



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES**

**NATURALEZA BOSÓNICA Y CONDENSACIÓN
DE PARES DE COOPER COLECTIVOS**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL GRADO
ACADÉMICO DE**

DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A

CARLOS RAMÍREZ RAMOS

Director de Tesis: Dr. Chumin Wang Chen





Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

RESUMEN

Esta tesis aborda el problema de la naturaleza cuántica de los pares de Cooper, los cuales tienen características tanto bosónicas como fermiónicas, ya que ellos poseen un espín total entero pero no se puede colocar dos de ellos en un mismo estado cuántico. Esta ambigüedad ha estado en controversia a lo largo de los últimos 55 años, desde el surgimiento de la teoría BCS, sin haber llegado a un consenso hasta la fecha. Los resultados de esta tesis sugieren que en lugar de haber pares de Cooper individuales dentro de un superconductor, se forman posiblemente combinaciones lineales de ellos, los cuales llamamos pares de Cooper colectivos. Por ejemplo, el estado base superconductor de BCS puede expresarse en términos de dichos pares colectivos. En contraste con los pares de Cooper individuales, los colectivos sí pueden acumularse en un mismo estado cuántico, debido a su carácter difuso en el espacio de momentos. Asimismo, se demuestra analíticamente la naturaleza bosónica de los colectivos mediante el cálculo de las relaciones de conmutación de sus operadores de creación y aniquilación en el límite diluido. Además, se prueba que éstos son eigenfunciones del hamiltoniano de BCS y se calcula su espectro de energía, a partir del cual se determina que la temperatura de condensación de Bose-Einstein de los pares de Cooper colectivos es finita. Por último, se muestra la equivalencia entre la teoría BCS y la condensación de Bose-Einstein en un sistema donde coexisten tres tipos de partículas: pares colectivos en el estado base, pares excitados y electrones no apareados, cuya energía electrónica es constante. En general, esta tesis proporciona evidencias de que la superconductividad podría tratarse como una condensación de Bose-Einstein de los pares de Cooper colectivos.

ABSTRACT

This thesis has the aim to study the quantum nature of Cooper pairs, having both bosonic and fermionic characteristics, since they possess integer total spin but cannot be two Cooper pairs at a single quantum state. This ambiguity has been in controversy along the last 55 years, since the establishment of the BCS theory, without having a consensus. The results of this thesis suggest the possible formation of linear combinations of Cooper pairs in a superconductor, instead of individual ones. These linear combinations are named as collective Cooper pairs. For example, the superconducting BCS ground state can be written in terms of such collective pairs. In contrast to the individual Cooper pairs, the collective ones do be able to accumulate many of them at a single quantum state, due to their diffuse character in the momentum space. Furthermore, it is analytically demonstrated the bosonic nature of the collective ones through the calculation of the commutation relation of their creation and annihilation operators at the dilute limit. Also, it is proved that the collective Cooper pairs are eigenfunctions of the BCS Hamiltonian and calculated their energy spectrum, which allows determining that the critical temperature of their Bose-Einstein condensation is finite. Finally, it is shown the equivalence between the BCS theory and the Bose-Einstein condensation in a system of three kinds of particles: collective Cooper pairs at the ground state, excited ones, and unpaired electrons, whose single-electron energy is a constant. In general, this thesis provides evidences that the superconductivity could be treated as a Bose-Einstein condensate of collective Cooper pairs.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO 1. TEORÍA BCS	4
1.1. <i>Excitaciones elementales en sólidos.....</i>	4
1.2. <i>Interacción atractiva entre electrones</i>	5
1.3. <i>Pares de Cooper.....</i>	8
1.4. <i>Teoría BCS a temperatura cero.....</i>	9
1.5. <i>Teoría BCS a temperatura finita</i>	12
1.6. <i>Caso de energía electrónica constante</i>	16
CAPÍTULO 2. CONDENSACIÓN DE BOSE-EINSTEIN	18
2.1. <i>Ensamblajes estadísticos</i>	18
2.2. <i>Partículas cuánticas.....</i>	20
2.3. <i>Gas ideal de bosones</i>	25
2.4. <i>Condensación de Bose-Einstein.....</i>	26
CAPÍTULO 3. PARES DE COOPER COLECTIVOS	29
3.1. <i>Propiedades de los pares de Cooper</i>	29
3.2. <i>Estado base de BCS.....</i>	30
3.3. <i>Naturaleza bosónica de los pares colectivos</i>	32
3.4. <i>Análisis del límite diluido</i>	34
3.5. <i>Transformación unitaria de pares de Cooper</i>	36
CAPÍTULO 4. CONDENSACIÓN DE LOS PARES COLECTIVOS.....	39
4.1. <i>Espectro de energía de un par colectivo.....</i>	39
4.2. <i>Comparación con la solución de Richardson</i>	45
4.3. <i>Condensación de Bose-Einstein.....</i>	47
CAPÍTULO 5. SUPERCONDUCTIVIDAD BASADA EN LOS PARES COLECTIVOS	50
5.1. <i>Coexistencia de electrones y pares.....</i>	50
5.2. <i>Estadística gran canónica</i>	57

5.3. Brecha energética superconductora	59
5.4. Temperatura crítica	61
CONCLUSIONES	63
Apéndice A. Conmutación de operadores.....	65
Apéndice B. Ecuación secular	69
Apéndice C. Adición de un par en el estado base	72
Apéndice D. Energía de pares	73
Apéndice E. Operador semidefinido positivo.....	74
Apéndice F. Máximo del peso estadístico	76
REFERENCIAS.....	79

INTRODUCCIÓN

La superconductividad es un fenómeno extraordinario que muestra efectos cuánticos a escala macroscópica. La ausencia de resistividad al paso de corriente eléctrica en mercurio fue descubierta inicialmente por Kamerlingh Onnes en 1911, al enfriar dicho material a 4 K. Posteriormente, Walter Meissner en 1933, encontró que el campo magnético en el interior de los superconductores tipo I siempre es cero, independientemente de si dicho campo se aplica antes o después de alcanzar el estado superconductor. Hoy en día, estas dos propiedades definen el estado superconductor [Thinkam, 1996].

La primera teoría microscópica para el fenómeno de la superconductividad, fue propuesta en 1957 por John Bardeen, Leon Neil Cooper y John Robert Schrieffer [Bardeen, 1957]. Dicha teoría parte del concepto de pares de Cooper, que son pares de electrones o huecos formados a partir de una interacción atractiva mediante un fonón dentro de un sólido. Ellos proponen un estado base constituido por múltiples pares de Cooper con momento de centro de masa igual a cero que conduce a la existencia de una brecha superconductora, demostrando así que debajo de una temperatura crítica se produce una transición de fase de segundo orden al estado superconductor. Esta teoría predice el efecto Meissner a través de la ecuación de London, así como la discontinuidad del calor específico en la temperatura crítica y su variación exponencial debajo de ésta. En resumen, la teoría BCS ha podido explicar muchas de las propiedades observadas en metales superconductores. Por otro lado, a pesar de que los superconductores tipo II y los cerámicos superconductores de altas temperaturas de transición no han sido completamente entendidos hasta la fecha, los experimentos, por ejemplo el de tunelaje, muestran que los pares de Cooper siguen siendo responsables de los estados superconductores. Así mismo, se ha encontrado superconductividad anisotrópica en diversos cerámicos superconductores [Galván, 2012].

Los pares de Cooper singuletes, formados por pares de electrones o de huecos con espines antiparalelos, tienen un espín total nulo. Dado que los bosones tienen espín entero, durante los últimos 50 años se han propuesto diversos modelos basados en la condensación de Bose-Einstein de los pares de Cooper. Sin embargo, los operadores de creación y aniquilación de dichos pares no cumplen las reglas de conmutación bosónicas, hecho que fue comentado en el artículo original de la teoría BCS [Bardeen, 1957]. Más grave aún, se puede demostrar analíticamente que es imposible que haya dos pares de Cooper en un mismo estado cuántico. Por lo tanto, resulta difícil aceptar una condensación de pares de Cooper.

En los últimos años, se han desarrollado modelos llamados *crossover* que fueron inicialmente propuestos por el premio Nobel Anthony James Leggett [Leggett, 1980] y complementados por P. Nozières y S. Schmitt-Rink [Nozières, 1984], en los cuales se discute la posible transición entre el estado superconductor tipo BCS y una condensación de Bose-Einstein (BEC) de pares de Cooper. El primero corresponde a una alta densidad de portadores mientras que el segundo se asocia a una baja densidad, donde puede ocurrir el apareamiento de Cooper antes de la condensación. Se ha aplicado el modelo de *crossover* para explicar la variación de la temperatura crítica en función del dopaje en los cerámicos superconductores, donde la zona de hiperdopaje obedece la teoría BCS mientras que la zona de hipodopaje podría estar relacionada con condensación de pares de Cooper, puesto que por encima de la temperatura crítica superconductor se observa un comportamiento anómalo de transporte de carga que podría relacionarse con un estado de pares de Cooper no condensado.

Por otro lado, existe un esfuerzo importante en la búsqueda de la naturaleza cuántica de los pares de Cooper. Por ejemplo, I. G. Kaplan, O. Navarro y J. A. Sánchez encontraron que los pares de Cooper satisfacen la para-estadística de Fermi de rango $p=1$ [Kaplan, 2005]. Asimismo, se ha propuesto la naturaleza bosónica de los pares de Cooper, a partir de que la suma de los operadores de número de pares de Cooper tienen como eigenvalores los números naturales más allá de uno, en contraste con cero o uno de los pares de Cooper individuales [Fujita, 1998].

En la presente tesis se introduce el concepto de los pares de Cooper colectivos como combinaciones lineales de pares de Cooper, o en forma general, como una transformación unitaria de los mismos. Además, se prueba su naturaleza bosónica mediante el cálculo de las relaciones de conmutación de los operadores de creación y aniquilación de los pares colectivos. Cabe mencionar que el estado base de la teoría BCS puede expresarse en términos de dichos pares. En particular, en el límite diluido se calcula el espectro de energía de los pares de Cooper colectivos así como su temperatura de condensación.

El primer capítulo de esta tesis presenta un resumen de la teoría BCS partiendo de una discusión sobre el origen de la interacción atractiva entre electrones dentro de un sólido. En particular, el estado base superconductor se determina mediante el método variacional y la superconductividad a temperatura finita se estudia considerando una coexistencia de tres tipos de partículas: pares en el estado base, pares excitados y electrones no apareados, como se desarrolla en el artículo original de BCS [Bardeen, 1957].

En el segundo capítulo se discute la condensación de Bose-Einstein de un gas ideal de bosones. Para ello se revisan los métodos estadísticos para su descripción y la determinación de su temperatura crítica. Como ejemplo, se detallan la ocurrencia y la ausencia de dicha condensación en sistemas tridimensionales y bidimensionales, respectivamente, debido a la diferencia en sus densidades de estados alrededor del estado base.

A lo largo del tercer capítulo, se definen los pares de Cooper colectivos y se prueba su naturaleza bosónica. Para su estado base, éstos pueden escribirse como combinaciones lineales de pares de Cooper. En forma más general, se definen a través de una transformación canónica de los pares de Cooper ordinarios. En este caso su naturaleza bosónica se prueba en el límite diluido.

En el cuarto capítulo, se inicia con el cálculo del espectro de energía de los pares de Cooper colectivos, el cual tiene una solución analítica en el límite termodinámico. Los detalles de dicho cálculo se desarrollan en el apéndice B. En particular, la energía del estado base de dicha solución coincide con la del problema de Cooper original obtenida vía cálculo variacional [Cooper, 1955]. Dentro de la aproximación de un gas ideal de pares de Cooper colectivos, se determina su temperatura de condensación de Bose-Einstein.

El capítulo cinco estudia el sistema donde coexisten tres tipos de partículas: pares colectivos en el estado base, pares excitados y electrones no apareados, cuya energía electrónica es una constante. Dicho estudio se lleva a cabo dentro del formalismo del ensamble gran canónico, y sus resultados muestran la equivalencia entre la teoría BCS y la condensación de Bose-Einstein.

CAPÍTULO 1. TEORÍA BCS

En 1957, John Bardeen, Leon Neil Cooper y John Robert Schrieffer (BCS) desarrollaron una teoría microscópica que explica el fenómeno de la superconductividad, basada en los pares de Cooper [Bardeen, 1957], los cuales son pares de electrones que se atraen debido a la deformación de la red de iones del material, produciendo un término del potencial tal que contrarresta el efecto repulsivo de la interacción coulombiana entre electrones. En este capítulo se presenta un breve resumen de dicha teoría.

1.1. Excitaciones elementales en sólidos

En la física del estado sólido, las excitaciones elementales o cuasipartículas son partículas ficticias que permiten describir de una forma sencilla a un sistema microscópicamente complejo. Por ejemplo, un electrón en un semiconductor tiene una interacción compleja con los iones, sin embargo, es posible describir su dinámica a través de un modelo de cuasipartícula libre, renormalizando dicha interacción mediante una masa efectiva m^* . Los ejemplos más comunes de las excitaciones elementales en sólidos son: fonones, magnones, plasmones, polarones, excitones, así como electrones en sólidos y huecos [Pines, 1999].

En particular, los sólidos están formados por iones que vibran alrededor de sus posiciones de equilibrio [Baquero, 2006], por lo cual tienen forma y volumen definidos. Cuando dichas posiciones de equilibrio forman una red periódica, es decir, una estructura con simetría traslacional, se dice que el sólido es cristalino [Ashcroft, 1976].

En la aproximación de oscilaciones pequeñas, las vibraciones de la red pueden expresarse como una superposición de los modos normales, en los cuales todos los iones del sólido vibran con la misma frecuencia. En el lenguaje de segunda cuantización, dichos modos normales de vibración se denominan fonones. Para cada sólido, existe una relación de dispersión que expresa la frecuencia de vibración ω en términos de su vector de onda \mathbf{q} , es decir, $\omega(\mathbf{q})$. Dichos vectores de onda toman valores discretos al considerar las condiciones de frontera del material. Por ejemplo, para una red cúbica con condiciones de frontera cíclicas, $\mathbf{q} \equiv (q_x, q_y, q_z)$ en la primera zona de Brillouin toma los valores [Kittel, 1996]

$$q_j = 0, \pm \frac{2\pi}{Na}, \pm \frac{4\pi}{Na}, \dots, \quad (1.1)$$

donde $j = x, y, z$, a es la constante de red y N el número de elementos en cada dirección. Cabe mencionar que a la frecuencia máxima que pueden alcanzar los fonones se le conoce como frecuencia de Debye, y se denota como ω_D .

Por último, los sólidos metálicos contienen, además de los iones, electrones deslocalizados, cuya energía ε se relaciona con su vector de onda \mathbf{k} a través de la siguiente expresión

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.2)$$

donde m es la masa del electrón. En analogía con los fonones, las condiciones de frontera conducen a valores discretos permitidos del vector de onda \mathbf{k} [Kittel, 1996].

1.2. Interacción atractiva entre electrones

En un gas de electrones en el vacío, las únicas interacciones son fuerzas coulombianas repulsivas. Sin embargo, en un sólido puede haber interacciones atractivas entre electrones mediante el intercambio de un fonón, como se discute a continuación siguiendo el método discutido por de Gennes [de Gennes, 1999].

Consideremos un proceso donde un electrón emite un fonón para ser absorbido después por otro electrón, como se muestra en la figura 1.1.

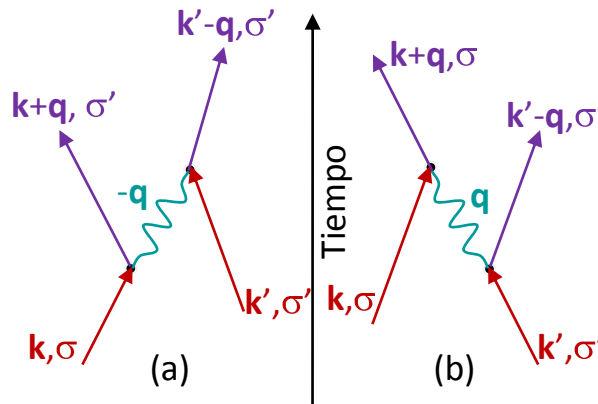


Figura 1.1 Diagrama de Feynman de la interacción electrón-electrón vía fonón con mismos estados iniciales y finales. (a) Un electrón en el estado \mathbf{k} emite un fonón con vector de onda $-\mathbf{q}$, el cual es absorbido por un segundo electrón. (b) Un electrón en el estado \mathbf{k}' emite un fonón con vector de onda \mathbf{q} que es absorbido por el otro electrón.

Partimos del hamiltoniano de Fröhlich dado por [Fröhlich, 1950]

$$\hat{H}_{ep} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} D_{\mathbf{q}} \hat{s}_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + D_{\mathbf{q}}^* \hat{s}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (1.3)$$

donde $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) de un electrón con vector de onda \mathbf{k} y espín σ , mientras que $\hat{s}_{\mathbf{q}}^\dagger$ ($\hat{s}_{\mathbf{q}}$) es el operador de creación (aniquilación) de un fonón con vector de onda \mathbf{q} y $D_{\mathbf{q}}$ es el coeficiente de la interacción electrón-fonón. En la teoría de perturbaciones a segundo orden, la amplitud de transición del estado inicial $|i\rangle$ al final $|f\rangle$ es [Landau, 1977]

$$\langle f | \hat{H}_{indirecta} | i \rangle = \sum_m \langle f | \hat{H}_{ep} | m \rangle \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E_f - E_m} + \frac{1}{E_i - E_m} \right) \langle m | \hat{H}_{ep} | i \rangle, \quad (1.4)$$

donde la suma se realiza sobre todos los estados intermedios.

En lenguaje de segunda cuantización, para los procesos mostrados en la figura 1.1, podemos escribir el estado inicial

$$|i\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger |0\rangle, \quad (1.5)$$

el estado final

$$|f\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger |0\rangle, \quad (1.6)$$

y los estados intermedios

$$|m^{(a)}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{s}_{-\mathbf{q}}^\dagger |0\rangle \quad (1.7)$$

para el caso (a) de la figura 1.1, así como

$$|m^{(b)}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger \hat{s}_{\mathbf{q}}^\dagger |0\rangle \quad (1.8)$$

para el caso (b) de la figura 1.1. De aquí,

$$\langle m^{(a)} | \hat{H}_{ep} | i \rangle = \langle m^{(b)} | \hat{H}_{ep} | i \rangle = D_{\mathbf{q}}, \quad (1.9)$$

en tanto que

$$\langle f | \hat{H}_{ep} | m^{(a)} \rangle = \langle f | \hat{H}_{ep} | m^{(b)} \rangle = D_{\mathbf{q}}^*. \quad (1.10)$$

El estado inicial tiene energía

$$E_i = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}, \quad (1.11)$$

y el estado final

$$E_f = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}. \quad (1.12)$$

La energía intermedia de los electrones en el caso (a) es

$$E_m^{(a)} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} \quad (1.13)$$

y en el caso (b)

$$E_m^{(b)} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}, \quad (1.14)$$

donde ω es la frecuencia de vibración fonónica. Al sustituir las ecuaciones (1.9) a (1.14) en la ecuación (1.4), encontramos que

$$\langle f | \hat{H}_{indirecta} | i \rangle = |D_q|^2 \hbar\omega_q \left[\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} - \hbar\omega_q} + \frac{1}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k'-q} - \hbar\omega_q} \right]. \quad (1.15)$$

Si

$$|\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}| < \hbar\omega_D \quad \text{y} \quad |\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k'-q}| < \hbar\omega_D, \quad (1.16)$$

siendo ω_D la frecuencia de Debye, la expresión (1.15) es negativa, correspondiente a una interacción atractiva. Esto podría contrarrestar a la repulsión coulombiana debilitada debido al apantallamiento por los electrones libres en un metal, pudiendo conducir a una interacción neta atractiva.

Por otro lado, Bardeen y Pines [Bardeen, 1955] demostraron que esta interacción atractiva se produce únicamente para electrones con energías cercanas a la de Fermi a temperatura cero, debido a que la interacción electrón-electrón vía fonón requiere dos estados electrónicos iniciales ocupados y otros dos finales desocupados, de acuerdo con el esquema de la figura 1.1. Esto sólo ocurre para estados electrónicos cercanos al nivel de Fermi limitados por la ecuación (1.16), lo cual se ilustra en la figura 1.2.

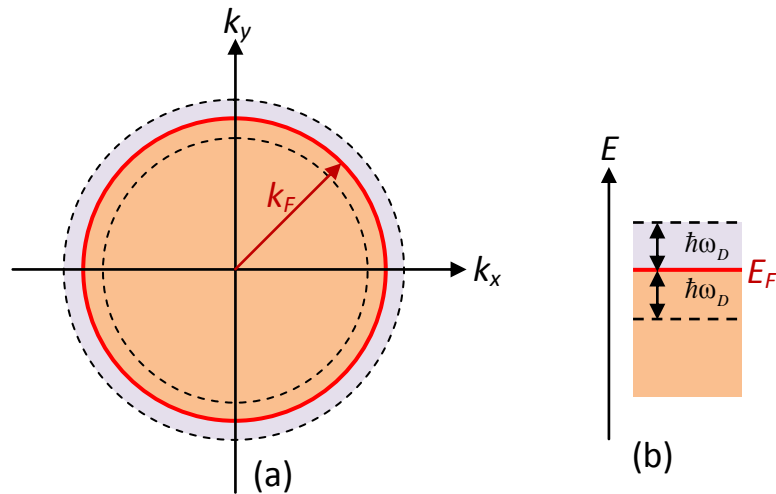


Fig. 1.2. (a) Estados electrónicos en el espacio \mathbf{k} ocupados a temperatura cero hasta la superficie de Fermi (línea sólida) en el modelo de electrones libres. Los estados apareables vía fonón se encuentran entre las líneas punteadas. (b) Estados apareables en la escala de energía.

1.3. Pares de Cooper

En el lenguaje de segunda cuantización, el hamiltoniano de un sistema multi-electrónico puede escribirse como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (1.17)$$

donde el segundo término expresa la interacción efectiva entre electrones que incluye tanto la repulsión coulombiana como la interacción vía fonón.

