



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**MODELAJE CUÁNTICO DE SUPERCONDUCTIVIDAD
EN NANOESTRUCTURAS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

F Í S I C O

P R E S E N T A:

Germán Emiliano López Fernández



**DIRECTOR DE TESIS:
Dr. Chumin Wang Chen**

Ciudad Universitaria, CD. MX., 2018



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.

Agradecimientos

Al proyecto 252943 del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y al proyecto IN106317 de la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) de la UNAM. Así mismo, a la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) de la UNAM por permitir el acceso a las supercomputadoras Miztli donde parte de los cálculos realizados en esta tesis fueron realizados.

Resumen

En 1957, J. Bardeen, L. Cooper y J. R. Schrieffer desarrollaron la primera teoría microscópica basada en una interacción electrón-electrón atractiva constante y una función de onda de múltiples pares logrando explicar una amplia gama de propiedades superconductoras conocidas hasta entonces. En 1958, N. Bogoliubov encontró una transformación unitaria seguido de una aproximación de campo medio para pares de electrones, la cual conduce a la misma solución de la teoría BCS [Tinkham, 1996]. El formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) es una extensión de la transformación de Bogoliubov, permitiendo el análisis de la brecha superconductora en el espacio real [Gennes, 1999]. En materiales nanoestructurados, tales como nanoalambres y nanocintas, el confinamiento cuántico puede tener efectos decisivos en su estado superconductor. Por otro lado, J. Hubbard estableció en 1963 un modelo cuántico en el espacio real para los electrones en sólidos incluyendo la interacción electrón-electrón.

En esta tesis se estudian la brecha superconductora y la temperatura crítica, así como su dependencia con el potencial químico y el parámetro de interacción electrón-electrón, en nanoalambres y nanocintas superconductores con distintas geometrías de sección transversal. Dicho estudio se realiza dentro del formalismo de BdG a partir del modelo de Hubbard usando el método de superceldas, donde los átomos de la sección transversal son explícitamente considerados. Los resultados obtenidos muestran que las nanoestructuras poseen una brecha superconductora inhomogénea por la presencia de una sección transversal finita. Esta brecha depende de la ubicación del potencial químico o el llenado de la banda electrónica, cuyos máximos tienen una correlación estrecha con los máximos de la densidad de estados electrónicos local en concordancia con la teoría BCS. Además, se presentan resultados analíticos para nanoestructuras con sección transversal de uno y dos átomos. Finalmente, la presente tesis sugiere que el formalismo de BdG más el modelo de Hubbard podría ser un método apropiado para el estudio cuántico de la superconductividad en nanoestructuras.

Contenido

Introducción	4
Capítulo 1 Fenómenos de la Superconductividad	6
1.1 Termodinámica del estado superconductor	7
1.2 Ecuaciones de London	10
1.3 Teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau	12
Capítulo 2 Teorías Microscópicas	15
2.1 Interacción electrón-electron via fonón	15
2.2 Pares de Cooper	17
2.3 Teoría de Bardeen-Cooper-Schrieffer	19
2.4 Transformación de Bogoliubov	23
2.5 Formalismo de Bogoliubov-de Gennes	27
Capítulo 3 Superconductividad en Nanoalambres y Nanocintas	31
3.1 Modelo de Hubbard atractivo	31
3.2 Bogoliubov-de Gennes en el espacio combinado	32
3.3 Brecha y temperatura crítica superconductoras	37
Conclusiones	52
Bibliografía	53

Introducción

La superconductividad ha sido un reto para la física teórica desde su descubrimiento en 1911 por el científico holandés Heike Kamerlingh Onnes [Onnes,1911], dado que no presenta resistencia eléctrica al paso de la corriente y presenta el efecto Meissner [Meissner,1933], es decir, se comporta como un diamagneto perfecto. Hoy en día se sabe que la superconductividad es un fenómeno colectivo de muchos cuerpos y no puede ser entendido a partir de la teoría de un solo electrón, ni dentro de la aproximación de campo medio para dicho electrón. Cabe mencionar que el problema de muchos cuerpos sigue sin poder resolverse en forma exacta hasta la fecha.

En general, la superconductividad es un fenómeno bastante complejo de entender. En 1934 Gorter y Casimir [Gorter,1934] desarrollaron la primera teoría termodinámica con la cual demuestran que por debajo de cierta temperatura crítica la superconductividad resulta ser un estado de menor energía y mas ordenado que el estado normal. Posteriormente los hermanos London extendieron las ecuaciones de Maxwell y encontraron la existencia de una longitud de penetración cuando un superconductor se encuentra en un campo magnético externo. En 1950 Ginzburg y Landau desarrollaron una teoría fenomenológica donde se introducen los conceptos del parámetro de orden y la longitud de coherencia. A partir del cociente entre la longitud de penetración y la de coherencia, se definen los superconductores de tipo I y tipo II. El gran salto en el entendimiento del fenómeno de la superconductividad fue en 1957, cuando J. Bardeen, L. Cooper y J. R. Schrieffer (BCS) desarrollaron la primera teoría cuántica proponiendo una función de onda de muchos cuerpos que conduce a una solución analítica mediante metodos variacionales, en la cual los pares de Cooper se forman a partir de una interacción electrón-electrón vía fonón. Esta teoría logró dar un origen microscópico de los principales modelos fenomenológicos existentes hasta entonces y en consecuencia se hizo acreedor del premio Nobel de Física en 1972. En 1958, el científico ruso Nikolai Bogoliubov desarrolló una teoría alternativa basada en campo medio de pares de electrones seguida por una transformación que diagonaliza analíticamente el Hamiltoniano de pares. Dicha teoria obtiene los mismos resultados de la teoría BCS de una manera mas simple especialmente para temperaturas finitas [Bogoliubov,1958]. Posteriormente, Pierre-Gilles de Gennes transformó la teoría de Bogoliubov desarrollada en el espacio de momentos hacia el espacio real obteniendo las famosas ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes.

Aunado a la importancia conceptual por entender la superconductividad, existe intereses en aplicar el fenómeno en la vida cotidiana, ya que primeramente la superconductividad permite trasladar grandes cantidades de electricidad sin tener pérdidas en el camino, como los cables basados en superconductores a temperatura de nitrógeno líquido instalados en Long Island en el estado de New York de los Estados Unidos de America desde el 2008 [energy.gov,2008]. Así mismo, los cables basados en cerámicos superconductores también se usan para crear bobinas y generar grandes campos magnéticos superando los 30 Teslas. Dichas bobinas son actualmente instaladas en los aceleradores de partículas y utilizadas en imagenes por resonancia magnética. Dichos cables están constituidos de multifilamentos superconductores en forma torcida para tener una mayor estabilidad magnética. Estos filamentos llegan a tener un diámetro menor que 100 nm. Por lo que el estudio de la superconductividad es estimulado desde diferentes ámbitos.

Desde el punto de vista teórico, una manera general para estudiar la dinámica de los electrones en sólidos es a través del hamiltoniano de Hubbard [Hubbard,1963], el cual enfatiza la interacción electrón-electrón en el espacio real, es decir, considera explícitamente las interacciones entre electrones del mismo sitio y de sitios vecinos mas cercanos. En esta tesis se investiga la superconductividad en nanoalambres a partir del hamiltoniano de Hubbard y las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes (BdG) en una forma combinada entre espacio real y espacio recíproco. Se calculan la brecha superconductora y la temperatura crítica como función del parámetro de interacción y de la posición del potencial químico para nanoalambres de longitud infinita con pequeña sección transversal. Los resultados numéricos de las brechas superconductoras locales obtenidas de las ecuaciones de BdG se comparan con las soluciones analíticas obtenidas en el formalismo de BCS para los casos con sección transversal de uno y dos átomos. Así mismo, la variación de la brecha superconductora local con respecto al potencial químico puede confirmarse a través de la densidad de estados local obtenida con la función de Green.

La presente tesis se organiza de la siguiente manera. En el capítulo uno se introducen las teorías fenomenológicas de la superconductividad, tales como la termodinámica del estado superconductor, las ecuaciones de London y la teoría de Ginzburg-Landau. El capítulo dos resume la teoría microscópica de BCS, la transformación de Bogoliubov y las ecuaciones de BdG. En el capítulo tres se discuten el modelo de Hubbard, la extensión del formalismo de BdG a un espacio combinado real-recíproco y los resultados obtenidos al resolver las ecuaciones de dicha extensión. Finalmente se presentan algunas conclusiones de este trabajo de investigación.

Capítulo 1 Fenómenos de la Superconductividad

La superconductividad fue descubierta en 1911 por el científico Heike Kamerlingh Onnes [Onnes,1911], quien logró licuar Helio a una temperatura de 4.2 Kelvin en 1908 y gracias a esto ganó el premio Nobel en 1913. Al tener acceso a estas temperaturas, él decide medir la resistencia eléctrica de distintos metales puros entre ellos el mercurio, en el cual observó una caída abrupta de la resistencia eléctrica alrededor de los 4.25 Kelvin, como se muestra en la Figura 1.1. Este fenómeno lo bautizó como superconductividad que ocurre por debajo de una temperatura crítica (T_c).

