reportado por Junod *et al.* en 2001 [34]. Más adelante retomaremos estos resultados cuando apliquemos nuestro modelo para calcular el calor específico para cupratos en el Cap. 5.

Componente cuadrática

Es bien sabido que para los superconductores convencionales, no se observa término cuadrático, mientras que para los cupratos, aún cuando por años existió una controversia sobre la existencia del término de la forma $C_e \propto \alpha T^2$ en el calor específico, finalmente se ha detectado experimentalmente [34]. Más aún, se observa que C_e cambia su comportamiento suavemente a $B^{1/2}T^2$ en presencia de un campo magnético [54].

Revisando la historia sobre el hallazgo de αT^2 en el calor específico de los cupratos, se encuentra que el grupo en Berkeley de Fisher *et al.*, en 1996 reportaba “...Absence of evidence for a

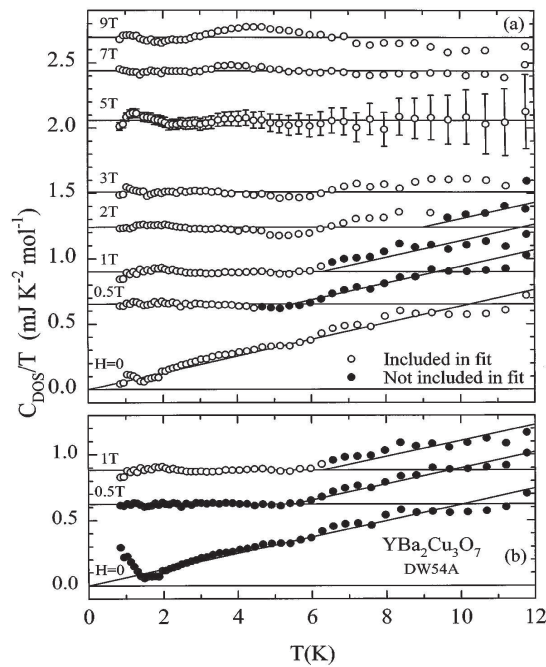


Figura 4.6: Calor específico electrónico a bajas temperaturas para varios campos magnéticos. Figura tomada de [36].

T^2 term for $H = 0$ ” [35, 86], y en 1999 indican “...Evidence for a d -wave pairing” [36], dando un valor $\alpha = 0.064 \text{ mJ/molK}^3$, aunque reconocen que hay una gran incertidumbre en el cálculo de esa cantidad, ya que su método está basado en un ajuste de parámetros.

Otros experimentos también lo han observado, como por ejemplo el grupo de Stanford, Moler *et al.*, en un primer reporte indican que $\alpha = 0.2 - 0.3 \text{ mJ/molK}^3$ [87] y luego, en 1997, obtienen $\alpha = 0.1 \text{ mJ/molK}^3$ [37], aunque sus cálculos comienzan fijando γ_e y continúan haciendo ajustes con varios parámetros. En 2001 el grupo de Ginebra, Junod *et al.* [34], aseguró obtener una muestra con una concentración muy baja de impurezas magnéticas y reporta $\alpha = 0.21 \text{ mJ/molK}^3$, primero midiendo el *calor específico anisotrópico* $C_{ani}(T, B) = C(T, B||c) - C(T, B\perp c)$ [88], y posteriormente tomando la diferencia $C_{dif}(B, T) = C(B, T) - C(0, T)$ [34], para distintos campos magnéticos externos B . En su trabajo tratan de no recurrir a ajustes y cancelan las contribuciones del calor específico de la red, de los núcleos y las paramagnéticas con la ayuda de los campos magnéticos.

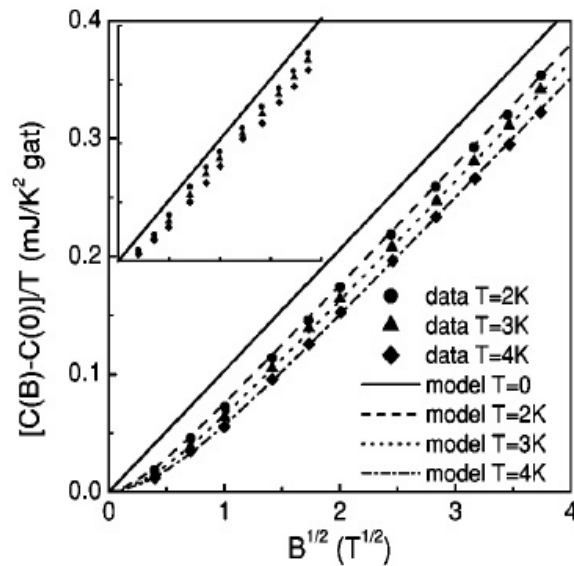


Figura 4.7: Diferencia del calor específico contra el campo externo $B^{1/2}$. En el inset se muestra el calor específico sin substrair la contribución de Schottky. Figura tomada de [34].

En la Fig. 4.7 se muestra una gráfica de C_{dif}/T contra $B^{1/2}$ a la cual se le ha substraido la contribución de Schottky, de donde directamente se extraen los valores de α y de A_c (el coeficiente de $B^{1/2}$ cuando $B \neq 0$). En el recuadro se muestra la misma curva sin substrairle la contribución de Schottky, la cual explicaremos más adelante.

Salto en el calor específico

El *salto* en el calor específico en el punto de la transición es quizá la característica más intrínseca en los superconductores, y en particular en los HTSC, y como ya dijimos, no está apropiadamente descrito por la teoría de BCS. Normalmente se atribuye esta discontinuidad al calor específico electrónico, y representa una transición de segundo orden cuyo tamaño $\Delta C \approx 5\text{J/molK}$, según diversos autores [41, 43, 79, 89].

Una figura muy ilustrativa de este efecto es la presentada por Fisher [90] *et al.* en 1992 (Fig. 4.8), donde se grafica $\Delta C(T_c)/T_c = (C_s - C_n)/T_c$ sin campo magnético externo. Se han publicado

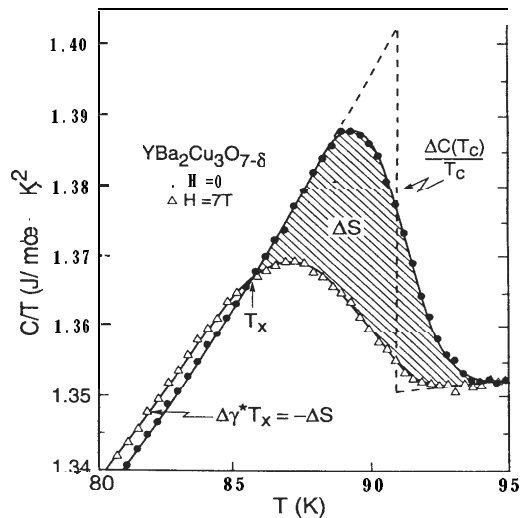


Figura 4.8: Detalle del salto de C/T .
Figura tomada de [90].

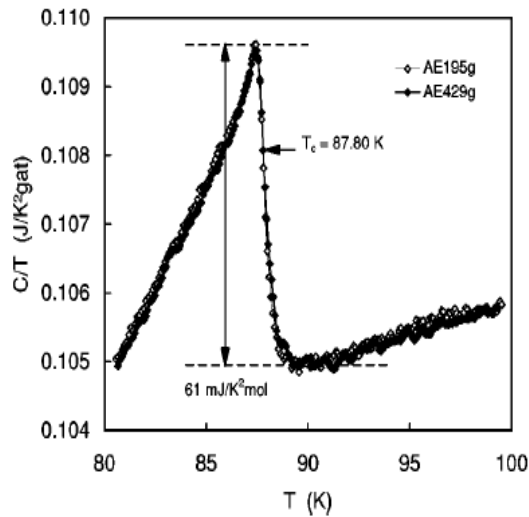


Figura 4.9: Detalle del salto de C/T .
Figura tomada de [34].

otras figuras semejantes usando muestras con menos impurezas, como la presentada por Junod *et al.* [34] en 2001, Fig. 4.9, en la cual se observa un salto más definido. Paralelamente, se han hecho diversos ajustes sobre la forma del calor específico cerca de T_c , ya sea usando una gaussiana en un intervalo de unos 5K alrededor de T_c [54], o un ajuste de las fluctuaciones sobre un intervalo menor (0.1K) [42,54].

Por otro lado, en presencia de un campo magnético externo, tenemos un pico seguido de una bajada que refleja que el orden de la transición es de primer orden [38]. En la Fig. 4.10, proporcionada por Junod *et al.*, se muestra cómo influye el campo magnético en la forma del pico, donde la curva superior corresponde al campo cero. En algunas gráficas es muy notoria una *curvatura positiva* en el salto, la cual junto con lo *redondeado* de la curva, se atribuyen a la finitud de la muestra y a las fluctuaciones, que debido a la alta temperatura crítica de los cupratos son significativas [91]. Además, existen varios reportes, diferentes entre sí, del calor específico electrónico para diferentes dopajes del superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, del cual mostramos un ejemplo en la Fig. 4.11, donde se toma C_e con respecto al compuesto no superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$.

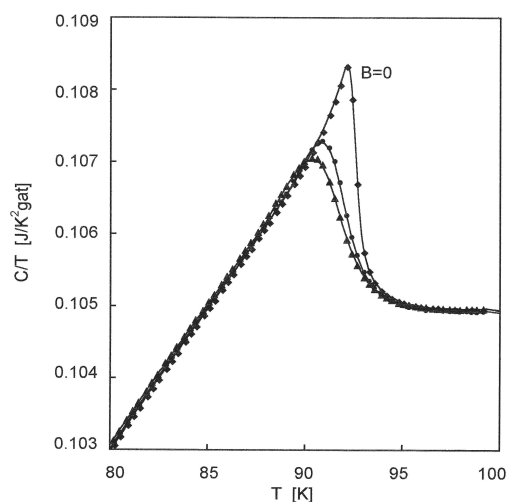


Figura 4.10: Variación de la forma del salto en presencia de un campo magnético para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$. Las líneas continuas corresponden a $B\parallel c$ y los círculos a $B\parallel ab$. Los datos son para $B = 0$, $B = 6.4\text{T}$ y $B = 9.6\text{T}$ comenzando desde arriba. Figura tomada de [46].

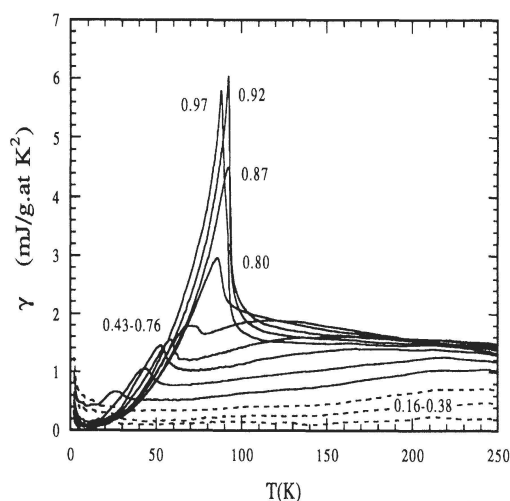


Figura 4.11: Coeficiente del calor específico electrónico $\gamma(x, T)$ en función de la temperatura para dopaje para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ relativo a $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$. Los valores de x son 0.16, 0.29, 0.38, 0.43, 0.48, 0.57, 0.67, 0.76, 0.80, 0.87, 0.92 y 0.97. Figura tomada de [92].

Giro hacia arriba

El calor específico muestra un giro hacia arriba, *fishtail*, a temperaturas cercanas a cero que se atribuye a las componentes magnéticas e hiperfinas [54]. Estas componentes usualmente se aproximan con series, como por ejemplo, la magnética en campo cero, que es debida a interacciones internas, se toma como $C_{mag}(0) = \sum A_n T^{-n}$. Por su lado, la componente hiperfina sólo existe en presencia del campo magnético, y va como $C_{hip} \propto T^{-2}$, aunque hay autores que dicen que el término T^{-2} se debe a la presencia de impurezas de iones pesados de tierras raras [93]. En la Fig. 4.12 mostramos las diferentes contribuciones al calor específico sobre T del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ a temperaturas entre 0.5 K y 10 K. Se observa que las contribuciones magnéticas e hiperfinas sólo son relevantes a temperaturas menores a 1 K.

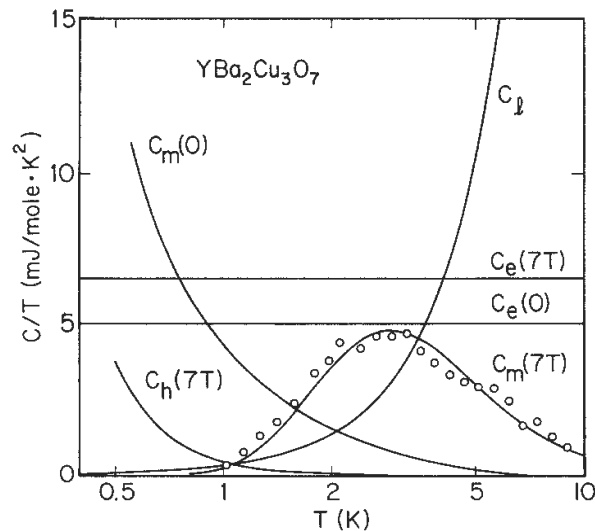


Figura 4.12: Contribuciones al calor específico a bajas temperaturas. Figura tomada de [94].

La mayoría de los autores toman estas (o algunas otras) formas analíticas, las “substraen” del calor específico total, y lo que obtienen lo reportan como la componente electrónica.

Aunque se ha hecho una investigación muy amplia con respecto a la influencia del campo magnético externo sobre el calor específico electrónico, sobre todo por el grupo de Ginebra [38, 45, 46], en este trabajo nos restringimos al caso de campo-cero.

Calor específico fonónico

Para describir el calor específico de la red C_l de los superconductores se encuentra que el aplicar el modelo de Einstein o el de Debye no es adecuado, por lo que algunos autores han recurrido al uso del formalismo de Born-von Kármán, el cual se complica mucho al estar trabajando con una red poliatómica en tres dimensiones [95]. Otros intentos para describir el calor específico de la red incluyen: la combinación de los dos modelos, Einstein y Debye [39]; ajustar el modelo de Debye con una temperatura de Debye Θ_D variable [40, 79]; la construcción de funciones de escalamiento en términos de series de potencias de una temperatura reducida [41]. Por otro lado

está el modelo propuesto por Fisher *et al.* [42] que inicialmente consistía en construir una serie de potencias impares para la parte armónica de la red a temperaturas muy bajas, y que luego evolucionó a una serie en términos de otra temperatura reducida para T 's arriba de 50 K más un término lineal para incluir la parte anarmónica [43]; éste es probablemente el método más conocido. Otros grupos, como el de Loram *et al.* [92], construyen C_l usando como referencia un material no-superconductor, ya sea a base del mismo cuprato con una pequeña variación en el contenido de oxígeno o introduciendo otro elemento; mientras Junod *et al.*, escalan modelos como el de 3D XY, muy parecido al que se usa para el ^4He [45], o aplicando el formalismo de los niveles más bajos de Landau (LLL) (véanse [45–47] y las referencias ahí citadas). También hay grupos, como Meingast *et al.* [96], que construyen una densidad de estados fonónica utilizando una aproximación de densidad local. Por su parte, Bessergenev *et al.* [44] desarrollan una serie de potencias alrededor de temperaturas características que dependen de varios momentos fonónicos, y por último, Shaviv *et al.* [89], que estiman un espectro fonónico basándose en las frecuencias de vibración de la red conocidas, y lo insertan en una serie de funciones de Einstein con temperaturas características. No está de más aclarar que normalmente se supone que el calor específico de la red es completamente isotrópico.

Todos estos autores substraen el calor específico de la red que obtuvieron con los métodos arriba mencionados al calor específico total y lo que queda es lo que etiquetan como “calor específico electrónico”. Por esta vía no sólo se transmiten al calor específico electrónico las incertidumbres intrínsecas del método utilizado, sino que además la contribución de C_e queda restringida básicamente a la altura del salto, que representa un pequeño porcentaje (entre el 1 y el 2 %) del total. Nosotros mostramos que esta manipulación es incorrecta, y que el calor específico electrónico (normal más superconductor) representa un (30 – 40) % del total.