En 1955, Cooper encontró que una interacción neta atractiva entre los electrones conduce a la formación de pares de electrones, llamados hoy en día pares de Cooper. En este análisis se aproxima el término del potencial de interacción por [Cooper, 1955]

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} = \begin{cases} -V, & \text{si } E_F < \varepsilon_{\mathbf{k}}, \varepsilon_{\mathbf{k}'} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases}, \quad (1.18)$$

donde E_F es la energía de Fermi, que es la máxima energía alcanzable por un electrón a temperatura cero.

Consideremos el estado ($|\psi\rangle$) con un par de electrones encima del mar de Fermi cuyo momento total de centro de masa $\mathbf{K} \equiv (\mathbf{k} + \mathbf{k}')/2 = 0$, es decir,

$$|\psi\rangle = \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} a_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} |F\rangle, \quad (1.19)$$

donde $|F\rangle$ representa el estado con el mar de Fermi lleno. La normalización de $|\psi\rangle$ requiere que

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} |a_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (1.20)$$

Usando $|\psi\rangle$ como función de prueba para determinar la energía del estado base del hamiltoniano (1.17), con el potencial dado en la ecuación (1.18), se tiene que

$$E \equiv \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = 2 \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} \varepsilon_{\mathbf{k}} |a_{\mathbf{k}}|^2 - V \sum_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'}. \quad (1.21)$$

Para encontrar la mínima energía variando $a_{\mathbf{k}}$ bajo la restricción (1.20), la función

$$E - \lambda \left(\sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} |a_{\mathbf{k}}|^2 - 1 \right) \quad (1.22)$$

debe ser minimizada. Al derivar la ecuación (1.22) con respecto a $a_{\mathbf{k}}^*$, se tiene que

$$2\varepsilon_{\mathbf{k}} - \lambda a_{\mathbf{k}} = V \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} a_{\mathbf{k}'}. \quad (1.23)$$

Nótese que multiplicando la ecuación (1.23) por $a_{\mathbf{k}}^*$ y sumando sobre \mathbf{k} se obtiene

$$\lambda = 2 \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} \varepsilon_{\mathbf{k}} |a_{\mathbf{k}}|^2 - V \sum_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'} = E. \quad (1.24)$$

Sea

$$A = \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} a_{\mathbf{k}}, \quad (1.25)$$

y la ecuación (1.23) puede reescribirse como

$$a_{\mathbf{k}} = \frac{VA}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (1.26)$$

Sustituyendo la solución (1.26) en la ecuación (1.25) se obtiene

$$A = \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} a_{\mathbf{k}} = \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} \frac{VA}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E}, \quad (1.27)$$

lo cual lleva finalmente a la ecuación para determinar la energía E

$$1 = \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} \frac{V}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (1.28)$$

En el límite termodinámico se puede reemplazar la sumatoria por una integral,

$$1 \simeq N E_F V \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E}, \quad (1.29)$$

donde $N E_F$ es la densidad de estados evaluada en la energía de Fermi y es esencialmente constante dentro del intervalo de integración, ya que $\hbar\omega_D \ll E_F$.

Al realizar la integral (1.29) encontramos que

$$E = 2E_F - \frac{2\hbar\omega_D}{e^{\frac{2}{N E_F V}} - 1} \approx 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{N E_F V}}, \quad (1.30)$$

mostrando de esta forma que la energía del par de electrones es menor que cuando éstos se encuentran al nivel de Fermi sin aparearse.

1.4. Teoría BCS a temperatura cero

Considere la siguiente función de prueba para el estado base [Navarro, 2007]

$$|G\rangle = \prod_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle, \quad (1.31)$$

donde $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \equiv \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}$ es el operador de creación de un par de Cooper. La condición de normalización de $|G\rangle$ conduce a $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, donde $|v_{\mathbf{k}}|^2$ y $|u_{\mathbf{k}}|^2$ representan respectivamente la probabilidad de encontrar o no encontrar al par de Cooper en el estado \mathbf{k} .

La energía libre del estado $|G\rangle$ para el hamiltoniano (1.17) es

$$\langle G | \hat{H} - \mu \hat{N} | G \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \quad (1.32)$$

donde $\hat{N} \equiv \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$, $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ y μ es el potencial químico. Si suponemos que

$$u_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \quad \text{y} \quad v_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}}, \quad (1.33)$$

entonces

$$\langle G | \hat{H} - \mu \hat{N} | G \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} [1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}] + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (1.34)$$

Para encontrar el mínimo de dicha energía libre, derivamos la ecuación (1.34) respecto a $\theta_{\mathbf{k}}$ e igualamos a cero, llegando a

$$-2 \epsilon_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \cos 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'} = 0, \quad (1.35)$$

es decir,

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}}{2 \epsilon_{\mathbf{k}}} \equiv -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (1.36)$$

donde

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (1.37)$$

Por lo tanto,

$$2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (1.38)$$

y

$$v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}, \quad (1.39)$$

donde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}$ es la energía de un electrón excitado al romper el par y $\Delta_{\mathbf{k}}$ corresponde a la brecha energética superconductor para el momento \mathbf{k} . Usando las ecuaciones (1.37) a (1.39) encontramos la ecuación para la brecha energética,

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\Delta_{\mathbf{k}'}^2 + \epsilon_{\mathbf{k}'}^2}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (1.40)$$

A diferencia del caso de Cooper, aquí se considera un potencial de interacción

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V, & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}}|, |\epsilon_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega_D, \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases}, \quad (1.41)$$

es decir, el potencial atractivo actúa en ambos lados de la superficie de Fermi. Las ecuaciones (1.40) y (1.41) conducen a

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta_0, & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_D \end{cases}. \quad (1.42)$$

Al reemplazar la sumatoria de la ecuación (1.40) por una integral, obtenemos

$$1 = \frac{V}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{N(\epsilon) d\epsilon}{\sqrt{\Delta_0^2 + \epsilon^2}} \approx N(0)V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\Delta_0^2 + \epsilon^2}} = N(0)V \sinh^{-1} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right), \quad (1.43)$$

donde se asume que la densidad de estados es aproximadamente constante en el intervalo de integración. Despejando Δ_0 encontramos que para el caso de acoplamiento débil, $N(0)V \ll 1$, tenemos

$$\Delta_0 \approx \hbar\omega_D \sinh \left(\frac{1}{N(0)V} \right) \approx 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{N(0)V}}. \quad (1.44)$$

A partir de la ecuación (1.39) y la condición de normalización de $|G\rangle$ se tienen

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} (1 + v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (1.45)$$

y

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right). \quad (1.46)$$

En resumen, usando el principio variacional hemos encontrado la brecha superconductor y la función de onda del estado base a temperatura cero.

1.5. Teoría BCS a temperatura finita

En esta sección se estudian los estados superconductores a temperatura finita siguiendo el método original de BCS [Bardeen, 1957]. Para el estado base de la ecuación (1.31), los estados excitados están compuestos por aquellos ortogonales al estado base $(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger})$ de la forma

$$-v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}. \quad (1.47)$$

Además, consideremos la presencia de electrones no apareados generados por $c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$, por lo que un estado excitado $(|\psi_{exc}\rangle)$ puede ser escrito como

$$|\psi_{exc}\rangle = \prod_{\mathbf{k} \in \Omega} u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \prod_{\mathbf{k}' \in \Omega'} -v_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'}\hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \prod_{\mathbf{k}'' \in \Omega'',\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}'',\sigma}^{\dagger} |0\rangle, \quad (1.48)$$

donde Ω, Ω' y Ω'' especifican los conjuntos de estados \mathbf{k} ocupados por pares del estado base, pares excitados y electrones no apareados, respectivamente. De esta forma podemos considerar que, dependiendo de la región a la que pertenezca, nuestro estado \mathbf{k} puede encontrarse en

(1) Par en el estado base:

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0_{\mathbf{k}}\rangle; \quad (1.49)$$

(2) Par en el estado excitado:

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = -v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0_{\mathbf{k}}\rangle; \quad (1.50)$$

(3) Electrón no-apareado:

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} |0_{\mathbf{k}}\rangle; \quad (1.51)$$

siendo $|0_{\mathbf{k}}\rangle$ el estado que no tiene electrones con momento-espín $\mathbf{k}\uparrow$ ni $-\mathbf{k}\downarrow$.

Para determinar las funciones de distribución, necesitamos la energía libre de Helmholtz

$$F = E - TS, \quad (1.52)$$

donde E es la energía promedio sobre las distintas configuraciones, cuya función de onda está dada por la ecuación (1.48) y S es la entropía.

Sean $z_{\mathbf{k}}$ la probabilidad de tener ocupado sólo el estado (\mathbf{k},\uparrow) ó $(-\mathbf{k},\downarrow)$ por un electrón, $p_{\mathbf{k}}$ la probabilidad de un estado de par excitado en \mathbf{k} y por lo tanto, $1 - z_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}$ la probabilidad de tener un estado de par en estado base en \mathbf{k} . Usando estas probabilidades en las ecuaciones (1.49) a (1.51) obtenemos que

$$\langle \psi_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{2} z_{\mathbf{k}} + p_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 + 1 - z_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2, \quad (1.53)$$

por lo que,

$$\langle \psi_{exc} | \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} | \psi_{exc} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[z_{\mathbf{k}} + 2p_{\mathbf{k}} + 2(1 - z_{\mathbf{k}} - 2p_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2) \right], \quad (1.54)$$

donde $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$.

Para el cálculo del término de interacción $\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}'}$, consideremos únicamente funciones de onda de la forma

$$|\psi_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\rangle = \alpha_{11} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} + \alpha_{01} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \alpha_{10} \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} + \alpha_{00} |0_{\mathbf{k}}, 0_{\mathbf{k}'}\rangle, \quad (1.55)$$

donde $|0_{\mathbf{k}}, 0_{\mathbf{k}'}\rangle$ representa los estados \mathbf{k} y \mathbf{k}' desocupados. Las posibilidades para la creación de estos estados son las siguientes:

(1) Ambos en el estado base de par:

$$|\psi_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\rangle = u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} |0_{\mathbf{k}}, 0_{\mathbf{k}'}\rangle, \quad (1.56)$$

con probabilidad $(1 - z_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}})(1 - z_{\mathbf{k}'} - p_{\mathbf{k}'})$.

(2) El par con \mathbf{k} en el estado base y el par con \mathbf{k}' en el estado excitado:

$$|\psi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\rangle = u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad -v_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} |0_{\mathbf{k}}, 0_{\mathbf{k}'}\rangle, \quad (1.57)$$

con probabilidad $(1 - z_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}) p_{\mathbf{k}'}$.

(3) El par con \mathbf{k}' en el estado base y el par con \mathbf{k} en el estado excitado:

$$|\psi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\rangle = -v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} |0_{\mathbf{k}}, 0_{\mathbf{k}'}\rangle, \quad (1.58)$$

con probabilidad $p_{\mathbf{k}}(1 - z_{\mathbf{k}'} - p_{\mathbf{k}'})$.

(4) Ambos en el estado excitado de par:

$$|\psi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\rangle = -v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad -v_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} |0_{\mathbf{k}}, 0_{\mathbf{k}'}\rangle, \quad (1.59)$$

con probabilidad $p_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}'}$.

Nótese que los coeficientes α_{ij} son función de u y v . Usando las funciones de onda de las ecuaciones (1.56) a (1.59) con sus respectivas probabilidades, y notando que los términos diagonales de $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}'}$ están dados por los términos $\alpha_{01} \alpha_{10}$ en cada caso, obtenemos que

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} | \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} | \psi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rangle &= \left[v_{\mathbf{k}}^2 (1-v_{\mathbf{k}}^2) v_{\mathbf{k}'}^2 (1-v_{\mathbf{k}'}^2) \right]^{1/2} (1-z_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}) (1-z_{\mathbf{k}'} - p_{\mathbf{k}'}) + \\
&\quad (1-z_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}) p_{\mathbf{k}'} + p_{\mathbf{k}} (1-z_{\mathbf{k}'} - p_{\mathbf{k}'}) + p_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}'} \quad (1.60) \\
&= \left[v_{\mathbf{k}}^2 (1-v_{\mathbf{k}}^2) v_{\mathbf{k}'}^2 (1-v_{\mathbf{k}'}^2) \right]^{1/2} (1-z_{\mathbf{k}} - 2p_{\mathbf{k}}) (1-z_{\mathbf{k}'} - 2p_{\mathbf{k}'}),
\end{aligned}$$

con lo que finalmente

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{exc} | \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} | \psi_{exc} \rangle \\
= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[v_{\mathbf{k}}^2 (1-v_{\mathbf{k}}^2) v_{\mathbf{k}'}^2 (1-v_{\mathbf{k}'}^2) \right]^{1/2} (1-z_{\mathbf{k}} - 2p_{\mathbf{k}}) (1-z_{\mathbf{k}'} - 2p_{\mathbf{k}'}) . \quad (1.61)
\end{aligned}$$

Las ecuaciones (1.54) y (1.61) indican que el valor esperado del hamiltoniano de BCS es

$$\begin{aligned}
E = \langle \psi_{exc} | \hat{H} | \psi_{exc} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[z_{\mathbf{k}} + 2p_{\mathbf{k}} + 2 (1-z_{\mathbf{k}} - 2p_{\mathbf{k}}) v_{\mathbf{k}}^2 \right] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[v_{\mathbf{k}}^2 (1-v_{\mathbf{k}}^2) v_{\mathbf{k}'}^2 (1-v_{\mathbf{k}'}^2) \right]^{1/2} (1-z_{\mathbf{k}} - 2p_{\mathbf{k}}) (1-z_{\mathbf{k}'} - 2p_{\mathbf{k}'}) . \quad (1.62)
\end{aligned}$$

Nótese que esta última expresión únicamente depende de la probabilidad $z_{\mathbf{k}} + 2p_{\mathbf{k}}$, es decir, ambas contribuyen a la energía sin anular el efecto de la otra. Debido a esto, debería ser usada una función de distribución $f_{\mathbf{k}}$ la cual da la probabilidad de ocupación, donde

$$z_{\mathbf{k}} = 2f_{\mathbf{k}} (1-f_{\mathbf{k}}) \quad (1.63)$$

y

$$p_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^2, \quad (1.64)$$

que se obtiene del hecho que $z_{\mathbf{k}}$ es la probabilidad de que (\mathbf{k}, \uparrow) esté ocupado por un electrón y al mismo tiempo $(-\mathbf{k}, \downarrow)$ esté desocupado y viceversa, y $p_{\mathbf{k}}$ es la probabilidad de que ambos, (\mathbf{k}, \uparrow) y $(-\mathbf{k}, \downarrow)$, estén ocupados por un par excitado.

Como las partículas excitadas son especificadas independientemente para cada sistema en el ensamble, la expresión usual de la entropía en términos de $f_{\mathbf{k}}$ debe ser usada:

$$-TS = 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}} + (1-f_{\mathbf{k}}) \ln (1-f_{\mathbf{k}}) . \quad (1.65)$$

Sustituyendo las ecuaciones (1.63) y (1.64) en la ecuación (1.62) y usando la ecuación (1.52) obtenemos que la energía libre de Helmholtz es

$$F = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[f_{\mathbf{k}} + 2 \frac{1-2f_{\mathbf{k}}}{h_{\mathbf{k}}} \right] + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[h_{\mathbf{k}} \frac{1-h_{\mathbf{k}}}{h_{\mathbf{k}'}} \frac{1-h_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}}} \right]^{1/2} \frac{1-2f_{\mathbf{k}}}{h_{\mathbf{k}}} \frac{1-2f_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}} - TS, \quad (1.66)$$

donde $h_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}^2$. Al minimizar la expresión anterior respecto a $h_{\mathbf{k}}$, se encuentra que

$$\epsilon_{\mathbf{k}} + \left\{ \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[h_{\mathbf{k}'} \frac{1-h_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}} \right]^{1/2} \frac{1-2f_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}} \right\} \frac{1-2h_{\mathbf{k}}}{\left[h_{\mathbf{k}} \frac{1-h_{\mathbf{k}}}{h_{\mathbf{k}}} \right]^{1/2}} = 0, \quad (1.67)$$

que podemos reescribir como

$$\frac{\left[h_{\mathbf{k}} \frac{1-h_{\mathbf{k}}}{h_{\mathbf{k}}} \right]^{1/2}}{1-2h_{\mathbf{k}}} = - \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[h_{\mathbf{k}'} \frac{1-h_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}} \right]^{1/2} \frac{1-2f_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (1.68)$$

Entonces, si el potencial es como el de la ecuación (1.41), se encuentra que $h_{\mathbf{k}'}$ es de nuevo de la forma

$$h_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (1.69)$$

y

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \left[h_{\mathbf{k}} \frac{1-h_{\mathbf{k}}}{h_{\mathbf{k}}} \right]^{1/2} = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \quad (1.70)$$

donde al igual que en el caso de temperatura cero $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}$, pero en esta ocasión la brecha (Δ) queda definida como

$$\Delta \equiv -V \sum_{\mathbf{k}'} \left[h_{\mathbf{k}'} \frac{1-h_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}} \right]^{1/2} \frac{1-2f_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}}. \quad (1.71)$$

Minimizando la energía libre de Helmholtz con respecto a $f_{\mathbf{k}}$ se encuentra que

$$2\epsilon_{\mathbf{k}} \frac{1-2h_{\mathbf{k}}}{h_{\mathbf{k}}} + 4 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{h_{\mathbf{k}}(1-h_{\mathbf{k}})h_{\mathbf{k}'}(1-h_{\mathbf{k}'})}{h_{\mathbf{k}}h_{\mathbf{k}'}}^{1/2} \frac{1-2f_{\mathbf{k}'}}{h_{\mathbf{k}'}} + 2k_B T \ln \frac{f_{\mathbf{k}}}{1-f_{\mathbf{k}}} = 0. \quad (1.72)$$

Sustituyendo los resultados obtenidos en las ecuaciones (1.68) a (1.71) llegamos a

$$-\ln \left(\frac{f_{\mathbf{k}}}{1-f_{\mathbf{k}}} \right) = \frac{1}{k_B T} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} + \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}}} \right] = \frac{E_{\mathbf{k}}}{k_B T}. \quad (1.73)$$

La solución para $f_{\mathbf{k}}$ es entonces

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\exp(E_{\mathbf{k}}/k_B T) + 1} = f(E_{\mathbf{k}}). \quad (1.74)$$

Por lo tanto, los electrones no apareados y los pares excitados describen un conjunto de fermiones independientes con relación de dispersión modificada $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}$, donde ahora la Δ recibe físicamente significado como la brecha energética, ya que las energías que se encuentran en $E < \Delta$ no pueden ser alcanzadas.

La nueva densidad de estados está dada entonces por

$$\frac{dN(E)}{dE} = \frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon} \frac{d\epsilon}{dE} = N(0) \frac{E}{(E^2 - \Delta^2)^{1/2}}. \quad (1.75)$$

Introduciendo los resultados dados en las ecuaciones (1.69), (1.70) y (1.74) en la ecuación (1.68), se obtiene

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T}\right), \quad (1.76)$$

en donde si reemplazamos la sumatoria por una integral por medio de la densidad de estados dada en la ecuación (1.75), se llega a

$$1 = N(0) V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon^2 + \Delta^2} \tanh\left(\frac{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}}{2k_B T}\right), \quad (1.77)$$

que es la ecuación para determinar la brecha superconductor. La temperatura crítica se obtiene cuando la brecha superconductor es cero, ya que en este caso $E_{\mathbf{k}}$ es simplemente la energía de los electrones sin interacción, es decir,

$$1 = N(0) V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_C}\right), \quad (1.78)$$

cuya solución es

$$k_B T_C \approx 1.14 \hbar\omega_D e^{-\frac{1}{N(0)V}}, \quad (1.79)$$

cuando $k_B T_C \ll \hbar\omega_D$. Cabe mencionar que estos resultados coinciden con los obtenidos a partir de la transformación de Bogoliubov [Rickayzen, 1966].

1.6. Caso de energía electrónica constante

Para el hamiltoniano de BCS con $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$, la densidad de estados electrónica puede escribirse como,

$$N(\epsilon) = M \delta(\epsilon). \quad (1.80)$$

donde M es el número total de estados apareables en la zona de potencial atractivo mostrada en la figura 1.2. Entonces, la ecuación (1.43) se convierte en

$$1 = \frac{V}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{N(\epsilon) d\epsilon}{\sqrt{\Delta_0^2 + \epsilon^2}} = \frac{MV}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\delta(\epsilon) d\epsilon}{\sqrt{\Delta_0^2 + \epsilon^2}} = \frac{MV}{2\Delta_0}. \quad (1.81)$$

Asimismo, la ecuación (1.75) tiene la siguiente forma,

$$\begin{aligned} 1 &= V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{N(\epsilon) d\epsilon}{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}} \tanh\left(\frac{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}}{2k_B T}\right) \\ &= MV \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\delta(\epsilon) d\epsilon}{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}} \tanh\left(\frac{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}}{2k_B T}\right) = \frac{MV}{2\Delta(T)} \tanh\left(\frac{\Delta(T)}{2k_B T}\right). \end{aligned} \quad (1.82)$$

Por otro lado, la temperatura crítica superconductora determinada por $\Delta(T_c) = 0$, es

$$1 = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{MV}{2\Delta} \tanh\left(\frac{\Delta}{2k_B T_c}\right) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{MV}{4k_B T_c} \cosh^{-2}\left(\frac{\Delta}{2k_B T_c}\right) = \frac{MV}{4k_B T_c}, \quad (1.83)$$

donde se hizo uso del teorema de L'Hopital. De las ecuaciones (1.81) y (1.83) se sigue que

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = 4. \quad (1.84)$$

Además, de la ecuación (1.82) tenemos

$$\tanh\left(\frac{\Delta(T)}{2k_B T}\right) = \frac{\exp \Delta(T)/(k_B T) - 1}{\exp \Delta(T)/(k_B T) + 1} = \frac{2\Delta(T)}{MV}, \quad (1.85)$$

esto es

$$\exp\left(\frac{\Delta(T)}{k_B T}\right) = \frac{1 + \frac{2\Delta(T)}{MV}}{1 - \frac{2\Delta(T)}{MV}} = \frac{MV + 2\Delta(T)}{MV - 2\Delta(T)}. \quad (1.86)$$

Usando la ecuación (1.81) llegamos finalmente a

$$k_B T = \frac{\Delta(T)}{\ln\left(\frac{MV + 2\Delta(T)}{MV - 2\Delta(T)}\right)} = \frac{\Delta(T)}{\ln\left(\frac{\Delta(0) + \Delta(T)}{\Delta(0) - \Delta(T)}\right)}. \quad (1.87)$$

La superconductividad con una energía electrónica constante será estudiada nuevamente en el capítulo 5 dentro del formalismo de condensación de Bose-Einstein.