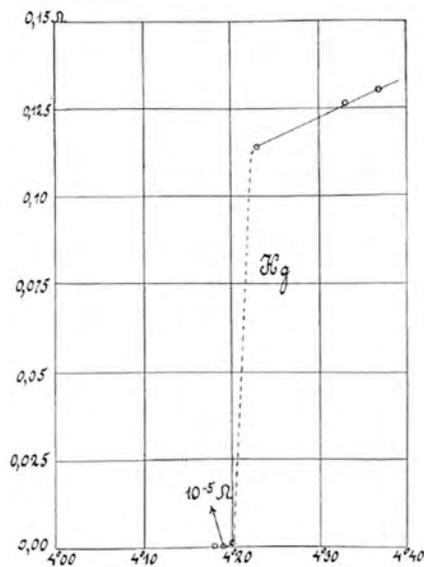


Fig. 1.1 Resistencia eléctrica (R) medida en el mercurio contra la temperatura (T) [Onnes,1912].

Además, Kammerling Onnes descubrió otra importante propiedad en los superconductores. Al ser expuestos a un campo magnético suficientemente intenso, se destruye el estado superconductor. Si el campo magnético es retirado, se recupera la superconductividad. El campo mínimo que se requiere para destruir este estado se llama campo crítico, cuyo valor depende de la temperatura.

En 1933, Meissner y Ochsenfeld descubrieron que el estado superconductor es un diamagneto perfecto, es decir, expulsan completamente las líneas de campo magnético del interior de la muestra [Meissner,1933]. Este fenómeno se conoce hoy día como efecto Meissner. Cabe mencionar que el efecto Meissner es reversible, en otras palabras, el estado superconductor destruido por un campo magnético externo se recupera al retirar dicho campo. Este hecho es relacionado termodinámicamente con la diferencia de energía libre entre el estado normal y superconductor sin campo magnético aplicado, a esto se le llama energía de condensación del estado superconductor. Los datos experimentales muestran que el campo crítico (H_c) es dependiente de la temperatura (T), como muestra la Figura 1.2, y puede expresarse como

$$H_c(T) \approx H_c(0)[1 - (T/T_c)^2]. \quad (1.1)$$

En este capítulo presentaremos un resumen de las características principales del estado superconductor y los modelos fenomenológicos del mismo.

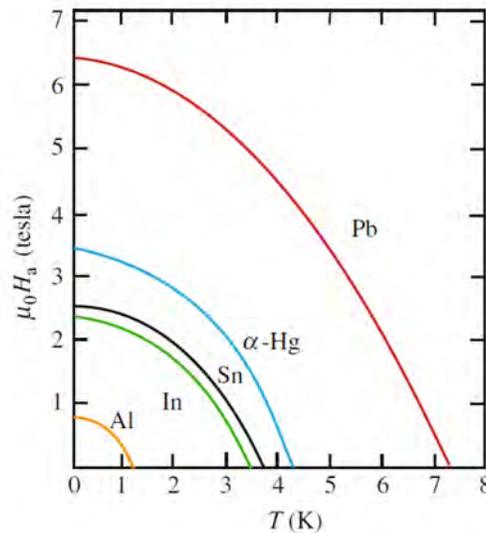


Fig. 1.2 Representación del campo magnético ($\mu_0 H_a$) necesario para destruir el estado superconductor y su dependencia con la temperatura (T) para distintos materiales [Alloul,2011]

1.1 Termodinámica del estado superconductor

El descubrimiento del efecto Meissner condujo al desarrollo de una teoría termodinámica de la transición de fase superconductor por Gorter y Casimir [Gorter,1934]. Dado que en cualquier transición de fase ciertas energías libres, determinadas por los parámetros termodinámicos del experimento, correspondientes a las dos fases involucradas deben ser iguales, estudiaremos en esta sección la energía libre de Gibbs ya que la transición superconductor ocurre a presión y temperatura constantes. En general los superconductores se pueden clasificar en dos tipos: Los del tipo I no permiten la entrada de las líneas de campo magnético en su interior cuando el campo magnético aplicado es menor que un valor crítico (H_c), mientras que los del tipo II tienen dos campos críticos con $H_{c1} < H_{c2}$. Cuando el campo magnético aplicado $H < H_{c1}$, el superconductor se comporta como los de tipo I. Si $H_{c1} < H < H_{c2}$ el superconductor permite presencia de líneas cuantizadas de flujo magnético las cuales forman una red triangular. Finalmente, para el caso $H > H_{c2}$ la muestra pierde sus características superconductoras [Lyton,1964]. El origen de los dos tipos superconductores se debe a la existencia una energía por la presencia de la interfase entre el estado normal y el superconductor. Dicha energía puede ser positiva que corresponde al tipo I y negativa si son de tipo II [Abrikosov,1957].

- **Diamagneto perfecto**

El trabajo de Meissner mostró que un superconductor tipo I se comporta como un diamagneto perfecto, es decir, en el interior del superconductor se tiene

$$\mathbf{B} = 0. \quad (1.2)$$

Como $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$, entonces

$$\mathbf{M} = -\mathbf{H}. \quad (1.3)$$

De esta forma, la energía libre de Gibbs (G) para un sistema magnético está dada por [Zemansky,1997]

$$G = U - TS + PV - \mu_0 \mathbf{H} \cdot \mathbf{M}, \quad (1.4)$$

donde U es la energía interna. Para el caso de temperatura y presión constante, tomando la parte diferencial de la ecuación (1.4) se obtiene

$$dG = -\mu_0 \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}, \quad (1.5)$$

ya que $dU = TdS - PdV + \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M}$. Integrando la ecuación (1.5) y considerando la relación (1.3) para el caso superconductor se llega a

$$G_s(H) - G_s(0) = \int_0^H -\mu_0 \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H} = \int_0^H \mu_0 H dH = \frac{\mu_0}{2} H^2. \quad (1.6)$$

Por otro lado, el estado normal de un superconductor es generalmente no magnético, en otras palabras $\mathbf{M} \approx \mathbf{0}$, ver Figura 1.3(a), entonces

$$G_n(H) - G_n(0) = 0. \quad (1.7)$$

Dada la condición de que en la transición de fases, cuando $H = H_c$, los estados normal y superconductor tienen la misma energía libre y de las ecuaciones (1.6) y (1.7) se tiene

$$G_s(0) + \frac{\mu_0}{2} H_c^2 = G_s(H_c) = G_n(H_c) = G_n(0). \quad (1.8)$$

En consecuencia,

$$G_n(0) - G_s(0) = \frac{\mu_0}{2} H_c^2. \quad (1.9)$$

La ecuación (1.9) señala que el estado normal tiene mayor energía libre que la del estado superconductor en ausencia de campo magnético aplicado (H_a), como se muestra en la Figura 1.3(b).

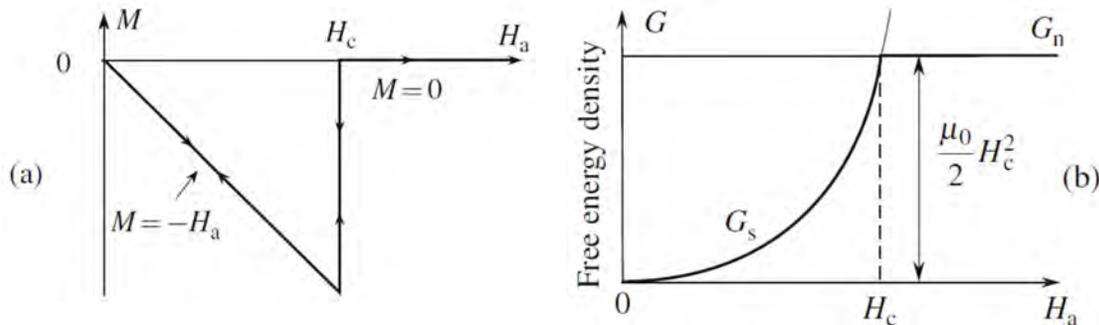


Fig. 1.3 (a) Comportamiento de la magnetización (M) dentro de un superconductor en función del campo aplicado (H_a), efecto Meissner. (b) Comportamiento de la energía libre (G) para un metal en estado superconductor y normal en función del campo aplicado (H_a) [Alloul,2011].

A partir de la ecuación (1.9), se puede calcular la entropía a través de la relación $S = -(\partial G/\partial T)_{P,H}$ obteniendo

$$S_n(0) - S_s(0) = -\mu_0 H_c \frac{\partial H_c}{\partial T}. \quad (1.10)$$

De la ecuación (1.1), se tiene $H_c(T_c) = 0$ cuando $T = T_c$ y por lo tanto, de la ecuación (1.10) se concluye que las entropías del estado normal y superconductor en ausencia de campo externo son iguales. Para temperaturas $T < T_c$, el valor de $(\partial H_c / \partial T)_{p,H}$ es negativo como consecuencia de la ecuación (1.1). Por lo que la entropía del estado superconductor es menor que la del estado normal. En otras palabras, el estado superconductor resulta ser más ordenado que el estado normal.