En la Tabla 4.3 [13] listamos algunas de las propiedades termodinámicas de materiales de alta T_c , e incluimos algunos elementos superconductores monoatómicos como referencia. Allí T_c es

Material	T_c K	γ_e mJ/mol K ²	$(C_s - C_n)/T_c$ mJ/mol K ²	Θ_D K	T_F 10 ³ K	$g(E_F)$ atm eV	n_{3D} 10 ²¹ /cm ³	n_{2D} 10 ¹⁴ /cm ²
Cu		0.67		310	81.6			
Al	1.2	1.26	1.45	394	136			
YBa ₂ Cu ₃ O ₇ *	92	14	50	410	2.29 ± .1	2.0	16.9 ± 3.4	9.9 ± 2.0
YBa ₂ Cu ₃ O _{6.5}		5.5		350	0.71 ± .07	0.8		
Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O ₈ *	95	8		250	0.97 ± .39		3.5 ± 1.8	2.7 ± 1.4
Tl ₂ Ba ₂ CuO ₆ *	80			240	3.15 ± .37			
HgBa ₂ Ca ₂ Cu ₃ O ₈	133		45					

Tabla 4.3: Parámetros para algunos superconductores a presión ambiente. Datos tomados de [13].

la temperatura crítica, γ_e el parámetro del calor específico electrónico, $C_s - C_n$ la diferencia de calores específicos entre el estado superconductor y el normal en la transición, Θ_D la temperatura de Debye, E_F la energía de Fermi, T_F la temperatura de Fermi, $g(E_F)$ la densidad de estados en el nivel de Fermi, y las densidades electrónicas n_{3D} y n_{2D} en 3 y 2 dimensiones. Los compuestos que tienen * muestran el valor calculado de la T_F para una sola capa (2D). En el Cap.5 daremos otra tabla también con propiedades termodinámicas pero exclusivamente para el cuprato YBa₂Cu₃O_{7-x} con diferentes concentraciones de oxígeno.

La exactitud y confiabilidad de los resultados experimentales depende en buena medida de la técnica utilizada, y una forma un tanto burda de determinar la precisión de las mediciones es el contar explícitamente con los datos experimentales, condición que muy pocas veces se cumple, y que tomaremos en cuenta a la hora de escoger el compuesto que usamos.

4.4.3. Coeficiente de expansión térmica y la relación entre C_p y C_V

Es sabido que a muy bajas temperaturas, la diferencia $C_p - C_V$ es mucho menor que el mismo calor específico, por lo que se suele denominar a éste simplemente como C [97]. Pero, como es natural para todo sólido, uno esperaría que los cupratos se expandan al incrementar su temperatura, pero la pregunta es qué tanto se expanden y si influye la expansión en su capacidad calorífica. Para cuantificar el efecto de la expansión en el calor específico recordemos que el coeficiente de expansión térmica β_{th} se define

$$\beta_{th} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial \ln V}{\partial T} \right)_p, \quad (4.5)$$

donde el subíndice p indica que la derivada se realiza a presión constante. En el caso de los superconductores convencionales, con simetrías preferentemente cúbicas, la red se expande isotrópicamente en las tres direcciones, entonces se puede tomar $\beta_{th} = 3\alpha_l$, con α_l el coeficiente de expansión lineal, cuyos valores típicos son del orden de $10^{-5}K^{-1}$. Pero para los cupratos, donde la simetría es hexagonal o tetragonal, se debe hacer la distinción entre las direcciones preferenciales. Entonces se toma al coeficiente de expansión térmica como

$$\beta_{th} = 2\alpha_{a,b} + \alpha_c, \quad (4.6)$$

donde $\alpha_{a,b} = (\partial \ln(a,b)/\partial T)_p$ el coeficiente de expansión lineal en la dirección a_1 o b_1 , y $\alpha_c = (\partial \ln c/\partial T)_p$ el coeficiente de expansión lineal en la dirección c_1 de la red. Existen mediciones confiables de los coeficientes de expansión térmica a lo largo de las tres direcciones cristalográficas para el $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, como las realizadas por Meingast *et al.* [98,99], Fig. 4.13, donde claramente se ve que el coeficientes de expansión térmica a lo largo de la dirección c es el mayor, del orden de $10^{-5}K^{-1}$ en la transición. Otros reportes [74] indican los valores $\alpha_a = 0.52 \times 10^{-5}K^{-1}$, $\alpha_b = 0.92 \times 10^{-5}K^{-1}$ y $\alpha_c = 1.57 \times 10^{-5}K^{-1}$ en un intervalo de temperaturas de 150 – 300K.

Por otro lado, se observa que el coeficiente de expansión térmica presenta un comportamiento cualitativo muy parecido al del calor específico, esto es, tiene una componente electrónica y otra

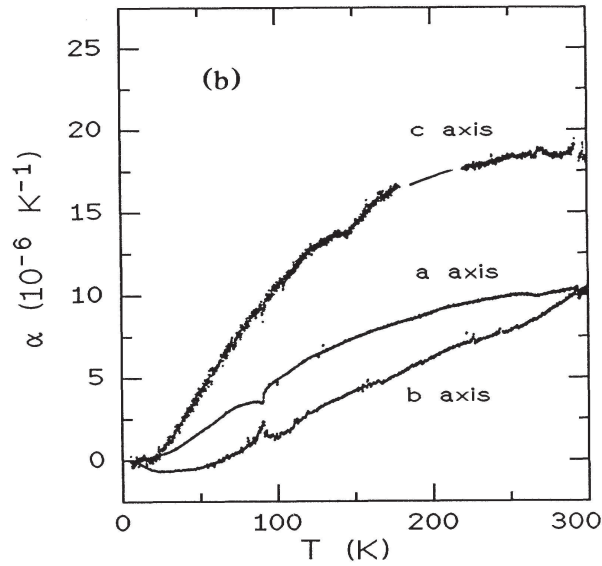


Figura 4.13: Coeficientes de expansión térmica. Figura tomada de [98].

debido a la red cristalina, tal que $\beta_{th} = \beta_e + \beta_l$. Por lo tanto, tiene una componente lineal que domina a bajas temperaturas y por lo menos una cúbica que es más importante a altas temperaturas. Por arriba de la temperatura de Debye del cuprato el coeficiente de expansión térmica es casi una constante, con valores $\alpha_c \sim 20 \times 10^{-6} K^{-1}$ y $\alpha_{a,b} \sim 10 \times 10^{-6} K^{-1}$ [99].

Aunque en la mayoría de los experimentos no se reporta explícitamente qué calor específico están midiendo, algunos especifican que obtienen el calor específico a presión constante - normalmente a presión atmosférica -, ya que para mantener un sólido a volumen constante se necesitan presiones muy altas y difíciles de manejar.

El calor específico es la capacidad calorífica por unidad de masa de un material. La relación entre la capacidad calorífica c_p a presión constante y a volumen constante c_v está dada por [85]

$$c_p - c_v = \frac{V\beta^2}{\kappa_T} T, \quad (4.7)$$

donde

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T, \quad (4.8)$$

es la compresibilidad isotérmica. Se tienen datos de que la compresibilidad isotérmica para el

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ es del orden de 123 GPa^{-1} [100].

En sólidos, la razón $(c_p - c_V)/c_p$ suele ser del orden de 0.1 % para $\Theta_D/6$, y sube al 1 % para $\Theta_D/3$ [85], aunque los datos con los que se cuenta sólo incluyen unos cuantos metales.

Se tiene otra relación entre las capacidades caloríficas aparte de (4.7):

$$\frac{c_p}{c_V} = \frac{\kappa_T}{\kappa_S}, \quad (4.9)$$

donde

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S \quad (4.10)$$

es la compresibilidad adiabática. Para sólidos y líquidos $c_p/c_V = 1$, mientras que para gases monoatómicos es $5/3$ y $7/5$ para gases diatómicos.

Aunque la Ec. (4.7) es estrictamente válida para redes con simetría cúbica, existen en la literatura cálculos de C_p y C_V para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ [96] para distintos dopajes que muestran que C_p y C_V son prácticamente idénticos al menos hasta la vecindad de $T = 200 \text{ K}$. En nuestro cálculo consideramos los dos calores específicos equivalentes en el intervalo que analizamos.

4.4.4. Pseudogap

Los fenómenos que ocurren en los HTSC por arriba de su temperatura crítica han sido extensamente analizados, pero aún se conoce muy poco sobre lo que sucede allí. Una región que tiene particular interés es la comprendida entre T_c y $T^* > T_c$, la conocida como *pseudogap*, que se muestra en el diagrama de fases de la Fig. (4.1). El pseudogap (PG) es una brecha adicional a la brecha superconductor, que se observa en el espectro de energía de las partículas, e indica una reducción en la densidad de estados en el nivel de Fermi (supresión en el peso espectral [101]). Se ha observado que cuando el cuprato tiene un dopaje inferior (underdoped) al óptimo, aparece el pseudogap arriba de T_c y por debajo de una temperatura denominada como T^* , y que la temperatura T^* decrece al aumentar el dopaje hasta llegar a T_c cuando se alcanza el dopaje óptimo,

donde el pseudogap se fusiona con el gap superconductor [102]. Dicho efecto se ha confirmado tanto en experimentos de tunelaje como en los de ARPES (angle-resolved photoemission spectroscopy), donde se observa que la conductancia diferencial a bajas frecuencias se anula (que se conecta directamente con la densidad de estados) para el primer caso [102], y un corrimiento del borde líder (*leading edge*) en la intensidad espectral (la cual se conecta con la función espectral via la distribución de Fermi) para el segundo [103]. También se ha podido comprobar, principalmente en cupratos a base de Bi, que el valor de Δ_0 (el gap superconductor) disminuye hasta en un factor de 3 conforme se aumenta el dopaje de los escasamente dopados hacia los cupratos óptimamente dopados y los sobre-dopados.

Frecuentemente se cree que el pseudogap puede proporcionar información sobre algunas de las propiedades de los cupratos, tales como: el tipo de función de onda que tienen los fermiones apareados; la intensidad de la interacción que hay entre los fermiones que se aparean; la transición de BCS a BEC; y la formación de *pre-pares*. En cuanto al tipo de función de onda del apareamiento, los experimentos de ARPES muestran que el pseudogap está íntimamente relacionado con la superficie de Fermi y la forma tipo *d* de su vector de onda, forma que se conserva hasta llegar a la transición superconductor.

El comportamiento del potencial químico para cupratos se ha asociado a la transición de BCS a BEC [54]. En una gráfica donde se presenta μ a $T = 0$ como función de $k_F \xi$ (longitud de coherencia del par de Cooper) [104], se muestra que la zona en la que μ es constante (y positivo) corresponde a la región para BCS, o sea, $k_F \xi \gg 1$ (acoplamiento débil); cuando μ comienza a decrecer sería la zona del pseudogap, hasta que $\mu = 0$; y una tercera zona, la de acoplamiento fuerte (BEC), donde el potencial químico es negativo. Tradicionalmente se interpreta a la zona donde $\mu \geq 0$ como la correspondiente a fermiones, y la $\mu < 0$ como de bosones. Sin embargo, en los HTSC la región del pseudogap es aquella comprendida entre $T_c \leq T \leq T^*$, donde se puede decir que no tenemos ni el estado normal con un líquido fermiónico puro, ni el de un gas pura-

mente de pares de Cooper. Más bien lo que se tiene es una mezcla de los dos anteriores, donde los fermiones desapareados coexisten con pares-preformados, que están fuertemente amarrados, pero son incoherentes. Dentro de este esquema, cuando $T > T^*$ la energía térmica es suficiente para romper dichos pares, mientras que conforme T disminuye desde T^* , los pares se tornan coherentes y se condensan [54]. Existen en la literatura estudios sobre Hg-1223, Tl-2201 y Bi-2212 que sugieren que la forma de la transición superconductoras en T_c es la de una condensación de Bose-Einstein [105].

Nuestro modelo se basa en que existe una zona de pares pre-formados, en coincidencia con la interpretación anterior, y en que la transición superconductoras obedece a una BEC, pero no pretende predecir el punto en el que la formación de pre-pares comienza, T^* , ni la forma en que la cantidad de pares se incrementa al ir de T^* a T_c . Más aún, es posible que la formación de pares continúe aún por debajo de T_c , pero este es un mecanismo prescindible en nuestros cálculos.

4.5. Propiedades superconductoras

Con el propósito de completar el cuadro de datos básicos del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, en la Tabla 4.4 presentamos algunas de sus propiedades superconductoras. La longitud de penetración de London λ_L se define como la distancia a la cual el campo magnético externo es atenuado bajo la superficie del superconductor, y está relacionada con la masa efectiva m^* y la densidad n_s de los pares superconductoras de la forma $\lambda_L^{-2} = 4\pi e^2 n_s / m^* c^2$. Por otro lado, la longitud de coherencia ξ mide el tamaño de los pares de Cooper y depende de la temperatura de la forma $\xi(T) = \xi_0 [1 - (T/T_c)]^{-1/2}$, con ξ_0 la longitud de coherencia a $T = 0$.

Se define el parámetro de Ginzburg-Landau (GL) κ como el cociente de las dos cantidades definidas en el párrafo anterior, pero al ser superconductoras anisotrópicas se debe hacer la distinción entre la dirección del plano a_1, b del cristal (\perp) y la dirección c (\parallel), como se muestra en la

ξ_0^{\parallel}	ξ_0^{\perp}	λ_L^{\parallel}	λ_L^{\perp}	κ^{\parallel}	κ^{\perp}	H_{c1}^{\parallel}	H_{c1}^{\perp}	H_{c2}^{\parallel}	H_{c2}^{\perp}
nm	nm	nm	nm			T	T	T	T
0.6	2.7	26	125	7.6	37	53	520	140	650

Tabla 4.4: Propiedades superconductoras a lo largo de dos direcciones para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Datos tomados de [74].

Tabla 4.4, tomada de la Ref. [74], donde H_{c1} es el campo magnético crítico inferior y H_{c2} es el campo magnético crítico superior.

En el Capítulo 5 retomaremos algunas de las propiedades descritas en este capítulo y las aplicaremos a nuestro modelo.

Capítulo 5

Calor específico del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$

En este capítulo usamos la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad extendida a estructuras multicapas, para describir las propiedades termodinámicas y superconductoras del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Escogemos el valor del dopaje $x = 0.078$ por ser aquél que conduce al cuprato con la mayor cantidad de datos experimentales disponible en la literatura.

Considerando que en los cupratos la conducción se realiza principalmente en los planos de CuO_2 , modelamos su celda unidad compuesta de dos capas conductoras de ancho a , separadas por planos de ancho cero e impenetrabilidad variable. Cada una de las capas conductoras contiene a uno de los dos planos de CuO_2 . Los planos separadores están situados, uno en la posición de los Ytrios y el otro en la parte superior de la celda unidad, como se muestra en la Fig. 5.1. Repitiendo esta celda unitaria reproducimos al superconductor como un sistema multicapas separadas por planos de ancho cero.

Los parámetros de los cuales depende nuestro modelo son: el ancho a de las capas conductoras (o separación entre los planos separadores); la impenetrabilidad de los planos separadores que en nuestro modelo está dada por P_0 ; y la densidad de pares de Cooper que tomamos como una fracción $f \leq 1$ de los posibles electrones apareables divididos entre dos. Los restantes $(1 - f/2)$ son los electrones (y/o huecos) no apareados que contribuyen como fermiones a las propiedades

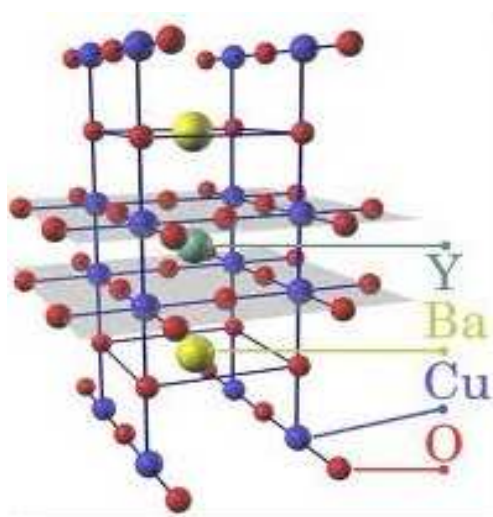


Figura 5.1: Celda unitaria del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, los planos sombreados son los planos de CuO_2 donde ocurre la superconductividad.

del superconductor.

El ancho de las capas la tomamos igual a la mitad de la altura de la celda unidad, es decir, $a = c_1/2 = 5.8 \text{ \AA}$. Los últimos dos parámetros los determinamos a partir de dos cantidades experimentales: la temperatura crítica y la magnitud del salto del calor específico en T_c , $\Delta C/T_c = (C_s - C_n)/T_c$. Todas las demás propiedades termodinámicas del material son una consecuencia de las anteriores.