CAPÍTULO 2. CONDENSACIÓN DE BOSE-EINSTEIN

El fenómeno de la condensación de Bose-Einstein fue predicho originalmente por Albert Einstein en 1925, poco tiempo después de que Satyendra Bose atrajera su atención con una derivación simple de la ley de radiación de Planck, al tratar a los fotones como partículas cuánticas que obedecen una estadística que hoy se conoce como la de Bose-Einstein. Adicionalmente, Einstein demostró que una colección de bosones podrían, a la temperatura y densidad apropiadas, ocupar súbitamente el estado base de forma macroscópica. En 1995, utilizando la técnica de enfriamiento por láser, se observó una condensación de Bose-Einstein de un gas de átomos de rubidio [Anderson, 1995]. Otro ejemplo de dicha condensación es la superfluidez observada en He^4 a 2.17 K, la cual se forma a partir de un líquido, en lugar de un gas de bosones [Guenault, 2003].

Durante este capítulo, revisaremos algunos formalismos de la física estadística que nos permiten analizar un gas de bosones, así como las condiciones de la condensación de Bose-Einstein.

2.1. Ensamblés estadísticos

En esta sección revisaremos los puntos relevantes de los tres ensambles más utilizados en la física estadística.

Microcanónico

El ensamble microcanónico es una herramienta utilizada para describir las propiedades termodinámicas de un sistema aislado [Pathria, 1996]. Para ello, se supone que el sistema se encuentra a una energía (E) constante, la cual puede ser alcanzada por diferentes microestados, cada uno de ellos con una probabilidad de ocurrencia equitativa,

$$\rho_i = \begin{cases} \Omega^{-1}, & \text{si } E - \delta E < E_i < E + \delta E \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases}, \quad (2.1)$$

donde Ω el número total de microestados que cumplen dicha condición.

En términos de Ω , la entropía (S) es definida como

$$S(E, V, N) = k_B \ln \Omega(E, V, N) \quad (2.2)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, V el volumen del sistema y N el número de partículas. Debido a que la termodinámica indica que

$$dE = TdS - pdV + \mu dN, \quad (2.3)$$

siendo T la temperatura, p la presión y μ el potencial químico; entonces tenemos las ecuaciones de estado

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} = \frac{1}{T}, \quad (2.4)$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N} = \frac{p}{T}, \quad (2.5)$$

y

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V} = -\frac{\mu}{T}. \quad (2.6)$$

Ensamble canónico

Consideremos un sistema de N partículas en un volumen fijo que está en equilibrio térmico con un reservorio a temperatura T , entonces la probabilidad de tener al sistema en el microestado con energía E_n es

$$\rho_l = \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} \quad (2.7)$$

donde $\beta \equiv 1/k_B T$ y Z es la función de partición definida como

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l}. \quad (2.8)$$

En términos de la función de partición, el promedio de la energía está dado por

$$\bar{E} = \sum_l \rho_l E_l = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z, \quad (2.9)$$

en tanto que la energía libre de Helmholtz es

$$F(T, V, N) = -pV + \mu N = -k_B T \ln Z(T, V, N). \quad (2.10)$$

Puesto que

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN, \quad (2.11)$$

entonces las ecuaciones de estado son

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = -S, \quad (2.12)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = \mu \quad (2.13)$$

y

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = -p. \quad (2.14)$$

Ensamble gran canónico

Para el caso de un sistema con volumen fijo, temperatura T y un potencial químico μ proveniente de un intercambio de partículas con sus alrededores, la probabilidad de tener al sistema en el estado de N partículas y energía $E_l(N)$ es

$$\rho(N, E_l) = \frac{e^{\alpha N - \beta E_l(N)}}{\Xi}, \quad (2.15)$$

donde $\alpha \equiv \beta\mu$ y Ξ es la gran función de partición, definida como

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_l e^{\alpha N - \beta E_l(N)}. \quad (2.16)$$

En términos de la gran función de partición, el promedio del número de partículas está dado por

$$\bar{N} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_l \rho(N, E_l) N = \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Xi, \quad (2.17)$$

en tanto que la energía promedio es

$$\bar{E} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_l \rho(N, E_l) E_l(N) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi. \quad (2.18)$$

El gran potencial, queda determinado por medio de la gran función de partición como

$$\Omega_{T,V,\mu} = -pV = -k_B T \ln \Xi_{T,V,\mu}. \quad (2.19)$$

Puesto que

$$d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu, \quad (2.20)$$

obtenemos las ecuaciones de estado

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V,\mu} = -S, \quad (2.21)$$

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T,\mu} = -p, \quad (2.22)$$

y

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} = -\bar{N} \quad (2.23)$$

2.2. Partículas cuánticas

En la mecánica cuántica es imposible seguir la trayectoria individual de dos partículas idénticas cuando sus funciones de onda se cruzan. Dicho de otra

manera, las partículas idénticas en la mecánica cuántica son indistinguibles [Merzbacher, 1998].

Consideremos un sistema cuántico de muchas partículas y una observable $\hat{\mathcal{G}}$ con eigenvalores \mathcal{G}_i . Al ser indistinguibles, lo único que importa es cuantas partículas hay en cada estado, por lo cual lo más conveniente es describir al sistema mediante un estado normalizado

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (2.24)$$

el cual indica que hay n_1 partículas con eigenvalor \mathcal{G}_1 , n_2 partículas con eigenvalor \mathcal{G}_2 , etcétera. La expresión (2.24) constituye una forma de representar los estados cuánticos en lenguaje del número de ocupación. Además, los estados escritos en la forma (2.24) componen una base para un sistema de partículas idénticas.

Para trabajar con los estados (2.24) es muy usual definir operadores de creación $\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger$ con la propiedad

$$\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \quad (2.25)$$

es decir, aumenta en una unidad el número de partículas con eigenvalor \mathcal{G}_i , y donde la constante de proporcionalidad se determinara más adelante. De la definición de operador adjunto encontramos que un operador de aniquilación $\hat{\mathcal{G}}_i$ tiene la propiedad

$$\hat{\mathcal{G}}_i |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (2.26)$$

removiendo una partícula con eigenvalor \mathcal{G}_i . Consideremos ahora una nueva observable \hat{o} con eigenvalores correspondientes \mathcal{O}_l , donde denotaremos como \tilde{n}_l al número de partículas que tienen eigenvalor \mathcal{O}_l , y como $\hat{\mathcal{O}}_l^\dagger$ y $\hat{\mathcal{O}}_l$ a sus operadores de creación y aniquilación respectivamente. De esta manera

$$\hat{\mathcal{O}}_l^\dagger |\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, \dots, \tilde{n}_l, \dots\rangle \propto |\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, \dots, \tilde{n}_l + 1, \dots\rangle \quad (2.27)$$

$$\hat{\mathcal{O}}_l |\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, \dots, \tilde{n}_l, \dots\rangle \propto |\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, \dots, \tilde{n}_l - 1, \dots\rangle \quad (2.28)$$

Evidentemente para estados de una partícula, las dos bases están conectadas por la ecuación

$$\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger |0\rangle \equiv |\mathcal{G}_i\rangle = \sum_l |\mathcal{O}_l\rangle \langle \mathcal{O}_l | \mathcal{G}_i\rangle = \sum_l \langle \mathcal{O}_l | \mathcal{G}_i\rangle \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger |0\rangle, \quad (2.29)$$

lo cual nos lleva a

$$\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger = \sum_l \langle \mathcal{O}_l | \mathcal{G}_i\rangle \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger, \quad (2.30)$$

y al obtener su hermitiano,

$$\hat{g}_i = \sum_l \langle g_i | o_l \rangle \hat{o}_l . \quad (2.31)$$

Para determinar el álgebra de estos operadores de creación y aniquilación, notemos que dos operadores de creación \hat{g}_i^\dagger y \hat{g}_j^\dagger , cuando se aplican sucesivamente, producen el mismo estado, salvo una constante que puede depender del orden en el que se apliquen, como se puede ver de las ecuaciones (2.25) y (2.26), entonces

$$\hat{g}_i^\dagger \hat{g}_j^\dagger = \lambda_{ij} \hat{g}_j^\dagger \hat{g}_i^\dagger, \quad (2.32)$$

y usando la relación (2.30) tenemos que

$$(\hat{g}_i^\dagger \hat{g}_j^\dagger - \lambda_{ij} \hat{g}_j^\dagger \hat{g}_i^\dagger) = \sum_{l,l'} \langle o_l | g_i \rangle \langle o_{l'} | g_j \rangle (\hat{o}_l^\dagger \hat{o}_{l'}^\dagger - \lambda_{ij} \hat{o}_{l'}^\dagger \hat{o}_l^\dagger) = 0 \quad (2.33)$$

dado que los coeficientes de la sumatoria son arbitrarios, la única forma que se cumpla la igualdad en el lado derecho de la ecuación es

$$\hat{o}_l^\dagger \hat{o}_{l'}^\dagger - \lambda_{ij} \hat{o}_{l'}^\dagger \hat{o}_l^\dagger + \hat{o}_{l'}^\dagger \hat{o}_l^\dagger - \lambda_{ij} \hat{o}_l^\dagger \hat{o}_{l'}^\dagger = (1 - \lambda_{ij})(\hat{o}_l^\dagger \hat{o}_{l'}^\dagger + \hat{o}_{l'}^\dagger \hat{o}_l^\dagger) = 0 \quad (2.34)$$

La cual tiene por solución

$$\lambda_{ij} = 1 \quad (2.35)$$

o

$$\hat{o}_l^\dagger \hat{o}_{l'}^\dagger + \hat{o}_{l'}^\dagger \hat{o}_l^\dagger = 0. \quad (2.36)$$

La ecuación (2.36) implica a su vez que

$$\hat{o}_l^\dagger \hat{o}_{l'}^\dagger + \hat{o}_{l'}^\dagger \hat{o}_l^\dagger = \sum_{l,l'} \langle g_i | o_l \rangle \langle g_j | o_{l'} \rangle (\hat{g}_i^\dagger \hat{g}_j^\dagger + \hat{g}_j^\dagger \hat{g}_i^\dagger) = 0 \quad (2.37)$$

y nuevamente al ser los coeficientes arbitrarios, $\hat{g}_i^\dagger \hat{g}_j^\dagger + \hat{g}_j^\dagger \hat{g}_i^\dagger = 0$, que en la ecuación (2.32) significa que

$$\lambda_{ij} = -1 \quad (2.38)$$

es también solución. De esta manera tenemos que

$$\hat{g}_i^\dagger \hat{g}_j^\dagger \pm \hat{g}_j^\dagger \hat{g}_i^\dagger = 0 \quad (2.39)$$

para $\lambda_{ij} = \mp 1$ respectivamente. El hermítico adjunto de la ecuación (2.39) es

$$\hat{g}_i \hat{g}_j \pm \hat{g}_j \hat{g}_i = 0 \quad (2.40)$$

Usando el mismo argumento, consideremos ahora el caso de dos operadores \hat{g}_i y \hat{g}_j^\dagger , con $i \neq j$, tenemos que

$$\hat{g}_i \hat{g}_j^\dagger = \mu \hat{g}_j^\dagger \hat{g}_i . \quad (2.41)$$

De las ecuaciones (2.30) y (2.31) se sigue que

$$\hat{\mathcal{G}}_i \hat{\mathcal{G}}_j^\dagger - \mu \hat{\mathcal{G}}_j^\dagger \hat{\mathcal{G}}_i = \sum_{l,l'} \langle \mathcal{G}_i | \mathcal{O}_{l'} \rangle \langle \mathcal{O}_l | \mathcal{G}_j \rangle (\hat{\mathcal{O}}_l^\dagger \hat{\mathcal{O}}_{l'} - \mu \hat{\mathcal{O}}_{l'} \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger) = 0 \quad (2.42)$$

en donde al tener coeficientes arbitrarios

$$\hat{\mathcal{O}}_l^\dagger \hat{\mathcal{O}}_{l'} - \mu \hat{\mathcal{O}}_{l'} \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger = 0 \text{ para } l \neq l' \quad (2.43)$$

que al sustituirse en (2.42) nos lleva a

$$\sum_l \langle \mathcal{G}_i | \mathcal{O}_l \rangle \langle \mathcal{O}_l | \mathcal{G}_j \rangle (\hat{\mathcal{O}}_l^\dagger \hat{\mathcal{O}}_l - \mu \hat{\mathcal{O}}_l \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger) = 0. \quad (2.44)$$

Esta ecuación tiene como solución general a

$$\hat{\mathcal{O}}_l^\dagger \hat{\mathcal{O}}_l - \mu \hat{\mathcal{O}}_l \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger = \hat{A} \quad (2.45)$$

ya que

$$\sum_l \langle \mathcal{G}_i | \mathcal{O}_l \rangle \langle \mathcal{O}_l | \mathcal{G}_j \rangle = \delta_{i,j}. \quad (2.46)$$

Usado entonces las ecuaciones (2.42) y (2.45) tenemos que

$$\hat{\mathcal{G}}_i \hat{\mathcal{G}}_j^\dagger - \mu \hat{\mathcal{G}}_j^\dagger \hat{\mathcal{G}}_i = \sum_l \langle \mathcal{G}_i | \mathcal{O}_l \rangle \langle \mathcal{O}_l | \mathcal{G}_j \rangle \hat{A} = \delta_{i,j} \hat{A} \quad (2.47)$$

de tal manera que \hat{A} es la misma para cualquier par de operadores de creación y aniquilación sin importar la base que se escoja.

Consideremos ahora un operador \hat{n}_i que cumple con

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (2.48)$$

es decir, devuelve el número de partículas con eigenvalor \mathcal{G}_i . Entonces

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i \quad (2.49)$$

es el operador que mide el número total de partículas, y este debe ser independiente de la base que se escoja. Solo hay tres operadores que son invariantes ante la transformación (2.30) y (2.31). Uno de ellos es el operador constante y los otros dos son

$$\sum_i \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger \hat{\mathcal{G}}_i = \sum_l \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger \hat{\mathcal{O}}_l \quad (2.50)$$

y

$$\sum_i \hat{\mathcal{G}}_i \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger = \sum_l \hat{\mathcal{O}}_l \hat{\mathcal{O}}_l^\dagger \quad (2.51)$$

Entonces se espera que \hat{n}_i tenga la forma

$$\hat{n}_i = x \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger \hat{\mathcal{G}}_i + y \hat{\mathcal{G}}_i \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger + z \hat{I}, \quad (2.52)$$

donde x, y, z son constantes. Dado que debe cumplirse $\hat{n}_i|0\rangle=0$, entonces $y+z=0$, es decir,

$$\hat{n}_i = x\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger\hat{\mathcal{G}}_i + y\hat{\mathcal{G}}_i\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger - \hat{I} \quad (2.53)$$

Usando las ecuaciones (2.25), (2.26) y (2.48), encontramos las siguientes relaciones de conmutación

$$\hat{n}_i\hat{\mathcal{G}}_j^\dagger - \hat{\mathcal{G}}_j^\dagger\hat{n}_i |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = n_i\hat{\mathcal{G}}_j^\dagger - \hat{\mathcal{G}}_j^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = 0 \quad \text{si } i \neq j, \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} \hat{n}_i\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger - \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger\hat{n}_i |\dots, n_i, \dots\rangle &= (n_i + 1)\alpha |\dots, n_i + 1, \dots\rangle - n_i\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle \\ &= (n_i + 1)\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle - n_i\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle \\ &= \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle \end{aligned} \quad (2.55)$$

y de forma análoga,

$$\hat{n}_i\hat{\mathcal{G}}_i - \hat{\mathcal{G}}_i\hat{n}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = -\hat{\mathcal{G}}_i |\dots, n_i, \dots\rangle. \quad (2.56)$$

Si la expresión (2.53) es sustituida en las relaciones de conmutación anteriores en consistencia con la ecuación (2.47) requiere que $\mu=+1$ si $\lambda_{ij}=1$ y $\mu=-1$ si $\lambda_{ij}=-1$. Además,

$$\hat{A}\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger - \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger\hat{A} = 0 \quad (2.57)$$

por lo que \hat{A} debe ser un múltiplo del operador identidad. Finalmente al actuar la ecuación (2.47) en el vacío, vemos que $\hat{A}|0\rangle=|0\rangle$, y entonces $\hat{A}=\hat{I}$.

En resumen, se llega a la conclusión de que hay dos y sólo dos formas en mecánica cuántica para describir partículas indistinguibles:

$$\text{Bosones} \quad \begin{cases} \hat{\mathcal{G}}_i^\dagger\hat{\mathcal{G}}_j^\dagger - \hat{\mathcal{G}}_j^\dagger\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger = 0 \\ \hat{\mathcal{G}}_i\hat{\mathcal{G}}_j - \hat{\mathcal{G}}_j\hat{\mathcal{G}}_i = 0 \\ \hat{\mathcal{G}}_i\hat{\mathcal{G}}_j^\dagger - \hat{\mathcal{G}}_j\hat{\mathcal{G}}_i^\dagger = \delta_{ij} \\ \hat{n}_i = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2.58)$$

y

$$\text{Fermiones} \quad \begin{cases} \hat{g}_i^\dagger \hat{g}_j^\dagger + \hat{g}_j^\dagger \hat{g}_i^\dagger = 0 \\ \hat{g}_i \hat{g}_j + \hat{g}_j \hat{g}_i = 0 \\ \hat{g}_i \hat{g}_j^\dagger + \hat{g}_j \hat{g}_i^\dagger = \delta_{ij} \\ \hat{n}_i = 0, 1 \end{cases} \quad (2.59)$$

2.3. Gas ideal de bosones

La energía total de un sistema ideal de N bosones con una configuración n_l dada es

$$E(n_1, \dots, n_l, \dots) = \sum_l n_l \varepsilon_l, \quad (2.60)$$

donde ε_l y n_l son respectivamente la energía y el número de ocupación del estado l , siendo

$$N = \sum_l n_l. \quad (2.61)$$

Por ser bosones, los valores que podría tomar n_l son

$$n_l = 0, 1, \dots, N. \quad (2.62)$$

Podemos escribir entonces la gran función de partición como

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\alpha N} \sum_{n_l} e^{-\beta \sum_l n_l \varepsilon_l} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_l} \prod_l e^{\alpha - \beta \varepsilon_l n_l}, \quad (2.63)$$

donde la suma sobre configuraciones n_l debe cumplir la ecuación (2.61). Se puede demostrar que la ecuación (2.63) puede ser reescrita como

$$\Xi = \prod_l \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{\alpha - \beta \varepsilon_l n_l} = \prod_l \frac{1}{1 - e^{\alpha - \beta \varepsilon_l}}, \quad (2.64)$$

por lo cual el gran potencial viene dado por

$$\Omega = -pV = k_B T \sum_l \ln 1 - e^{\alpha - \beta \varepsilon_l}. \quad (2.65)$$

Por otro lado, la energía promedio de acuerdo con la ecuación (2.18) es

$$\bar{E} = \sum_l \frac{\varepsilon_l}{e^{\beta \varepsilon_l - \alpha} - 1}, \quad (2.66)$$

y el número de partículas promedio usando la ecuación (2.17) es

$$\bar{N} = \sum_l \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_l - \alpha} - 1}, \quad (2.67)$$

lo cual muestra que el número promedio de ocupación de la energía ε_l es

$$\bar{n}_l = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_l - \alpha} - 1}, \quad (2.68)$$

al comparar las ecuaciones (2.66) y (2.67) con (2.60) y (2.61) respectivamente. Dado que el número de partículas en un sistema cerrado es no negativo, entonces la ecuación (2.67) implica que

$$\alpha < \min \beta\varepsilon_l, \quad (2.69)$$

es decir,

$$\mu < \min \varepsilon_l. \quad (2.70)$$

2.4. Condensación de Bose-Einstein

Consideremos un gas ideal de bosones libres, donde las energías de una partícula están dadas por

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.71)$$

que al ser sustituido en la ecuación (2.67) se obtiene

$$\bar{N} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}} - \alpha} - 1}, \quad (2.72)$$

donde $\alpha < 0$ de acuerdo con la ecuación (2.69).

Sistemas tridimensionales

Si reemplazamos la sumatoria por una integral, obtenemos de la ecuación (2.72) que

$$\bar{N} = \frac{V}{2\pi^3} \int \frac{d^3k}{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}} - \alpha} - 1} + \bar{N}_0 = \frac{4\pi\sqrt{2}}{2\pi\hbar^3} Vm^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon - \alpha} - 1} + \bar{N}_0 \quad (2.73)$$

donde el término \bar{N}_0 es el promedio de ocupación de la energía $\varepsilon = 0$. \bar{N}_0 es llamado el condensado y es escrito por separado ya que el término con $\varepsilon = 0$ no está incluido dentro de la integral.