Por otro lado, la diferencia de entropías sugiere que hay un calor latente dado por $Q = T(S_n - S_s)$ en la transición de fases normal-superconductor en presencia de un campo magnético. Nótese que hay una discontinuidad en dS/dT como resultado de la ecuación (1.10) y en consecuencia el calor específico $C = TdS/dT$ también será discontinuo. De esta forma, derivando la ecuación (1.10) obtenemos

$$\frac{C_s - C_n}{T} = \mu_0 \frac{d}{dT} \left(H_c \frac{dH_c}{dT} \right) = \mu_0 \left[\left(\frac{dH_c}{dT} \right)^2 + H_c \frac{d^2 H_c}{dT^2} \right]. \quad (1.11)$$

De la misma forma cuando $T = T_c$, el campo crítico H_c se vuelve cero y encontramos que

$$C_s - C_n = \mu_0 T_c \left(\frac{dH_c}{dT} \right)_{T=T_c}^2. \quad (1.12)$$

Cabe mencionar que la discontinuidad del calor específico de la ecuación (1.12) ha sido confirmado experimentalmente.

A partir de la expresión (1.1) obtenida experimentalmente para $H_c(T)$, las ecuaciones (1.10) y (1.11) pueden reescribirse como

$$S_s - S_n = -2\mu_0 \left[\frac{H_c(0)}{T_c} \right]^2 \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right] T \quad (1.13)$$

y

$$\frac{C_s - C_n}{T} = -2\mu_0 \left[\frac{H_c(0)}{T_c} \right]^2 \left[1 - 3 \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right]. \quad (1.14)$$

Se sabe que, a bajas temperaturas, el calor específico electrónico del estado normal es proporcional a la temperatura [Kittel,2005], es decir,

$$\frac{C_n}{T} = \gamma = 2\mu_0 \left[\frac{H_c(0)}{T_c} \right]^2. \quad (1.15)$$

Sustituyendo la ecuación (1.15) en (1.14) se tiene

$$\frac{C_s}{T} = 3\gamma \left(\frac{T}{T_c} \right)^2. \quad (1.16)$$

Entonces, la discontinuidad en el calor específico al momento de la transición viene dada por

$$(C_s - C_n)/T_c = 2\gamma. \quad (1.17)$$

Cabe mencionar que las ecuaciones (1.16) y (1.17) son consecuencia de la expresión aproximada (1.1), las cuales difieren respectivamente del comportamiento exponencial observado experimentalmente y de la teoría BCS [Tinkham,1996].

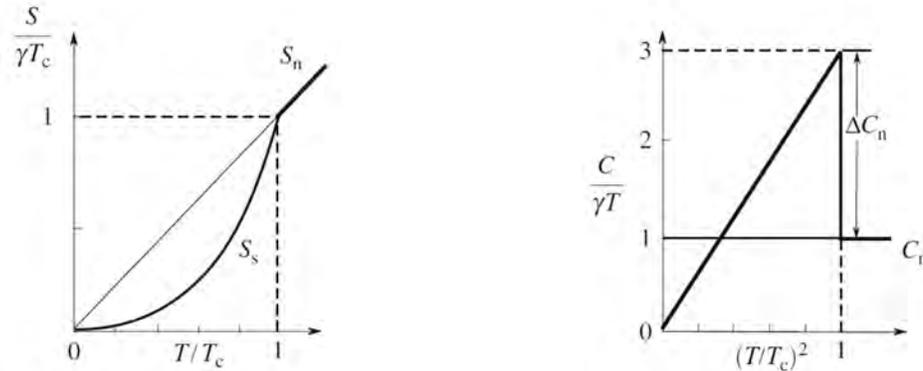


Fig.1.4 Entropía y calor específico en función de T/T_c [Alloul,2011].

• Estado intermedio

Consideremos una esfera superconductor sometida en un campo magnético ligeramente menor que el campo crítico denotado en la Figura 1.5 como $H_c'' = H_c$. En el ecuador de dicha esfera las líneas de campo aumentan su densidad y en consecuencia el campo puede superar el valor crítico. Por lo tanto, alrededor de dicho ecuador se encuentra en un estado “normal” donde el campo penetra en forma de burbujas [Nature Physics,2008]. Este estado de la muestra en donde una parte es superconductor y otra es normal es usualmente llamado el estado intermedio que es la mezcla de dos fases. Si el campo externo es menor que $H_c' = 2H_c/3$ para una muestra esférica, el campo es expulsado completamente fuera de la muestra ya que el campo externo es menor que el campo crítico en todas partes de la muestra. La muestra está completamente en el estado superconductor y presenta un efecto Meissner completo.

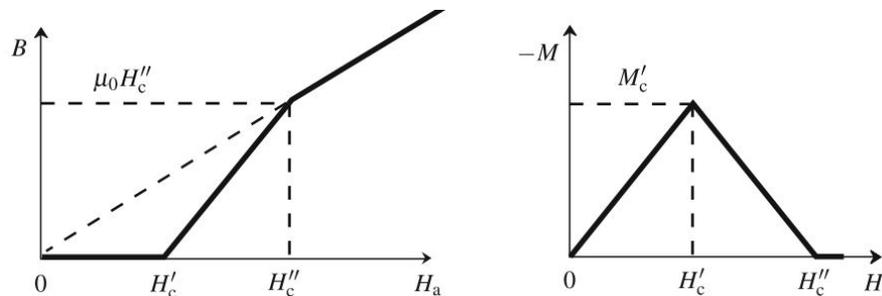


Fig.1.5. Panel izquierdo: Campo magnético (B) en el interior de la muestra como función del campo aplicado (H_a), donde el estado intermedio se encuentra cuando $H_c' < H_a < H_c''$. Panel derecho: Magnetización (M) versus H_a [Alloul,2011].

1.2 Ecuaciones de London

En un superconductor a temperatura finita se pueden clasificar sus electrones en dos tipos: electrones normales y superconductores. Este clasificación se conoce históricamente como el modelo de dos fluidos,

donde la densidad electrónica total (n) se escribe como la suma de densidades electronicas normal (n_n) y superconductoras (n_s), es decir, $n = n_n + n_s$ [Lyton,1964].

Sean e^* , m^* y \mathbf{v} la carga, la masa y la velocidad de los electrones superconductores, de acuerdo con la segunda ley de Newton se tiene

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e^* \mathbf{E}, \quad (1.18)$$

donde \mathbf{E} es el campo eléctrico. En términos de la densidad de corriente de los electrones superconductores ($\mathbf{J}_s = n_s e^* \mathbf{v}$) cerca de los bordes de la muestra que no varía espacialmente, la ecuación (1.18) puede reescribirse como

$$\frac{\partial \mathbf{J}_s}{\partial t} = \frac{n_s (e^*)^2}{m^*} \mathbf{E}. \quad (1.19)$$

Usando la Ley de Faraday $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$, donde \mathbf{B} es el campo magnético, el rotacional de la ecuación (1.19) toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\nabla \times \mathbf{J}_s + \frac{n_s (e^*)^2}{m^*} \mathbf{B} \right] = 0. \quad (1.20)$$

Por lo tanto, $\nabla \times \mathbf{J}_s + n_s (e^*)^2 \mathbf{B} / m^*$ es una constante. Los hermanos London propusieron en 1935 que dicha constante es igual a cero, con lo que llegaron a la relación

$$\nabla \times \mathbf{J}_s = -\frac{n_s (e^*)^2}{m^*} \mathbf{B}. \quad (1.21)$$

Nótese que (1.19) y (1.21) son las dos ecuaciones de London. Para el caso estacionario, $\partial \mathbf{J}_s / \partial t = 0$, y de la ecuación (1.19) se tiene que $\mathbf{E} = 0$. En consecuencia $\mathbf{J}_n = \sigma \mathbf{E} = 0$. Usando la ley de Ampere dada por $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \partial \mathbf{E} / \partial t = \mu_0 \mathbf{J}_s$ y la ecuación (1.21), se tiene

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = \mu_0 \nabla \times \mathbf{J}_s = -\mu_0 \frac{n_s (e^*)^2}{m^*} \mathbf{B}. \quad (1.22)$$

Dado que $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, la ecuación (1.22) nos lleva a

$$\nabla^2 \mathbf{B} = -\mu_0 \frac{n_s (e^*)^2}{m^*} \mathbf{B}. \quad (1.23)$$

Para una muestra rectangular semi-infinita, la solución unidimensional de la ecuación (1.23) es

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}_a e^{-x/\lambda_L} = \mu_0 \mathbf{H}_a e^{-x/\lambda_L}, \quad (1.24)$$

donde la longitud de penetración de London (λ_L) está definida por

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m^*}{\mu_0 n_s (e^*)^2}}. \quad (1.25)$$

Claramente las ecuaciones de London no reproducen la completa expulsión de un campo magnético del interior de un superconductor. En su lugar, los hermanos London predijeron una penetración del

campo que decae como $e^{-x/\lambda}$ de su valor en la superficie, donde λ es denominada la longitud de penetración de London. El valor típico de λ es 0.3 a 1 μm y se ha medido experimentalmente [Lyton,1964]. La existencia de esta leve penetración del campo magnético externo tiene una mayor relevancia en los casos de películas delgadas superconductoras, alambres o partículas coloidales y en un tratamiento detallado del estado intermedio.

1.3 Teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau

En 1950 Vitaly Ginzburg y Lev Landau (G-L) introdujeron un parámetro de orden complejo $\psi(\mathbf{r})$ para la superconductividad, tal que $|\psi|^2 \sim n_s$, donde n_s es la densidad de electrones superconductores. La teoría G-L propone que la energía libre es una función únicamente de $|\psi|^2$ y puede expandirse en serie de potencias alrededor de T_c , cuyos primeros términos son $|\psi|^2$, $|\psi|^4$ y $|\nabla\psi|^2$. En 1959 Lev P. Gor'kov derivó microscópicamente las ecuaciones de Ginzburg-Landau a partir de la teoría BCS [Gor'kov,1959].