Nótese que aunque estamos hablando de los pares de Cooper de partículas, en realidad deberíamos referirnos a los pares de Cooper tanto de partículas como de huecos, es decir, en esta versión básica del modelo Bosón-Fermión, no hacemos distinción entre los pares de uno o de otro tipo. Debido a esta condición sobre el modelo no podemos hacer predicciones de las propiedades del superconductor como función del dopaje. Por esta misma razón, al tomar los parámetros experimentales del superconductor e introducirlos en la teoría, incluimos implícitamente el dopaje del material. Una versión aumentada del modelo implicaría hacer la distinción entre pares de partículas y de huecos, con la consecuente introducción de un parámetro adicional.

A manera de comparación, en la Tabla 5.1 mostramos los datos experimentales disponibles más

representativos para los cupratos $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ con distintos dopajes x , donde hemos seleccionado aquellos que han sido más estudiados, algunos de los cuales ya mencionamos en la Sec. 4.4.2. En la misma Tabla indicamos la fuente de donde se tomaron los datos y el año en que fueron publicados.

Como ocurre con varias características de los cupratos, la temperatura crítica varía de muestra a muestra, aun tratándose de un mismo dopaje y un mismo experimento, por lo que tomamos la que cada autor indica como su favorita. Escribimos los valores de la constante γ_e y α correspondientes, cuando el experimento las reporta. Es importante no confundir γ_e con la γ_n que varios autores denominan como la densidad de estados electrónicos del estado normal. Incluimos en la misma Tabla 5.1 la temperatura de Debye Θ_D en el punto de la transición, la cual, en la mayoría de los casos, es deducida a partir de la curva de calor específico experimental a la que se le sustrae el calor específico electrónico C_e , y se le ajusta una curva de calor específico de la red con una determinada Θ_D . Este procedimiento lleva a un círculo vicioso, ya que para obtener el calor específico electrónico varios autores substraen el calor específico de la red usando una Θ_D , ya sea fija o variable, como mencionamos en la Secc. 4.4.2. También agregamos la *magnitud del salto* que el correspondiente experimento reporta, aunque en algunos casos es necesario obtenerla de la curva, los cuales marcamos con una (\ddagger). Además, en la Tabla 5.1 indicamos que tipo de curva de C se presenta en cada artículo y si se incluye un listado de los datos. Señalamos con un (*) cuando se cuenta con la curva experimental de la densidad de estados fonónico [106] (PDOS), obtenido por medio de la dispersión inelástica de neutrones (INS), la cual analizaremos más adelante. Pocos autores incluyen, además de la magnitud del salto, la amplitud de la transición que oscila entre 0.3 y 5 K. Así mismo, pocos son los que garantizan que se conserva el dopaje a lo largo de todo el intervalo de temperaturas reportado, por eso algunos nisiquiera lo determinan.

El reporte más reciente sobre el calor específico que consultamos es el de Junod *et al.* [34], de 2001. Estos autores emplean un arreglo de campos magnéticos transversales para cancelar las componentes magnéticas internas, reducen al mínimo las fluctuaciones térmicas, y garantizan que

Cuprato	T_c K	γ_e mJ/mol K ²	α mJ/mol K ³	Θ_D K	$\frac{\Delta C}{T_c}$ mJ/mol K ²	Curva de C	Autores Año
YBa ₂ Cu ₃ O _{6.9}	91.44	28.2			50	C_p/R †	Shaviv 1990 [89]
YBa ₂ Cu ₃ O _{6.92}	92.2	25.1 ‡	3.4		20 ‡	C_p †	Bessergenev 1995 [44]
YBa ₂ Cu ₃ O _{6.95}	93	3.06 *	0.11 *	400		C/T vs T^2	Moler 1994 [87]
YBa ₂ Cu ₃ O _{6.97} *	91						Roulin 1996 [45]
	92.5	19.5 ‡			50 ‡	C_{el} vs T	Loram 1993 [92]
YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x} **	90	37		440	45.5	C_p vs T	Inderhees 1987 [40]
YBa ₂ Cu ₃ O ₇ *	92	6.95		457	47	C/T vs T	Fisher 1988 [107]
		0.2 ‡	0.065			C_{DOS}/T vs T	Wright 1999 [36]
	87.8	2 a 3	0.21	422.3	61	C/T vs T ‡	Junod 2001 [34]

Tabla 5.1: Propiedades de YBa₂Cu₃O_{7-x} para distintos valores de x, y fuente que reporta los datos. * Renker [106] reporta la curva de PDOS. ** Los autores no determinan el dopaje. † Proporcionan un listado de los datos. * Los mismos autores reportan $\gamma_e = 3.23$ mJ/mol K² y $\alpha = 0.16$ mJ/mol K³ en 1997. ‡ Dato obtenido directamente de su curva. ‡ Presentan sus curvas para una región limitada de temperaturas.

mantienen el dopaje en $x = 7$ a lo largo de todo el intervalo de temperaturas estudiado. Como resultado de lo anterior, las curvas que publican muestran, entre otras cosas, una transición más aguda (menos redondeada) en T_c , Fig. 4.9. Desafortunadamente sólo presentan sus curvas para regiones muy limitadas de temperatura: C/T vs T , para la zona de la transición de fase $80\text{K} \leq T \leq 100\text{K}$; C/T vs T^2 , para temperaturas muy bajas $2\text{K} \leq T^2 \leq 25\text{K}$; y $[C(B) - C(8 \text{ Tesla})]/T$ vs T , también para T 's bajas, donde B es la magnitud del campo magnético. De esta última curva, la cual reproducimos en la Fig. 4.7, es posible observar el comportamiento cuadrático del calor específico para $B = 0$.

Además de los datos presentados en la Tabla 5.1, nos son útiles los siguientes valores para

YBa₂Cu₃O₇: la velocidad de Fermi en tres dimensiones $v_{F3D} = 1.4 \times 10^7$ cm/s y la correspondiente en 2D $v_{F2D} = 1.0 \times 10^6$ cm/s [34]; la temperatura de Fermi $T_F = 2290$ K [108] ($T_F = 3300$ K según [34]); la energía de Fermi $E_F = 3.16 \times 10^{-20}$ J = 0.197 eV ($E_F = 4.55 \times 10^{-20}$ J = 0.284 eV [34]) la temperatura de condensación (BEC) de un gas ideal de bosones (GIB) $T_0 = 499.2$ K, de la relación $T_0/T_F = 0.218$ [65]; la correspondiente longitud de onda térmica descrita en la Secc. 3.1 $\lambda_0 = 23.575$ Å ($\lambda_0 = 19.66$ Å) para los bosones con una masa $m_B = 2m_e$; la densidad de portadores de superconductividad Ec. (4.3) $n_s = 2 \times 10^{21}$ cm⁻³ [80], o la densidad de pares superconductores $n_{ps} = 1.0 \times 10^{21}$ cm⁻³ [34]; la anisotropía en las masas $(m_c/m_{ab})^{1/2} \approx 5.3$ [46]; el valor de $\Delta_0 = 20$ meV [34] ($\Delta_0 = 15$ meV según [13]); la longitud de coherencia $\xi \approx 15$ Å [34]. Otras relaciones importantes son: la masa molar del YBa₂Cu₃O_{7-x} que va de 664.9 g/mol a 666.2 g/mol dependiendo de la concentración de oxígeno; el volumen molar $V_{mol} = 104.6$ cm³/mol; la masa atómica (en gramos) ≈ 51 g-at (gramos por átomo) [38] y 1 mol = (12 + x)g-at. Por último, calculamos nuestros parámetros $a_1/\lambda_0 = 0.246$ y $\gamma = 1.317$ ($a_1/\lambda_0 = 0.295$ y $\gamma = 0.914$), tomando en cuenta que la constante cristalográfica c_1 [74] no cambia sino hasta la cuarta cifra significativa para los distintos dopajes que analizamos. Así mismo, es importante decir que Junod *et al.* [34] reportan que observan una relación $\Delta_0/E_F = 2/\pi k_F \xi \approx v_{F2D}/v_{F3D} \approx 1/14$, de donde deducen que sólo una pequeña parte de los portadores de superconductividad cerca de la superficie de Fermi se aparean.

5.1. Temperatura crítica: fracción

Recordemos que en la Secc. 3.1, cuando obtenemos la temperatura crítica para un gas de bosones en un sistema de capas, usamos como referencia la temperatura BEC de un gas ideal de bosones en una caja infinita que en el límite termodinámico tiene la misma densidad de partículas que la del gas de bosones entre capas. La temperatura crítica del gas ideal de bosones está dada

por

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar^2 n_B^{2/3}}{m_B k_B \zeta(3/2)^{2/3}}, \quad (5.1)$$

donde utilizamos explícitamente el subíndice B para bosones (la B en k_B es la de Boltzmann).

Usando el valor obtenido en la sección anterior de $T_0 = 499\text{K}$ y los datos experimentales de la temperatura crítica superconductor del cuprato, notamos que cuando los pares tienen una relación de dispersión cuadrática para su movimiento paralelo a los planos, la razón $T_{cexp}/T_0 \approx 0.20$ (0.128), corresponden a una P_0 mayor a 10^4 para $a/\lambda_0 = 0.246$ ($a/\lambda_0 = 0.295$), como se observa en la Fig. 3.4. Mientras que cuando los pares tienen una componente lineal en su relación de dispersión correspondiente a su movimiento paralelo a los planos, $T_{cexp}/T_F \approx 0.040$ (≈ 0.030), valor que no se llega a obtener para la γ requerida, como se ve en la Fig. 3.10. Dichas expresiones fueron deducidas tomando el gas de bosones formado por todos los electrones apareables en la esfera de Fermi, cuya densidad es n_{3D} . Procurando concordancia con lo observado experimentalmente, es necesario considerar que únicamente una fracción f de esos electrones participan en el gas de pares de Cooper (bosones), tal que $n_{Bf} = fn_{3D}/2$. Recordemos también que sólo una parte N_{0f} de esos pares forman el condensado, mientras que los restantes electrones apareables -pero que no se aparearon- están en los niveles excitados N_{ef} .

Entonces, la temperatura de una fracción de ese gas de bosones T_{0f} es

$$T_{0f} = \frac{2\pi\hbar^2 n_{Bf}^{2/3}}{m_B k_B \zeta(3/2)^{2/3}} \frac{f^{2/3}}{2^{2/3}} = T_0 f^{2/3}. \quad (5.2)$$

Para $f = 1$, de la Ec. anterior, se recupera el caso en que todos los fermiones apareables participan en el gas de bosones. La longitud de onda térmica correspondiente es $\lambda_{0f} = h/\sqrt{2\pi m_B k_B T_{0f}} = \lambda_0/f^{1/3}$. La generalización para el cociente de la temperatura crítica de una fracción del gas ideal de bosones que se formaría si todos los electrones de un gas con densidad n_{3D} y temperatura de Fermi T_F , se aparearan, dividido entre la temperatura de Fermi del gas de electrones es

$$\frac{T_{0f}}{T_F} = \frac{2\pi f^{2/3}}{(6\pi^2)^{2/3} \zeta(3/2)^{2/3}} = (0.218) f^{2/3}. \quad (5.3)$$

Por otro lado, la energía de Fermi en 3D para los electrones apareables está dada por la Ec. (4.3), de donde despejamos la densidad de acarreadores de superconductividad, obteniendo

$$n_s = \frac{(T_F k_B)^{3/2} (4m_e)^{3/2}}{\hbar^3 3\pi^2}, \quad (5.4)$$

es decir, $n_s = 1.128 \times 10^{27}/m^3$ que es la densidad de electrones en el sistema a $T = T_F$ (ver Fig. 4.5), mientras que de la Ec. (5.1) sabemos que $n_B = 1.994 \times 10^{26}/m^3$ es el número de bosones de un gas ideal a $T = T_0 = 499.2\text{K}$, el cual es un orden de magnitud menor que n_s .

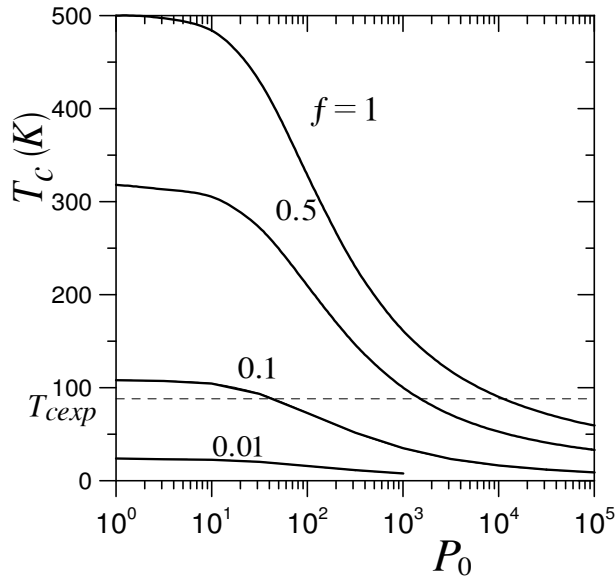


Figura 5.2: Temperatura crítica como función de P_0 para algunos valores de f , para pares con relación de dispersión cuadrática. La línea punteada es la T_c experimental del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$.

Introduciendo la fracción f en la Ec. (3.19) para pares de electrones con componente cuadrática en su relación de dispersión correspondiente a su movimiento paralelo a los planos, obtenemos

$$-1 = \frac{1}{f} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\gamma a^3} \frac{1}{\tilde{\beta}_c} \int_0^\infty adk_z \ln\{1 - \exp[-\beta_c(\epsilon_{k_z} - \mu_0)]\}, \quad (5.5)$$

que es la expresión implícita a partir de la cual obtenemos la temperatura crítica, $\tilde{\beta}_c \equiv \beta_c k_B T_0$.

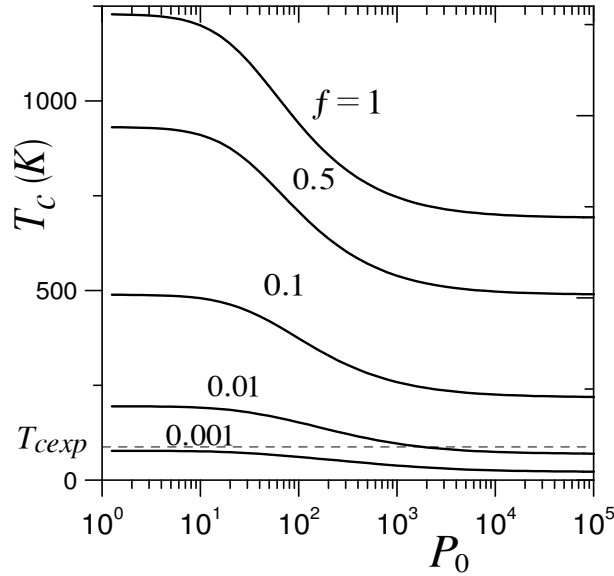


Figura 5.3: Temperatura crítica como función de P_0 para algunos valores de f para pares con relación de dispersión lineal. La línea punteada es la T_c experimental del cuprato YBa₂Cu₃O_{6.92}.

En el caso en el que consideramos a los pares de Cooper con una relación de dispersión lineal paralela a los planos, tomamos la Ec. (3.47) y llegamos a que

$$1 = \frac{1}{f} 3.9864 \left(\frac{\gamma T_0}{T_F} \right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta_c)^2} \int_0^\infty adk_z g_2 \left\{ \exp[-k_B T_F \beta_c \gamma (T_0/T_F) (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_{0z})] \right\}. \quad (5.6)$$

con $\bar{\epsilon}_{k_z} \equiv \epsilon_{k_z}/(\hbar^2/2ma^2)$, y $\bar{\mu}_{0z} \equiv \mu_{0z}/(\hbar^2/2ma^2)$. En las Figs. 5.2 y 5.3 mostramos la temperatura crítica como función del parámetro P_0 para algunos valores de f , para pares con relación de dispersión cuadrática y lineal paralela a los planos, respectivamente.

Como podemos observar de la Fig. 5.2, para pares con relación de dispersión cuadrática, prácticamente para todos los valores de f entre 0.1 y 1.0 existe una P_0 con la que se reproduce la T_c experimental, mientras que para pares con relación de dispersión lineal paralela a los planos, Fig. 5.3, sólo puede hacerse en un intervalo estrecho de valores de f , del orden de centésimas. De este modo obtenemos una familia de parejas de valores (f, P_0) que cumplen con $T_c = T_{cexp}$, donde el valor óptimo de la pareja de valores se determina con la altura del salto en el calor específico en el punto de la transición.

5.2. Calor específico electrónico

Consideramos que el calor específico electrónico es la suma de dos contribuciones: el calor específico de los pares de Cooper, considerados como bosones, y el gas de fermiones constituido por los electrones que pudieron aparearse pero no lo hicieron. Para el primero se toma una fracción f de la mitad de los electrones apareables y para el segundo se toman los restantes $1 - f/2$. Entonces, tanto el salto en $\Delta C/T_c$ en T_c , como las constantes γ_e (componente lineal en T del calor específico electrónico) y α (componente cuadrática en T), se deben de poder determinar con nuestras ecuaciones de calor específico electrónico, ya que son características inherentes al mismo.