Para α finita y negativa, \bar{N}_0 es pequeña en comparación al primer término de la ecuación (2.73), por lo cual podemos considerarlo despreciable, *i.e.*,

$$\bar{N} \simeq \frac{4\pi\sqrt{2}}{2\pi\hbar^3} Vm^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon - \alpha} - 1}. \quad (2.74)$$

La contribución de \bar{N}_0 solo resulta relevante cuando α es cercana a cero [Silvera, 1997], como puede apreciarse en la Fig. 2.1. Para estimar la temperatura en la cual esto ocurre, llamada temperatura crítica de condensación (T_C), notemos que a medida que la temperatura decrece, teniendo fijos el número de partículas y el volumen, α debe acercarse a cero con la finalidad de satisfacer la ecuación (2.74). Sin embargo, cuando $\alpha = 0$, alcanzando su máximo valor nominal, la ecuación (2.74) no puede cumplirse y nos conduce a un nuevo comportamiento en el que las partículas sobrantes caen directamente dentro del condensado. Entonces la temperatura crítica es aquella que cumple con

$$\bar{N} = \frac{4\pi\sqrt{2}}{2\pi\hbar^3} Vm^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{k_B T_C}} - 1} = \frac{4\pi\sqrt{2}}{2\pi\hbar^3} Vm^{3/2} k_B T_C^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^x - 1}, \quad (2.75)$$

lo cual nos lleva a

$$T_C \approx 3.31 \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\bar{N}}{V} \right)^{2/3}. \quad (2.76)$$

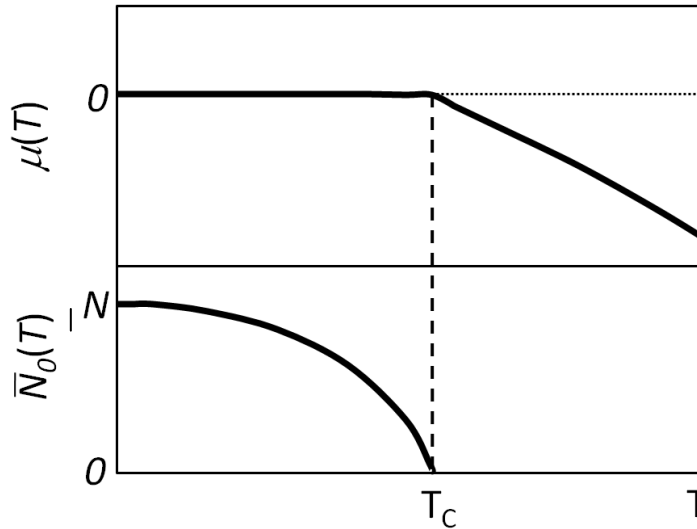


Figura 2.1 El potencial químico μ y la ocupación del condensado \bar{N}_0 de un gas ideal de Bose como una función de la temperatura.

En resumen, hemos encontrado la variación del potencial químico con la temperatura y la temperatura crítica de la condensación de Bose-Einstein para un gas tridimensional.

Sistemas bidimensionales

Al reemplazar la sumatoria de la ecuación (2.72) por una integral, para un sistema bidimensional obtenemos que

$$\bar{N} = \frac{A}{2\pi^2} \int \frac{d^2k}{e^{\beta\varepsilon_k - \alpha} - 1} = \frac{Am}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon - \alpha} - 1}, \quad (2.77)$$

siendo A el área del sistema. Sin embargo, nótese que cuando $\alpha \rightarrow 0$ la integral tiende a infinito, ya que para $\delta \rightarrow 0$ la ecuación (2.77) es reescrita como

$$\bar{N} = \frac{Am}{2\pi\hbar^2} \left(\int_0^\delta \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} + \int_\delta^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \right) \approx \frac{Am}{2\pi\hbar^2} \left(\int_0^\delta \frac{d\varepsilon}{\beta\varepsilon} + \int_\delta^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \right) = \infty, \quad (2.78)$$

debido a que la integral cuyos límites abarcan $0 < \varepsilon < \delta$ diverge. Puesto que \bar{N} es finita, siempre existe una $\alpha < 0$ tal que se cumple la ecuación (2.77). Debido a esto, no se ocupa macroscópicamente el estado base y por lo tanto no se produce el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein en este caso.

Cabe mencionar que generalizando este análisis para un gas libre de bosones en D dimensiones, es posible mostrar que el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein únicamente se presenta si $D > 2$ [Gunton, 1968].

CAPÍTULO 3. PARES DE COOPER COLECTIVOS

Desde el descubrimiento de la superconductividad ha habido una búsqueda continua en correlacionarla con la condensación de Bose-Einstein. Existen diversos motivos que soportan esta idea, por ejemplo, los pares de Cooper, responsables del fenómeno superconductor, poseen un espín entero, como las partículas bosónicas. Sin embargo, a pesar de las notables similitudes entre ambos fenómenos, el hecho de que los operadores de creación y aniquilación de pares de Cooper no cumplen las relaciones de conmutación bosónicas (2.58) ha desalentado este esfuerzo, como se menciona en el artículo original de BCS [Bardeen, 1957].

La falla más importante es quizás la imposibilidad de tener dos pares de Cooper en el mismo estado cuántico, es decir, sus números de ocupación son cero ó uno, tal como ocurre en fermiones, hecho que se discutirá con mayor detalle en la sección 3.1. En este capítulo introduciremos el concepto de pares de Cooper colectivos, los cuales son combinaciones lineales de pares de Cooper, y mostraremos su naturaleza bosónica.

3.1. Propiedades de los pares de Cooper

Como vimos en el capítulo 1, los pares de Cooper son responsables de la superconductividad. Estas partículas compuestas por dos electrones o huecos poseen espín entero y no son bosones debido a su origen fermiónico, es decir,

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'} \right] = \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} - \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} = \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} = 0 \quad (3.1)$$

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \right] = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = 0 \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \left[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \right] &= \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger - \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \quad - \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = 1 - \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \equiv \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ y $\hat{b}_{\mathbf{k}} \equiv \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}$ son respectivamente los operadores de creación y aniquilación de un par de Cooper en estado \mathbf{k} . Las ecuaciones (3.1) y (3.2) muestran que los operadores de creación (aniquilación) conmutan entre sí, cumpliendo así dos de los conmutadores bosónicos. Sin embargo, para $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ la ecuación (3.3) indica que el conmutador no es bosónico, pudiendo tener valores entre -1 y 1 .

Mas grave aún, es la aplicación sucesiva de dos operadores de creación ó de aniquilación del mismo estado cuántico,

$$\begin{aligned}\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger 2} &= \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} = 0 \\ \hat{b}_{\mathbf{k}}^2 &= \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = 0\end{aligned}\quad (3.4)$$

los cuales se anulan debido a la presencia de dos operadores de creación ó aniquilación fermiónicos sucesivos. La ecuación (3.4) impide la acumulación de más de un par de Cooper en el mismo estado cuántico.

Las ecuaciones (3.1) a (3.4) muestran como los pares de Cooper presentan características combinadas de bosones y fermiones. En particular, la ecuación (3.4) imposibilita una condensación de Bose-Einstein de pares de Cooper.

3.2. Estado base de BCS

Consideremos la función de onda del estado base ($|G\rangle$) utilizada por la teoría BCS, que se muestra en la ecuación (1.31),

$$|G\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}) |0\rangle. \quad (3.5)$$

Para el caso de un superconductor con brecha energética $\Delta \neq 0$, la ecuación (1.46) conduce a

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\Delta^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}} \right) > 0. \quad (3.6)$$

Entonces podemos reescribir la ecuación (3.5) como

$$\begin{aligned}|G\rangle &= \left[\prod_{\tilde{\mathbf{k}}} u_{\tilde{\mathbf{k}}} \right] \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) |0\rangle \\ &= \left[\prod_{\tilde{\mathbf{k}}} u_{\tilde{\mathbf{k}}} \right] \left[1 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}}{u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} + \dots \right] |0\rangle, \\ &= \left[\prod_{\tilde{\mathbf{k}}} u_{\tilde{\mathbf{k}}} \right] \sum_{n=0}^M \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right)^n |0\rangle\end{aligned}\quad (3.7)$$

donde $M \equiv \sum_{\mathbf{k}} 1$ es el número máximo de pares de Cooper que pueden existir en el sistema. Nótese que en la ecuación (3.7) el índice n enumera sumatorias de

términos con n pares. De aquí, definimos el estado de n pares de Cooper colectivos $|n\rangle$ como

$$|n\rangle \equiv A_n \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right)^n |0\rangle = A_n \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle, \quad (3.8)$$

donde

$$A_n \equiv \left[n! \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \right|^2 \right]^{-1/2} \quad (3.9)$$

es el factor de normalización que puede obtenerse como sigue:

$$\begin{aligned} 1 = \langle n|n\rangle &= |A_n|^2 \langle 0| \sum_{\mathbf{q}_1} \cdots \sum_{\mathbf{q}_n}^{q_i \neq q_j} \frac{v_{\mathbf{q}_1}^* \cdots v_{\mathbf{q}_n}^*}{u_{\mathbf{q}_1}^* \cdots u_{\mathbf{q}_n}^*} \hat{b}_{\mathbf{q}_1} \cdots \hat{b}_{\mathbf{q}_n} \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \\ &= |A_n|^2 \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \sum_{\mathbf{q}_1}^{q_i \neq q_j} \cdots \sum_{\mathbf{q}_n} \frac{v_{\mathbf{q}_1}^* \cdots v_{\mathbf{q}_n}^*}{u_{\mathbf{q}_1}^* \cdots u_{\mathbf{q}_n}^*} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \langle 0| \hat{b}_{\mathbf{q}_1} \cdots \hat{b}_{\mathbf{q}_n} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Para que $\langle 0| \hat{b}_{\mathbf{q}_1} \cdots \hat{b}_{\mathbf{q}_n} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \neq 0$, necesariamente $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n = \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n$, habiendo $n!$ maneras de que esto pase, ya que \mathbf{q}_1 tiene n opciones, \mathbf{q}_2 tendrá $n-1$ opciones restantes, y así sucesivamente. Entonces la ecuación (3.10) se convierte en

$$1 = |A_n|^2 n! \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \right|^2 \quad (3.11)$$

de donde se obtiene (3.9). Cabe mencionar que la función de onda (3.8) es eigenfunción del operador de número de pares propuesto por Fujita y Morabito [Fujita, 1998], como se aprecia a continuación,

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} |n\rangle &= A_n \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \\ &= A_n \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}_1, \uparrow} - \hat{n}_{-\mathbf{k}_1, \downarrow}) + \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} \right] \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \\ &= A_n \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \left[\sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} + \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} \right] \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} |n\rangle + \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n}^{k_i \neq k_j} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde

$$(\hat{n}_{\mathbf{k}_1, \uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}_1, \downarrow}) \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^\dagger |0\rangle = 0 \quad (3.13)$$

al ser $\mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n \neq \mathbf{k}_1$. Repitiendo el proceso anterior obtenemos

$$\sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} |n\rangle = \sum_{\mathbf{k}} (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} + \cdots + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_n}) |n\rangle + \sum_{\substack{\mathbf{k}_j \neq \mathbf{k}_j \\ \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} |0\rangle = n |n\rangle \quad (3.14)$$

confirmando que (3.8) es un estado de n pares.

En términos de $|n\rangle$ la función de onda (3.5) puede reescribirse como

$$|G\rangle = \left[\prod_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \right] \sum_{n=0}^M \frac{1}{A_n} |n\rangle, \quad (3.15)$$

en otras palabras, el estado base superconductor es una combinación lineal de estados de n pares.

Por otro lado, la ecuación (3.8) sugiere que el estado $|n\rangle$ puede visualizarse como el producto de n combinaciones lineales de pares de Cooper idénticas,

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger. \quad (3.16)$$

A dicha combinación lineal le llamamos *par de Cooper colectivo*. Nótese que al aplicar dos veces el mismo operador colectivo, este no se anula, a diferencia de lo que ocurre con los pares de Cooper individuales. Por lo tanto, es factible una acumulación macroscópica de pares de Cooper colectivos en un solo estado cuántico, lo cual se discutirá en el capítulo 4.

3.3. Naturaleza bosónica de los pares colectivos

En base a los resultados de la sección 3.2 y considerando el espacio de Hilbert generado por los estados $|n\rangle$ descritos en la ecuación (3.8), definimos el operador de creación (\hat{a}^\dagger) y el de aniquilación (\hat{a}) de un par de Cooper colectivo como [Ramírez, 2009]

$$\hat{a}^\dagger \equiv \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\eta} \quad (3.17)$$

y

$$\hat{a} \equiv \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{\beta}. \quad (3.18)$$

donde los operadores $\hat{\eta}$ y $\hat{\beta}$ tienen como eigenfunciones a los estados $|n\rangle$ y operan de la siguiente manera

$$\hat{\eta}|n\rangle = \eta_n|n\rangle = \sqrt{n+1} \frac{A_{n+1}}{A_n}|n\rangle, \quad (3.19)$$

y

$$\hat{\beta}|n\rangle = \beta_n|n\rangle = \frac{\sqrt{n}}{n} \frac{A_{n-1}}{M-n+1}|n\rangle. \quad (3.20)$$

Las relaciones de conmutación de $\hat{\eta}$ y $\hat{\beta}$ con los operadores $\sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ y $\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}/v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}$ se analizan en el apéndice A.

De las ecuaciones (3.17) y (3.19) encontramos que

$$\begin{aligned} \hat{a}^{\dagger}|n\rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\eta}|n\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \eta_n A_n \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right)^n |0\rangle \\ &= \eta_n A_n \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right)^{n+1} |0\rangle = \eta_n \frac{A_n}{A_{n+1}} |n+1\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Por otro lado, para el operador de aniquilación,

$$\hat{a}|n\rangle = \beta_n A_n \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \quad (3.22)$$

donde $\hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle = 0$ si $\mathbf{k} \notin \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n$. Entonces

$$\begin{aligned} \hat{a}|n\rangle &= \beta_n A_n \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_2} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_2} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \\ &+ \beta_n A_n \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}_3}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle, \\ &\vdots \\ &+ \beta_n A_n \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_n} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{n-1}}^{\dagger} |0\rangle \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde al ser las sumatorias sobre índices mudos, podemos reescribir (3.23) como

$$\begin{aligned}
\hat{a}|n\rangle &= \beta_n A_n n \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_{n-1}}^\dagger |0\rangle \\
&= \frac{\sqrt{n}}{n} \frac{A_{n-1}}{M-n+1} A_n n (M-n+1) \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\substack{\mathbf{k}_{n-1} \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_{n-1}}^\dagger |0\rangle. \quad (3.24) \\
&= \sqrt{n} A_{n-1} \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\substack{\mathbf{k}_{n-1} \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_{n-1}}^\dagger |0\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle
\end{aligned}$$

En resumen,

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{cases} \quad (3.25)$$

Las ecuaciones anteriores constituyen la base para representar a un sistema de partículas bosónicas y de las cuales es inmediato que los operadores de creación y aniquilación de pares de Cooper colectivos cumplen con relaciones de conmutación bosónicas, es decir, en el subespacio generado por los estados $|n\rangle$ definidos en la ecuación (3.8)

$$\begin{cases} [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}] = 0 \\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I} \end{cases} \quad (3.26)$$

De esta manera se demuestra que el estado base de BCS puede representarse por medio de partículas bosónicas.

3.4. Análisis del límite diluido

El origen de la condición $\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j$ en la ecuación (3.9) proviene de que la aplicación de dos operadores de creación o aniquilación sucesivos aniquila el estado, de acuerdo a lo que ya se explicó en la ecuación (3.4). De hecho podemos reescribir

$$\sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1} \cdots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \cdots u_{\mathbf{k}_n}} \right|^2 = \sum_{\mathbf{k}_1} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1}}{u_{\mathbf{k}_1}} \right|^2 \sum_{\mathbf{k}_2 \neq \mathbf{k}_1} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_2}}{u_{\mathbf{k}_2}} \right|^2 \cdots \sum_{\mathbf{k}_n \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{n-1}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_n}} \right|^2. \quad (F.27)$$

Sin embargo, cuando el número máximo de pares de Cooper que pueden existir en el sistema M es muy grande en comparación con el número total de pares del

sistema n , para cada conjunto posible $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n$ podemos usar la aproximación de

$$\sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 = \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 - \sum_{\mathbf{k} = \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 \approx \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 \quad (3.28)$$

donde se asume que al ser $M \gg n$

$$\sum_{\mathbf{k} = \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 / \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 \ll 1, \quad (3.29)$$

ya que el numerador de esta expresión tiene n términos en tanto el denominador tiene M .

Bajo la aproximación (3.28) tenemos entonces que

$$\eta_n = \sqrt{n+1} \frac{A_{n+1}}{A_n} \approx \frac{\sqrt{(n+1)n! \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_n} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \right|^2}}{\sqrt{(n+1)! \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_{n+1}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_{n+1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_{n+1}}} \right|^2}} = \left(\sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 \right)^{-1/2} \quad (3.30)$$

y

$$\beta_n = \frac{\sqrt{n}}{n} \frac{A_{n-1}}{M-n+1} \frac{A_n}{A_n} \approx \eta_n = \frac{\sqrt{n}}{nM} \frac{\sqrt{n! \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_n} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \right|^2}}{\sqrt{(n-1)! \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_{n-1}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \right|^2}} = \frac{1}{M} \left(\sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 \right)^{1/2}. \quad (3.31)$$

Por lo tanto, los operadores $\hat{\eta}$ y $\hat{\beta}$ se vuelven constantes en el límite diluido,

$$\hat{a}^\dagger = \left(\sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 \right)^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad \text{y} \quad \hat{a} = \frac{1}{M} \left(\sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2 \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}, \quad (3.32)$$

es decir, los pares de Cooper colectivos son combinaciones lineales de pares de Cooper ordinarios.

3.5. Transformación unitaria de pares de Cooper

En general, se pueden definir los operadores de creación de pares de Cooper colectivos a través de una transformación unitaria de pares de Cooper [Ramírez, 2011], *i.e.*,

$$\hat{a}_\alpha^\dagger \equiv \sum_{l=1}^M A_\alpha(l) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{l=1}^M \exp\left(\frac{i2\pi l\alpha}{M}\right) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger \quad (3.33)$$

donde $\alpha=0,1,\dots,M-1$, $A_\alpha(l) = \frac{1}{\sqrt{M}} \exp\left(\frac{i2\pi l\alpha}{M}\right)$ y entonces

$$\sum_{l=1}^M A_\alpha^*(l) A_\beta(l) = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M \exp\left[\frac{i2\pi l(\beta-\alpha)}{M}\right] = \delta_{\alpha,\beta}. \quad (3.34)$$

La ecuación (3.34) demuestra que la transformación (3.33) es unitaria y asegura que todos los operadores \hat{a}_α^\dagger son linealmente independientes. En consecuencia, los pares colectivos (3.33) constituyen una base del espacio de Hilbert generado por los pares de Cooper originales. Los operadores de aniquilación correspondientes pueden escribirse como

$$\hat{a}_\alpha \equiv \sum_{l=1}^M A_\alpha^*(l) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}. \quad (3.35)$$

Los operadores de creación y aniquilación definidos en las ecuaciones (3.33) y (3.35) poseen la característica de que la aplicación sucesiva de dos o más operadores idénticos es distinta a cero, lo cual es fundamental para un sistema bosónico.

Partiendo de las definiciones (3.33) y (3.35), encontramos que

$$\left[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta \right] = \sum_{l,l'=1}^M A_\alpha^*(l) A_\beta^*(l') \left[\hat{b}_{\mathbf{k}_l}, \hat{b}_{\mathbf{k}_{l'}} \right] = 0 \quad (3.36)$$

$$\left[\hat{a}_\alpha^\dagger, \hat{a}_\beta^\dagger \right] = \sum_{l,l'=1}^M A_\alpha(l) A_\beta(l') \left[\hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{k}_{l'}}^\dagger \right] = 0 \quad (3.37)$$

y

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^\dagger \right] &= \sum_{l,l'=1}^M A_\alpha^*(l) A_\beta(l') \left[\hat{b}_{\mathbf{k}_l}, \hat{b}_{\mathbf{k}_{l'}}^\dagger \right] \\ &= \sum_{l,l'=1}^M A_\alpha^*(l) A_\beta(l') \left(1 - \hat{n}_{-\mathbf{k}_l\downarrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}_l\uparrow} \right) \delta_{l,l'} \\ &= \delta_{\alpha,\beta} - \sum_{l=1}^M A_\alpha^*(l) A_\beta(l) \left(\hat{n}_{-\mathbf{k}_l\downarrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}_l\uparrow} \right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

donde se usaron las ecuaciones (3.1) a (3.3) y (3.34). Nótese que la ecuación (3.38) contiene una sumatoria que analizaremos a continuación.

En general, un estado cuántico con N pares de Cooper colectivos puede ser escrito como

$$\begin{aligned}
|n_0, \dots, n_{M-1}\rangle &\equiv B_{n_0, \dots, n_{M-1}} \prod_{\nu=0}^{M-1} \hat{a}_\nu^\dagger{}^{n_\nu} |0\rangle \\
&= B_{n_0, \dots, n_{M-1}} \prod_{\nu=0}^{M-1} \left(\sum_{l=1}^M A_\nu(l) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger \right)^{n_\nu} |0\rangle \\
&= B_{n_0, \dots, n_{M-1}} \left(\sum_{l=1}^M A_0(l) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger \right)^{n_0} \cdots \left(\sum_{l=1}^M A_{M-1}(l) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger \right)^{n_{M-1}} |0\rangle \\
&= \sum_{l_1=1}^M \cdots \sum_{l_N=1}^M C(l_1, \dots, l_N) \hat{b}_{\mathbf{k}_{l_1}}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_{l_N}}^\dagger |0\rangle,
\end{aligned} \tag{3.39}$$

donde $B_{n_0, \dots, n_{M-1}}$ es el factor de normalización,

$$\sum_{\nu=0}^{M-1} n_\nu = N \tag{3.40}$$

y

$$C(l_1, \dots, l_N) = B_{n_0, \dots, n_{M-1}} A_0(l_1) \cdots A_{M-1}(l_N). \tag{3.41}$$

De la ecuación (3.39) encontramos que

$$\begin{aligned}
\sum_{l=1}^M \hat{n}_{\mathbf{k}_l, \sigma} |n_0, \dots, n_{M-1}\rangle &= \sum_{l_1=1}^M \cdots \sum_{l_N=1}^M C(l_1, \dots, l_N) \sum_{l=1}^M \hat{n}_{\mathbf{k}_l, \sigma} \hat{b}_{\mathbf{k}_{l_1}}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_{l_N}}^\dagger |0\rangle \\
&= \sum_{l_1=1}^M \cdots \sum_{l_N=1}^M C(l_1, \dots, l_N) \sum_{l=1}^M \delta_{l, l_1} + \cdots + \delta_{l, l_N} \hat{b}_{\mathbf{k}_{l_1}}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_{l_N}}^\dagger |0\rangle \\
&= N |n_0, \dots, n_{M-1}\rangle.
\end{aligned} \tag{3.42}$$

En consecuencia $\langle \sum \hat{n}_{-\mathbf{k}_l, \downarrow} \rangle = \langle \sum \hat{n}_{\mathbf{k}_l, \uparrow} \rangle = N$ y dado que $|\sum_l A_l B_l| \leq \sum_l |A_l| |B_l|$, entonces

$$\left\langle \left| \sum_{l=1}^M A_\alpha^*(l) A_\beta(l) \hat{n}_{-\mathbf{k}_l, \downarrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}_l, \uparrow} \right| \right\rangle \leq \sum_{l=1}^M |A_\alpha^*(l)| |A_\beta(l)| \left(\langle \hat{n}_{-\mathbf{k}_l, \downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_l, \uparrow} \rangle \right) = \frac{2N}{M}, \tag{3.43}$$

donde $\langle \hat{o} \rangle \equiv \langle n_0, \dots, n_{M-1} | \hat{o} | n_0, \dots, n_{M-1} \rangle$. Por lo tanto en el límite diluido, es decir, cuando $N/M \rightarrow 0$, la ecuación (3.38) conduce a

$$\left[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^\dagger \right] = \delta_{\alpha, \beta}. \quad (3.44)$$

En resumen, las ecuaciones (3.36), (3.37) y (3.44) demuestran que para el límite diluido podemos construir un conjunto de pares de Cooper colectivos con propiedades bosónicas. Dicho conjunto constituye una base del mismo espacio de Hilbert de los pares de Cooper.