La teoría G-L postula que si ψ es pequeña y varía lentamente en el espacio la densidad de energía libre de Gibbs puede ser expandida en series de potencias [Tinkham,1996][Lyton,1964]

$$G_s(H) = G_n(0) + \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e^* \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{\mu_0 H^2}{2}, \quad (1.26)$$

donde α y β son los coeficientes de expansión, \mathbf{A} es el potencial vectorial del campo magnético, m^* y e^* son respectivamente la masa y la carga de los electrones superconductores. En ausencia de campos magnéticos externos y de gradientes obtenemos

$$G_s(0) - G_n(0) = \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4. \quad (1.27)$$

Minimizando la ecuación (1.27) respecto a $|\psi|^2$ obtenemos el valor de equilibrio sin campo externo

$$|\psi|^2 = |\psi_\infty|^2 = -\alpha/\beta, \quad (1.28)$$

donde ψ_∞ es el valor de ψ en el interior del superconductor.

Para que el sistema sea estable y tenga un mínimo distinto de $|\psi|^2=0$, se tiene que $\alpha < 0$ y $\beta > 0$. Usando la ecuación (1.9) dada por $G_s(0) - G_n(0) = -\mu_0 H_c^2/2$ y sustituyendo (1.28) en (1.27) obtenemos

$$-\frac{\mu_0 H_c^2}{2} = G_s(0) - G_n(0) = -\frac{\alpha^2}{2\beta}. \quad (1.29)$$

Dado que los coeficientes α y β son funciones de la temperatura, entonces en una vecindad de T_c , ellos pueden ser expandidos en series de Taylor como

$$\begin{aligned} \alpha(T) &\approx (T - T_c)(\partial\alpha/\partial T)_{T=T_c} \\ \beta(T) &\approx \beta(T_c) = \beta_c \end{aligned} \quad (1.30)$$

Con esto uno puede encontrar a partir de las ecuaciones (1.9) y (1.30) que

$$H_C^2 = \frac{\mu_0 \alpha^2}{\beta} = \frac{\mu_0 (T - T_C)^2}{\beta_C} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_{T=T_C}^2. \quad (1.31)$$

Para temperaturas cercanas a T_C , la variación de H_C con la temperatura puede aproximarse en forma lineal, por lo que la ecuación (1.31) justifica las aproximaciones de los coeficientes α y β en la ecuación (1.30).

Ahora, considerando $\psi = |\psi| e^{i\varphi}$, el término de energía cinética en la ecuación (1.26) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e^* \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 &= \frac{1}{2m^*} \left[(i\hbar \nabla - e^* \mathbf{A}) |\psi| e^{-i\varphi} \right] \left[(-i\hbar \nabla - e^* \mathbf{A}) |\psi| e^{i\varphi} \right] \\ &= \frac{1}{2m^*} \left[(i\hbar e^{-i\varphi} \nabla |\psi| + \hbar |\psi| e^{-i\varphi} \nabla \varphi - e^* \mathbf{A} |\psi| e^{-i\varphi}) (-i\hbar e^{i\varphi} \nabla |\psi| - \hbar |\psi| e^{i\varphi} \nabla \varphi - e^* \mathbf{A} |\psi| e^{i\varphi}) \right] \\ &= \frac{1}{2m^*} \left[\hbar^2 (\nabla |\psi|)^2 + \hbar^2 |\psi|^2 (\nabla \varphi)^2 - 2\hbar e^* \mathbf{A} |\psi|^2 \nabla \varphi + (e^* \mathbf{A})^2 |\psi|^2 \right] \\ &= \frac{1}{2m^*} \left[\hbar^2 (\nabla |\psi|)^2 + (\hbar \nabla \varphi - e^* \mathbf{A})^2 |\psi|^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.32)$$

El primer término de la ecuación (1.32) corresponde a la energía extra asociada a los gradientes de $|\psi|$, como ocurre en las frontera de un dominio superconductor. El segundo término proporciona la energía cinética asociada a las supercorrientes en una forma con invariancia de norma. En la norma de London con φ constante [Bardeen,1950], el segundo término de la ecuación (1.32) se reduce a

$$\frac{(e^* \mathbf{A} |\psi|)^2}{2m^*}. \quad (1.33)$$

A partir de las ecuaciones (1.21) y (1.25), la densidad de energía cinética de los superelectrones está dada por

$$K = \frac{n_s m^*}{2} |\mathbf{v}|^2 = \frac{(e^*)^2 n_s}{2m^*} |\mathbf{A}|^2 = \frac{|\mathbf{A}|^2}{2\mu_0 \lambda^2}. \quad (1.34)$$

Igualando las ecuaciones (1.33) y (1.34) se obtiene

$$\lambda^2 = \frac{m^*}{\mu_0 (e^* |\psi|)^2}. \quad (1.35)$$

Cabe mencionar que si $|\psi|^2 = n_s$, la ecuación (1.35) se reduce a (1.25).

Suponiendo que los superelectrones son los pares de Cooper, es decir, $e^* = 2e$, $m^* = 2m$ y $n_s = n/2$, la ecuación (1.35) puede reescribirse como

$$n_s = |\psi|^2 = \frac{m^*}{\mu_0 (e^* \lambda)^2} = \frac{m}{2\mu_0 e^2 \lambda^2}. \quad (1.36)$$

Resolviendo las ecuaciones (1.28) y (1.29), se tiene

$$\alpha = -\frac{2\mu_0^2 \lambda^2 e^2 H_c^2}{m} \quad \text{y} \quad \beta = \frac{4\mu_0^3 \lambda^4 e^4 H_c^2}{m^2}. \quad (1.37)$$

Por otro lado, aplicando el método variacional a la ecuación (1.26) respecto a ψ^* se obtiene

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*} \left| \frac{\hbar}{i} \nabla - e^* \mathbf{A} \right|^2 \psi = 0. \quad (1.38)$$

Para un sistema unidimensional sin campo magnético externo y ψ real, utilizando (1.28) la ecuación (1.38) para $g = \psi/\psi_\infty$ puede reescribirse como

$$\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|} \frac{d^2 g}{dx^2} + g - g^3 = 0. \quad (1.39)$$

De la ecuación (1.39) se puede definir una longitud característica o de coherencia (ζ) para la variación de g como

$$\zeta^2(T) \equiv \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha(T)|}. \quad (1.40)$$

Al sustituir (1.37) en (1.40) encontramos

$$\zeta(T) \equiv \frac{\hbar}{2\sqrt{2}\mu_0 e H_c \lambda}. \quad (1.41)$$

Por lo tanto, podemos introducir un parámetro adimensional de Ginzburg-Landau (κ) dado por

$$\kappa = \frac{\lambda}{\zeta(T)} \equiv \frac{2\sqrt{2}\mu_0 e H_c \lambda^2}{\hbar}. \quad (1.42)$$

Se ha encontrado que $\kappa \ll 1$ para los superconductores puros, mientras que $\kappa \gg 1$ en aleaciones superconductoras o cerámicos superconductores, por lo que hoy en día se utiliza $\kappa = 1/\sqrt{2}$ para separar los superconductores tipo I de los tipo II [Tinkham, 1996].

Capítulo 2 Teorías Microscópicas

A diferencia de los modelos fenomenológicos presentados en el capítulo anterior, en este capítulo se presenta un resumen del modelo de Fröhlich, los pares de Cooper, la teoría BCS, la transformación de Bogoliubov y el formalismo Bogoliubov-de Gennes. Este último será el punto de partida para el estudio de la superconductividad en nanoalambres.

2.1 Interacción electrón-electron via fonón

En un gas de electrones en el vacío, las partículas interactúan únicamente a través de la fuerza de Coulomb repulsiva. En cambio, en un sólido los electrones además pueden interactuar a través del intercambio de un fonón, en lugar de un fotón como en la interacción Coulombiana. En 1950 Herbert Fröhlich encontró que, si se consideran las interacciones Coulombiana, via fonones y de apantallamiento, la interacción resultante puede ser atractiva [Fröhlich,1950].

Los elementos de matriz $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ de la interacción electrón-electrón entre un estado inicial (**I**) donde dos electrones tienen vectores de onda $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$, y un estado final (**II**) donde los vectores de onda son $(\mathbf{k}', -\mathbf{k}')$ pueden tener dos términos [Gennes,1999]:

- (a) El que se deriva directamente de la repulsión Coulombiana $U_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ entre dos electrones cuyo elemento de matriz está dado por

$$\langle \mathbf{I} | \hat{H}_C | \mathbf{II} \rangle = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} U_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} = \int U_C(\boldsymbol{\rho}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\rho} = U_{\mathbf{q}}, \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$.