5.2.1. Calor específico de los pares de Cooper

Aquí calculamos el calor específico de los pares de Cooper, con las expresiones obtenidas en el Cap. 3 para el gas de bosones dentro de una estructura de multicapas periódicas.

Relación de dispersión cuadrática paralela a los planos

Introduciendo la fracción f en las Ecs. (3.34) y (3.27) para el calor específico y la derivada del potencial químico, en el caso de que los pares tengan una relación de dispersión cuadrática paralela a los planos, y después de un poco de álgebra se llega a que

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{f} \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \frac{2}{\tilde{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} adk_z g_2 \{ \exp[-\tilde{\beta}(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})] \} \\ &\quad - \frac{1}{f} \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \int_{-\infty}^{\infty} adk_z \ln \{ 1 - \exp[-\tilde{\beta}(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})] \} \{ 2\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu} - \tilde{\mu}_0 + T \frac{d\tilde{\mu}}{dT} \} \\ &\quad + \frac{1}{f} \frac{2(\gamma/\pi)^{1/2}}{\zeta(3/2)} \tilde{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} adk_z \frac{(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu}_0) \{ (\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu}) + T \frac{d\tilde{\mu}}{dT} \}}{\exp\{ \tilde{\beta}(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu}) \} - 1}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

y

$$T \frac{d\tilde{\mu}}{dT} = - \frac{1 + \frac{1}{f} [2(\gamma/\pi)^{1/2} / \zeta(3/2)] \int_0^{\infty} adk_z (\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu}) / \{ \exp[\tilde{\beta}(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})] - 1 \}}{\frac{1}{f^{1/3}} [2(\gamma/\pi)^{1/2} / \zeta(3/2)] \int_0^{\infty} adk_z / \{ \exp[\tilde{\beta}(\tilde{\epsilon}_{k_z} - \tilde{\mu})] - 1 \}}. \quad (5.8)$$

Tomamos los datos de Bessergenev de la Tabla 5.1 para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$, y calculamos el calor específico, el cual graficamos en la Fig. 5.4 con los valores $f = 0.24$ y $P_0 = 316$, que reproducen la temperatura crítica y la altura del salto experimentales.

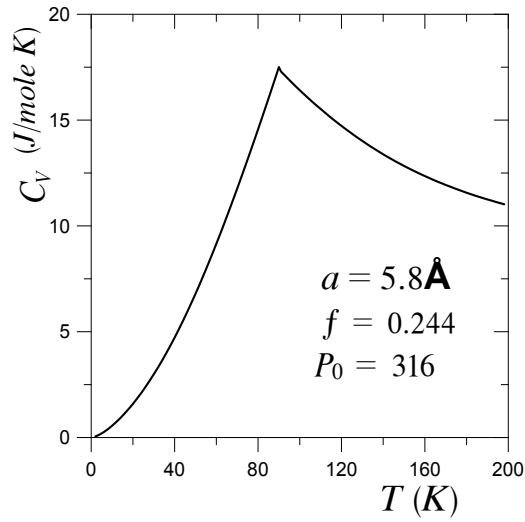


Figura 5.4: Calor específico en función de la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. (5.7). Caso en que los pares tienen una relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.

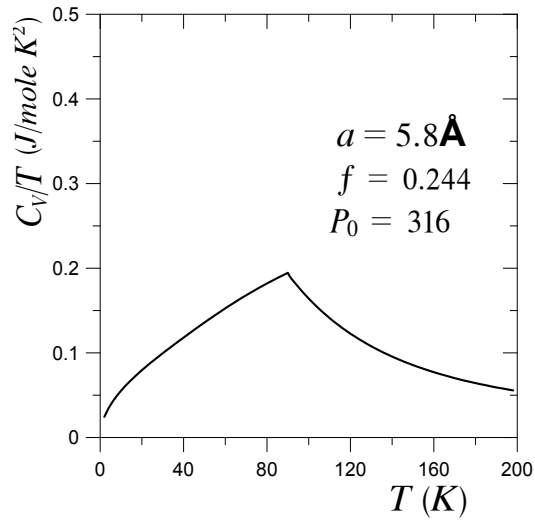


Figura 5.5: Calor específico sobre la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. (5.7). Caso en que los pares tienen una relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.

De la Fig. 5.4 se observa que el calor específico en la transición tiene la forma de una bajada y no un salto, como es de esperarse cuando se utiliza una relación de dispersión cuadrática paralela a los planos, como se indica en [47]. Más aún, de la Fig. 5.5 no es posible determinar la componente cuadrática en T del calor específico electrónico, al contrario de lo que ocurre cuando se utiliza la relación de dispersión lineal, como veremos mas adelante.

Relación de dispersión lineal paralela a los planos

Para este caso partimos de las correspondientes Ecs. (3.55) y (3.48), e introducimos la fracción f para llegar a

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{2}{f}(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{3/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_2 \{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma(T_0/T_F)(\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\epsilon}_0 - \bar{\mu})] \} \\
&\quad \times [2\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\epsilon}_0 + \bar{\epsilon}_0 - \bar{\mu} + T \frac{d\bar{\mu}}{dT}] \\
&\quad - \frac{1}{f}(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{5/2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\epsilon}_0) \ln \{ 1 - \exp[-k_B T_F \beta \gamma(T_0/T_F)(\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{\epsilon}_0 - \bar{\mu})] \} \\
&\quad \times [\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{\epsilon}_0 - \bar{\mu} + T \frac{d\bar{\mu}}{dT}] \\
&\quad + \frac{6}{f}(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z g_3 \{ \exp[-k_B T_F \beta \gamma(T_0/T_F)(\bar{\epsilon}_{K_z} + \bar{\epsilon}_0 - \bar{\mu})] \}.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

y

$$T \frac{d\bar{\mu}}{dT} = \frac{2k_B T_F \beta - \frac{1}{f}(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z \ln \{ 1 - \exp[-k_B T_F \beta \gamma(T_0/T_F)(\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu} + \bar{\epsilon}_0)] \} (\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu} + \bar{\epsilon}_0)}{\frac{1}{f}(3.9864) \left(\frac{\gamma T_0}{T_F}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} adK_z \ln \{ 1 - \exp[-k_B T_F \beta \gamma(T_0/T_F)(\bar{\epsilon}_{K_z} - \bar{\mu} + \bar{\epsilon}_0)] \}}. \tag{5.10}$$

En la Fig. 5.6 mostramos el calor específico a volumen constante como función de la temperatura para los pares de Cooper cuyas energías como función del momento del par es lineal, donde se ha podido reproducir la altura del salto experimental tomando los valores $f = 0.018$ y $P_0 = 3 \times 10^6$.

Nótese que en el caso de que los pares de Cooper tengan una componente lineal en su relación de dispersión, la curva de C_V en función de la temperatura presenta un salto en T_c , y la de C_V/T vs T es una recta para $T < T_c$, como se ve en la Fig. 5.7, indicando que el calor específico es un polinomio de orden 2 en esa región, αT^2 , tal como se observa experimentalmente [34]. Éste comportamiento es el mismo que discutimos en la Sec. 4.4.2, correspondiente al término del calor específico electrónico *superconductor*, donde nuestro cálculo arroja un valor de $\alpha = 3.7$ mJ/mol

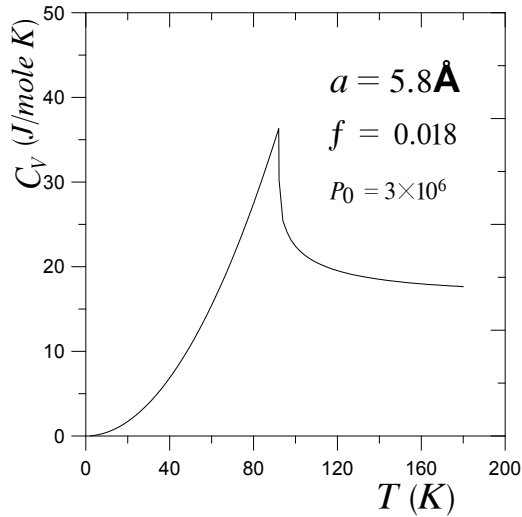


Figura 5.6: Calor específico en función de la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. 5.9. Caso en que los pares tienen una relación de dispersión lineal paralela a los planos.

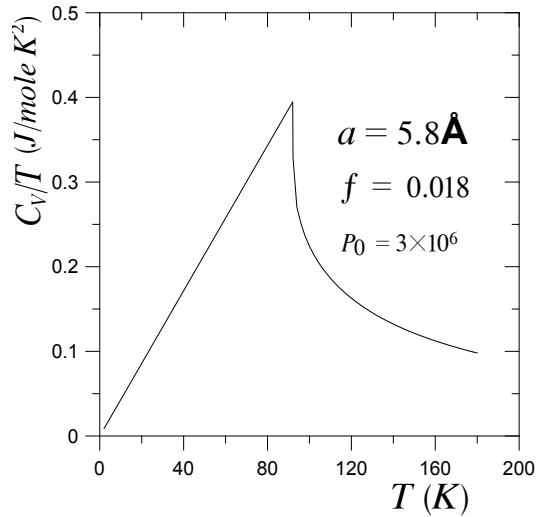


Figura 5.7: Calor específico sobre la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. 5.9. Caso en que los pares tienen una relación de dispersión lineal paralela a los planos.

K^3 , en concordancia con lo que se observa de las curvas publicadas por [44] para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$, como mostramos en la Tabla 5.1.

Es importante resaltar que con ambas relaciones de dispersión, el porcentaje de electrones que se aparean y participan en la superconductividad está entre el 1 y el 3% en concordancia con lo que se reporta en [34] y que contrasta con el 90 y el 95% indicado en [89].

5.2.2. Calor específico de fermiones no apareados

El calor específico de los electrones (o huecos) - apareables - no apareados lo obtenemos de las relaciones para un gas de fermiones en un sistema de capas desarrolladas en la Sec. 3.2. Tomando

la fracción correspondiente $(1 - f/2)$ para la Ec. (3.77) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} = & 4 \frac{1}{(1 - f/2)} \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f_2 \{ \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu_{fer})] \} \\ & + 2 \frac{1}{(1 - f/2)} \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu_{fer})] \} \{ 2\epsilon_{k_z} - \mu_{fer} + T \frac{\partial \mu_{fer}}{\partial T} \} \\ & + 2 \frac{1}{(1 - f/2)} \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \beta \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\epsilon_{k_z} \{ \epsilon_{k_z} - \mu_{fer} + T \frac{\partial \mu_{fer}}{\partial T} \}}{\exp[\beta(\epsilon_{k_z} - \mu_{fer})] + 1}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

donde μ_{fer} es el potencial químico de los electrones no apareados.

Para calcular C_V , es necesario primero obtener el potencial químico. Tomamos la Ec. (3.67)

$$1 = \frac{1}{(1 - f/2)} \frac{L^3}{N} \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \{ 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{k_z} - \mu_{fer})] \}, \quad (5.12)$$

de donde μ_{fer} se obtiene con métodos numéricos como en los casos anteriores.

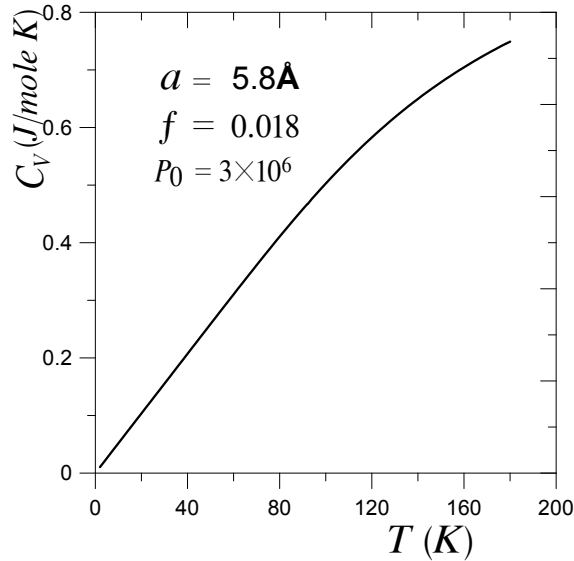


Figura 5.8: Calor específico en función de T para los electrones desapareados.

En la Fig. 5.8 mostramos la curva del calor específico en función de la temperatura del gas de electrones no apareados para los valores de $f = 0.018$ y $P_0 = 3 \times 10^3$ que se obtuvieron en la sección anterior para los pares con relación de dispersión lineal paralela a los planos. Como era de esperarse, el comportamiento de C_V en función de la temperatura es lineal hasta un valor de T por

arriba de T_c , que es lo que en la Sec. 4.4.2 se reportó como el calor específico electrónico *normal*. Esta componente contribuye a lo más con una milésima parte del calor específico total, dando un valor de $\gamma_e = 5.1 \text{ mJ/mol K}^2$.

5.2.3. Calor específico electrónico total

El calor específico electrónico total es la suma de las dos contribuciones anteriores, $C_e = C_{en} + C_{es}$ [54], donde C_{en} es la componente normal y C_{es} es la componente superconductor. Basados en nuestro modelo este calor específico tiene la forma

$$C_e = C_{en} + C_{es} = \gamma_e T + \alpha T^2. \quad (5.13)$$

Encontramos que el calor específico normal, correspondiente a los electrones no apareados, es dos ordenes de magnitud menor al de los pares de Cooper, como lo mostramos en la Fig. 5.7, donde se puede apreciar esta componente (línea discontinua) con $\gamma_e = 5.1 \text{ mJ/mol K}^2$.

Son varias las observaciones que hay que hacer en este punto sobre el calor específico electrónico. Primero, que el *giro hacia arriba* presente a T 's muy bajas en el calor específico experimental NO se reproduce si se toma un modelo en el que los electrones (tanto los apareados como los desapareados) no tienen interacción entre ellos, y en el que tampoco se toman en cuenta las componentes magnéticas internas ni la influencia de campos magnéticos externos. Segundo, que existe una componente lineal del calor específico electrónico, correspondiente a la componente normal [54] cuyo valor de γ_e que obtenemos, aunque muy pequeño, NO es igual a cero, en concordancia con lo que reportan Loram *et al.* [109] para un dopaje $x > 0.6$. Aunque en la Ref. [39] se sugiere que el hecho de que $\gamma_e \neq 0$ se debe exclusivamente a la presencia de huecos, en esta versión de nuestro modelo no podemos discernir sobre el tipo de fermiones que lo ocasionan. Tercero, encontramos una componente cuadrática del calor específico electrónico, correspondiente a la componente superconductor, en completo acuerdo con los reportes experimentales [34,36,37].

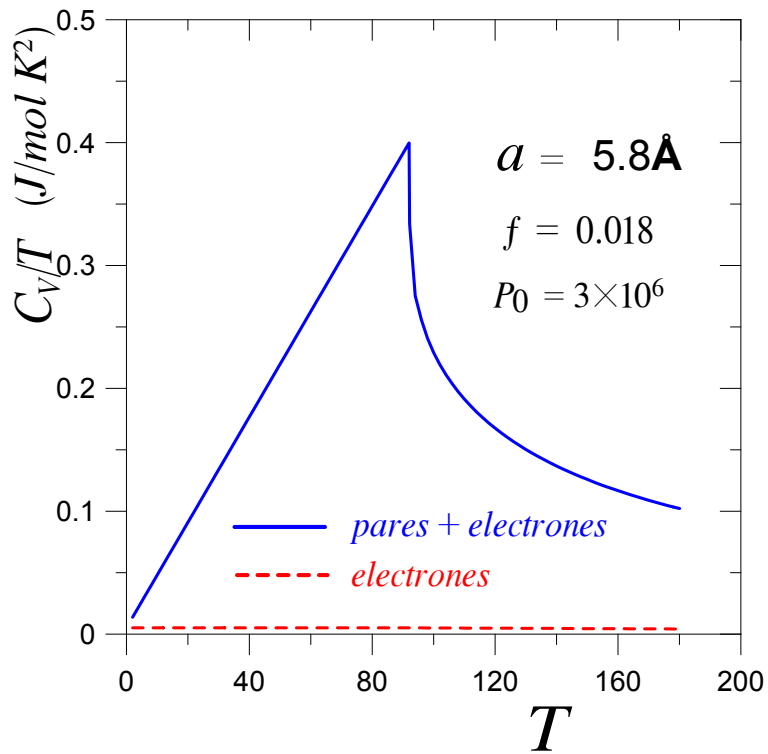


Figura 5.9: Suma del calor específico sobre T de los pares de Cooper más los electrones desapareados, para pares con una relación de dispersión lineal paralela a los planos (línea continua). La línea discontinua es la componente de los electrones desapareados.