Como se aprecia a lo largo del capítulo, los pares de Cooper colectivos representan un formalismo alternativo para representar los estados superconductores. La naturaleza bosónica surge de una participación difusa en los pares de Cooper ordinarios y permite la acumulación de una cantidad macroscópica de partículas en un solo estado cuántico, dando pie a estudiar el fenómeno superconductor desde el punto de vista de la condensación de Bose-Einstein, la cual analizaremos en el siguiente capítulo.

CAPÍTULO 4. CONDENSACIÓN DE LOS PARES COLECTIVOS

En el capítulo anterior demostramos el carácter bosónico de los pares de Cooper colectivos en el límite diluido. Es importante enfatizar que el hecho de ser bosones no garantiza su condensación de Bose-Einstein a temperatura finita, como se ejemplificó en el Capítulo 2 para un gas ideal de bosones libres en dos dimensiones, donde existe una densidad finita de estados alrededor del estado base generando grandes fluctuaciones que impiden una transición de fase a temperatura finita, de acuerdo con el teorema de Mermin-Wagner [Mermin, 1966]. Por lo tanto, se requiere encontrar el espectro de energías de los pares colectivos y entonces, mediante un análisis estadístico, determinar si éstos presentan o no la condensación de Bose-Einstein.

A lo largo de este capítulo calcularemos el espectro de energías del hamiltoniano de BCS y demostraremos que los pares de Cooper colectivos son sus eigenfunciones. Partiendo de este espectro mostraremos que los pares colectivos presentan el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein. Para ello se analizarán dos sistemas, uno con solución analítica que se obtiene al considerar que la energía electrónica es independiente del momento, en tanto el otro, a través de un modelo de capas, tendrá soluciones numéricas que permiten abordar incluso sistemas de tamaño macroscópico.

4.1. Espectro de energía de un par colectivo

Dentro de la teoría BCS, el hamiltoniano para describir un sistema superconductor es

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}, \quad (4.1)$$

donde $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ y la suma de \mathbf{k} se realiza bajo la condición de $\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_F \leq \hbar\omega_D$, es decir, está restringida a la región de ancho $\hbar\omega_D$ por encima de la energía de fermi donde hay una interacción atractiva entre electrones y se considera una esfera de fermi estable en el límite diluido de pares de Cooper colectivos. Dicha región está representada por la zona azul de la figura 4.1.

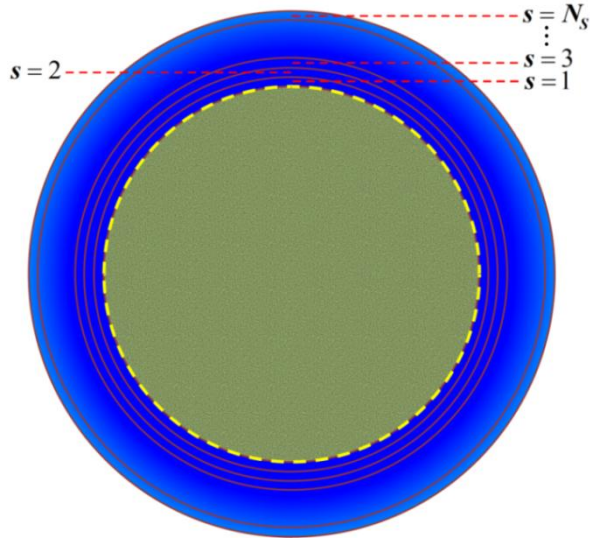


Figura 4.1. Representación esquemática de la región en espacio \mathbf{k} donde la interacción electrón-electrón es atractiva (zona azul). Esta región puede ser descrita como N_s capas con energía electrónica constante en cada una de ellas. El círculo discontinuo señala la superficie de Fermi.

Caso de una sola capa

Consideremos primeramente el caso donde la energía electrónica $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon$. Éste corresponde al de $\hbar\omega_D$ tan pequeño que todos los estados electrónicos se ubican aproximadamente en una sola capa equienergética. Además, consideremos los pares de Cooper colectivos definidos como en la ecuación (3.20),

$$\hat{a}_\alpha^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{l=1}^M \exp\left(\frac{i2\pi l\alpha}{M}\right) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger, \quad (4.2)$$

siendo $\alpha = 0, 1, \dots, M-1$. Entonces el hamiltoniano (4.1) para este caso es

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}, = \varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - MV \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0. \quad (4.3)$$

Nótese que el término $\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$ cuenta el número total de electrones, en tanto $\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0$ es el operador de número total de pares colectivos con $\alpha = 0$. Los estados de un par de Cooper colectivo son,

$$|1_\alpha\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger |0\rangle. \quad (4.4)$$

En consecuencia, el número total de electrones en ese estado es 2 y

$$\hat{H} |1_\alpha\rangle = (2\varepsilon - MV \delta_{\alpha,0}) |1_\alpha\rangle, \quad (4.5)$$

es decir, los pares de Cooper colectivos son eigenfunciones del hamiltoniano (4.3) con energías iguales a

$$E_\alpha = \begin{cases} 2\varepsilon - MV, & \text{si } \alpha = 0 \\ 2\varepsilon & , \text{ si } \alpha = 1, 2, \dots, M-1 \end{cases} \quad (4.6)$$

Modelo de capas

Para el caso general donde $\varepsilon(\mathbf{k})$ no es aproximado por una constante, la región de interacción electrón-electrón atractiva puede ser dividida en N_s capas con energías electrónicas, $\varepsilon(\mathbf{k})$, iguales a $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{N_s}$, como se muestra en la figura 4.1. Con esto en mente, el hamiltoniano original de BCS (4.1) puede reescribirse de la siguiente manera,

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{s=1}^{N_s} \varepsilon_s \sum_{\mathbf{k}|\varepsilon(\mathbf{k})=\varepsilon_s, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - V \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}, \quad (4.7)$$

Definiremos los estados de pares de Cooper colectivos para el caso de N_s capas como

$$|1_{s,\alpha}\rangle \equiv \hat{a}_{s,\alpha}^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{M_s}} \sum_{l|\varepsilon(\mathbf{k}_l)=\varepsilon_s} \exp\left(\frac{i2\pi l\alpha}{M_s}\right) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger |0\rangle, \quad (4.8)$$

donde $M_s = \sum_{l|\varepsilon(\mathbf{k}_l)=\varepsilon_s} 1$ es el número de estados de \mathbf{k} que se encuentran en la capa s y $\alpha = 0, 1, \dots, M_s-1$. Nótese que la definición (4.8) es similar a la (4.2) excepto que cada capa posee su propio conjunto de pares de Cooper colectivos. Entonces

$$\sum_{s=1}^{N_s} \varepsilon_s \sum_{\mathbf{k}|\varepsilon(\mathbf{k})=\varepsilon_s, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} |1_{s,\alpha}\rangle = 2\varepsilon_s |1_{s,\alpha}\rangle, \quad (4.9)$$

y usando que $\sum_{l=1}^{M_s} \exp i2\pi l\alpha/M_s = M_s \delta_{0,\alpha}$.

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} |1_{s,\alpha}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{M_s}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \sum_{l|\varepsilon(\mathbf{k}_l)=\varepsilon_s} \exp\left(\frac{i2\pi l\alpha}{M_s}\right) \hat{b}_{\mathbf{k}_l}^\dagger |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{M_s}} \sum_{l=1}^{M_s} \exp\left(\frac{i2\pi l\alpha}{M_s}\right) \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle = \delta_{0,\alpha} \left(\sqrt{M_s} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \right) \\ &= \delta_{0,\alpha} \left(\sqrt{M_s} \sum_{s'=1}^{N_s} \sqrt{M_{s'}} \hat{a}_{s',0}^\dagger |0\rangle \right) = \delta_{0,\alpha} \left(\sqrt{M_s} \sum_{s'=1}^{N_s} \sqrt{M_{s'}} |1_{s',0}\rangle \right) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Lo anterior nos lleva a

$$\hat{H}_{BCS} |1_{s,\alpha}\rangle = 2\varepsilon |1_{s,\alpha}\rangle \quad \text{para } \alpha = 1, 2, \dots, M_s - 1, \quad (4.11)$$

es decir, $|1_{s,\alpha}\rangle$ son las eigenfunciones del hamiltoniano de BCS excepto para $\alpha = 0$. Algo interesante por notar es que dichos estados no cambian su energía en comparación con los estados de electrones no apareados.

Por otro lado, la ecuación (4.10) indica que los estados con $\alpha = 0$ constituyen un subconjunto cerrado de soluciones del hamiltoniano (4.7), por lo que las eigenfunciones restantes de dicho hamiltoniano deben ser combinación lineal de los estados con $\alpha = 0$, es decir,

$$|v\rangle = \sum_{s=1}^{N_s} A_v(s) |1_{s,0}\rangle. \quad (4.12)$$

Usando las ecuaciones (4.9) y (4.10) obtenemos

$$\hat{H}_{BCS} |1_v\rangle = \sum_s 2\varepsilon_s A_v(s) |1_{s,0}\rangle - V \sum_s A_v(s) \sqrt{M_s} \sum_{s'} \sqrt{M_{s'}} |1_{s',0}\rangle. \quad (4.13)$$

Si suponemos que $|1_v\rangle$ es eigenfunción del Hamiltoniano de BCS, es decir, $\hat{H}_{BCS} |1_v\rangle = E_v |1_v\rangle$, entonces

$$\sum_{s=1}^{N_s} 2\varepsilon_s A_v(s) |1_{s,0}\rangle - V \sum_{s,s'=1}^{N_s} A_v(s) \sqrt{M_s} \sqrt{M_{s'}} |1_{s',0}\rangle = E_v \sum_{s=1}^{N_s} A_v(s) |1_{s,0}\rangle. \quad (4.14)$$

Por lo que

$$\sum_{s=1}^{N_s} \frac{E_v - 2\varepsilon_s}{V} A_v(s) |1_{s,0}\rangle + \sum_{s,s'=1}^{N_s} A_v(s) \sqrt{M_s M_{s'}} |1_{s',0}\rangle = 0. \quad (4.15)$$

La ecuación anterior se puede expresar en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} x_1 + M_1 & \sqrt{M_1 M_2} & \cdots & \sqrt{M_1 M_{N_s}} \\ \sqrt{M_2 M_1} & x_2 + M_2 & \cdots & \sqrt{M_2 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_1} & \sqrt{M_{N_s} M_2} & \cdots & x_{N_s} + M_{N_s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_v(1) \\ A_v(2) \\ \vdots \\ A_v(N_s) \end{pmatrix} = 0 \quad (4.16)$$

donde

$$x_s \equiv \frac{E_v - 2\varepsilon_s}{V}. \quad (4.17)$$

La ecuación (4.16) tiene soluciones no triviales únicamente cuando

$$\det \begin{pmatrix} x_1 + M_1 & \sqrt{M_1 M_2} & \cdots & \sqrt{M_1 M_{N_s}} \\ \sqrt{M_2 M_1} & x_2 + M_2 & \cdots & \sqrt{M_2 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_1} & \sqrt{M_{N_s} M_2} & \cdots & x_{N_s} + M_{N_s} \end{pmatrix} = 0 \quad (4.18)$$

En el apéndice B se demuestra que la ecuación secular que resuelve (4.18) es

$$\sum_s \frac{M_s}{E_\nu - 2\varepsilon_s} = -\frac{1}{V}. \quad (4.19)$$

Por otro lado, la ecuación (4.14) es resuelta cuando

$$2\varepsilon_s A_\nu(s) - A_\nu \sqrt{M_s} = E_\nu A_\nu(s), \quad (4.20)$$

donde $A_\nu \equiv V \sum_{s=1}^{N_s} A_\nu(s) \sqrt{M_s}$ es una constante para ν dada, entonces,

$$A_\nu(s) = \frac{A_\nu \sqrt{M_s}}{2\varepsilon_s - E_\nu}. \quad (4.21)$$

Con la finalidad de obtener funciones de onda normalizadas tenemos

$$\sum_{s=1}^{N_s} |A_\nu(s)|^2 = \sum_{s=1}^{N_s} \left| \frac{A_\nu \sqrt{M_s}}{2\varepsilon_s - E_\nu} \right|^2 = |A_\nu|^2 \sum_{s=1}^{N_s} \frac{M_s}{(2\varepsilon_s - E_\nu)^2} = 1 \quad (4.22)$$

i.e.,

$$A_\nu(s) = \frac{\sqrt{M_s}}{2\varepsilon_s - E_\nu} \left[\sum_{s'=1}^{N_s} \frac{M_{s'}}{(2\varepsilon_{s'} - E_\nu)^2} \right]^{-1/2}. \quad (4.23)$$

Por lo tanto las eigenfunciones (4.12) pueden reescribirse como,

$$|\nu\rangle \equiv \left[\sum_{s'=1}^{N_s} \frac{M_{s'}}{(2\varepsilon_{s'} - E_\nu)^2} \right]^{-1/2} \sum_{s=1}^{N_s} \frac{\sqrt{M_s}}{2\varepsilon_s - E_\nu} \hat{a}_{s,0}^\dagger |0\rangle \quad (4.24)$$

o en términos de pares de Cooper ordinarios,

$$|\nu\rangle \equiv \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{k}) - E_\nu} \right]^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{k}) - E_\nu} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \quad (4.25)$$

La ecuación (4.19) permite encontrar la energía E_ν del estado $|\nu\rangle$ y en general se calcula numéricamente. La figura 4.2 muestra las energías del hamiltoniano de BCS que se obtienen mediante las ecuaciones (4.11) y (4.19).

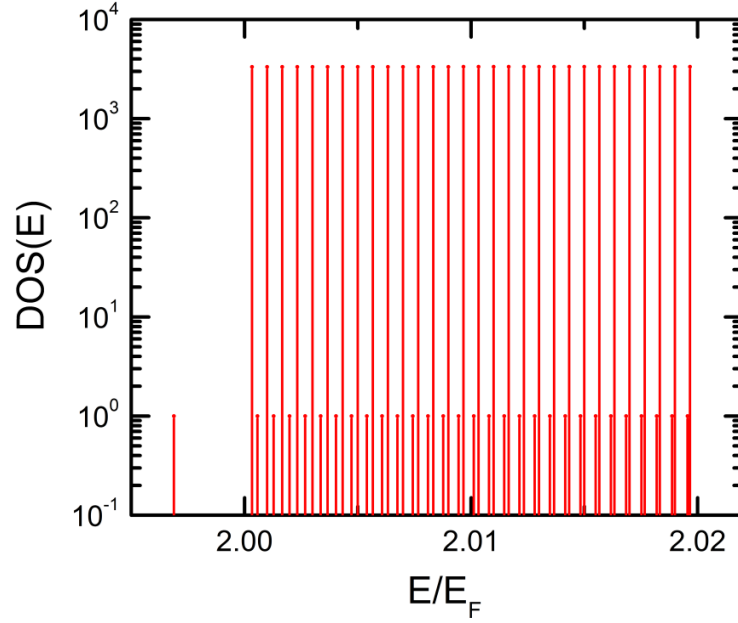


Figura 4.2. Densidad of estados (DOS) de pares de Cooper colectivos obtenidos hamiltoniano de BCS para $N_s = 30$, $M = 10^5$, $V = 10^{-7} E_F$ y $\hbar\omega_D = 10^{-2} E_F$.

Notamos que siempre hay una solución de (4.19) para $\nu = s$ que cumple con

$$2\varepsilon_{s-1} < E_s < 2\varepsilon_s, \quad (4.26)$$

además de una solución para el estado base E_1 que cumple

$$E_1 < 2\varepsilon_1. \quad (4.27)$$

Para un análisis más riguroso de las soluciones de la ecuación (4.19), definimos

$$F(E) \equiv \sum_{s=1}^{N_s} \frac{M_s}{2\varepsilon_s - E} - \frac{1}{V}, \quad (4.28)$$

la cual tiene singularidades en $E = 2\varepsilon_1, 2\varepsilon_2, \dots, 2\varepsilon_{N_s}$. En la figura 4.3, la función $F(E)$ es ilustrada para los mismos parámetros de la figura 4.2. Alrededor de las singularidades $F(E)$ se tiene el comportamiento límite,

$$F(E) = \begin{cases} \infty, & \text{si } E \rightarrow 2\varepsilon_s^- \\ -\infty, & \text{si } E \rightarrow 2\varepsilon_s^+ \end{cases}, \quad (4.29)$$

y entonces siempre hay una solución de $F(E) = 0$ con $2\varepsilon_s < E < 2\varepsilon_{s+1}$, dado que $F(E)$ es una función continua en este intervalo. Finalmente,

$F(E \rightarrow -\infty) = -1/V < 0$ y entonces, siempre hay una solución de $F(E) = 0$ para $E < 2\varepsilon_1$ confirmando de esta manera las ecuaciones (4.26) y (4.27).

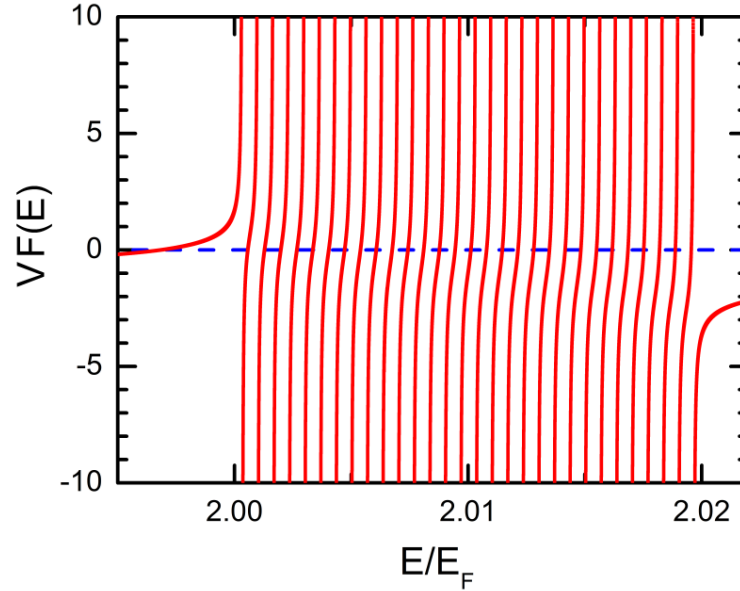


Figura 4.3. Gráfica de $F(E)$ definida en la ecuación (4.28) usando los mismos parámetros de la figura 2. La intercepciones de $F(E)$ con la línea punteada son las soluciones de la ecuación (4.19).

Entonces, las soluciones de la ecuación (4.19) son las restantes N_s eigenenergías del hamiltoniano de BCS adicionales a las dadas en la ecuación (4.11). Cabe mencionar que el estado base (E_1) determinado de la ecuación (4.11) concuerda con la solución de Cooper (1.30). Esto puede visualizarse de la siguiente manera: Dado que $2\varepsilon(\mathbf{k}) - E_1 > 0$, la ecuación (4.19) puede escribirse como

$$\frac{1}{V} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{k}) - E_1} = \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{2\varepsilon - E_1} \approx g(E_F) \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E_1}, \quad (4.30)$$

y entonces,

$$E_1 = 2E_F - \frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/g(E_F)V} - 1}, \quad (4.31)$$

donde $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados electrónica. Esto confirma el resultado de Cooper de que existe un estado apareado más estable que los no-apareados.

4.2. Comparación con la solución de Richardson

En la última década, el espectro de energía exacto obtenido por Richardson para W pares de Cooper [Richardson, 1963] ha sido ampliamente usado para sistemas

descritos por el hamiltoniano de BCS [Dukelsky, 2004]. Dicho espectro se obtiene al resolver el sistema de ecuaciones generado por

$$1 + 2V \sum_{\nu' \neq \nu}^W (E_\nu - E_{\nu'})^{-1} - V \sum_{s=1}^{N_s} (2\varepsilon_s - E_\nu)^{-1} = 0 \quad (4.32)$$

donde la eigenenergía está dada por

$$E = \sum_{\nu=1}^W E_\nu. \quad (4.33)$$

y las correspondientes funciones de onda se expresan como

$$|W\rangle = B^\dagger(E_1) \cdots B^\dagger(E_W) |0\rangle, \quad (4.34)$$

donde

$$B^\dagger(E_j) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{k}) - E_j} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger. \quad (4.35)$$

Cabe mencionar que, tal como menciona Richardson, la ecuación (4.32) es incapaz de encontrar soluciones en los cuales $E_\nu = E_{\nu'}$ para $\nu' \neq \nu$ [Richardson, 1963], enfatizando que podrían existir soluciones fuera del alcance de las ecuaciones (4.32) y (4.33). En particular, las ecuaciones (4.19) y (4.25) reproducen la solución de Richardson para el caso de un solo par. Sin embargo, dicha solución omite los niveles excitados determinados en la ecuación (4.11) para hamiltonianos de BCS con energía electrónica degenerada.

De hecho, las nuevas eigenfunciones dadas por la ecuación (4.11) pueden también obtenerse siguiendo el método de Richardson. Si asumimos que la energía electrónica no es degenerada en una capa s con $M_s > 1$ son no degenerados, es decir,

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}_l) = \varepsilon_s + ld, \quad (4.36)$$

donde $l = 1, 2, \dots, M_s$ y d es el espaciamiento entre niveles. De acuerdo a la ecuación (4.26) o a la 1 de la referencia [Richardson, 1964], hay siempre una y solo una energía ($E_{l,s}$) tal que

$$2\varepsilon_s + 2(l-1)d \leq E_{l,s} \leq 2\varepsilon_s + 2ld \quad (4.37)$$

para $l = 2, 3, \dots, M_s$. En particular, el caso de energía electrónica degenerada puede recuperarse al tomar el límite $d \rightarrow 0$ y entonces, la ecuación (4.37) conduce a $M_s - 1$ eigenestados con energías $E_s = 2\varepsilon_s$, reproduciendo las eigenenergías de la ecuación (4.11).