- (b) El que se origina de la interacción electrón-electrón via fonón. En este caso, un electrón puede emitir un fonón que después puede ser reabsorbido por otro electrón. Este proceso se muestra en la Fig.2.1. El estado inicial (**I**) tiene energía $E_I = 2\xi_{\mathbf{k}}$, donde $\xi_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / (2m)$, mientras que el estado final (**II**) tiene energía $E_{II} = 2\xi_{\mathbf{k}'}$

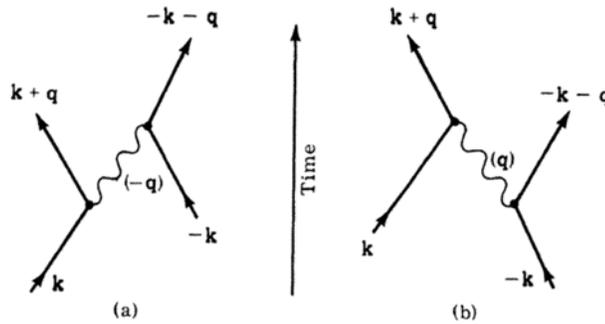


Fig. 2.1. Interacción electrón-electrón via un fonón. En el proceso (a) un electrón en el estado \mathbf{k} emite un fonón con vector de onda $-\mathbf{q}$, el cual es absorbido después por un segundo electrón. En el proceso (b) el segundo electrón en el estado $(-\mathbf{k})$ emite un fonón \mathbf{q} que es absorbido por el primer electrón [Gennes,1999].

Existen dos estados intermedios permitidos por la conservación del momento:

(i1) Este estado está conformado por tres partículas: el electrón 1 en el estado $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, el electrón 2 en el estado $-\mathbf{k}$, y un fonón con vector de onda $-\mathbf{q}$ y energía $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, por lo que la energía asociada a este estado es

$$E_{i1} = \xi_{\mathbf{k}'} + \xi_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}. \quad (2.2)$$

(i2) Este estado contiene el electrón 1 en el estado \mathbf{k} , el electrón 2 en el estado $-\mathbf{k}' = -(\mathbf{k} + \mathbf{q})$, y un fonón con vector de onda \mathbf{q} y energía $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, cuya energía asociada es

$$E_{i2} = \xi_{\mathbf{k}'} + \xi_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} = E_{i1}. \quad (2.3)$$

El elemento de matriz de los estados acoplados (**I**) y (**II**) a segundo orden de perturbación es

$$\langle \mathbf{I} | \hat{H}_{\text{indirecto}} | \mathbf{II} \rangle = \sum_i \langle \mathbf{I} | \hat{H}_{e-ph} | i \rangle \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E_{\text{II}} - E_i} + \frac{1}{E_i - E_{\text{I}}} \right) \langle i | \hat{H}_{e-ph} | \mathbf{II} \rangle, \quad (2.4)$$

donde la suma es sobre todos los posibles estados intermedios y \hat{H}_{e-ph} es el acoplamiento electrón-fonón. Entonces, la ecuación (2.4) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{I} | \hat{H}_{\text{indirecto}} | \mathbf{II} \rangle &= \langle \mathbf{I} | \hat{H}_{e-ph} | i1 \rangle \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right) \langle i1 | \hat{H}_{e-ph} | \mathbf{II} \rangle \\ &+ \langle \mathbf{I} | \hat{H}_{e-ph} | i2 \rangle \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right) \langle i2 | \hat{H}_{e-ph} | \mathbf{II} \rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

es decir,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{I} | \hat{H}_{\text{indirecto}} | \mathbf{II} \rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right) \sum_i \langle \mathbf{I} | \hat{H}_{e-ph} | i \rangle \langle i | \hat{H}_{e-ph} | \mathbf{II} \rangle \\ &= \frac{|\mathbf{W}_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{q}}} \right), \end{aligned} \quad (2.6)$$

donde se define una frecuencia ω por $\hbar\omega = \xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}}$ y el elemento de matriz que representa la emisión o absorción de un fonón con vector de onda \mathbf{q} lo llamaremos $\mathbf{W}_{\mathbf{q}}$ y estará dado por

$$|\mathbf{W}_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{1}{2} \sum_i \langle \mathbf{I} | \hat{H}_{e-ph} | i \rangle \langle i | \hat{H}_{e-ph} | \mathbf{II} \rangle. \quad (2.7)$$

De esta forma $\hbar\omega$ y $\hbar\mathbf{q}$ son respectivamente la energía y el cambio en el momento del electrón 1 en la transición $\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{II}$. El elemento de matriz total es

$$\langle \mathbf{I} | \hat{H} | \mathbf{II} \rangle = U_{\mathbf{q}} + \frac{|\mathbf{W}_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar} \frac{2\omega_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (2.8)$$

Cuando $\omega < \omega_{\mathbf{q}}$ el término indirecto es negativo, es decir, atractivo. Hemos encontrado una interacción atractiva, siempre que $U_{\mathbf{q}}$ no sea muy grande.

2.2 Pares de Cooper

La idea de una interacción atractiva débil capaz de unir un par de electrones fue presentada por Cooper en 1956. El demostró que el mar de Fermi de los electrones es inestable ante la formación de un par ligado, sin importar que tan débil sea dicha interacción, siempre que sea atractiva [Cooper,1956].

Para estudiar la formación de un par de Cooper, consideremos un gas de electrones libres en el estado base donde adicionamos dos electrones al mar de Fermi. Además, suponemos que los electrones extra interactúan entre ellos, pero no con los que se encuentran en el mar de Fermi, excepto a través del principio de exclusión de Pauli. Transformando nuestro problema a coordenadas del centro de masa, el estado base del par de electrones tiene momento total cero. Entonces, la función de onda del par puede escribirse como

$$\psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}, \quad (2.9)$$

donde $g(\mathbf{k})$ es la amplitud de probabilidad de encontrar dichos electrones con vector de onda \mathbf{k} asociada a la coordenada interna del par ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$). Dado que los estados $|\mathbf{k}| < |\mathbf{k}_F|$ están ocupados, el principio de exclusión de Pauli impone que

$$g(\mathbf{k}) = 0, \text{ si } |\mathbf{k}| < |\mathbf{k}_F|. \quad (2.10)$$

Dado que la función de onda total de partículas fermiónicas debe ser antisimétrica ante el intercambio entre dos fermiones, la ecuación (2.9) se convierte en una suma de $\cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]$ con la función de espín singlete $[|\alpha(1)\rangle|\beta(2)\rangle - |\alpha(2)\rangle|\beta(1)\rangle]/\sqrt{2}$ o en una suma de $\sin[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]$ con las funciones de espín triplete dadas por $|\alpha(1)\rangle|\alpha(2)\rangle$, $[|\alpha(1)\rangle|\beta(2)\rangle + |\alpha(2)\rangle|\beta(1)\rangle]/\sqrt{2}$ y $|\beta(1)\rangle|\beta(2)\rangle$. Consideremos la función de onda singlete de dos electrones dada por

$$\Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}) \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] [|\alpha(1)\rangle|\beta(2)\rangle - |\alpha(2)\rangle|\beta(1)\rangle]. \quad (2.11)$$

La ecuación de Schrödinger para los dos electrones referida al nivel de Fermi es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \left(E + \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \right) \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (2.12)$$

donde $\hbar^2 k_F^2 / 2m = E_F$ es la energía de Fermi por electrón y E es la energía del par. Sustituyendo la función de onda (2.11) en el término del potencial en la ecuación de Schrödinger (2.12) se tiene

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= V(\mathbf{r}) \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') \cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \chi = \frac{\chi}{2} \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') [V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} + V(-\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}] \\ &= \frac{\chi}{2} \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') \int V(\mathbf{r}') [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}')] e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' = \frac{\chi}{2\Omega} \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') \int V(\mathbf{r}') \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} (e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}')} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}) d\mathbf{r}' \quad (2.13) \\ &= \frac{\chi}{\Omega} \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') \int V(\mathbf{r}') \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' = \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \chi, \end{aligned}$$

donde se usa $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$. Por lo tanto, a partir de la ecuación (2.12) obtenemos una ecuación para $g(\mathbf{k})$ dada por

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m} g(\mathbf{k}) + \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = (E + 2E_F) g(\mathbf{k}), \quad (2.14)$$

donde

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{\Omega} \int V(\mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (2.15)$$

es el elemento de matriz de la interacción entre los estados electrónicos \mathbf{k} y \mathbf{k}' , y Ω es el volumen del sistema. Si la interacción $V(\mathbf{r})$ es atractiva, se obtienen soluciones de estados ligados con $E < 2E_F$.

Consideremos una interacción de la forma

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V, & \text{si } E_F < \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} < E_F + \hbar\omega_c, \\ 0, & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.16)$$

donde $V > 0$. Esta interacción es atractiva y constante en una banda de energía con una frecuencia de corte de ω_c por encima de la energía de Fermi. Para el caso en que la interacción atractiva es mediante fonones, dicha frecuencia de corte es ω_D . Así sustituyendo el potencial (2.16) en (2.14) obtenemos

$$V \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}') = \left(E + 2E_F - \frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) g(\mathbf{k}). \quad (2.17)$$

Dado que el lado izquierdo de la ecuación (2.17) no depende de \mathbf{k} , entonces

$$g(\mathbf{k}) = \frac{V \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} g(\mathbf{k}')}{E + 2E_F - \hbar^2 k^2 / m}. \quad (2.18)$$

Sustituyendo (2.18) en (2.17) se encuentra la condición de autoconsistencia

$$V \sum_{|\mathbf{k}'| > |\mathbf{k}_F|} \frac{1}{E + 2E_F - \hbar^2 k'^2 / m} = 1. \quad (2.19)$$

Cambiando la suma en la ecuación (2.19) por una integral y definiendo $\xi' = \hbar^2 k'^2 / (2m) - E_F$ se obtiene

$$V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{N(\xi')}{2\xi' - E} d\xi' = 1, \quad (2.20)$$

donde $N(\xi') = \Omega(2\pi)^{-3} 4\pi k'^2 dk' / d\xi'$ es la densidad de estados. Si asumimos que $\hbar\omega_D \ll E_F$, $N(\xi)$ puede aproximarse al valor de $N(0)$ al nivel de Fermi, así la ecuación (2.20) se reescribe como

$$1 \approx \frac{1}{2} N(0) V \ln \frac{E - 2\hbar\omega_D}{E} \quad (2.21)$$

En la mayoría de los superconductores tradicionales se ha encontrado que $N(0)V < 0.3$, lo cual permite el uso del llamado límite de interacciones débiles, valido para $N(0)V \ll 1$, en donde la solución de la ecuación (2.21) para la energía E del par se puede escribir como

$$E \approx -2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{N(0)V}}. \quad (2.22)$$

En otras palabras, este es un estado ligado con energía negativa hecho únicamente por electrones con $k > k_F$.