Y por último, que nuestros cálculos muestran que el porcentaje de participación del calor específico electrónico total constituye entre el 40 y el 50 % de la parte fonónica (o sea, aproximadamente el 30 % del total), NO el 1 – 2 % que se indica en [92] y [96]. Inclusive autores como Fisher *et al.* [54] sugieren que el calor específico electrónico constituye un *pequeño porcentaje* del total, pero ellos mismos presentan los argumentos en contra de su dicho.

5.3. Calor específico de la red

En esta sección calculamos el calor específico debido a la red, o sea de los fonones, ya que como dijimos con anterioridad éste representa la mayor contribución para el calor específico del

cuprato. De los varios modelos que describen el calor específico de las redes cristalinas revisamos dos opciones: el modelo de Debye, y el obtenido con los resultados de la densidad de estados fonónicos a través de la dispersión inelástica de neutrones, y comparamos ambos resultados.

5.3.1. Calor específico de los fonones

La energía total del cristal se deduce a partir del número de modos normales de vibración de la red $G(\omega)d\omega$ contenidos en el intervalo $d\omega$ y con frecuencia ω . $G(\omega)$ es conocida como la densidad de estados fonónicos de la red (PDOS).

Se toma la energía $\hbar\omega$ de un modo de frecuencia ω , y se considera que el cristal es lo suficientemente grande como para tomar una integral en lugar de una suma sobre todos los estados, la energía interna de las vibraciones de la red está dada por [95]

$$U = \int \frac{\hbar\omega G(\omega)d\omega}{(\exp[\hbar\omega/k_B T] - 1)}. \quad (5.14)$$

A partir de la expresión anterior se puede obtener el calor específico de la red C_l derivando la energía interna con respecto a la temperatura, de modo que

$$C_l = k_B \int \frac{(\hbar\omega/k_B T)^2 \exp[\hbar\omega/k_B T] G(\omega)d\omega}{(\exp[\hbar\omega/k_B T] - 1)^2}. \quad (5.15)$$

Usando la expresión general (5.15) se deriva el calor específico de la red para distintos modelos a través de la PDOS. En este trabajo analizamos dos posibilidades, la del modelo de Debye y el uso del espectro fonónico obtenido vía la dispersión inelástica de neutrones (INS por sus siglas en inglés).

5.3.2. Modelo de Debye

En el modelo de Debye se considera que el sólido es isotrópico, es decir, es idéntico en cualquiera de las tres direcciones cristalográficas. El número de modos con vector de propa-

gación menor o igual a k es igual al volumen de una esfera de radio k dividido por el volumen de cada modo $(2\pi/L)^3$, i.e., $(4\pi/3)k^3/(2\pi/L)^3$. Por lo tanto, el número de total de modos con vector de propagación inferior a k , dividido por unidad de volumen, es $k^3/2\pi^2$. Entonces, el número de modos dentro de un cascarón de ancho dk alrededor del vector de propagación k es $\omega(k)dk = d(k^3/2\pi^2) = (3k^2/2\pi^2)dk$. Por otro lado, el número de estados con frecuencias entre ω y $\omega + d\omega$ está dado por $G(\omega)d\omega = \omega(k)(dk/d\omega)d\omega$, de donde se obtiene $G(\omega) = 3k^2/2\pi^2v_0 = 3\omega^2/2\pi^2v_0^3$, donde v_0 es a velocidad del sonido en la red y se ha supuesto que es la misma en cualquier dirección de propagación, ya sea longitudinal o transversal. También se supone que hay una frecuencia límite que puede alcanzar la vibración de los fonones de la red, dada por $\omega_m = 2v_0/a_1$ (a_1 la constante cristalográfica). Entonces se obtiene que la energía interna para el sólido de Debye es

$$U = \frac{3k_B^4 T^4}{2\pi^2 v_0^3 \hbar^3} s_{cel} \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{(\exp[x] - 1)}, \quad (5.16)$$

donde $x \equiv \hbar\omega/k_B T$, $x_m \equiv \hbar\omega_m/k_B T$, y $\omega_m \equiv v_0(6\pi^2 N)^{1/3}$, con $3N$ el número total de modos de vibración y s_{cel} el número de átomos por celda unitaria [85]. De ahí se define la temperatura de Debye como $\Theta_D \equiv \hbar\omega_m/k_B$ y es característica para cada sólido. El calor específico a volumen constante se obtiene derivando la energía interna (5.16) con respecto a la temperatura, tal que

$$\frac{C_V}{Nk_B} = 9s_{cel} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 \exp[x] dx}{(\exp[x] - 1)^2}, \quad (5.17)$$

A bajas temperaturas se recupera la forma T^3 que se observa para el calor específico de los sólidos, mientras que cuando $T \gg \Theta_D$ tiende al valor de Dulong-Petit $C = 3R/\text{mol}$, con $R = 8.31 \text{ J/mol K}$ la constante universal de los gases.

Cuando se trata de describir cristales monoatómicos el modelo de Debye es bueno, como se ha mostrado para algunos superconductores convencionales como el Al [85], pero para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ con $s_{cel} = 13$ y $\Theta_D = 430\text{K}$ en general no se obtienen buenos resultados, como se observa en la Fig. 5.10, donde graficamos el calor específico reportado por Bessergenev para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ [44]

y varias curvas de C_V en función de T para distintos valores de Θ_D usando la Ec. (5.17). Se puede observar que aun tomando una temperatura de Debye mayor, que se acerque un poco más a lo reportado experimentalmente en la zona de la transición, el modelo de Debye no es suficiente para describir ni la curvatura de C_V por debajo de T_c ni la altura de C_V en T_c . Sin embargo, con este modelo (así como con otros modelos) sí se reproduce el comportamiento T^3 observado [34] para $T < 5K$. Como comentamos en la Sec. 4.4.2, en la literatura hay una serie de intentos para reproducir el calor específico de la red, entre otros, variando Θ_D con respecto a T a lo largo del intervalo analizado [40].

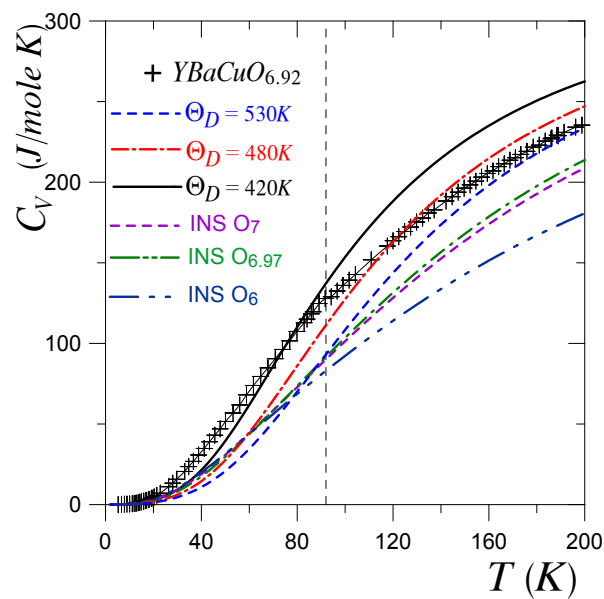


Figura 5.10: Calor específico de la red para $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ utilizando el modelo de Debye para tres temperaturas, y la dispersión inelástica de neutrones (INS) para tres dopajes x . Las cruces son valores experimentales de Bessergenev para $YBa_2Cu_3O_{6.92}$ [44].

5.3.3. Dispersión inelástica de neutrones

Una manera alternativa y confiable de obtener la densidad de estados fonónica $G(\omega)$ es la de recurrir al espectro de energías reportado por los experimentos de dispersión inelástica de neutrones

(INS) [106] para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ con distintos dopajes, suponiendo que dicho espectro contiene toda la información sobre los fonones de la red, incluida la anarmonicidad. Por el lado de las teorías, ha habido esfuerzos por obtener $G(\omega)$ a partir de las curvas del calor específico total, ya sea por medio de la obtención de los principales momentos de la red [110] o usando métodos de inversión [111].

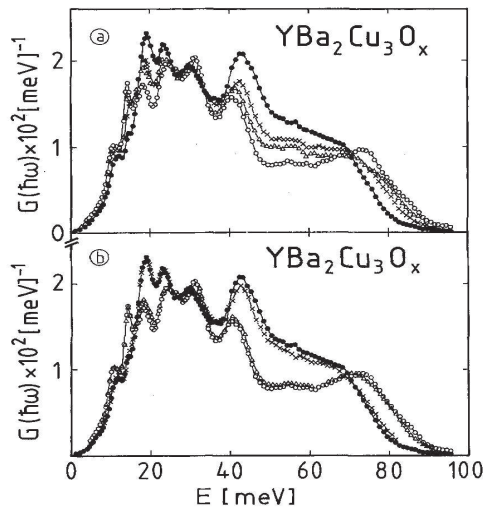


Figura 5.11: Espectro fonónico de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ para diferentes concentraciones de oxígeno. Se comienza con $x = 6.97$ (puntos) y se termina con $x = 6.07$ (círculos abiertos). Las concentraciones intermedias son: a) $x = 6.53$ (cruces) y $x = 6.40$ (triángulos), b) $x = 6.81$ (cruces) y $x = 6.16$ (triángulos). Figura tomada de Ref. [106].

Para obtener el espectro fonónico Renker *et al.* utilizan como referencia la PDOS para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ con una concentración de oxígeno cercana a 6, que lo hace no superconductor [106]. Dicho experimento fue realizado a temperaturas de 6 K y 300 K, con dos haces de neutrones incidentes con energías de 32 meV y 128 meV, y normalizando al peso total del espectro. Aquí tomamos las curvas de $G(\hbar\omega)$ en función de la energía E reportadas [106] para los cupratos $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.97}$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ e $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$, y que mostramos en la Fig. 5.11.

Después de digitalizarlas, las introducimos en la Ec. (5.15). Cuidando el manejo de las unidades, hacemos la integración con métodos numéricos (regla del trapecio) del integrando $I(T) \equiv (\hbar\omega/k_B T)^2$

$\exp[\hbar\omega/k_B T]G(\hbar\omega)/(\exp[\hbar\omega/k_B T] - 1)^2$ como función de la temperatura. En la Fig. 5.12 mostramos un ejemplo del comportamiento de la función $I(T)$ para $T = 100$ K.

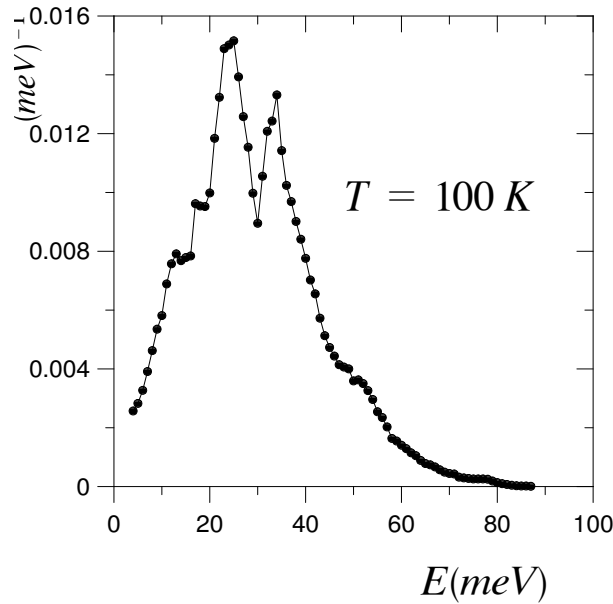


Figura 5.12: Forma de la función $I(T)$ como función de la energía para $T = 100$ K.

Al obtener el calor específico de la red encontramos que en el punto de la transición T_c tiene una variación menor al 1 con respecto al uso de dos muestras con concentración de oxígeno x diferente pero cercanas, como mostramos en la Fig. 5.10. Sin embargo, el calor específico de la muestra de referencia $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ tiene una diferencia mayor con respecto a las contrapartes superconductoras. En la Fig. 5.13 presentamos C_V/T para los mismos valores de Θ_D y de dopaje de INS que utilizamos para la Fig. 5.10, donde se puede observar que las diferencias entre las curvas teóricas y la experimental son más notables.

Contribución Anarmónica

Cuando se quiere considerar los efectos anarmónicos en el calor específico, dentro del marco de un modelo como el de Debye, es necesario agregar al Hamiltoniano los términos del potencial de la red más allá del cuadrático, principalmente del tipo cúbico y cuártico, y resolver las ecua-

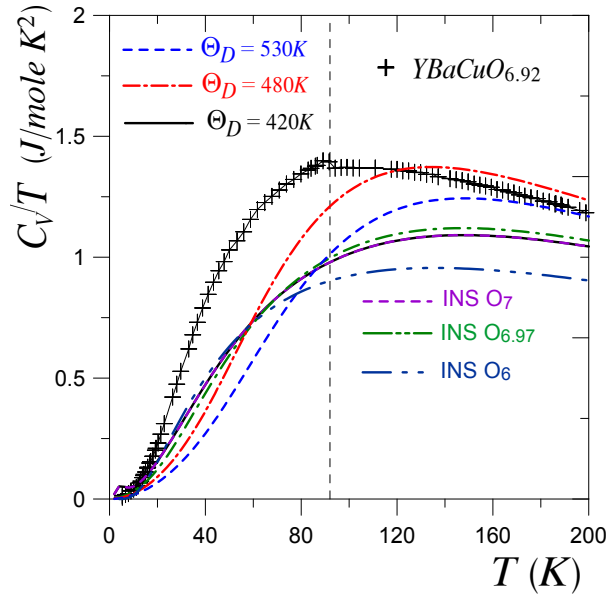


Figura 5.13: Calor específico fonónico sobre la temperatura para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ utilizando el modelo de Debye para tres temperaturas, y la dispersión inelástica de neutrones (INS) para tres dopajes x . Las cruces son valores experimentales de Bessergenev para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ [44].

ciones a partir de la función de partición correspondiente. Al final lo que se debe obtener es una contribución adicional al calor específico (5.15). Sin embargo, varios autores [44, 110] indican que el término de la anarmonicidad no excede del 10 al 15 % de la componente electrónica en el intervalo de temperaturas de 0 K hasta 300 K. De cualquier forma, al utilizar el espectro fonónico de la dispersión inelástica de neutrones, la contribución anarmónica debiera estar incluida.

5.4. Calor específico total del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$

Con base en los datos experimentales de temperatura crítica y salto en el calor específico para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$, en la Sec. 5.1 obtuvimos: $P_0 = 316$ y $f = 0.24$ para el caso de pares con una relación de dispersión cuadrática paralela a los planos, y $P_0 = 3 \times 10^6$ y $f = 0.018$ para el caso de una relación de dispersión lineal paralela a los planos. De esta manera pudimos calcular los calores

específicos correspondiente a las componentes electrónicas normal y superconductoras.

Desafortunadamente no contamos con la dispersión inelástica de neutrones para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ para calcular su componente de la red del calor específico. Sin embargo, sí lo tenemos para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.97}$, que presenta una ligera variación en el dopaje con respecto al anterior. Considerando que dicha variación nos llevaría sólo a pequeñas diferencias en el cálculo del calor específico de la red, tal como se puede constatar en la Fig. 5.10, tomamos el calor específico de la red como igual al del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ y lo usamos para sumarlo a las componentes electrónicas. Nótese que aunque tenemos la curva de PDOS para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.97}$, los datos de temperatura crítica y salto en el calor específico están referidos [92] a los valores del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ que no es superconductor, lo cual introduce una indefinición tanto en el calor específico de la red como en el electrónico.

Sumando las tres contribuciones (red, electrónica normal y superconductoras) obtenemos el calor específico total -salvo las componentes magnéticas e hiperfinas- el cual graficamos en las Figs. 5.14 y 5.15 para ambas relaciones de dispersión. Agregamos el calor específico reportado experimentalmente por Bessergenev *et al.* en 1995. Aunque Junod *et al.* reportaron sus datos experimentales del calor específico total más recientemente, en el 2001, desafortunadamente no los reportan completos, únicamente en un intervalo de 80 a 100 K. Las curvas de C_V/T contra T para los mismos valores de los parámetros las presentamos en las Figs. 5.16 y 5.17.

Se observa que la curva del calor específico total que obtenemos utilizando la relación de dispersión lineal para los pares de Cooper reproduce la altura y el salto del calor específico total en T_c . La forma de la curvatura tiene diferencias muy pequeñas, las cuales son más notorias al graficar C_V/T . La diferencia entre el valor experimental y el calculado con nuestro modelo se hace más notoria para temperaturas alrededor de los 40 K, donde la contribución de la red al C_V quizá merezca un análisis más preciso.