En cuanto a las eigenfunciones correspondientes, se prueba en la ecuación (4.11) que las expresiones (4.4) para $\alpha \neq 0$ son las eigenfunciones del

hamiltoniano (4.7). O bien, cualquier combinación lineal de de las expresiones (4.4) dentro de la misma capa también será eigenfunción, ya que sus eigenenergías son degeneradas [Griffiths, 2005]. Estas eigenfunciones no son dadas por la solución de Richardson [Richardson, 1964].

4.3. Condensación de Bose-Einstein

Como se mostró en el capítulo 2, el número promedio de partículas para un sistema de bosones puede expresarse como

$$\bar{N} = \sum_m \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_m - \mu} - 1}, \quad (4.38)$$

donde ε_m es el espectro de energía de una sola partícula y el potencial químico $\mu < \min(\varepsilon_m)$.

Consideremos primeramente la solución analítica que encontramos para el caso de una sola capa, $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon$, cuyo espectro de energía de un solo par se expresa en la ecuación (4.6). Para este caso particular, tenemos que el número promedio de pares (\bar{N}_p) es, de la ecuación (4.38),

$$\bar{N}_p = \bar{N}_0 + \bar{N}_e = \frac{1}{e^{\beta 2\varepsilon - MV - \mu} - 1} + \frac{M - 1}{e^{\beta 2\varepsilon - \mu} - 1} \quad (4.39)$$

con $\mu < 2\varepsilon - MV$. Debido a que $M \gg 1$, por encima de la temperatura crítica de condensación (T_{BEC}) tenemos que el número de pares colectivos es aproximadamente igual al número de pares excitados (\bar{N}_e), es decir,

$$\bar{N}_p \approx \bar{N}_e = \frac{M - 1}{e^{\beta 2\varepsilon - \mu} - 1} \quad \text{para } T > T_{BEC}. \quad (4.40)$$

T_{BEC} se puede determinar de la ecuación (4.40) cuando el potencial químico alcanza su máximo valor, es decir, $\mu = 2\varepsilon - MV$, esto conduce a

$$\bar{N}_p = \frac{M - 1}{e^{MV/k_B T_{BEC}} - 1}, \quad (4.41)$$

de donde se sigue que

$$k_B T_{BEC} = \frac{MV}{\ln\left(\frac{M - 1}{\bar{N}_p} + 1\right)}. \quad (4.42)$$

Para el caso de N_s capas, la ecuación (4.38) puede ser escrita como la suma de los promedios de ocupación del estado base (\bar{N}_0) más los de los estados excitados (\bar{N}_{exc}),

$$\bar{N} = \bar{N}_0 + \bar{N}_{exc} = \frac{1}{e^{\beta(E_1 - \mu)} - 1} + \sum_{\nu=2}^{N_s} \frac{1}{e^{\beta(E_\nu - \mu)} - 1} + \sum_{s=1}^{N_s} \frac{M_s - 1}{e^{\beta(2\varepsilon_s - \mu)} - 1}, \quad (4.43)$$

donde $\mu < E_1$. Por un razonamiento análogo al caso de una sola capa, la condensación de Bose-Einstein empieza cuando $T = T_{BEC}$, $\mu = E_1$, y

$$\bar{N} = \bar{N}_{exc} = \sum_{\nu=1}^{N_s-1} \frac{1}{e^{\beta_{BEC}(E_\nu - E_1)} - 1} + \sum_{s=1}^{N_s} \frac{M_s - 1}{e^{\beta_{BEC}(2\varepsilon_s - E_1)} - 1}, \quad (4.44)$$

donde $\beta_{BEC} = 1/k_B T_{BEC}$. En la Figura 4.4 se muestra T_{BEC} como función de N_s calculado a partir de la ecuación (4.44). Observe que cuando N_s crece, T_{BEC} decrece asintóticamente a una constante, la cual puede determinarse de la siguiente manera: Para el límite termodinámico ($M \rightarrow \infty$) y con un número infinito de capas ($N_s \rightarrow \infty$), tenemos que $\varepsilon_{s+1} - \varepsilon_s \rightarrow 0$. Consecuentemente, la ecuación (4.26) conduce a $E_s \rightarrow 2\varepsilon_s$ para $s \neq 1$. En otras palabras, las dos sumas en la ecuación (4.44) pueden reescribirse como

$$\bar{N} = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{M_s}{e^{\beta_{BEC}(2\varepsilon_s - E_1)} - 1} = \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{e^{\beta_{BEC}(2\varepsilon - E_1)} - 1}. \quad (4.45)$$

En un sistema tridimensional de partículas libres, la densidad de estados $g(\varepsilon) = C\sqrt{\varepsilon}$ y la ecuación (4.45) se convierte en la ecuación integral

$$\bar{N} = C \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\beta_{BEC}(2\varepsilon - E_1)} - 1}, \quad (4.46)$$

cuya solución de T_{BEC} se muestra como la línea punteada en la figura 4.4.

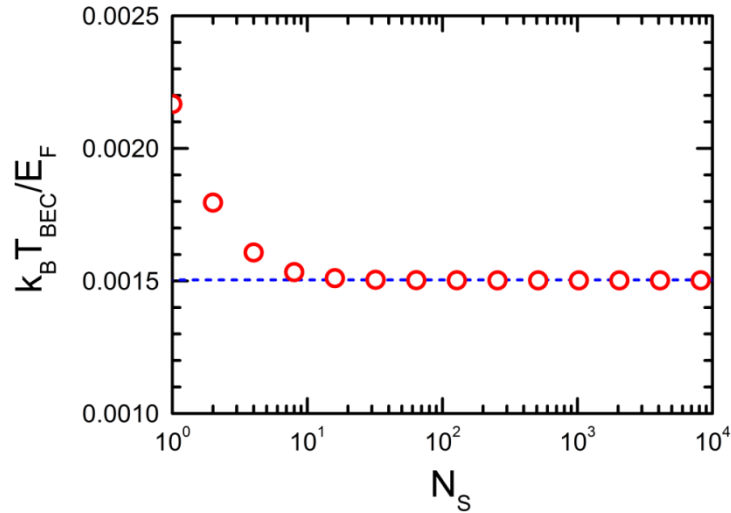


Figure 4.4. Temperatura de condensación de Bose-Einstein (T_{BEC}) como una función del número de capas (N_s) para $M = 10^5$, $V = 10^{-7} E_F$, $\hbar\omega_D = 10^{-2} E_F$ y $N = 10^{-2} M$. La línea punteada es la solución de la ecuación(4.46).

En resumen, hemos visto que los estados de un solo par colectivo definidos por la ecuación (4.8) son eigenfunciones del hamiltoniano de BCS. Además, el espectro de energía de este hamiltoniano fue completamente calculado por medio de un modelo de multicapas, en lugar del método variacional usual que sólo permite determinar el estado base. En el límite termodinámico, este espectro es el mismo que el de un sistema sin interacción electrón-electrón ($V = 0$), excepto que uno de los estados de la capa de menor energía reduce su energía a la del estado base del sistema dada en la ecuación (4.31). Finalmente se demuestra que este espectro de energía es capaz de conducir a una condensación de Bose-Einstein de pares de Cooper colectivos a una temperatura finita.

CAPÍTULO 5. SUPERCONDUCTIVIDAD BASADA EN LOS PARES COLECTIVOS

En el capítulo 4 hemos visto que un gas de pares de Cooper colectivos puede conducir a una condensación de Bose-Einstein dentro de la aproximación de esfera de Fermi estable. Más allá de dicha aproximación, la superconductividad se puede estudiar a través de un modelo de tres tipos de partículas: pares de Cooper en estado base, pares de Cooper excitados y electrones no apareados, como el esquema propuesto en el artículo original de BCS [Bardeen, 1957]. En este capítulo haremos uso de dicho modelo excepto que será desarrollado en el lenguaje de los pares de Cooper colectivos en lugar de pares de Cooper individuales.

Primeramente obtendremos las eigen-energías y eigen-funciones cuando hay un número P de pares colectivos en el estado base, X de pares excitados y Q de electrones no apareados. Así mismo, haremos un análisis estadístico de algunas propiedades termodinámicas del sistema dentro del formalismo del ensamble gran canónico. Finalmente, compararemos estos resultados con los de la teoría BCS.

Cabe mencionar que el espectro de energía de los pares colectivos se determinará mediante un método alternativo al de Richardson, ya que como se menciona en la referencia [Crouzeix, 2011], el método de Richardson no permite determinar eigenestados donde dos o más pares se encuentren en el mismo estado cuántico, teniendo en cuenta que un electrón solo dentro de un estado pareable reduce el espacio donde se pueden generar los pares de Cooper, como fue originalmente discutido por Richardson [Richardson, 1963].

5.1. Coexistencia de electrones y pares

Partiremos del hamiltoniano de una sola capa dada por la ecuación (4.3)

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}. \quad (5.1)$$

donde hay un total de M estados disponibles en la capa para formar pares.

Estados de Q electrones no apareados

Definimos a un estado de electrón no apareado como aquel apareable pero ocupado por un solo electrón, es decir, en dicho estado hay un electrón en el estado electrónico (\mathbf{k}, σ) pero no hay otro electrón en $(-\mathbf{k}, -\sigma)$. Sea

$$|1_{\mathbf{k},\sigma}\rangle \equiv \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (5.2)$$

el estado de electrón no apareado (\mathbf{k}, σ) . Si aplicamos el operador de aniquilación de un par de Cooper colectivo (\hat{a}_α) al estado (5.2) obtenemos,

$$\begin{aligned} \hat{a}_\alpha |1_{\mathbf{k},\sigma}\rangle &= \sum_{\mathbf{k}'} A_\alpha(\mathbf{k}') \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} A_\alpha(\mathbf{k}') (\delta_{\sigma,\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} - \delta_{\sigma,\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}) |0\rangle = 0. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Usando la definición (4.2) se tiene $\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} = M \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0$ y entonces de la ecuación (5.3) se sigue

$$\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} |1_{\mathbf{k},\sigma}\rangle = M \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 |1_{\mathbf{k},\sigma}\rangle = 0. \quad (5.4)$$

La ecuación (5.4) indica que el término de interacción del hamiltoniano (5.1) no actúa sobre electrones no apareados. Por otro lado, para el primer término de dicho hamiltoniano,

$$\varepsilon \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} |1_{\mathbf{k},\sigma}\rangle = \varepsilon |1_{\mathbf{k},\sigma}\rangle, \quad (5.5)$$

ya que $\sum_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} = \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{n}_{\mathbf{k}',\sigma'}$ es el operador de número total de electrones en el sistema.

En general, podemos expresar un microestado de Q electrones no apareados como

$$|Q_{(\mathbf{k}_1,\sigma_1),\dots,(\mathbf{k}_Q,\sigma_Q)}\rangle \equiv \hat{c}_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}^\dagger \cdots \hat{c}_{\mathbf{k}_Q,\sigma_Q}^\dagger |0\rangle, \quad (5.6)$$

el cual tiene electrones en los estados electrónicos $(\mathbf{k}_1,\sigma_1),\dots,(\mathbf{k}_Q,\sigma_Q)$ y no tiene electrones en los estados electrónicos $(-\mathbf{k}_1,-\sigma_1),\dots,(-\mathbf{k}_Q,-\sigma_Q)$. Los resultados de las ecuaciones (5.2) a (5.4) se generalizan a

$$\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} |Q_{(\mathbf{k}_1,\sigma_1),\dots,(\mathbf{k}_Q,\sigma_Q)}\rangle = 0, \quad (5.7)$$

y de la ecuación (5.5) tenemos que

$$\varepsilon \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} |Q_{(\mathbf{k}_1,\sigma_1),\dots,(\mathbf{k}_Q,\sigma_Q)}\rangle = Q \varepsilon |Q_{(\mathbf{k}_1,\sigma_1),\dots,(\mathbf{k}_Q,\sigma_Q)}\rangle. \quad (5.8)$$

De las ecuaciones (5.7) y (5.8), se tiene

$$\hat{H} |Q_{(\mathbf{k}_1,\sigma_1),\dots,(\mathbf{k}_Q,\sigma_Q)}\rangle = Q \varepsilon |Q_{(\mathbf{k}_1,\sigma_1),\dots,(\mathbf{k}_Q,\sigma_Q)}\rangle. \quad (5.9)$$

Dado que los electrones no apareados pueden ocupar libremente los M estados apareables sin haber la posibilidad de doble ocupación, el número de microestados posibles de Q electrones no apareados es

$$D_Q = \frac{2^Q M!}{Q!(M-Q)!}, \quad (5.10)$$

donde el factor 2^Q se debe a que cada uno de los Q estados puede ser ocupado únicamente por un electrón con espín positivo o negativo.

Por otro lado, si el sistema tiene Q electrones no apareados, su energía aumentara en $Q\varepsilon$ de acuerdo con la ecuación (5.9) y el número de estados apareables pasará a ser $\tilde{M} \equiv M - Q$, ya que los Q estados no apareados impiden la formación de pares de Cooper en ellos. Lo anterior fue originalmente discutido por Richardson [Richardson, 1963].

Estado de P Pares colectivos en el estado base

A lo largo de los \tilde{M} estados apareables, los operadores de creación de los pares de Cooper colectivos pueden escribirse en analogía a la ecuación (4.2) como

$$\hat{a}_\alpha^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\tilde{M}}} \sum_{l=1}^{\tilde{M}} \exp\left(\frac{i2\pi l\alpha}{\tilde{M}}\right) \hat{b}_{k_l}^\dagger, \quad (5.11)$$

donde $\alpha = 0, 1, \dots, \tilde{M}-1$, siendo $\alpha = 0$ el correspondiente al estado base. Para el caso de P pares colectivos en el estado base

$$|P\rangle \equiv \hat{a}_0^\dagger{}^P |\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\tilde{M}^{P/2}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_P} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_P}^\dagger |\tilde{0}\rangle \quad (5.12)$$

donde $|\tilde{0}\rangle$ es el vacío que no tiene ningún par de Cooper en los \tilde{M} estados apareables, pudiendo haber electrones no apareados fuera de dichos estados apareables. Entonces,

$$\varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} |P\rangle = 2P\varepsilon |P\rangle \quad (5.13)$$

y

$$\begin{aligned}
V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} |P\rangle &= V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\tilde{M}^{P/2}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_P} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_P}^\dagger |\tilde{0}\rangle \\
&= \frac{V}{\tilde{M}^{P/2}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_P} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_P}^\dagger \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_P} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_1} |\tilde{0}\rangle + \dots \\
&\quad + \frac{V}{\tilde{M}^{P/2}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{P-1}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{P-1}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}_P \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{P-1}} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_P} |\tilde{0}\rangle \\
&= \frac{VP}{\tilde{M}^{P/2}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{P-1}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{P-1}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}_P \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{P-1}} 1 |\tilde{0}\rangle \\
&= \frac{VP}{\tilde{M}^{P/2}} (\tilde{M} - P + 1) \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{P-1}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{P-1}}^\dagger |\tilde{0}\rangle \\
&= VP (\tilde{M} - P + 1) \frac{1}{\tilde{M}^{P/2}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_P} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_P}^\dagger |\tilde{0}\rangle \\
&= VP (\tilde{M} - P + 1) |P\rangle.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

De las ecuaciones (5.13) y (5.14) se sigue que

$$\hat{H} |P\rangle = [2P\varepsilon - P \tilde{M} - P + 1 V] |P\rangle, \tag{5.15}$$

es decir, el estado $|P\rangle$ con P pares colectivos en el estado base es eigen-función del hamiltoniano (5.1) con eigen-energía $E_P = 2P\varepsilon - P \tilde{M} - P + 1 V$. Cabe enfatizar que sólo existe un microestado con P pares colectivos en el estado base.

Estados de X pares excitados

Supongamos que

$$|X_i\rangle \equiv \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X} A_i \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_X}^\dagger |\tilde{0}\rangle \tag{5.16}$$

es una eigenfunción del hamiltoniano (5.1) formado por X pares excitados. Al no contener pares en el estado base, (5.16) debe cumplir con $\hat{a}_0 |X_i\rangle = 0$, lo cual implica

$$\begin{aligned}
\hat{a}_0 |X_i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\tilde{M}}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X} A_i \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_X}^\dagger |\tilde{0}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{\tilde{M}}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{X-1}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{X-1}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}_X \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{X-1}} A_i \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X |\tilde{0}\rangle = 0.
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Para cada conjunto de valores $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{X-1}$, $\hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{X-1}}^\dagger$ es ortogonal a cualquier otro conjunto de valores diferentes. Entonces la ecuación (5.17) conduce a

$$\sum_{\mathbf{k}_X \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{X-1}} A_i \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X = 0. \quad (5.18)$$

De la ecuación (5.16) tenemos que

$$\varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} |X_i\rangle = 2X \varepsilon |X_i\rangle. \quad (5.19)$$

Además, de (5.17) obtenemos que

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} |X_i\rangle = \tilde{M} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 |X_i\rangle = 0. \quad (5.20)$$

Por lo que (5.16) son eigen-funciones del hamiltoniano con energía $2X\varepsilon$, es decir,

$$\hat{H} |X_i\rangle = 2X\varepsilon |X_i\rangle, \quad (5.21)$$

donde la ecuación (5.18) es la condición que debe cumplir $|X_i\rangle$ para ser eigenfunción del hamiltoniano (5.1).

A continuación cuantificaremos el número de soluciones linealmente independientes de la ecuación (5.18). Primeramente notemos que cada conjunto de valores $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{X-1}$ conduce a una ecuación (5.18) diferente. El número de ecuaciones para X pares excitados es igual al número de maneras de escoger $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{X-1}$ diferentes de un total de \tilde{M} posibilidades, es decir,

$$\frac{\tilde{M}!}{(X-1)!(\tilde{M}-X+1)!}. \quad (5.22)$$

Las incógnitas de este sistema de ecuaciones son $A_i \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X$ que se definen por medio de un conjunto $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X$. Entonces, el número de incógnitas es igual al número de formas diferentes de elegir $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X$ de un total de \tilde{M} posibilidades, es decir,

$$\frac{\tilde{M}!}{X!(\tilde{M}-X)!}. \quad (5.23)$$

Por ejemplo, en el caso de $\tilde{M} = 4$ y $X = 2$, la ecuación (5.18) genera el siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{cases} A \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + A \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3 + A \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_4 = 0 \\ A \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + A \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + A \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4 = 0 \\ A \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3 + A \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + A \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 = 0 \\ A \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_4 + A \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4 + A \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 = 0 \end{cases} \quad (5.24)$$

por lo que tenemos 4 ecuaciones con 6 incógnitas cuyas soluciones forman un espacio bidimensional habiendo únicamente 2 de ellas linealmente independientes.

En general, el número de soluciones linealmente independientes es

$$D_X = \frac{\tilde{M}!}{X!(\tilde{M}-X)!} - \frac{\tilde{M}!}{(X-1)!(\tilde{M}-X+1)!} = \frac{\tilde{M}!}{X!(\tilde{M}-X+1)!} \tilde{M} - 2X + 1, \quad (5.25)$$

la cual sólo es válida cuando

$$2X \leq \tilde{M}, \quad (5.26)$$

ya que de otra manera la única solución es la trivial $A_i \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_X = 0$. Por último, al tratarse del número total de soluciones independientes de (5.18), $D(X)$ es también la degeneración que tiene un sistema que posee X pares excitados y ningún par en el estado base.

Estados de P pares colectivos en el estado base y X excitados

En general, cualquier estado con W pares puede escribirse como

$$|W\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_W} A_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_W} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_W}^\dagger |\tilde{0}\rangle. \quad (5.27)$$

En el apéndice C se demuestra que si $|W\rangle$ es eigenfunción del hamiltoniano (5.1) con energía E , es decir,

$$\hat{H}|W\rangle = \left(\varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \right) |W\rangle = E|W\rangle, \quad (5.28)$$

entonces

$$\hat{H} \hat{a}_0^\dagger |W\rangle = [E + 2\varepsilon - V(M - 2W)] \hat{a}_0^\dagger |W\rangle, \quad (5.29)$$

i.e., el estado $\hat{a}_0^\dagger |W\rangle$ también es eigenfunción del hamiltoniano (5.1) cuya energía $E' = E + 2\varepsilon - V(M - 2W)$. El resultado anterior junto con el de la ecuación (5.21) nos indica que el estado con P pares colectivos en el estado base y X pares excitados se puede escribir como

$$|P, X_i\rangle = (\hat{a}_0^\dagger)^P |X_i\rangle, \quad (5.30)$$

el cual es eigenfunción del hamiltoniano (5.1). En el apéndice D se demuestra por inducción matemática que los estados (5.30) tienen energía

$$E_{P, X} = 2P + 2X \varepsilon - P \tilde{M} - 2X - P + 1 V. \quad (5.31)$$

Por otro lado, en el apéndice E se demuestra que el operador

$$\sum_{k,k'} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} = \frac{1}{V} \varepsilon \sum_{k,\sigma} \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma} - \hat{H} \quad (5.32)$$

es semidefinido positivo, es decir, sus eigenvalores son mayores o iguales a cero. En particular, los estados con eigenvalores iguales a cero son aquellos formados por pares excitados y ningún par en el estado base ($|X_i\rangle$).

De las ecuaciones (5.31) y (5.32) tenemos,

$$\sum_{k,k'} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} |P, X_i\rangle = P \tilde{M} - 2X - P + 1 |P, X_i\rangle. \quad (5.33)$$

De acuerdo a lo discutido en el párrafo anterior, tendríamos que el eigenvalor debe cumplir con $P \tilde{M} - 2X - P + 1 > 0$, es decir,

$$P + 2X \leq \tilde{M}. \quad (5.34)$$

La ecuación (5.34) restringe el número de pares de cada tipo que puede tener un eigenestado del hamiltoniano (5.1).