2.3 Teoría de Bardeen-Cooper-Schrieffer

Como se vió en la sección anterior, el mar de Fermi se vuelve inestable ante la formación de un par de Cooper cuando la interacción neta es atractiva. Este problema puede analizarse usando el lenguaje de segunda cuantización, en donde los estados ocupados, incluido el índice de espín, se expresan en términos de operadores de creación ($\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger$) con momento \mathbf{k} y espín hacia arriba, así como operadores de aniquilación ($\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}$) que vacía el estado correspondiente. En esta notación, la ecuación (2.9) se puede reescribir como

$$|\psi_0\rangle = \sum_{k > k_F} g(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |\mathbb{F}\rangle, \quad (2.23)$$

donde $|\mathbb{F}\rangle$ representa el mar de Fermi con todos los estados llenos hasta k_F .

Como los electrones obedecen la estadística de Fermi, los operadores de creación y aniquilación definidos anteriormente obedecen las relaciones de anticonmutación de los operadores fermiónicos

$$\begin{aligned} \left[\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right]_+ &\equiv \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \\ \left[\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \right]_+ &= \left[\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right]_+ = 0 \end{aligned}, \quad (2.24)$$

donde $\sigma = \uparrow \text{ ó } \downarrow$ indica el espín electrónico. El operador de numero de partículas $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ está definido como

$$\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.25)$$

el cual tiene como eigenvalores uno cuando opera sobre un estado ocupado y cero cuando opera sobre un estado vacío.

Para el caso de muchos pares Cooper, la función de onda propuesta por BCS [Bardeen,1957] es de la forma

$$|\psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_M} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |\phi_0\rangle \quad (2.26)$$

donde $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Así la probabilidad de que el estado de par $(\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow)$ esté ocupado es $|v_{\mathbf{k}}|^2$ y la probabilidad de que este no se encuentre ocupado es $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |v_{\mathbf{k}}|^2$

- **Método variacional**

Para determinar los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ se parte del siguiente hamiltoniano reducido

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{l}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow}, \quad (2.27)$$

el cual incluye los términos decisivos para la superconductividad, aunque omite muchos otros términos que involucran electrones no apareados. Dado que $|\psi_G\rangle$ de (2.26) no es un eigenestado del operador de número $\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$, para mantener el número promedio de partículas se introduce un término $-\mu\hat{N}$, donde μ es el potencial químico. Minimizando el valor esperado de la suma obtenemos

$$\delta \langle \psi_G | \hat{H} - \mu\hat{N} | \psi_G \rangle = 0. \quad (2.28)$$

La inclusión de $-\mu\hat{N}$ es matemáticamente equivalente a tomar el cero de la energía de banda electrónica en μ . Más explícitamente tenemos

$$\delta \langle \psi_G | \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{l}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow} | \psi_G \rangle = 0, \quad (2.29)$$

donde $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ es la energía de una partícula relativo al potencial químico. Por simplicidad se toma $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ como reales, entonces

$$\langle \psi_G | \hat{H} - \mu\hat{N} | \psi_G \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}}, \quad (2.30)$$

la cual se minimiza usando la restricción $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Esta restricción puede reescribirse como

$$u_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \quad \text{y} \quad v_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}}. \quad (2.31)$$

Así, el lado derecho de la ecuación (2.30) se puede escribir como

$$\sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) \sin(2\theta_{\mathbf{l}}). \quad (2.32)$$

Por lo tanto,

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{\mathbf{k}}} \langle \psi_G | \hat{H} - \mu\hat{N} | \psi_G \rangle = 0 = -2\xi_{\mathbf{k}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) \sin(2\theta_{\mathbf{l}}), \quad (2.33)$$

es decir,

$$\tan(2\theta_{\mathbf{k}}) = \frac{\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \sin(2\theta_{\mathbf{l}})}{2\xi_{\mathbf{k}}}. \quad (2.34)$$

Definimos las cantidades

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \sin(2\theta_{\mathbf{l}}) \quad (2.35)$$

y

$$E_{\mathbf{k}} = \left(\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 \right), \quad (2.36)$$

la ecuación (2.34) se vuelve

$$\tan(2\theta_k) = -\frac{\Delta_k}{\xi_k}. \quad (2.37)$$

Además,

$$2u_k v_k = \sin(2\theta_k) = \frac{\Delta_k}{E_k} \quad (2.38)$$

y

$$v_k^2 - u_k^2 = \cos(2\theta_k) = -\frac{\xi_k}{E_k}. \quad (2.39)$$

Los signos para el seno y el coseno en las ecuaciones anteriores se eligen tal que el número de ocupación $v_k^2 \rightarrow 0$ cuando $\xi_k \rightarrow \infty$. Sustituyendo (2.38) en (2.35), se obtiene la condición de autoconsistencia para evaluar Δ_k dada por

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{E_{\mathbf{l}}} V_{k\mathbf{l}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{(\Delta_{\mathbf{l}}^2 + \xi_{\mathbf{l}}^2)^{1/2}} V_{k\mathbf{l}}. \quad (2.40)$$

Nótese primero la solución trivial $\Delta_k = 0$, de las ecuaciones (2.38) y (2.39) se tienen $v_k = 1$ para $\xi_k < 0$ y $v_k = 0$ para $\xi_k > 0$. La función de onda asociada a dicha solución trivial es solamente un determinante de Slater con todos los estados ocupados hasta k_F que corresponde al mar de Fermi normal a $T = 0$. Pero esperamos una solución no trivial con menor energía si $V_{k\mathbf{l}}$ es negativo. Retomando el modelo simplificado para $V_{k\mathbf{l}}$ usado por Cooper (2.16),

$$V_{k\mathbf{l}} = \begin{cases} -V, & \text{si } |\xi_k| \text{ y } |\xi_{\mathbf{l}}| \leq \hbar\omega_c, \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases}, \quad (2.41)$$

donde V es una constante positiva. Sustituyendo (2.41) en (2.40) encontramos que para $|\xi_k| > \hbar\omega_c$ se tiene $\Delta_k = 0$ ya que $V = 0$, mientras que para $|\xi_k| < \hbar\omega_c$ tenemos $\Delta_k = \Delta$ puesto que el lado derecho de la ecuación (2.40) no tiene dependencia en \mathbf{k} . En resumen,

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta, & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_c \\ 0, & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_c \end{cases}. \quad (2.42)$$

Al sustituir (2.42) en (2.40) se obtiene la condición de autoconsistencia dada por

$$1 = \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}}. \quad (2.43)$$

Al reescribir (2.43) cambiando la suma por una integral desde $-\hbar\omega_c$ hasta $\hbar\omega_c$ e introduciendo la densidad de estados $N(\xi_k) \approx N(0)$, se obtiene

$$\frac{1}{N(0)V} \approx \int_0^{\hbar\omega_c} \frac{d\xi}{(\Delta^2 + \xi^2)^{1/2}} = \operatorname{arcsinh} \frac{\hbar\omega_c}{\Delta}. \quad (2.44)$$

En el límite de acoplamiento débil $N(0)V \ll 1$, se tiene

$$\Delta \approx \frac{\hbar\omega_c}{\sinh\{1/[N(0)V]\}} \approx 2\hbar\omega_c e^{-1/N(0)V}. \quad (2.45)$$

Ahora calcularemos los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ que especifican la función de onda BCS mas óptima. De la ecuación (2.39) y la condición de normalización $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ encontramos el número de ocupación $v_{\mathbf{k}}^2$ está dado por

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}} \right) \text{ y } u_{\mathbf{k}}^2 = 1 - v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right). \quad (2.46)$$

En la Fig. 2.1. se muestra una gráfica de $v_{\mathbf{k}}^2$. Notemos que $v_{\mathbf{k}}^2$ tiende a uno por debajo de la energía de Fermi y a cero al pasarlo, así como la función de distribución de Fermi para metales a temperaturas finitas.