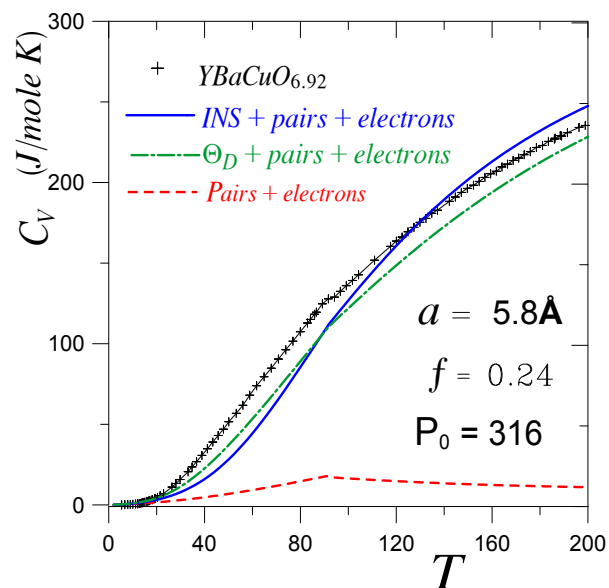


Figura 5.14: Calor específico total para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.

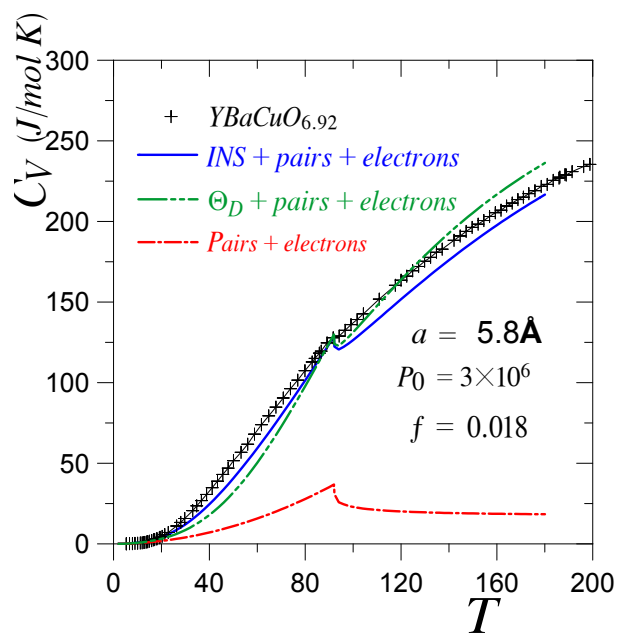


Figura 5.15: Calor específico total para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión lineal paralela a los planos.

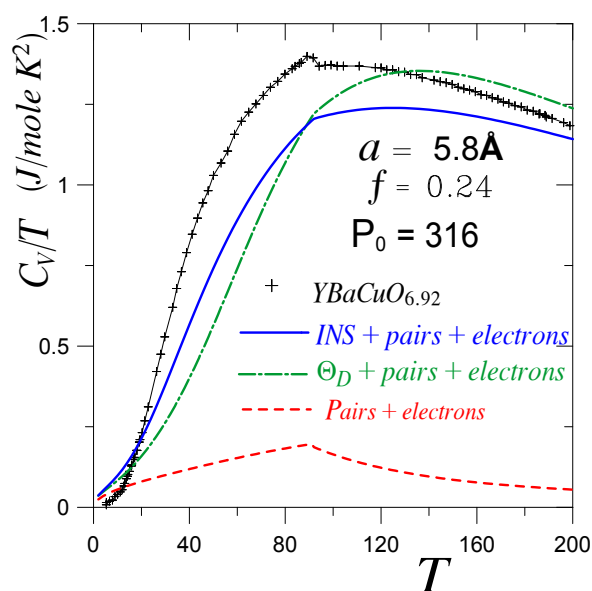


Figura 5.16: Calor específico total sobre la temperatura T , para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.

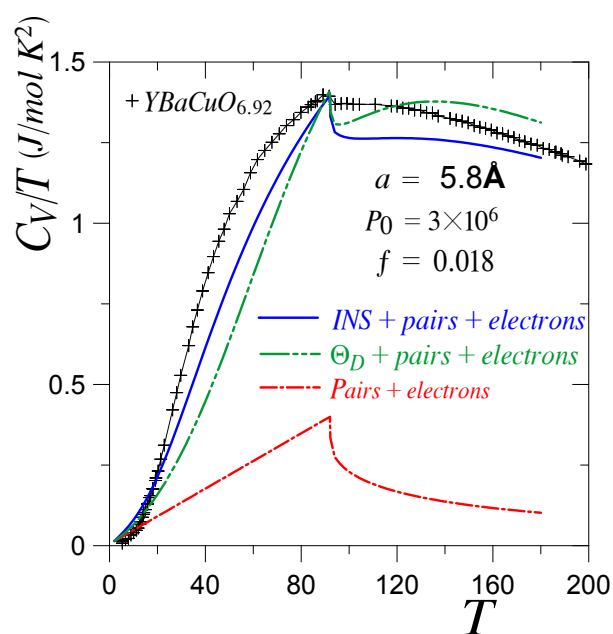


Figura 5.17: Calor específico total sobre la temperatura T para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión lineal paralela a los planos.

Capítulo 6

Conclusiones

Desarrollamos la física de gases ideales de fermiones y bosones inmersos en estructuras periódicas. Las estructuras periódicas fueron modeladas usando potenciales de Kronig-Penney en el límite en que las barreras cuadradas del potencial se vuelven deltas de Dirac, para restringir el movimiento de las partículas en una (planos) o dos (tubos) direcciones. Dimos las expresiones para calcular todas las propiedades termodinámicas de bosones y fermiones sin interacciones en estructuras planares, como función de la separación entre los planos y de su impenetrabilidad (intensidad de las deltas). Pusimos mayor atención en el calor específico ya que: a) nos permite identificar las transiciones de fase del sistema cuántico y b) es la propiedad termodinámica que regularmente miden los experimentales en los sistemas reales, lo cual nos proporcionó datos de referencia para realizar nuestros cálculos.

Para el gas de bosones se encontró que la temperatura crítica de condensación Bose-Einstein es muy sensible a la presencia de los planos. Como función de la impenetrabilidad de los planos (en nuestros cálculos representada por la variable adimensional P_0), la temperatura crítica disminuyó a partir de T_0 que es la temperatura crítica del gas ideal de bosones sin planos, hasta cero, conforme P_0 variaba de cero hasta valores de 10^6 , dejando la separación entre planos fija. Como función de la separación entre planos, dejando fija la impenetrabilidad, la temperatura crítica disminuyó desde T_0

hasta un valor mínimo que depende de la P_0 , y luego volvió a subir hasta T_0 , conforme la separación variaba de cero a infinito. Además de la condensación Bose-Einstein, el sistema manifiesta una transición espacial de 3D a 2D a una temperatura característica, conforme los planos se vuelven más impenetrables.

Los resultados para bosones entre capas pueden ser utilizados para modelar sistemas tales como películas de helio cuatro, excitones en semiconductores con multicapas, etc., pero aquí los usamos para reproducir las propiedades termodinámicas de los superconductores de alta temperatura crítica, en particular de los cupratos, con base en la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad.

Extendimos la versión más básica de la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad para incluir planos entre los gases bosónicos y fermiónicos que definen a la teoría. Un resultado inmediato y contundente es que la temperatura crítica, parámetro que tradicionalmente nos ha guiado para determinar predictibilidad de la teoría Bosón-Fermión y realizar sus mejoras, pasa a ser una variable dependiente notoriamente de la anisotropía del material a través de impenetrabilidad de los planos y de la separación entre ellos. Más aún, extendimos la teoría para calcular todas las demás propiedades termodinámicas del sistema (energía interna, entropía, calor específico, etc.), sin incluir la influencia de campos magnéticos externos. En particular, se calculó el calor específico de los cupratos con el detalle necesario para identificar las contribuciones de cada una de las componentes (bosónica, fermiónica y de la red).

Usamos la teoría Bosón-Fermión extendida para calcular el calor específico de uno de los cupratos más estudiados desde su descubrimiento, el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. Las características de dicho cuprato son: una temperatura crítica $T_c = 92.2 \text{ K}$; un salto $\Delta C/T_c = (C_s - C_n)/T_c = 20 \text{ mJ/mol K}^2$; para temperaturas menores que T_c el calor específico tiene una componente lineal $\gamma_e T$ más una cuadrática αT^2 , que corresponden a la contribución electrónica. La contribución de la red es proporcional a T^3 para $T < 5 \text{ K}$. También para temperaturas menores a 5 K, el calor específico total se separa del comportamiento lineal y muestra un aumento que en la literatura denominan *giro hacia*

arriba (“up turn”). Este aumento del calor específico a temperaturas cercanas al cero absoluto es asociado a contribuciones hiperfinas y magnéticas, las cuales no consideramos en nuestro modelo.

El cuprato fue modelado como una estructura de capas entre las cuales los pares de Cooper (ya sean partículas o huecos) conviven con los electrones (o huecos), con movilidad principal en las direcciones paralelas a las capas. Es decir, los planos limítrofes de las capas, generan una anisotropía que restringe el movimiento de los pares en la dirección perpendicular a los planos. Por lo tanto la energía de los pares de Cooper se compuso de la energía de su movimiento paralelo a los planos más la energía del movimiento perpendicular a los planos. En su movimiento bidimensional paralelo a los planos, los pares de Cooper tienen una energía proporcional al momento del centro de masa. A manera de comparación, también se realizaron los cálculos suponiendo que los pares tenían una relación de dispersión cuadrática como función de su momento del centro de masa. Para su movimiento perpendicular a los planos, la energía fue calculada usando el límite de potenciales deltas en el modelo de Kronig-Penney, el cual generó las bandas.

Los fermiones (electrones o huecos) se consideraron libres en su movimiento paralelo a los planos, y por lo tanto con una relación de dispersión cuadrática, mientras que en la dirección perpendicular su movimiento también fue modulado por la presencia de los planos restrictivos, y su energía es la misma que la de una partícula dentro del potencial de Kronig-Penney en el límite de deltas.

Los tres parámetros de los que depende nuestro modelo son: la separación a entre los planos, la cual tomamos como la mitad de la celda unitaria; la impenetrabilidad de los planos representada por P_0 ; y la fracción f de portadores de carga que intervienen en la superconducción. De aquí que todas las propiedades termodinámicas del cuprato quedan en términos de los parámetros P_0 y f . Para fijar estos parámetros calculamos la temperatura crítica y la altura del salto en el calor específico en T_c , y los igualamos a los valores experimentales. Con la pareja (P_0, f) determinada, calculamos el resto de la curva del calor específico electrónico.

De manera directa, para temperaturas menores que T_c , obtuvimos un comportamiento lineal como función de T con una $\gamma_e = 5.1 \text{ mJ/mol K}^2$, muy parecida a la reportada en los experimentos más recientes. Esta componente lineal, aunque pequeña, es una confirmación de la existencia de partículas fermiónicas, ya sean electrones o huecos, aun a temperatura cero. La componente cuadrática en la temperatura aparece de manera natural en nuestro modelo, como una consecuencia de la presencia de pares de Cooper bosónicos con una relación de dispersión lineal en una estructura cuasi bidimensional. El coeficiente de T^2 , α , nos da un valor de 3.7 mJ/mol K^3 , que es del orden de lo reportado experimentalmente.

Para hacer una comparación más completa con las curvas reportadas para el C_V , se calculó el calor específico de la red directamente de la densidad de estados fonónica obtenida de la dispersión inelástica de neutrones. Aunque el comportamiento del calor específico de la red calculado sigue de cerca a la curva del calor específico total experimental, las diferencias porcentuales son mayores a aquellas con las que las componentes electrónicas contribuyen. De aquí que la mayor fuente de error en nuestro cálculo del C_V total, respecto al experimental, sea la contribución de la red al calor específico. Sin embargo, con las curvas de calor específico electrónico y el calor específico fonónico reconstruimos naturalmente la altura total del calor específico en el punto de la transición T_c . Otras posibles fuentes de diferencia entre las curvaturas del C_V que reportamos y el experimental, podrían ser el no incluir interacciones entre las partículas que forman el condensado, y el considerar una estructura simple del cascarón de Fermi.

Resaltamos que la teoría Bosón-Fermión de la superconductividad extendida para incluir estructuras periódicas, ha sido capaz de reproducir las características esenciales del calor específico experimental que resultan de la contribución electrónica (incluidos los huecos) tales como: las componentes lineal y cuadrática del calor específico como función de la temperatura, observadas por los experimentales para temperaturas menores que T_c .

Una extensión inmediata del modelo sería diferenciar la contribución de los electrones de la

de los huecos, que nos permitiría avanzar en la descripción de las propiedades de los cupratos como función del dopaje. También, pretendemos extender el modelo Bosón-Fermión a estructuras tubulares para describir a los superconductores cuasi-unidimensionales tales como las sales de Bechgaard.

Apéndice A

Relación de dispersión lineal en $x - y$ y cuadrática en z

En este Apéndice obtenemos la temperatura crítica de condensación Bose-Einstein T_c para un gas de bosones libres con relación de dispersión lineal en el plano $x - y$ (como en la Secc. 3.1.2), pero en el eje z en lugar de utilizar un potencial de KP dejamos a los bosones libres con una relación de dispersión cuadrática. Con la finalidad de poder hacer la debida conexión con los cupratos estamos considerando que los bosones vienen del apareamiento de todos los fermiones del sistema inicial, como es el caso de los pares de Cooper - otro ejemplo sería un potencial delta atractivo entre fermiones. Se ha demostrado [6] que para momentos del centro de masa del par pequeños en el plano $x - y$, i.e., $K_{x,y}/k_F < 1$, se tiene la relación de dispersión, Ec. (3.36)

$$\epsilon_{K_x, K_y} = \epsilon_0 + C_1 (K_x^2 + K_y^2)^{1/2}, \quad (\text{A.1})$$

donde $C_1 = (2/\pi)\hbar v_F$.

Tomando el gran potencial de la Ec. (3.37), y substituyendo las sumatorias por integrales en el

límite termodinámico $\hbar^2/mL^2 \ll k_B T$ tenemos

$$\begin{aligned} \Omega(T, V, \mu) &= k_B T \ln\{1 - e^{-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)}\} - k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp\{-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)\} l}{l} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dK_x \int_{-\infty}^{\infty} dK_y \exp\{-\beta l C_1 (K_x^2 + K_y^2)^{1/2}\} \int_{-\infty}^{\infty} dK_z \exp\{-\beta l \epsilon_{K_z}\}. \end{aligned}$$

Pero ahora $\epsilon_{K_z} = \hbar^2 K_z^2 / 2m$ y por lo tanto $\int_{-\infty}^{\infty} dK_z \exp[-\beta l \epsilon_{K_z}] = \pi^{1/2} / (\beta l \hbar^2 / 2m)^{1/2}$, mientras la integral sobre dK_x y dK_y ya la hicimos en la Sec. 3.1.2 bajo el cambio de variable $\rho^2 = K_x^2 + K_y^2$. Entonces, después de un poco de álgebra

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0 - \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2 (\hbar^2/2m)^{1/2} \beta^{7/2}} g_{7/2} \{\exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\}, \quad (\text{A.2})$$

donde $\Omega_0 = k_B T \ln[1 - \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]]$.

A partir del gran potencial obtenemos la ecuación de número

$$N = N_0 + \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2 (\hbar^2/2m)^{1/2} \beta^{5/2}} g_{5/2} \{\exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\}. \quad (\text{A.3})$$

El potencial químico lo obtenemos de la ecuación anterior, dividiendo ambos lados de la igualdad por N , y considerando que para $T \equiv T_c$, $N_0/N \sim 0$, entonces

$$1 = \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2 (\hbar^2/2m)^{1/2} \beta^{5/2}} g_{5/2} \{\exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\}, \quad (\text{A.4})$$

de donde se obtiene el potencial químico con métodos numéricos.

Introduciendo los equivalentes de L^3/N y C_1 en términos de la energía de Fermi E_{F3D}

$$1 = \frac{2^{5/2} \pi^{3/2} \Gamma(2) (3\pi^2)^{5/3}}{64(2\pi)^2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^{5/2}} g_{5/2}(\exp[-k_B T_F \beta (\epsilon_0 + e_0 - \mu)]). \quad (\text{A.5})$$

En la Fig. A.1 se grafica $\mu'/k_B T_c$ como función de T/T_c , donde $\mu' = \mu - (\epsilon_0 + e_0)$.