Estados de Q electrones no apareados, P pares colectivos en el estado base y X pares excitados

Finalmente, para el caso de Q electrones no apareados la energía aumenta en $Q\varepsilon$ y el número de estados apareables es $\tilde{M} = M - Q$. Entonces de la ecuación (5.31) tenemos que la energía para un estado $|Q, P, X\rangle$ con Q electrones no apareados, P pares colectivos en el estado base y X pares excitados es

$$E_{Q,P,X} = \varepsilon (2P + 2X + Q) - VP (M - Q - 2X - P + 1). \quad (5.35)$$

Por otro lado, las ecuaciones (5.10) y (5.25) nos dicen que el número total de microestados con dicha energía es

$$\begin{aligned} D_{Q,P,X} &= D_Q D_X = \frac{2^Q M!}{Q!(M-Q)!} \frac{(M-Q)! (M-Q-2X+1)}{X!(M-Q-X+1)!} \\ &= \frac{2^Q M! (M-Q-2X+1)}{Q! X! (M-Q-X+1)!}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Por último de la ecuación (5.34) se sigue que

$$P + 2X \leq M - Q. \quad (5.37)$$

En resumen, para el hamiltoniano (5.1) hemos encontrado su espectro de energía (5.35) con una degeneración dada por (5.36) bajo la constricción (5.37), dentro del modelo de tres tipos de partículas: Pares colectivos en el estado base, pares excitados y electrones no apareados.

5.2. Estadística gran canónica

En el modelo de BCS a temperatura finita, el espacio apareable se extiende por una energía $\hbar\omega_D$ alrededor del potencial químico (μ). Para nuestro modelo de una sola capa usaremos entonces que $\varepsilon = \mu$. Con esto en mente, encontramos que la gran función de partición (2.16) para una energía dada por la ecuación (5.35) y número de electrones $N = Q + 2P + 2X$ cuya degeneración de microestados (5.36) es

$$\Xi = \sum_{Q=0}^M \sum_{P=0}^{M-Q} \sum_{X=0}^{(M-P-Q)/2} \Theta(Q, P, X) \quad (5.38)$$

donde

$$\Theta(Q, P, X) = \frac{2^Q M! M - Q - 2X + 1}{Q! X! (M - Q - X + 1)!} e^{\beta V P - M - Q - 2X - P + 1} \quad (5.39)$$

En la sección 2.1 hemos visto que las cantidades físicas importantes se derivan de $\ln \Xi$ dentro del formalismo del ensamble gran canónico. Dado que

$$\begin{aligned} \max[\ln \Theta(Q, P, X)] &\leq \ln \Xi = \ln \left[\sum_{Q=0}^M \sum_{P=0}^{M-Q} \sum_{X=0}^{(M-P-Q)/2} \Theta(Q, P, X) \right] \\ &\leq \ln \left[\sum_{Q=0}^M \sum_{P=0}^{M-Q} \sum_{X=0}^{(M-P-Q)/2} \max \Theta(Q, P, X) \right] \\ &= \ln \left[(M+1) M - Q + 1 \left(\frac{M - P - Q}{2} + 1 \right) \max \Theta(Q, P, X) \right] \\ &= \ln(M+1) + \ln M - Q + 1 + \ln \left(\frac{M - P - Q}{2} + 1 \right) + \ln[\max \Theta(Q, P, X)] \\ &\leq 3 \ln(M+1) + \max[\ln \Theta(Q, P, X)] \end{aligned} \quad (5.40)$$

entonces si en el límite termodinámico

$$\ln M \ll \max[\ln \Theta(Q, P, X)], \quad (5.41)$$

se tiene que

$$\ln \Xi \approx \max[\ln \Theta(Q, P, X)] = \ln \Theta(Q_0, P_0, X_0), \quad (5.42)$$

donde Q_0, P_0 y X_0 son los parámetros que maximizan a $\Theta(Q, P, X)$.

A continuación probaremos la validez de (5.41). En el apéndice F se demuestra que

$$\begin{aligned} \max[\ln \Theta Q, P, X] &\approx \beta V \left(\frac{Q_0}{2} + X_0 \right) M - Q_0 - 2X_0 + 1 \\ &+ M \ln \left(\frac{M}{M - Q_0 - X_0 + 1} \right) + \beta V \left(\frac{M - Q_0 - 2X_0 + 1}{2} \right)^2. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Para el caso de $Q_0 = X_0 = 0$, se tiene

$$\max[\ln \Theta Q, P, X] \approx M \ln \left(\frac{M}{M+1} \right) + \beta V \left(\frac{M+1}{2} \right)^2, \quad (5.44)$$

entonces en el límite termodinámico ($M \rightarrow \infty$)

$$\max[\ln \Theta Q, P, X] \approx \beta V \left(\frac{M}{2} \right)^2 - 1 \gg \ln M. \quad (5.45)$$

Para los casos restantes con Q_0 y $X_0 > 0$, cuyos valores están restringidos por la ecuación (5.37), se tiene

$$\max[\ln \Theta Q, P, X] > M \ln \left(\frac{M}{M - Q_0 - X_0 + 1} \right) + \beta V \left(\frac{M - Q_0 - 2X_0 + 1}{2} \right)^2 \gg \ln M. \quad (5.46)$$

Por lo tanto, la condición (5.41) es verdadera y en consecuencia, la ecuación (5.42) es válida.

Adicionalmente, en el apéndice F se demuestra que los parámetros que maximizan la función (5.39) son

$$P_0 = \frac{M - Q_0 - 2X_0 + 1}{2}, \quad (5.47)$$

$$Q_0 = 2 \sqrt{X_0(M+1)} - X_0 \quad (5.48)$$

y

$$k_B T = \frac{V \left(M - 2\sqrt{X_0(M+1)} + 1 \right)}{\ln \left(\frac{M - 2\sqrt{X_0(M+1)} + 1}{X_0} + 1 \right)}. \quad (5.49)$$

Por otro lado, sustituyendo (5.48) en (5.47) obtenemos que en el límite termodinámico,

$$P_0 = \frac{M - 2(\sqrt{X_0(M+1)} - X_0) - 2X_0 + 1}{2} = \frac{M - 2\sqrt{X_0(M+1)} + 1}{2} \approx \frac{M - 2\sqrt{X_0 M}}{2}, \quad (5.50)$$

por lo que podemos escribir (5.49) como

$$k_B T = \frac{2VP_0}{\ln\left(\frac{2P_0}{X_0} + 1\right)}, \quad (5.51)$$

o bien como,

$$k_B T = \frac{2VP_0}{\ln\left(\frac{8MP_0}{M-2P_0^2} + 1\right)} = \frac{2VP_0}{\ln\left(\frac{8MP_0 + M - 2P_0^2}{M - 2P_0^2}\right)} = \frac{VP_0}{\ln\left(\frac{M + 2P_0}{M - 2P_0}\right)}. \quad (5.52)$$

Entonces a temperatura cero, se tiene

$$\frac{VP_0}{\ln\left(\frac{M + 2P_0}{M - 2P_0}\right)} = 0, \quad (5.53)$$

el cual implica que $P_0 = 0$ ó $P_0 = M/2$. Pero,

$$\lim_{P_0 \rightarrow 0} \frac{VP_0}{\ln\left(\frac{M + 2P_0}{M - 2P_0}\right)} = \lim_{P_0 \rightarrow 0} \frac{V}{\frac{M - 2P_0}{M + 2P_0} \left[\frac{2(M - 2P_0) + 2(M + 2P_0)}{M - 2P_0^2} \right]} = \frac{V}{4} \neq 0, \quad (5.54)$$

es decir, $P_0 = 0$ no es solución de (5.53). Por lo tanto,

$$P_0(T = 0) = \frac{M}{2}, \quad (5.55)$$

y de las ecuaciones (5.50) y (5.48) se tienen

$$X_0(T = 0) = 0 \quad (5.56)$$

y

$$Q_0(T = 0) = 0, \quad (5.57)$$

en otras palabras, cuando la temperatura tiende a cero el sistema tiene únicamente pares de Cooper colectivos en el estado base.

5.3. Brecha energética superconductora

Definimos a dos veces la brecha superconductora (2Δ) como la energía necesaria para romper un par colectivo en el estado base. El factor 2 se introdujo por primera vez por la teoría BCS, ya que la brecha Δ se define para cada electrón individual. Entonces, para un estado con Q electrones no apareados, P pares colectivos en el estado base y X pares excitados, la brecha superconductora se

puede escribir como el promedio aritmético de energía requerida para romper un par y la energía liberada al formar un par adicional, en similitud a la definición de Mulliken para la electronegatividad [Sutton, 1993], es decir,

$$2\Delta_{Q,P,X} \equiv \left[(E_{Q+2,P-1,X} - E_{Q,P,X}) + (E_{Q,P,X} - E_{Q-2,P+1,X}) \right] / 2. \quad (5.58)$$

Usando la ecuación (5.35), (5.58) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} 2\Delta_{Q,P,X} &= V(P-1)(M-Q-2X-P) + V(P+1)(M-Q-2X-P+2) / 2 \\ &= V(M-Q-2X+1). \end{aligned} \quad (5.59)$$

En el formalismo de gran canónico, la energía libre está dada por (2.19), *i.e.*,

$$\Omega = -k_B T \ln \Xi. \quad (5.60)$$

El equilibrio termodinámico se alcanza cuando la energía libre (Ω) es mínima, o sea cuando Ξ es máxima. Entonces, la brecha superconductor a temperatura T de un sistema en equilibrio, $\Delta(T)$, se obtiene de las ecuaciones (5.47) y (5.59) que

$$\Delta(T) = VP_0(T). \quad (5.61)$$

En otras palabras, la brecha es proporcional a la cantidad de pares en el estado base del sistema a temperatura T . De la ecuación (5.55) se sigue entonces que la brecha a temperatura cero es

$$\Delta(0) = \frac{MV}{2}. \quad (5.62)$$

Por último, de la ecuación (5.52) se obtiene que la brecha está relacionada con la temperatura a través de la ecuación

$$k_B T = \frac{VP_0}{\ln\left(\frac{MV + 2VP_0}{MV - 2VP_0}\right)} = \frac{\Delta(T)}{\ln\left(\frac{\Delta(0) + \Delta(T)}{\Delta(0) - \Delta(T)}\right)}. \quad (5.63)$$

En la figura 5.1 se muestra $\Delta(T)/\Delta(0) = P_0(T)/P_0(0)$ como función de la temperatura.

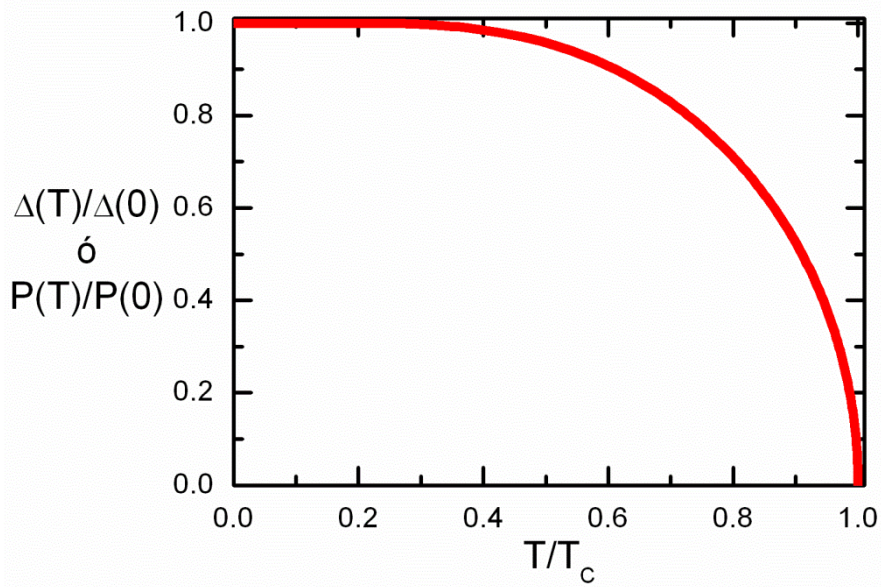


Figura 5.1. Brecha superconductora (Δ) y ocupación del estado base (P) como función de la temperatura (T).

5.4. Temperatura crítica

La temperatura crítica superconductora (T_c) en el formalismo de BCS se define como aquella temperatura a la cual la brecha energética se anula, es decir,

$$\Delta(T_c) = 0. \quad (5.64)$$

Entonces de la ecuación (5.63) se tiene

$$k_B T_c = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\Delta}{\ln \left(\frac{\Delta(0) + \Delta}{\Delta(0) - \Delta} \right)} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\frac{\Delta(0) - \Delta}{\Delta(0) + \Delta} \left\{ \frac{\Delta(0) - \Delta + \Delta(0) + \Delta}{\Delta(0) - \Delta^2} \right\}} = \frac{\Delta(0)}{2}, \quad (5.65)$$

de donde se concluye que el cociente entre 2 veces la brecha superconductora a temperatura cero y la temperatura crítica es

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = 4. \quad (5.66)$$

Por último, quisiéramos enfatizar que en un sistema de bosones, la temperatura crítica de condensación se define como aquella en la cual la población del estado base (P) se anula. Entonces de la ecuación (5.61) recuperaríamos la condición (5.64) que define a la temperatura crítica superconductora, mostrando la igualdad entre ambas temperaturas críticas.

Al comparar los resultados de (5.63) y (5.66) con los de (1.87) y (1.84), se aprecia la equivalencia entre los resultados presentados en esta tesis y los de la teoría BCS en el caso de una sola capa con energía electrónica constante. Más allá del formalismo de BCS, nuestros resultados demuestran que el estado superconductor de BCS puede interpretarse como una condensación de Bose-Einstein de pares de Cooper colectivos, como puede apreciarse particularmente en la figura 5.1.

CONCLUSIONES

En esta tesis hemos introducido el concepto de pares de Cooper colectivos, definidos como una combinación lineal de pares de Cooper, o bien en general como una transformación unitaria de los mismos. Su concepción proviene de que el estado base superconductor propuesto por Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) puede expresarse en términos de los pares colectivos. Este hecho establece una relación natural entre estos pares colectivos y la superconductividad. Los puntos más relevantes de esta tesis se pueden resumir como siguen:

- (1) Se demuestra por primera vez que los pares de Cooper colectivos tienen naturaleza bosónica en el límite diluido, es decir, se pueden acumular muchos de ellos en un mismo estado cuántico, en contraste con los pares de Cooper individuales; hecho que surge de su carácter difuso en el espacio de momentos.
- (2) Se prueba que los estados de un par de Cooper colectivo son las eigenfunciones del hamiltoniano de BCS y se determinan sus correspondientes energías usando el modelo de capas, cuya solución es analítica en el límite termodinámico y su estado base coincide con el resultado original de Cooper obtenido mediante cálculo variacional.
- (3) Se predice la existencia de una condensación de Bose-Einstein (BEC) de pares de Cooper colectivos a temperatura finita en el límite diluido, siguiendo el método estadístico estándar.
- (4) Dentro del modelo de coexistencia entre tres tipos de partículas: pares colectivos en el estado base, pares excitados y electrones no apareados, se demuestra que la superconductividad puede considerarse como una condensación de pares colectivos para el caso de energía electrónica constante.

Cabe mencionar que el análisis del capítulo cinco puede extenderse al modelo de multicapas discutido en el capítulo cuatro. Dicha extensión se encuentra actualmente en curso. Asimismo, el estudio de la superconductividad basada en los pares de Cooper colectivos presentado en esta tesis puede catalogarse en el lado BEC dentro del esquema de *crossover* entre BCS y BEC [Randeria, 1995]. En particular, el carácter difuso en el espacio \mathbf{k} de los pares de Cooper colectivos podría traducirse a un menor tamaño de dichos pares en

espacio real, que es consistente con las suposiciones básicas del lado BEC dentro del *crossover*.

En general, considero que la superconductividad sigue siendo un reto para la física teórica, ya que aún no existe una explicación microscópica satisfactoria de los cerámicos superconductores. El paralelismo mostrado en esta tesis entre la superconductividad y la condensación de Bose-Einstein de pares de Cooper colectivos podría contribuir a la búsqueda de dicha explicación microscópica. Por último, creo que esta tesis no es un trabajo acabado, sino espero que sea el inicio de un camino alternativo para estudiar la superconductividad.

Apéndice A. Conmutación de operadores

En este apéndice buscaremos las reglas de conmutación de los operadores $\hat{\eta}$ y $\hat{\beta}$ definidos en las ecuaciones (3.17) y (3.18).

Primeramente notamos que

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |n\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_n \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right)^n |0\rangle = A_n \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right)^{n+1} |0\rangle = \frac{A_n}{A_{n+1}} |n+1\rangle, \quad (\text{A.1})$$

por lo que en el subespacio generado por los estados $|n\rangle$ definidos en la ecuación (3.8) se tiene

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} |n+1\rangle \langle n|. \quad (\text{A.2})$$

Por otro lado,

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} |n\rangle = A_n \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \quad (\text{A.3})$$

donde $\hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle = 0$ si $\mathbf{k} \notin \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n$. Entonces

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} |n\rangle &= A_n \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_2} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_2} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \\ &+ A_n \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_3} \dots v_{\mathbf{k}_n}}{u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_3} \dots u_{\mathbf{k}_n}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}_3}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_n}^{\dagger} |0\rangle \\ &\vdots \\ &+ A_n \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_n} \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{n-1}}^{\dagger} |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Nótese que los renglones de la ecuación (A.4) son iguales, ya que los índices de las sumatorias son mudos. Entonces

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} |n\rangle &= n A_n \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{n-1}}^{\dagger} |0\rangle \\ &= (M-n+1) n A_n \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\substack{\mathbf{k}_{n-1} \\ \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j}} \frac{v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_{n-1}}}{u_{\mathbf{k}_1} \dots u_{\mathbf{k}_{n-1}}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{n-1}}^{\dagger} |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

es decir,

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} |n\rangle = \frac{A_n}{A_{n-1}} n(M-n+1) |n-1\rangle. \quad (\text{A.6})$$

En consecuencia, en el subespacio generado por los estados $|n\rangle$,

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} = \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} n(M-n+1) |n-1\rangle \langle n|. \quad (\text{A.7})$$

De las ecuaciones (3.19) y (3.20), se tienen

$$\hat{\eta} = \sum_{n=0}^M \eta_n |n\rangle \langle n| \quad (\text{A.8})$$

y

$$\hat{\beta} = \sum_{n=0}^M \beta_n |n\rangle \langle n|. \quad (\text{A.9})$$

Entonces en el subespacio generado por los estados $|n\rangle$,

$$[\hat{\eta}, \hat{\beta}] = 0, \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \left[\hat{\eta}, \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \right] &= \sum_{n'=0}^M \eta_{n'} |n'\rangle \langle n'| \left[\sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n |n-1\rangle \langle n| \right. \\ &\quad \left. - \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n |n-1\rangle \langle n| \sum_{n'=0}^M \eta_{n'} |n'\rangle \langle n'| \right] \\ &= \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n \eta_{n-1} |n-1\rangle \langle n| \\ &\quad - \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n \eta_n |n-1\rangle \langle n| \\ &= \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n (\eta_{n-1} - \eta_n) |n-1\rangle \langle n|, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} \left[\hat{\eta}, \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \right] &= \sum_{n'=0}^M \eta_{n'} |n'\rangle \langle n'| \left[\sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} |n+1\rangle \langle n| - \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} |n+1\rangle \langle n| \sum_{n'=0}^M \eta_{n'} |n'\rangle \langle n'| \right] \\ &= \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} \eta_{n+1} |n+1\rangle \langle n| - \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} \eta_n |n+1\rangle \langle n| \\ &= \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} (\eta_{n+1} - \eta_n) |n+1\rangle \langle n| \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

y en analogía a las dos anteriores,

$$\left[\hat{\beta}, \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \right] = \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n \beta_{n-1} - \beta_n |n-1\rangle\langle n|, \quad (\text{A.13})$$

y

$$\left[\hat{\beta}, \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \right] = \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} \beta_{n+1} - \beta_n |n+1\rangle\langle n|. \quad (\text{A.14})$$

Usando las expresiones (A.2) y (A.8) tenemos que el operador de ascenso (3.17) puede reescribirse como

$$\hat{a}^\dagger = \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} |n+1\rangle\langle n| \left[\sum_{n'=0}^M \eta_{n'} |n'\rangle\langle n'| \right] = \sum_{n=0}^{M-1} \frac{A_n}{A_{n+1}} \eta_n |n+1\rangle\langle n|, \quad (\text{A.15})$$

mientras que usando las expresiones (A.7) y (A.9) el operador de descenso (3.18) queda expresado como

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n |n-1\rangle\langle n| \left[\sum_{n'=0}^M \beta_{n'} |n'\rangle\langle n'| \right] \\ &= \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n \beta_n |n-1\rangle\langle n|. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Dado que \hat{a}^\dagger es el operador adjunto de \hat{a} , se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^M \frac{A_n}{A_{n+1}} \eta_n |n+1\rangle\langle n| &= \sum_{n'=1}^M \frac{A_{n'}}{A_{n'-1}} n' (M-n'+1) \beta_{n'} |n'\rangle\langle n'-1| \\ &= \sum_{n=0}^M \frac{A_{n+1}}{A_n} (n+1)(M-n) \beta_{n+1} |n+1\rangle\langle n|, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

entonces

$$\eta_n = \left(\frac{A_{n+1}}{A_n} \right)^2 (n+1)(M-n) \beta_{n+1}. \quad (\text{A.18})$$

Por otro lado, del conmutador del operador de creación \hat{a}^\dagger con el de aniquilación \hat{a} tenemos

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n \beta_n |n-1\rangle\langle n| \left[\sum_{n'=0}^{M-1} \frac{A_{n'}}{A_{n'+1}} \eta_{n'} |n'+1\rangle\langle n'| \right] \\ &\quad - \sum_{n'=0}^{M-1} \frac{A_{n'}}{A_{n'+1}} \eta_{n'} |n'+1\rangle\langle n'| \left[\sum_{n=1}^M \frac{A_n}{A_{n-1}} (M-n+1)n \beta_n |n-1\rangle\langle n| \right] \\ &= \sum_{n'=0}^{M-1} \eta_{n'} (n'+1)(M-n') \beta_{n'+1} |n'\rangle\langle n'| - \sum_{n=1}^M \eta_{n-1} n (M-n+1) \beta_n |n\rangle\langle n|, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

esto es,

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = & \sum_{n=1}^{M-1} \eta_n (n+1)(M-n)\beta_{n+1} - \eta_{n-1}(M-n+1)n\beta_n |n\rangle\langle n| \\ & + M\eta_0\beta_1|0\rangle\langle 0| - M\eta_{M-1}\beta_M|M\rangle\langle M|. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Puesto que $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I} \equiv \sum_n |n\rangle\langle n|$, (A.20) conduce que para $1 \leq n \leq M-1$,

$$\eta_n (n+1)(M-n)\beta_{n+1} - \eta_{n-1}(M-n+1)n\beta_n = 1 \quad (\text{A.21})$$

y

$$M\eta_0\beta_1 = -M\eta_{M-1}\beta_M = 1. \quad (\text{A.22})$$

Las condiciones (A.18), (A.21) y (A.22) son consistentes con las ecuaciones (3.19) y (3.20).