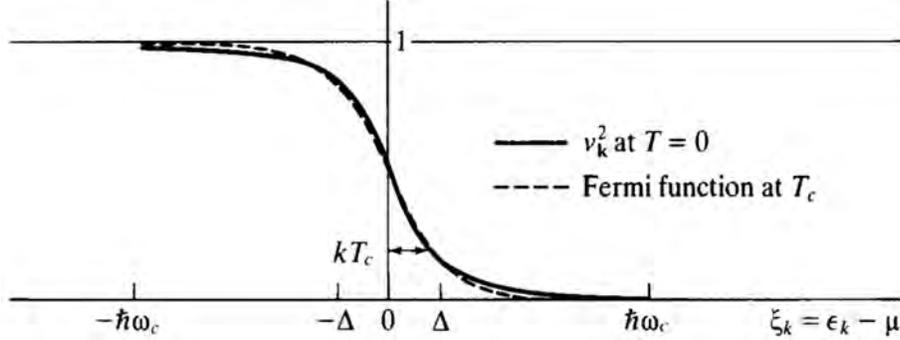


Fig. 2.1. Gráfica del factor de ocupación de BCS ($v_{\mathbf{k}}^2$) versus la energía del electrón medida desde el potencial químico (μ). Para hacer los cortes en $\pm \hbar\omega_c$ visibles, la gráfica se hizo con un superconductor de acoplamiento fuerte con $N(0)V = 0.43$. Para comparar, la función de Fermi para el estado normal a T_c se muestra en la misma escala usando la relación de BCS $\Delta(0) = 1.76k_B T_c$.

Con $|\psi_G\rangle$ determinada, ahora calcularemos su energía, para mostrar que esta es necesariamente menor que la del estado normal. De la ecuación (2.30), usando (2.40), (2.43) y (2.46) se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \psi_G | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi_G \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} \sqrt{1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}} \sqrt{1 - \frac{\xi_{\mathbf{l}}}{E_{\mathbf{l}}}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \left(\frac{\sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2}}{E_{\mathbf{k}}} \right) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}}} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Como el estado normal a $T = 0$ es equivalente al estado BCS con $\Delta = 0$, entonces $E_{\mathbf{k}} = |\xi_{\mathbf{k}}|$. Así que

$$\langle \psi_n | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi_n \rangle = \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 2\xi_{\mathbf{k}}, \quad (2.48)$$

donde los términos con $|\mathbf{k}| > k_F$ son cero ya que $E_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}}$. Por lo tanto, la diferencia de energías es

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_s - \langle E \rangle_n &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} - \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 2\xi_{\mathbf{k}} = \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} - \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 2\xi_{\mathbf{k}} \\ &= \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \left(-\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} = 2 \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

usando la simetría alrededor de la energía de Fermi, es decir que $-\xi_{\mathbf{k}}$ con $|\mathbf{k}| < k_F$ es igual a $\xi_{\mathbf{k}}$ con $|\mathbf{k}| > k_F$. En esta fórmula la suma expresa el cambio en la energía cinética, mientras que el término $-\Delta^2/V$ es el cambio en la energía potencial. Tomando la aproximación continua e integrando ξ desde 0 a $\hbar\omega_c$ y usando la relación de acoplamiento débil (2.45), la ecuación (2.49) puede reescribirse como

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_n &\approx 2N(0) \int_0^{\hbar\omega_c} \left(\xi - \frac{\xi^2}{E} \right) d\xi - \frac{\Delta^2}{V} = N(0) \left[\xi \left(\xi - \sqrt{\Delta^2 + \xi^2} \right) + \Delta^2 \ln \left(\sqrt{\Delta^2 + \xi^2} + \xi \right) \right]_0^{\hbar\omega_c} - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= N(0) \left[\hbar\omega_c \left(\hbar\omega_c - \sqrt{\Delta^2 + (\hbar\omega_c)^2} \right) + \Delta^2 \ln \frac{\sqrt{\Delta^2 + (\hbar\omega_c)^2} + \hbar\omega_c}{\Delta} \right] - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= N(0) \left[(\hbar\omega_c)^2 \left(1 - \sqrt{\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_c} \right)^2 + 1} \right) + \Delta^2 \ln \left(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta} \sqrt{\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_c} \right)^2 + 1} + 1 \right) \right] - \frac{\Delta^2}{V} \tag{2.50} \\
&\approx N(0) \left\{ -(\hbar\omega_c)^2 \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_c} \right)^2 + \Delta^2 \ln \left[\frac{\hbar\omega_c}{\Delta} \left(2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_c} \right)^2 \right) \right] \right\} - \frac{\Delta^2}{V} \approx N(0) \left\{ -\frac{1}{2} \Delta^2 + \Delta^2 \ln \frac{2\hbar\omega_c}{\Delta} \right\} - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= N(0) \left\{ -\frac{1}{2} \Delta^2 + \Delta^2 \frac{1}{N(0)V} \right\} - \frac{\Delta^2}{V} = \left[\frac{\Delta^2}{V} - \frac{1}{2} N(0) \Delta^2 \right] - \frac{\Delta^2}{V}.
\end{aligned}$$

En términos de la energía interna $U(T)$ y anticipando que $\Delta(T)$ es dependiente de la temperatura obtenemos como resultado final

$$U_s(0) - U_n(0) = -\frac{1}{2} N(0) \Delta^2(0), \tag{2.51}$$

la cual es la energía de condensación a $T = 0$ que es por definición igual a $\mu_0 H_c^2(0)/2$, donde $H_c(T)$ es el campo magnético crítico.

2.4 Transformación de Bogoliubov

En contraste con el método variacional en la sección anterior, ahora resolveremos el hamiltoniano (2.27) a través de la aproximación de campo medio de pares definiendo el valor medio $b_{\mathbf{k}} = \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$. De esta forma los operadores de creación y aniquilación de pares pueden reescribirse como

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = b_{\mathbf{k}}^* + (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - b_{\mathbf{k}}^*) \quad \text{y} \quad \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = b_{\mathbf{k}} + (\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - b_{\mathbf{k}}), \tag{2.52}$$

donde la cantidad entre paréntesis es la fluctuación de la densidad de pares respecto a su valor medio y se supone que es pequeño. Por lo que dentro de la aproximación a primer orden se consideran únicamente los términos lineales de dicha fluctuación y el hamiltoniano (2.27) se convierte

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} [b_{\mathbf{k}}^* + (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - b_{\mathbf{k}}^*)][b_{\mathbf{l}} + (\hat{c}_{-\mathbf{l}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow} - b_{\mathbf{l}})] \\
&= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} [b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{l}} + b_{\mathbf{k}}^* (\hat{c}_{-\mathbf{l}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow} - b_{\mathbf{l}}) + (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - b_{\mathbf{k}}^*) b_{\mathbf{l}} + (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - b_{\mathbf{k}}^*) (\hat{c}_{-\mathbf{l}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow} - b_{\mathbf{l}})] \\
&\approx \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} [b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{l}} + b_{\mathbf{k}}^* (\hat{c}_{-\mathbf{l}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow} - b_{\mathbf{l}}) + (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - b_{\mathbf{k}}^*) b_{\mathbf{l}}] \\
&= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger b_{\mathbf{l}} + b_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{l}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow} - b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{l}}).
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Notemos que el hamiltoniano (2.53) no conserva el número de partículas y como antes, podemos manejar esta situación introduciendo el potencial químico μ para fijar el número de partículas promedio $\langle \hat{N} \rangle$.

Similar a la definición (2.35) para la brecha superconductor, definiremos

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} b_{\mathbf{l}} = -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \langle c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} \rangle. \tag{2.54}$$

En términos de $\Delta_{\mathbf{k}}$ el hamiltoniano (2.53) se puede reescribir como

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*). \tag{2.55}$$

Este hamiltoniano puede diagonalizarse analíticamente a través de una transformación lineal de Bogoliubov definiendo unos nuevos operadores fermiónicos ($\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}$) como [Bogoliubov,1958]

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger \quad \text{y} \quad \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = -v_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger, \tag{2.56}$$

donde los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ satisfacen $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Nótese que $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}$ participa en la destrucción de un electrón con $\mathbf{k}\uparrow$ o creando uno con $-\mathbf{k}\downarrow$; en ambos casos, el efecto neto es para decrecer el momento lineal del sistema por $\hbar\mathbf{k}$ y reduce S_z por $\hbar/2$. El operador $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger$ tiene propiedades similares, entonces, $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}$ incrementa tanto el momento del sistema por $\hbar\mathbf{k}$ como el espín S_z por $\hbar/2$.

Reescribimos el hamiltoniano (2.55) en términos de los operadores definidos en (2.56) obtenemos

$$\begin{aligned}
\hat{H} - \mu \hat{N} &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}) - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} [(u_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}) (u_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger) + (-v_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger) (-v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1})] \\
&\quad - \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}) (-v_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger) + \Delta_{\mathbf{k}}^* (-v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger) (u_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger) - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*] \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} [(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}) + 2|v_{\mathbf{k}}|^2 + 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}} [(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1} - 1) + (\Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{*2} - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^{*2}) \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + (\Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2) \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*].
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Ahora, si escogemos $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ tal que los coeficientes de $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}$ y $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger$ sean igual a cero, el hamiltoniano (2.57) se diagonaliza, es decir, se lleva a una forma que contienen únicamente constantes más términos proporcionales a los números de ocupación $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\nu}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\nu}$, donde $\nu = 0, 1$. Los coeficientes de ambos términos no deseados son ceros si

$$2\xi_k u_k v_k + \Delta_k^* v_k^2 - \Delta_k u_k^2 = 0. \quad (2.58)$$

Cuando multiplicamos la ecuación (2.58) por Δ_k^*/u_k^2 y resolvemos la ecuación cuadrática de $\Delta_k^* v_k/u_k$, esta condición se convierte a

$$\frac{\Delta_k^* v_k}{u_k} = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2} - \xi_k = E_k - \xi_k, \quad (2.59)$$

donde hemos elegido el signo positivo de la raíz que corresponde a una solución estable. Entonces, utilizando (2.59) la condición de normalización se puede reescribir como

$$|v_k|^2 = 1 - |u_k|^2 = 1 - |v_k|^2 \frac{|\Delta_k|^2}{(E_k - \xi_k)^2} = 1 - |v_k|^2 \frac{E_k - \xi_k}{E_k + \xi_k}. \quad (2.60)$$

Resolviendo la ecuación (2.60) se obtiene nuevamente las soluciones de BCS dadas por (2.46). A pesar de que las fases de u_k , v_k y Δ_k son individualmente arbitrarias, ellas se relacionan a través de (2.59) ya que $\Delta_k^* v_k/u_k$ es real. Así se eligen sin pérdida de generalidad que u_k , v_k y Δ_k sean reales.