Para obtener la temperatura crítica tomamos $\mu' = 0$, entonces

$$1 = \frac{2^{5/2} \pi^{3/2} \Gamma(2) (3\pi^2)^{5/3}}{64(2\pi)^2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^{5/2}} g_{5/2}(1), \quad (\text{A.6})$$

y con $g_{5/2}(1) = \zeta(5/2) = 1.341$ llegamos a que $T_c/T_F = 0.536678$.

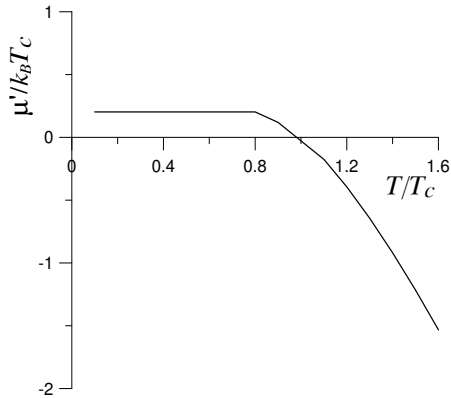


Figura A.1: Potencial químico como función de la temperatura para bosones con una relación de dispersión lineal en el plano x, y y cuadrática en la dirección z .

Observamos, en primer lugar, que la relación para N en términos de $g_{5/2}$ tiene la misma forma que la reportada en [71] para el caso de un gas de bosones libres en tres dimensiones atrapado por dos osciladores armónicos ($d = 3$, $\delta = 2$), y obtenemos una relación para T_c que no involucra ni P ni γ (como se esperaba). En segundo lugar, reproducimos el valor $T_c/T_F = 0.536678$ que observamos cuando $P \rightarrow 0$ del caso de relación de dispersión lineal mas KP obtenido en la Sec. 3.1.2. Este valor es ligeramente diferente del reportado en [65] para el caso $d = 3$, $s = 1$, pero aquél es completamente isotrópico, es decir, la relación de dispersión es lineal en las tres direcciones.

Haciendo uso de las ecuaciones (3.15), obtenemos la energía interna como

$$U = \frac{\epsilon_0 + e_0}{\exp\{-k_B T_F \beta (\epsilon_0 + e_0 - \mu)\} - 1} + \frac{5}{2} \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2 (\hbar^2/2m)^{1/2}} \frac{1}{\beta^{7/2}} g_{7/2} \{\exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\} \\ + \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2 (\hbar^2/2m)^{1/2}} \frac{\epsilon_0}{\beta^{5/2}} g_{5/2} \{\exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\}. \quad (\text{A.7})$$

El primer miembro del lado derecho es $(\epsilon_0 + e_0)N_0$ y el tercero es $(\epsilon_0 + e_0)N_e$, y recordando que $N = N_0 + N_e$, podemos calcular

$$\frac{\{U - (\epsilon_0 + e_0)N\}}{Nk_B T} = \frac{5}{2} \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2 (\hbar^2/2m)^{1/2}} \frac{1}{\beta^{5/2}} g_{7/2} \{\exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)]\}, \quad (\text{A.8})$$

la cual graficamos en la Fig. A.2 como función de T/T_c .

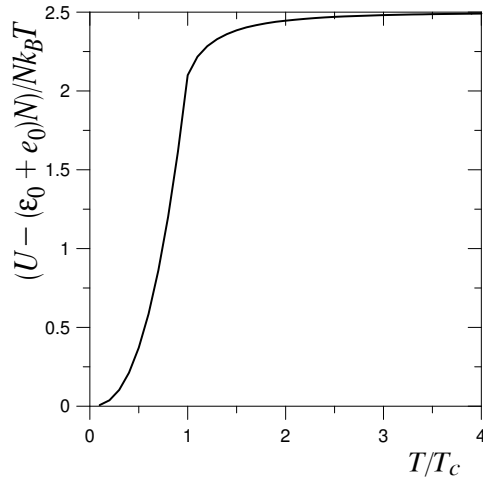


Figura A.2: Energía interna como función de la temperatura para bosones con una relación de dispersión lineal en el plano $x - y$ y cuadrática en la dirección z .

De la Ec. (A.7) obtenemos el calor específico a volumen constante

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{35}{4} \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2(\hbar^2/2m)^{1/2}} \frac{1}{\beta^{5/2}} g_{7/2} \{ \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \} \\ &+ \frac{5}{2} \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2(\hbar^2/2m)^{1/2}} \frac{1}{\beta^{3/2}} g_{5/2} \{ \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \} \left\{ 2\epsilon_0 - \mu + T \frac{d\mu}{dT} \right\} \\ &- \frac{L^3}{N(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2(\hbar^2/2m)^{1/2}} \frac{1}{\beta^{1/2}} g_{3/2} \{ \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \} \left\{ -\epsilon_0 - e_0 + \mu - T \frac{d\mu}{dT} \right\}, \end{aligned}$$

para lo que utilizamos la derivada del potencial químico con respecto a la temperatura, que obtenemos a partir de (A.4)

$$T \frac{d\mu}{dT} = \frac{\frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2(\hbar^2/2m)^{1/2}} g_{3/2} \{ \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \} \{ \mu - \epsilon_0 - e_0 \} - \frac{5}{2} \beta^{3/2}}{\frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(2)\pi^{1/2}}{C_1^2(\hbar^2/2m)^{1/2}} g_{3/2} \{ \exp[-\beta(\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \}}. \quad (\text{A.9})$$

Adimensionalizando

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} = & \frac{35}{4} \frac{2^{5/2} \pi^{3/2} \Gamma(2) (3\pi^2)^{5/3}}{64(2\pi)^2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^{5/2}} g_{7/2} \{ \exp[-k_B T_F \beta (\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \} \\ & + \frac{5}{2} \frac{2^{5/2} \pi^{3/2} \Gamma(2) (3\pi^2)^{5/3}}{64(2\pi)^2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^{3/2}} g_{5/2} \{ \exp[-k_B T_F \beta (\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \} \{ 2\epsilon_0 - 2e_0 - \mu + T \frac{d\mu}{dT} \} \\ & - \frac{2^{5/2} \pi^{3/2} \Gamma(2) (3\pi^2)^{5/3}}{64(2\pi)^2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^{1/2}} g_{3/2} \{ \exp[-k_B T_F \beta (\epsilon_0 + e_0 - \mu)] \} \{ -\epsilon_0 - e_0 + \mu - T \frac{d\mu}{dT} \}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

La Eq. (A.10) en la región de $T < T_c$, donde $\mu = \epsilon_0$, tiene la forma

$$\begin{aligned} \frac{C_{V<}}{Nk_B} = & \frac{35}{4} \frac{2^{5/2} \pi^{3/2} \Gamma(2) (3\pi^2)^{5/3}}{64(2\pi)^2} \frac{1}{(k_B T_F \beta)^{5/2}} g_{7/2}(1) \\ & + \frac{5}{2} \frac{2^{5/2} \pi^{3/2} \Gamma(2) (3\pi^2)^{5/3}}{64(2\pi)^2} \frac{(\epsilon_0 + e_0)}{(k_B T_F \beta)^{3/2}} g_{5/2}(1) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

la cual, junto con (A.10) se muestra en la Fig. A.3. Observamos el salto en el calor específico que ocurre bajo la condición de que $(d + \delta) > 4$ [65].

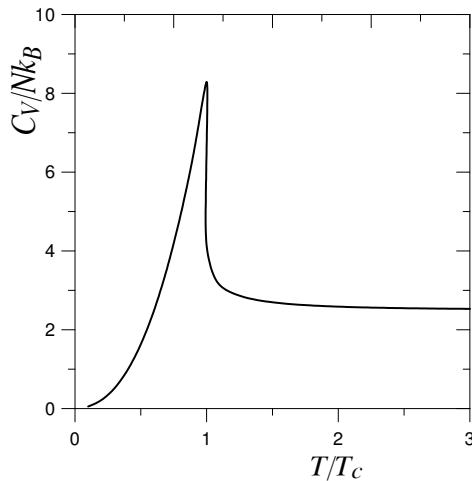


Figura A.3: Calor específico como función de la temperatura para bosones con una relación de dispersión lineal en el plano x,y y cuadrática en la dirección z .

Lista de Figuras

1.1. Evolución de la temperatura crítica en base al descubrimiento de nuevos superconductores. Figura tomada de [27].	4
1.2. Estructura del superconductor de fermión pesado CeCu_2Si_2	6
1.3. Estructura del superconductor cuprato YBaCuO	7
1.4. Estructura del superconductor $\text{Nd}_x\text{Ca}_{1-x}\text{FeAsF}$	8
2.1. Espacio de momentos para dos fermiones formando un par de Cooper.	14
2.2. Forma del la brecha de energía $\Delta(T)$ en función de la temperatura.	23
2.3. Espacio de momentos para dos fermiones formando un par de Cooper con $\mathbf{K} \neq 0$ (zona sombreada).	28
2.4. Temperatura crítica de los superconductores en función de la dimensión. Figura tomada de [65].	30
3.1. Bosones inmersos en un arreglo de multicapas periódicas generadas con potenciales tipo Kronig-Penney en la dirección z	34
3.2. Tres primeras bandas de energía para el peine de Dirac en la dirección z , con $P_0 = 10$ y separación entre las deltas $a/\lambda_0 = 1.0$	35
3.3. Fracción del condensado para $\gamma = 0.1$ y distintos valores de P_0 para pares con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos. $\gamma \equiv \hbar^2/2ma^2k_B T_0 = 1/4\pi(a/\lambda_0)^2$	38

3.4. Temperatura crítica como función de P_0 para varios valores de γ para pares con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.	40
3.5. Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de T/T_0 para varios valores de P_0 para pares con relación de dispersión cuadrática para el movimiento paralelo a los planos.	41
3.6. Energía interna como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$ ($a/\lambda_0 = 0.89$), y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática para su movimiento paralelo a los planos.	44
3.7. Calor específico en unidades de Nk_B como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$, $a/\lambda_0 = 0.89$, y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática para su movimiento paralelo a los planos.	46
3.8. Calor específico sobre T en unidades de Nk_B como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$, $a/\lambda_0 = 0.89$, y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática para su movimiento paralelo a los planos.	47
3.9. Entropía en unidades de Nk_B como función de T/T_0 para $\gamma = 0.1$ ($a/\lambda_0 = 0.89$), y varios valores de P_0 , para pares con relación de dispersión cuadrática.	49
3.10. Temperatura crítica como función de P_0 para varios valores de γ para pares con relación de dispersión lineal para el movimiento paralelo a los planos.	53
3.11. Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de T/T_0 para varios valores de P_0 para pares con relación de dispersión lineal para el movimiento paralelo a los planos.	54
3.12. Energía interna como función de T/T_F para $e_0 = 2E_F$ y varios valores de P_0 , usando una relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos. . . .	56

3.13. Calor específico a volumen constante como función de T/T_F , $e_0 = 2E_F$ y varios valores de P_0 , para pares con una relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos.	59
3.14. Entropía como función de T/T_F para la relación de dispersión lineal para su movimiento paralelo a los planos.	60
3.15. Potencial químico en unidades de E_F para un gas ideal de fermiones dentro de la estructura de capas con separación $a/\lambda_0 = 0.89$ ($\gamma = 0.1$).	63
3.16. Energía interna en unidades de E_F para un gas ideal de fermiones dentro de la estructura de capas con separación $a/\lambda_0 = 0.89$ ($\gamma = 0.1$).	65
3.17. Calor específico entre Nk_B para un gas ideal de fermiones dentro de la estructura de capas con separación $a/\lambda_0 = 0.89$ ($\gamma = 0.1$).	67
4.1. Diagrama de fase para $YBa_2Cu_3O_7$ en función del dopaje. El lado izquierdo corresponde al dopaje con electrones y el derecho al dopaje con hoyos. Diagrama tomado de [77].	70
4.2. Esquema de capas para $YBa_2Cu_3O_7$ ortorrómbico. Las capas son perpendiculares al eje c_1 . Tomado de la Ref [13].	73
4.3. Anisotropía en las masas γ_c (diamantes) y temperatura crítica del bulto (cuadrados) para $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ como función de la concentración de oxígeno. Figura tomada de [46].	75
4.4. Temperatura de Debye para YBCO (a) oxidado y (c) ligeramente reducido; (b) con un término $\gamma_c T$ permitido. No se observa pico en T_c . Figura tomada de [79].	77
4.5. Temperatura crítica y densidad de número de portadores de superconductividad en función de la temperatura de Fermi. Figura tomada de [82].	78
4.6. Calor específico electrónico a bajas temperaturas para varios campos magnéticos. Figura tomada de [36].	82

4.7.	Diferencia del calor específico contra el campo externo $B^{1/2}$. En el inset se muestra el calor específico sin substraer la contribución de Schottky. Figura tomada de [34].	83
4.8.	Detalle del salto de C/T . Figura tomada de [90].	84
4.9.	Detalle del salto de C/T . Figura tomada de [34].	84
4.10.	Variación de la forma del salto en presencia de un campo magnético para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$. Las líneas continuas corresponden a $B\parallel c$ y los círculos a $B\parallel ab$. Los datos son para $B = 0$, $B = 6.4\text{T}$ y $B = 9.6\text{T}$ comenzando desde arriba. Figura tomada de [46].	85
4.11.	Coefficiente del calor específico electrónico $\gamma(x, T)$ en función de la temperatura para dopaje para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ relativo a $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$. Los valores de x son 0.16, 0.29, 0.38, 0.43, 0.48, 0.57, 0.67, 0.76, 0.80, 0.87, 0.92 y 0.97. Figura tomada de [92].	85
4.12.	Contribuciones al calor específico a bajas temperaturas. Figura tomada de [94].	86
4.13.	Coefficientes de expansión térmica. Figura tomada de [98].	90
5.1.	Celda unitaria del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, los planos sombreados son los planos de CuO_2 donde ocurre la superconductividad.	96
5.2.	Temperatura crítica como función de P_0 para algunos valores de f , para pares con relación de dispersión cuadrática. La línea punteada es la T_c experimental del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$.	101
5.3.	Temperatura crítica como función de P_0 para algunos valores de f para pares con relación de dispersión lineal. La línea punteada es la T_c experimental del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$.	102
5.4.	Calor específico en función de la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. (5.7). Caso en que los pares tienen una relación de dispersión cuadrática paralela a los planos.	104

-
- 5.5. Calor específico sobre la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. (5.7). Caso en que los pares tienen una relación de dispersión cuadrática paralela a los planos. 104
- 5.6. Calor específico en función de la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. 5.9. Caso en que los pares tienen una relación de dispersión lineal paralela a los planos. 106
- 5.7. Calor específico sobre la temperatura T del gas de pares de Cooper del cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ usando la Ec. 5.9. Caso en que los pares tienen una relación de dispersión lineal paralela a los planos. 106
- 5.8. Calor específico en función de T para los electrones desapareados. 107
- 5.9. Suma del calor específico sobre T de los pares de Cooper más los electrones desapareados, para pares con una relación de dispersión lineal paralela a los planos (línea continua). La línea discontinua es la componente de los electrones desapareados. 109
- 5.10. Calor específico de la red para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ utilizando el modelo de Debye para tres temperaturas, y la dispersión inelástica de neutrones (INS) para tres dopajes x . Las cruces son valores experimentales de Bessergenev para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ [44]. . . 112
- 5.11. Espectro fonónico de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ para diferentes concentraciones de oxígeno. Se comienza con $x = 6.97$ (puntos) y se termina con $x = 6.07$ (círculos abiertos). Las concentraciones intermedias son: a) $x = 6.53$ (cruces) y $x = 6.40$ (triángulos), b) $x = 6.81$ (cruces) y $x = 6.16$ (triángulos). Figura tomada de Ref. [106]. 113
- 5.12. Forma de la función $I(T)$ como función de la energía para $T = 100$ K. 114

-
- 5.13. Calor específico fonónico sobre la temperatura para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ utilizando el modelo de Debye para tres temperaturas, y la dispersión inelástica de neutrones (INS) para tres dopajes x . Las cruces son valores experimentales de Bessergenev para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ [44]. 115
- 5.14. Calor específico total para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos. 117
- 5.15. Calor específico total para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión lineal paralela a los planos. 117
- 5.16. Calor específico total sobre la temperatura T , para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión cuadrática paralela a los planos. 118
- 5.17. Calor específico total sobre la temperatura T para el cuprato $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$. La contribución de los pares de Cooper ha sido calculada con relación de dispersión lineal paralela a los planos. 118
- A.1. Potencial químico como función de la temperatura para bosones con una relación de dispersión lineal en el plano x, y y cuadrática en la dirección z 126
- A.2. Energía interna como función de la temperatura para bosones con una relación de dispersión lineal en el plano $x - y$ y cuadrática en la dirección z 127
- A.3. Calor específico como función de la temperatura para bosones con una relación de dispersión lineal en el plano x, y y cuadrática en la dirección z 128