Apéndice B. Ecuación secular

En este apéndice se detallan los pasos para obtener la ecuación secular (4.19) a partir de la ecuación (4.18),

$$\det \begin{pmatrix} x_1 + M_1 & \sqrt{M_1 M_2} & \cdots & \sqrt{M_1 M_{N_s}} \\ \sqrt{M_2 M_1} & x_2 + M_2 & \cdots & \sqrt{M_2 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_1} & \sqrt{M_{N_s} M_2} & \cdots & x_{N_s} + M_{N_s} \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{B.1})$$

Introduciremos ahora la notación $D(i, j, \dots)$ como el determinante menor de la matriz de la ecuación (B.1) que se obtiene al borrar las filas y columnas i, j, \dots . Por ejemplo, $D(1)$ está dado por

$$D(1) \equiv \det \begin{pmatrix} x_2 + M_2 & \sqrt{M_2 M_3} & \cdots & \sqrt{M_2 M_{N_s}} \\ \sqrt{M_3 M_2} & x_3 + M_3 & \cdots & \sqrt{M_3 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_2} & \sqrt{M_{N_s} M_3} & \cdots & x_{N_s} + M_{N_s} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Sustrayendo $\sqrt{M_1/M_2}$ veces la segunda fila de la primera en (B.1) se obtiene

$$\det \begin{pmatrix} x_1 & -\sqrt{\frac{M_1}{M_2}} x_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{M_2 M_1} & x_2 + M_2 & \sqrt{M_2 M_3} & \cdots & \sqrt{M_2 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_1} & \sqrt{M_{N_s} M_2} & \sqrt{M_{N_s} M_3} & \cdots & x_{N_s} + M_{N_s} \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{B.3})$$

Haciendo una expansión en cofactores, la ecuación (B.3) se reescribe como

$$x_1 D(1) + \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} x_2 \det \begin{pmatrix} \sqrt{M_2 M_1} & \sqrt{M_2 M_3} & \cdots & \sqrt{M_2 M_{N_s}} \\ \sqrt{M_3 M_1} & x_3 + M_3 & \cdots & \sqrt{M_3 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_1} & \sqrt{M_{N_s} M_3} & \cdots & x_{N_s} + M_{N_s} \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{B.4})$$

Una vez más, sustrayendo $\sqrt{M_2/M_3}$ veces la segunda fila de la primera, el segundo término de la ecuación (B.4) se vuelve

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} x_2 \det \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{\frac{M_2}{M_3}} x_3 & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{M_3 M_1} & x_3 + M_3 & \sqrt{M_3 M_4} & \cdots & \sqrt{M_3 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_1} & \sqrt{M_{N_s} M_3} & \sqrt{M_{N_s} M_4} & \cdots & x_{\varepsilon_s} + M_{N_s} \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} x_2 \sqrt{\frac{M_2}{M_3}} x_3 \det \begin{pmatrix} \sqrt{M_3 M_1} & \sqrt{M_3 M_4} & \cdots & \sqrt{M_3 M_{N_s}} \\ \sqrt{M_4 M_1} & x_4 + M_4 & \cdots & \sqrt{M_4 M_{N_s}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{M_{N_s} M_1} & \sqrt{M_{N_s} M_4} & \cdots & x_{\varepsilon_s} + M_{N_s} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Repitiendo $N_s - 3$ veces este procedimiento, la ecuación (B.4) se reescribe como

$$x_1 D(1) + \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} x_2 \sqrt{\frac{M_2}{M_3}} x_3 \sqrt{\frac{M_3}{M_4}} x_4 \cdots \sqrt{\frac{M_{N_s-1}}{M_{N_s}}} x_{N_s} \sqrt{M_{N_s} M_1} = x_1 D(1) + M_1 \prod_{s \neq 1} x_s = 0. \quad (\text{B.6})$$

ahora, aplicando el mismo procedimiento a $D(1)$ eliminando esta vez el reglón que contiene x_2 se obtiene

$$D(1) = x_2 D(1,2) + M_2 \prod_{s \neq 1,2} x_s. \quad (\text{B.7})$$

Entonces

$$x_1 \left(x_2 D(1,2) + M_2 \prod_{s \neq 1,2} x_s \right) + M_1 \prod_{s \neq 1} x_s = x_1 x_2 D(1,2) + M_1 \prod_{s \neq 1} x_s + M_2 \prod_{s \neq 2} x_s = 0. \quad (\text{B.8})$$

Repitiendo $(N_s - 2)$ veces el procedimiento de las ecuaciones (B.7) y (B.8), se obtiene para el caso de $x_i \neq 0$, siendo $i = 1, 2, \dots, N_s$,

$$x_1 x_2 \cdots x_{N_s} + M_1 \prod_{s \neq 1} x_s + \cdots + M_{N_s} \prod_{s \neq N_s} x_s = \left(\prod_{s'=1}^{N_s} x_{s'} \right) \left(1 + \sum_{s=1}^{N_s} \frac{M_s}{x_s} \right) = 0, \quad (\text{B.9})$$

y por lo tanto,

$$1 + \sum_{s=1}^{N_s} \frac{M_s}{x_s} = 0, \quad (\text{B.10})$$

que corresponde al resultado de la ecuación (4.19).

Para el caso de $x_i = 0$, la ecuación (B.9) nos lleva a

$$M_i \prod_{s \neq i} x_s = 0, \tag{B.11}$$

y entonces debe existir al menos otro $x_j = 0$ para $j \neq i$. Por lo tanto, para una E_v dada, $x_i = x_j = 0$ implica que $\varepsilon_i = \varepsilon_j$, lo cual contradice la suposición inicial del modelo de capas.

Apéndice C. Adición de un par en el estado base

En este apéndice demostraremos que si

$$|W\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_W} A_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_W} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_W}^\dagger |\tilde{0}\rangle \quad (\text{C.1})$$

es una eigenfunción del hamiltoniano (5.1) con energía E , es decir,

$$\hat{H}|W\rangle = \left(\varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - VM\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \right) |W\rangle = E|W\rangle, \quad (\text{C.2})$$

entonces $\hat{a}_0^\dagger |W\rangle$ también será eigenfunción, siendo \hat{a}_0^\dagger el operador de creación de un par de Cooper en el estado base.

Primeramente notemos que

$$\hat{H}\hat{a}_0^\dagger |W\rangle = \left(\varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - VM\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \right) \hat{a}_0^\dagger |W\rangle = (2W + 2)\varepsilon\hat{a}_0^\dagger |W\rangle - VM\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger |W\rangle. \quad (\text{C.3})$$

y de la ecuación (3.38) tenemos,

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{a}_0^\dagger |W\rangle &= (2W + 2)\varepsilon\hat{a}_0^\dagger |W\rangle - VM\hat{a}_0^\dagger \left(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + 1 - \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \right) |W\rangle \\ &= (2W + 2)\varepsilon\hat{a}_0^\dagger |W\rangle - V(M - 2W)\hat{a}_0^\dagger |W\rangle - \hat{a}_0^\dagger VM\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 |W\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Además de la ecuación (C.2) obtenemos que

$$-VM\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 |W\rangle = \left[E - \varepsilon \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \right] |W\rangle = (E - 2\varepsilon W) |W\rangle. \quad (\text{C.5})$$

Entonces la ecuación (C.4) se convierte en

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{a}_0^\dagger |W\rangle &= (2W + 2)\varepsilon\hat{a}_0^\dagger |W\rangle - V(M - 2W)\hat{a}_0^\dagger |W\rangle + (E - 2\varepsilon W)\hat{a}_0^\dagger |W\rangle \\ &= [E + 2\varepsilon - V(M - 2W)]\hat{a}_0^\dagger |W\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

En resumen, la ecuación (C.6) indica que si $|W\rangle$ es eigenfunción del hamiltoniano (5.1) con energía E , también lo será $\hat{a}_0^\dagger |W\rangle$ pero con energía $E' = E + 2\varepsilon - V(M - 2W)$.

Apéndice D. Energía de pares

En este apéndice demostraremos por inducción matemática que si $|X_i\rangle$ es una eigenfunción del hamiltoniano (5.1) con X pares excitados y ningún par en el estado base, entonces el estado

$$|P, X_i\rangle = (\hat{a}_0^\dagger)^P |X_i\rangle, \quad (D.1)$$

también será eigenfunción pero con energía

$$E_{P,X} = \varepsilon (2P + 2X) - P \tilde{M} - 2P - X + 1 V. \quad (D.2)$$

- Para el caso de $P = 0$, de la ecuación (5.21) tenemos

$$\hat{H}|0, X_i\rangle = 2X\varepsilon|0, X_i\rangle. \quad (D.3)$$

- Para el caso de $P = 1$, la ecuación (5.29) conduce a

$$\hat{H}|1, X_i\rangle = (2(X + 1)\varepsilon - (\tilde{M} - 2X)V)|1, X_i\rangle, \quad (D.4)$$

es decir, $|1, X_i\rangle$ es una eigenfunción del hamiltoniano (5.1) con energía $E_{1,X} = 2(X + 1)\varepsilon - (\tilde{M} - 2X)V$.

- Supongamos que para el caso de $P = \tilde{P}$, se tiene

$$\hat{H}|\tilde{P}, X_i\rangle = (2\tilde{P} + 2X)\varepsilon - \tilde{P}(\tilde{M} - 2X - \tilde{P} + 1)V |\tilde{P}, X_i\rangle. \quad (D.5)$$

- Para $P = \tilde{P} + 1$, la ecuación (5.29) nos conduce a

$$\begin{aligned} \hat{H}|\tilde{P} + 1, X_i\rangle &= (2\tilde{P} + 2X)\varepsilon - \tilde{P}(\tilde{M} - 2X - \tilde{P} + 1)V + 2\varepsilon - \tilde{M}V + 2(\tilde{P} + X)V |\tilde{P} + 1, X_i\rangle \\ &= [2(\tilde{P} + 1) + 2X]\varepsilon - (\tilde{P} + 1)[\tilde{M} - 2X - (\tilde{P} + 1) + 1]V |\tilde{P} + 1, X_i\rangle. \end{aligned} \quad (D.6)$$

Con lo cual la suposición inicial queda demostrada.

Apéndice E. Operador semidefinido positivo

En este apéndice se demuestra que el operador $\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}$ es semidefinido positivo en el subespacio de los pares de Cooper, es decir, que para cualquier función general de pares

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N} A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N) \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_N}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{E.1})$$

se tiene

$$\langle \psi | \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} | \psi \rangle \geq 0. \quad (\text{E.2})$$

Primeramente notemos que

$$\begin{aligned} \langle \psi | \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} | \psi \rangle &= \langle \psi | \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N} A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N) \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_N}^\dagger |0\rangle \\ &= \langle \psi | N \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{N-1}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}_N \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N) |0\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N} A^*(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \\ &\quad \times \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} \langle 0 | \hat{b}_{\mathbf{q}_1} \dots \hat{b}_{\mathbf{q}_N} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{N-1}}^\dagger |0\rangle \sum_{\mathbf{k}_N \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N). \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

Dado que

$$\langle 0 | \hat{b}_{\mathbf{q}_1} \dots \hat{b}_{\mathbf{q}_N} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mathbf{k}_{N-1}}^\dagger |0\rangle = \begin{cases} 1, & \text{si } \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N = \mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1} \\ 0, & \text{si } \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N \neq \mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1} \end{cases}, \quad (\text{E.4})$$

entonces (E.3) se convierte en

$$\begin{aligned} &\langle \psi | \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} | \psi \rangle \\ &= N! \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}}^{(\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j)} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} A^*(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}, \mathbf{k}_0) \sum_{\mathbf{k}_N \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}, \mathbf{k}_N) \\ &= N! \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}}^{(\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j)} \left| \sum_{\mathbf{k}_N \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}, \mathbf{k}_0) \right|^2 \geq 0, \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

donde la igualdad sólo se cumple cuando

$$\sum_{\mathbf{k}_N \neq \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}} A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}, \mathbf{k}_0) = 0 \quad (\text{E.6})$$

para cada posible conjunto $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N-1}$. La ecuación (E.5) demuestra que el operador $\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}$ es semidefinido positivo en el subespacio de los pares de Cooper.

Apéndice F. Máximo del peso estadístico

En este apéndice, se determinará el máximo de la función

$$\Theta_{Q,P,X} = \frac{2^Q M! M - Q - 2X + 1}{Q! X! (M - Q - X + 1)!} e^{\beta V P M - Q - 2X - P + 1}. \quad (\text{F.1})$$

con la restricción $P + 2X + Q \leq M$ de acuerdo a la ecuación (5.37). Para obtener su máximo tenemos que encontrar sus derivadas parciales e igualarlas a cero. Sean Q_0 , P_0 y X_0 los parámetros que maximizan $\Theta_{Q,P,X}$. Primeramente

$$\frac{\partial \Theta(Q,P,X)}{\partial P} = \beta V (M - Q - 2P - 2X + 1) \frac{2^Q M! (M - Q - 2X + 1)}{Q! X! (M - Q - X + 1)!} e^{\beta V P (M - Q - 2X - P + 1)} = 0, \quad (\text{F.2})$$

en consecuencia,

$$M - Q - 2P - 2X + 1 = 0, \quad (\text{F.3})$$

ya que de la ecuación (5.37) se tiene $M - Q - 2X + 1 \geq 1$ al ser $P \geq 0$. Entonces,

$$P_0 = \frac{M - Q - 2X + 1}{2} \quad (\text{F.4})$$

es el valor que debe tomar P para obtener un máximo de (F.1). Para verificar que esta solución corresponde a un máximo, nótese que

$$\frac{\partial}{\partial P} \Theta_{Q,P,X} < 0 \quad \text{si } P > P_0 \quad (\text{F.5})$$

y

$$\frac{\partial}{\partial P} \Theta_{Q,P,X} > 0 \quad \text{si } P < P_0, \quad (\text{F.6})$$

lo cual corresponde al comportamiento de un máximo en $P = P_0$. Evaluando Θ para $P = P_0$ encontramos que

$$\Theta_{Q,P_0,X} = \frac{2^Q M! M - Q - 2X + 1}{Q! X! (M - Q - X + 1)!} e^{\beta V \left(\frac{M - Q - 2X + 1}{2} \right)^2}. \quad (\text{F.7})$$

Dado que el logaritmo natural es una función monótonamente creciente, maximizar $\Theta_{Q,P_0,X}$ equivale a maximizar su logaritmo. Calculando su logaritmo por medio de la aproximación de Stirling tenemos que

$$\begin{aligned}\ln \Theta_{Q, P_0, X} &\approx Q \ln 2 + M \ln M + \ln(M - Q - 2X + 1) \\ &+ \beta V \left(\frac{M - Q - 2X + 1}{2} \right)^2 - Q \ln Q - X \ln X \\ &- (M - Q - X + 1) \ln(M - Q - X + 1) + 1.\end{aligned}\quad (\text{F.8})$$

En el límite termodinámico ($M \rightarrow \infty$) la expresión anterior se convierte en

$$\begin{aligned}\ln \Theta_{Q, P_0, X} &\approx Q \ln 2 + M \ln M + \beta V \left(\frac{M - Q - 2X + 1}{2} \right)^2 - Q \ln Q \\ &- X \ln X - (M - Q - X + 1) \ln(M - Q - X + 1).\end{aligned}\quad (\text{F.9})$$

Las dos derivadas parciales de $\ln \Theta_{Q, P_0, X}$ son

$$\frac{\partial}{\partial Q} \ln \Theta_{Q, P_0, X} \approx \ln 2 - \beta V \frac{M - Q - 2X + 1}{2} - \ln Q + \ln(M - Q - X + 1) = 0 \quad (\text{F.10})$$

y

$$\frac{\partial}{\partial X} \ln \Theta_{Q, P_0, X} \approx -\beta V (M - Q - 2X + 1) - \ln X + \ln(M - Q - X + 1) = 0. \quad (\text{F.11})$$

Multiplicando por 2 la ecuación (F.10) y restándole (F.11) tenemos

$$\ln 4 - 2 \ln Q + \ln X + \ln(M - Q - X + 1) = \ln \left[\frac{4X(M - Q - X + 1)}{Q^2} \right] = 0, \quad (\text{F.12})$$

lo cual implica que

$$Q^2 + 4XQ - 4X(M - X + 1) = 0, \quad (\text{F.13})$$

cuyas soluciones son

$$Q = -2X \pm 2\sqrt{X(M + 1)}. \quad (\text{F.14})$$

Dado que $X < M$, la solución física ($Q \geq 0$) corresponde a

$$Q_0 = 2\sqrt{X(M + 1)} - X. \quad (\text{F.15})$$

Finalmente sustituyendo (F.15) en (F.11) obtenemos

$$-\beta V \left[M - 2\sqrt{X(M + 1)} + 1 \right] - \ln X + \ln \left[M - 2\sqrt{X(M + 1)} + X + 1 \right] = 0. \quad (\text{F.16})$$

En la ecuación anterior se puede despejar $k_B T = 1/\beta$, para finalmente obtener que X está relacionada con la temperatura T a través de la ecuación

$$k_B T = \frac{V \left(M - 2\sqrt{X_0(M+1)} + 1 \right)}{\ln \left(\frac{M - 2\sqrt{X_0(M+1)} + 1}{X_0} + 1 \right)}. \quad (\text{F.17})$$

Para determinar el valor que toma la función (F.1) en su máximo, notemos que las ecuaciones (F.10) y (F.11) conducen respectivamente a

$$Q \ln 2 - Q \ln Q + Q \ln(M - Q - X + 1) = \beta V Q \left(\frac{M - Q - 2X + 1}{2} \right) \quad (\text{F.18})$$

y

$$-X \ln X + X \ln(M - Q - X + 1) = \beta V X \left(\frac{M - Q - 2X + 1}{2} \right). \quad (\text{F.19})$$

Al sustituir (F.18) y (F.19) en la ecuación (F.8) tendremos

$$\begin{aligned} & \max \left[\ln \Theta \left(Q, P, X \right) \right] \\ & \approx \beta V \left(\frac{Q_0}{2} + X_0 \right) (M - Q_0 - 2X_0 + 1) + M \ln \frac{M}{M - Q_0 - X_0 + 1} + \beta V \left(\frac{M - Q_0 - 2X_0 + 1}{2} \right)^2, \end{aligned} \quad (\text{F.20})$$

donde Q_0 y X_0 se obtienen mediante las ecuaciones (F.15) y (F.17).

REFERENCIAS

- [Anderson, 1995] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman y E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [Ashcroft, 1976] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Brooks Cole (1976).
- [Bardeen, 1955] J. Bardeen y D. Pines, *Phys. Rev.* **99**, 1140 (1955).
- [Bardeen, 1957] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [Baquero, 2006] R. Baquero, *El fascinante mundo del estado sólido: la superconductividad*. UPTC (2006).
- [Cooper, 1955] L. N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [Crouzeix, 2011] M. Crouzeix y M. Combescot, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 267001 (2011).
- [Fröhlich, 1950] H. Fröhlich, *Phys. Rev.* **79**, 845 (1950).
- [Fujita, 1998] S. Fujita, D.L. Morabito, *Mod. Phys. Lett. B* **12**, 753 (1998).
- [Galván, 2012] C. G. Galván, L. A. Pérez y C. Wang, *Phys. Lett. A* **376**, 1380 (2012).
- [Griffiths, 2005] D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, segunda edición, Pearson Education (2005) p. 102.
- [Guenault, 2002] A.M. Guenault, *Basic Superfluids*, Taylor & Francis Ltd (2002).
- [Gunton, 1968] J. D. Gunton y M. J. Buckingham, *Phys. Rev.* **166**, 152 (1968).
- [Kaplan, 2005] I. G. Kaplan, O. Navarro y J. A. Sanchez, *Phys. C* **419**, 13 (2005).
- [Kittel, 1996] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, séptima edición, John Wiley and Sons (1996).
- [Landau, 1977] L.D. Landau y E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, non-Relativistic Theory*, tercera edición, Pergamon Press (1977).
- [Legget, 1980] A. J. Legget, *in Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, Springer-verlg (1980) p. 13.
- [Mermin, 1966] N. D. Mermin y H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [Merzbacher, 1998] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, tercera edición, John Wiley & Sons (1998).
- [Navarro, 2007] O. Navarro y R. Baquero, *Ideas Fundamentales de la Superconductividad*, Universidad Nacional Autónoma de México (2007).

- [Nozières, 1984] P. Nozières y S. Schmitt-Rink, *J. Low. Temp. Phys.* **59**, 195 (1985).
- [Pathria, 1996] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Second Edition, Butterworth-Heinemann (1996).
- [Pines, 1999] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, Westview Press (1999).
- [Ramírez, 2009] C. Ramírez y C. Wang, *Phys. Lett. A* **373**, 269 (2009).
- [Ramírez, 2011] C. Ramírez y C. Wang, *J. Phys. Chem. Solids* **72**, 395 (2011).
- [Randeria, 1995] M. Randeria, en *Bose-Einstein Condensation*, editado por A. Griffin, D. W. Snoke y S. Stringari, Cambridge University Press (1995).
- [Richardson, 1963] R. W. Richardson, *Phys. Lett.* **3**, 277 (1963).
- [Richardson, 1964] R.W. Richardson and N. Sherman, *Nucl. Phys.* **52**, 221 (1964).
- [Rickayzen, 1966] G. Rickayzen, *Theory of Superconductivity*, John Wiley (1966).
- [Silvera, 1997] I. F. Silvera, *Am. J. Phys.* **65**, 570 (1997).
- [Sutton,1993] A. P. Sutton, *Electronic Structure of Materials*, Oxford (1993) p. 34.
- [Thinkam, 1996] M. Thinkam, *Introduction to superconductivity*, Mc-Graw Hill (1996).