Lista de Tablas

4.1. Propiedades cristalográficas de algunos superconductores. C = cúbica, O = ortorrómbica, T = tetragonal	72
4.2. Resistividad a lo largo de dos direcciones para algunos superconductores. Nótese el cambio del exponente de las unidades para ρ_{xy} y para ρ_z	74
4.3. Parámetros para algunos superconductores a presión ambiente. Datos tomados de [13].	88
4.4. Propiedades superconductoras a lo largo de dos direcciones para $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Datos tomados de [74].	94
5.1. Propiedades de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ para distintos valores de x , y fuente que reporta los datos. * Renker [106] reporta la curva de PDOS. ** Los autores no determinan el dopaje. † Proporcionan un listado de los datos. ‡ Los mismos autores reportan $\gamma_e = 3.23 \text{ mJ/mol K}^2$ y $\alpha = 0.16 \text{ mJ/mol K}^3$ en 1997. ‡ Dato obtenido directamente de su curva. ‡ Presentan sus curvas para una región limitada de temperaturas.	98

Bibliografía

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B.* **64**, 1175 (1986).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 189 (1957).
- [3] R. Friedberg and T. D. Lee, *Phys. Rev. B* **40**, 6745 (1989).
- [4] V. V. Tolmachev, *Phys. Lett. A* **266**, 400 (2000).
- [5] M. Casas, A. Rigo, M. de Llano, O. Rojo, and M. A. Solís, *Phys. Lett. A* **245**, 55 (1998).
- [6] M. Casas, N. J. Davidson, M. de Llano, T. A. Mamedov, A. Puente, R. M. Quick, A. Rigo, and M. A. Solís, *Physica A* **295**, 425 (2001).
- [7] S. K. Adhikari, M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. Fortes, M. A. Solís, M. de Llano, A. A. Valladares and O. Rojo, *Phys. Rev. B* **62**, 8671 (2000).
- [8] F. London and H. London, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **149**, 71 (1935). F. London, *Phys. Rev.* **54**, 947 (1938).
- [9] V. L. Ginzburg and L. Landau, *Jou. Exp. Theoret. Phys.* **20**, 1064 (1950). V. L. Ginzburg, *Uzp. Fiz. Nauk* **48**, 25 (1952).
- [10] R. F. Feynman, *Proc. Intern. Conf. Theoret. Phys. Kyoto Tokio, Japan* (1953).
- [11] M. R. Schafroth, *Phys. Rev.* **96**, 1149 (1954).

-
- [12] H. Onnes, research notes **56, 57** (1911), Kamerling Onnes Archive, Boerhaave Museum, Leiden, the Netherlands.
- [13] C. P. Poole Jr., H. A. Farach, R. J. Creswick, R. Prozorov, *Superconductivity*, 2nd Ed. (Elsevier, The Netherlands, 2007).
- [14] L. R. Testardi, J. H. Wernick and W. A. Roger, *Sol. State Comm.* **15**, 1 (1974).
- [15] J. R. Gavaler, *App. Phys. Lett.* **23**, 480 (1973).
- [16] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2nd Ed. (Mc. Graw-Hill, Inc., New York, 1996).
- [17] T. Miyazaki, T. Hase and T. Miyatake in *Handbook of Superconductor Materials, Vol. I*, edited by D. A. Cardwell and D. S. Ginley (Institute of Physics Publishing Ltd, Bristol and Philadelphia, 2003).
- [18] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, Z. J. Huang, Y. Q. Wang and C. W. Chu, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 908 (1987).
- [19] S. N. Putilin, I. Bryntse, E. V. Antipov, *Mat. Res. Bull.* **26**, 1299 (1991).
- [20] J. H. Eggert, J. Z. Hu and H. K. Mao, *Phys. Rev B* **49**, 15299 (1994).
- [21] F. Pesty, P. Geroche and K. Bechgaard, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2495 (1985).
- [22] A. Y. Ganin, Y. Takabayashi, Y. Z. Khimyak, S. Margadonna, A. Tamai, M. J. Rosseinsky and K. Prassides, *Nature Mat.* **7**, 367 (2008).
- [23] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani and J. Akimitsu, *Nature* **410**, 63 (2001).
- [24] T. E. Weller, M. Ellerby, S. S. Saxena, R. P. Smith and T. Skipper, *Nature Phys.* **1**, 39 (2005).

-
- [25] J. S. Kim, R. K. Kremer, L. Boeri and F. S. Razavi, Phys. Rev. Lett. **96**, 217002 (2006) .
- [26] I. Mazin, Nature **464**, 183 (2010).
- [27] Coalition for the Commercial Application of Superconductors *Superconductivity, Present and Future Applications*, 2nd Ed. (US, 2009).
- [28] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz, and J. Schäfer, Phys. Rev. Lett. **43**, 1892 (1979).
- [29] T. Vorenkamp, A. de Visser, R. Weter, A. A. Menovsky and J. J. M. Franse, Phys. Rev. B **48**, 6385 (1993).
- [30] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).
- [31] H. Takahashi, K. Igawa, K. Arii, Y. Kamihara, M. Hirano and H. Hosono, Nature **453**, 376 (2008).
- [32] I. Mazin, Physics **4**, 26(2011).
- [33] J. Paglione and R. Greene, Nature Phys. **6**, 645 (2010).
- [34] Y. Wang, B. Revaz, A. Erb and A. Junod, Phys. Rev. B **63**, 094508 (2001).
- [35] D. A. Wright, J. P. Emerson, B. F. Woodfield, S. F. Reklis, J. E. Gordon, R. A. Fisher and N. E. Phillips, J. Low Temp. Phys. **105**, 897 (1996).
- [36] D. A. Wright, J. P. Emerson, B. F. Woodfield, J. E. Gordon, R. A. Fisher and N. E. Phillips, Phys. Rev. Lett **82**, 1550 (1999).
- [37] K. A. Moler, D. L. Sisson, J. S. Urbach, M. R. Beasley, A. Kapitulnik, D. J. Baar, R. Liang and W. N. Hardy, Phys. Rev. B **55**, 3954 (1997).

- [38] A. Junod, M. Roulin, J. Y. Genoud, B. Revaz, A. Erb, E. Walker, *Physica C* **275**, 245 (1997).
- [39] D. Varshney, R. K. Singh and A. K. Khaskalam, *Phys. Stat. Sol. B* **206**, 749 (1998).
- [40] S. E. Inderhees, M. B. Salamon, T. A. Friedmann, and D. M. Ginsberg, *Phys. Rev. B* **36**, 2401 (1987).
- [41] G. Mozurkewich, M. B. Salamon, and S. E. Inderhees, *Phys. Rev. B* **46**, 11914 (1992).
- [42] N. E. Phillips, R. A. Fisher and J. E. Gordon, *Progress in Low Temperature Physics, Vol. XIII*, edited by D. F. Brewer (Elsevier Science Publisher B.V., Netherlands, 1992) p267.
- [43] J. E. Gordon, M. L. Tan, R. A. Fisher and N. E. Phillips, *Solid State Comm.* **69**, 625 (1989).
- [44] V. G. Bessergenev, Yu A. Kovalevskaya, V. N. Naumov, G.I. Frolova, *Physica C* **245**, 36 (1995).
- [45] M. Roulin, A. Junod and E. Walker, *Physica C* **260**, 257 (1996).
- [46] M. Roulin, A. Junod, and E. Walker, *Physica C* **296**, 137 (1998).
- [47] A. Junod, A. Erb and C. Renner, *Physica C* **317**, 333 (1999).
- [48] R. Friedberg and T. D. Lee, *Phys. Letters A* **138**, 423 (1989).
- [49] P. Salas, M. Fortes, M. de Llano, F. J. Sevilla, and M. A. Solís, *J. of Low Temp. Phys.* **159**, 540 (2010).
- [50] P. Salas, F. J. Sevilla, M. Fortes, M. de Llano, A. Camacho, and M. A. Solís, *Phy. Rev. A* **82**, 033632 (2010).
- [51] Kronig R. de L. and Penney W. G., *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A130**, 499 (1930); McQuarrie, D. A., *The Kronig-Penney Model: A Single Lecture Illustrating the Band Structure of Solids*, *The Chemical Educator* **1**, No.1, Springer-Verlag New York, INC. (1996).

-
- [52] D. M. Eagles, Phys. Rev. **186**, 456 (1969).
- [53] J. E. Hoffman, Physics **3**, 23 (2010).
- [54] R. A. Fisher, J. E. Gordon and N. E. Phillips, in *Handbook of High-Temperature Superconductivity, Theory and Experiment*, edited by J. Robert Schrieffer and J. S. Brooks (Springer, New York, 2007).
- [55] L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [56] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995); D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner and T. H. Greytak, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998); C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [57] Giaever, Phys. Rev. Lett **5**, 147 (1960).
- [58] A. C. Rose-Innes and E. H. Rhoderick, *Introduction to Superconductivity* 2nd Edition (Pergamon, Oxford, U. K.,1978).
- [59] J. B. Ketterson and S. N. Song, *Superconductivity* (Cambridge University Press, Cambridge, U. K.,1999).
- [60] G. M. Eliashberg, Soviet Phys. JETP **11**, 696 (1960).
- [61] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) Ser. A **276**, 238 (1963); **281**, 401 (1964).
- [62] M. Casas, S. Fujita, M. de Llano, A. Puente, A. Rigo and M. A. Solís, Physica C **295**, 93 (1998).
- [63] S. K. Adhikari, M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. Fortes, M. A. Solís, M. de Llano, A. A. Valladares and O. Rojo, Physica C **351**, 341 (2000).

- [64] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Benjamin, New York, 1964).
- [65] F. J. Sevilla, M. Grether, M. Fortes, M. de Llano, O. Rojo, M. A. Solís and A. A. Valladares, *J. Low Temp. Phys.* **121**, 281 (2000).
- [66] X-G Wen and R. Kan, *Phys. Rev. B* **37**, 595 (1988).
- [67] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2nd Ed. (Pergamon, Oxford, 1996).
- [68] S. Wolfram, *The MATHEMATICA Book*, 3rd. Ed. (Wolfram Media, Champaign IL, USA, 1996).
- [69] I. S. Gradshteyn, and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 5th Ed. (Academic Press, London, 1995).
- [70] V. C. Aguilera-Navarro, M. de Llano and M. A. Solís, *Eur. Phys. J. D* **20**, 177 (1999).
- [71] M. Grether, M. Fortes, M. de Llano, J. L. del Río, F. J. Sevilla, M. A. Solís, and A. A. Valladares, *Eur. Phys. J. D* **23**, 117 (2003).
- [72] M. Grether, M. de Llano and M. A. Solís, *Eur. Phys. J. D* **25**, 287 (2003).
- [73] C. Uher in *Handbook of Superconductor Materials, Vol. I*, edited by D. A. Cardwell and D. S. Ginley (Institute of Physics Publishing Ltd, Bristol and Philadelphia, 2003) p. 75.
- [74] A. Koblishka-Veneva, N. Sakai, S. Tajima and M. Murakami in *Handbook of Superconductor Materials, Vol. I*, edited by D. A. Cardwell and D. S. Ginley (Institute of Physics Publishing Ltd, Bristol and Philadelphia, 2003) p. 893.
- [75] J. W. Loram, K. A. Mirza, J. R. Cooper and J. L. Tallon, *Physica C* **282**, 1405(1997).
- [76] T. Timusk and B. Statt, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 61 (1999).

- [77] <http://www.quantummatters.wordpress.com>
- [78] J. Hauck, S. Denker, H. Hindriks, S. Ipta and K. Mika, *Z. Phys. B* **84**, 31 (1991).
- [79] A. Junod, D. Eckert, T. Graf, G. Triscone and J. Muller, *Physica C* **162**, 1401 (1989).
- [80] Y. J. Uemura, L. P. Le, G.M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, and H. Yamochi, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2665 (1991).
- [81] Y. J. Uemura, *Physica B* **374**, 1 (2006).
- [82] Y. J. Uemura, *J. Phys.: Cond. Matt.* **16**, S4515 (2004).
- [83] D. A. Bonn, *Nature Physics* **2**, 159 (2006).
- [84] P. W. Anderson, G. Baskaran, Z. Zou and T. Hsu, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2790 (1987).
- [85] A. Tari, *The Specific Heat of Matter at Low Temperatures* (Imperial College Press, London, 2003).
- [86] R. A. Fisher, J. E. Gordon, S. F. Reklis, D. A. Wright, J. P. Emerson, B. F. Woodfield, E. M. McCarron III and N. E. Phillips, *Physica C* **252**, 237 (1995).
- [87] K. A. Moler, D. J. Baar, J. S. Urbach, R. Liang, W. N. Hardy and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. Lett* **73**, 2744 (1994).
- [88] B. Revaz, J.-Y. Genoud, A. Jounod, K. Neumaier, A. Erb and E. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3364 (1998).
- [89] R. Shaviv, E. F. Westrum Jr., R. C. J. Brown, M. Sayer, X. Yu and R.D. Weir, *J. Chem. Phys.* **92**, 6794 (1990).

-
- [90] N. E. Phillips, R. A. Fisher and J. E. Gordon, *Chin. Jou. Phys.* **30**, 799 (1992).
- [91] S. E. Inderhees, M. B. Salamon, J. P. Rice and D. M. Ginsberg, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 232 (1991).
- [92] J. W. Loram, K. A. Mirza, J. R. Cooper and W. Y. Liang, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1740(1993).
- [93] S. J. Collocot, R. Driver, L. Dale and S. X. Dou, *Phys. Rev. B* **37**, 7917 (1988).
- [94] N. E. Phillips, J. P. Emerson, R. A. Fisher, J. E. Gordon, B. F. Woodfield and D. A. Wright, *Jou. Supercon.* **7**, 251 (1994).
- [95] Ch. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 2nd Ed. (John Wiley and Sons, New York, 1965).
- [96] C. Meingast, A. Inaba, R. Heid, V. Pankoke, K-P Bohnen, W. Reichardt and T. Wolf., *J. Phys. Soc. Jap.* **78**, 074706 (2009).
- [97] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics, Part 1*, 3rd Ed. (Pergamon Press, Oxford, 1986).
- [98] C. Meingast, O. Kraut, T. Wolf, H. Wuhl, A. Erb and G. Muller-Vogt, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1634 (1991).
- [99] P. Nagel, V. Pasler and C. Meingast, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2376 (2000).
- [100] J. D. Jorgensen, S. Pei, P. Lightfoot, D. G. Hinks, B. W. Veal, B. Dabrowski, A. P. Paulikas and R. Kleb, *Phys. C* **171**, 93 (1990).
- [101] H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano, T. Takahashi, M. Randería, M. R. Norman, T. Mochiku, K. Hadowaki and J. Giapintzakis, *Nature* **382**, 51 (1996).
- [102] A. Perali, P. Pieri, G. C. Striani and C. Castellani, *Phys. Rev. B* **66**, 024510 (2002).

-
- [103] T. Timusk and B. Statt, Rep. Prog. Phys. **62**, 61 (1999).
- [104] F. Pistolesi and G. C. Strinati, Phys. Rev. B **49**, 6356 (1994).
- [105] A. S. Alexandrov, W. H. Beere, V. V. Kabanov and W. Y. Liang, Phys. Rev. Lett. **79**, 1551 (1997).
- [106] B. Renker, F. Gompf, E. Gering, D. Ewert, H. Rietschel and A. Dianoux, Z. Phys. B **73**, 309 (1988). B. Renker, F. Gompf, E. Gering, G. Roth, W. Reichardt, D. Ewert, H. Rietschel and H. Mutka, Z. Phys. B **71**, 437 (1988).
- [107] R. A. Fisher, J. E. Gordon, S. Kim, N. E. Phillips and A. M. Stacy, Physica C **153**, 1092 (1988).
- [108] C. P. Poole, H. A. Farach, and R. J. Creswick, *Superconductivity* (Academic Press, Inc. London, U. K., 1995) p. 595.
- [109] W. Y. Liang, J. W. Loram, K. A. Mirza, N. Athanassopoulou and J. R. Cooper, Physica C **263**, 277 (1996).
- [110] V. N. Naumov, G. I. Frolova, E. B. Amitin, V. E. Fedorov, P. P. Samoilo, Physica C **262**, 143 (1996).
- [111] T. Wen, G. C. Ma, X. X. Dai, J. X. Dai and W. E. Evenson, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 225 (2003).