• Energía de excitación

Dados los valores de u_k y v_k de la ecuación (2.46) o (2.60), el hamiltoniano (2.57) se reduce a

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_k [\xi_k - E_k + \Delta_k b_k^*] + \sum_k E_k (\hat{\gamma}_{k0}^\dagger \hat{\gamma}_{k0} + \hat{\gamma}_{k1}^\dagger \hat{\gamma}_{k1}). \quad (2.61)$$

Usando las definiciones (2.56), la brecha superconductor (2.54) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \Delta_k &= -\sum_l V_{kl} \langle (-v_l \hat{\gamma}_{l0}^\dagger + u_l^* \hat{\gamma}_{l1}) (u_l^* \hat{\gamma}_{l0} + v_l \hat{\gamma}_{l1}^\dagger) \rangle \\ &= -\sum_l V_{kl} \langle -v_l u_l^* \hat{\gamma}_{l0}^\dagger \hat{\gamma}_{l0} - v_l^2 \hat{\gamma}_{l0}^\dagger \hat{\gamma}_{l1}^\dagger + u_l^{*2} \hat{\gamma}_{l1} \hat{\gamma}_{l0} + v_l u_l^* \hat{\gamma}_{l1} \hat{\gamma}_{l1}^\dagger \rangle \\ &= -\sum_l V_{kl} v_l u_l^* \langle -\hat{\gamma}_{l0}^\dagger \hat{\gamma}_{l0} + \hat{\gamma}_{l1} \hat{\gamma}_{l1}^\dagger \rangle = -\sum_l V_{kl} v_l u_l^* \langle 1 - \hat{\gamma}_{l0}^\dagger \hat{\gamma}_{l0} - \hat{\gamma}_{l1}^\dagger \hat{\gamma}_{l1} \rangle, \end{aligned} \quad (2.62)$$

donde los términos $\hat{\gamma}_{l0}^\dagger \hat{\gamma}_{l1}^\dagger$ y $\hat{\gamma}_{l1} \hat{\gamma}_{l0}$ no contribuyen al valor promedio [Galván,2013]. En ausencia de cuasipartículas $\hat{\gamma}_{kv}$ (fermiones de Bogoliubov) a $T=0$, la ecuación (2.62) se reduce a (2.35) y en consecuencia se llega a (2.45) para $\Delta(0)$ en términos de $\hbar\omega_c$ y $N(0)V$. Por lo tanto, los resultados de BCS son confirmados por los obtenidos via la transformación de Bogoliubov para $T=0$.

Así en la ecuación (2.61) la primera suma es una constante que difiere de la correspondiente suma del estado normal a $T=0$ por exactamente la energía de condensación encontrada anteriormente con las ecuaciones (2.49) y (2.50). El segundo término da el incremento en la energía por encima del estado base en término de los operadores de número $\hat{\gamma}_{kv}^\dagger \hat{\gamma}_{kv}$ para los fermiones de Bogoliubov. Entonces, $E_k = \sqrt{|\Delta_k|^2 + \xi_k^2}$ es la energía de los fermiones de Bogoliubov y Δ_k es la brecha de energía o la energía mínima para romper el par.

• Temperaturas finitas

Dado que los operadores de Bogoliubov $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger$ y $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger$ obedecen las reglas de conmutación fermiónicas, estas cuasipartículas cumplen con la estadística de Fermi-Dirac dada por

$$f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1}, \quad (2.63)$$

donde $\beta = 1/k_B T$. Como $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2} \geq 0$, $f(E_{\mathbf{k}})$ tiende a cero cuando $T = 0$ para toda \mathbf{k} , incluyendo $|\mathbf{k}| < k_F$. En general, el valor esperado de los operadores de Bogoliubov satisface [Galván,2013]

$$\langle 1 - \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} - \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1} \rangle = 1 - 2f(E_{\mathbf{k}}). \quad (2.64)$$

Así utilizando (2.38) y (2.64) la ecuación (2.62) se reescribe como

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}}^* [1 - 2f(E_{\mathbf{l}})] = -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}}^* \left(1 - \frac{2}{e^{\beta E_{\mathbf{l}}} + 1} \right) \\ &= -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}}^* \left(\frac{e^{\beta E_{\mathbf{l}}} - 1}{e^{\beta E_{\mathbf{l}}} + 1} \right) = -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}}^* \left(\frac{e^{\beta E_{\mathbf{l}}/2} - e^{-\beta E_{\mathbf{l}}/2}}{e^{\beta E_{\mathbf{l}}/2} + e^{-\beta E_{\mathbf{l}}/2}} \right) \\ &= -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} v_{\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}}^* \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{l}}}{2}\right) = -\sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{2E_{\mathbf{l}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{l}}}{2}\right). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Para el caso $V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} = -V$, tenemos $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$ y la condición de autoconsistencia es

$$\frac{1}{V} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\beta E_{\mathbf{k}}/2)}{2E_{\mathbf{k}}}, \quad (2.66)$$

donde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}$ y la suma sobre \mathbf{k} está restringida por la ecuación (2.41). La ecuación (2.66) puede utilizarse para determinar la brecha superconductor $\Delta(T)$ y la temperatura crítica (T_c) cuando $\Delta = 0$.

• Determinación de la temperatura crítica

La forma de encontrar T_c es reemplazando $E_{\mathbf{k}}$ con $|\xi_{\mathbf{k}}|$ en (2.66) y resolver dicha ecuación. Al cambiar la suma por una integral, considerando la simetría de $|\xi_{\mathbf{k}}|$ alrededor del nivel de Fermi, la condición de autoconsistencia es

$$\frac{1}{N(0)V} \approx \int_0^{\beta_c \hbar \omega_c / 2} \frac{\tanh(x)}{x} dx. \quad (2.67)$$

Al evaluar esta integral uno obtiene [Mathematics,2011]

$$\int_0^{\beta_c \hbar \omega_c / 2} \frac{\tanh(x)}{x} dx = \ln(A \beta_c \hbar \omega_c), \quad (2.68)$$

donde $A = 2e^\gamma / \pi \approx 1.13$ y $\gamma = 0.577 \dots$ es la constante de Euler. En consecuencia, a partir de las ecuaciones (2.67) y (2.68) despejamos β_c^{-1} con lo que obtenemos

$$k_B T_c = \beta_c^{-1} \approx 1.13 \hbar \omega_c e^{-\frac{1}{N(0)V}}. \quad (2.69)$$

Realizando el cociente entre las ecuaciones (2.45) y (2.69) se tiene

$$\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} \approx \frac{2}{1.13} = 1.764, \quad (2.70)$$

y encontramos una relación entre la brecha de energía a $T = 0$ y la temperatura crítica para el caso de interacciones débiles.

- **Dependencia de la brecha con la temperatura**

A partir de la ecuación (2.66) se tiene

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_c} \frac{\tanh(\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}/2)}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi, \quad (2.71)$$

y se calcular $\Delta(T)$ de forma numérica. Para superconductores de acoplamiento débil, $\Delta(T)/\Delta(0)$ es una función de T/T_c , que decrece de forma monótona como muestra Fig. 2.2.

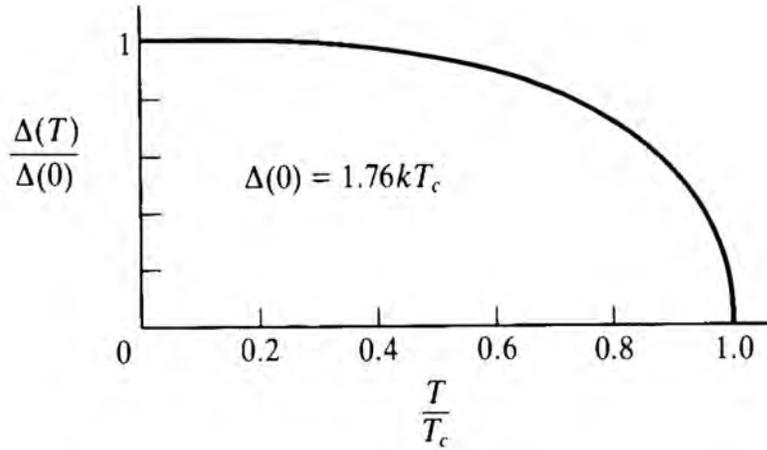


Fig. 2.2. Dependencia de la brecha de energía $\Delta(T)$ respecto a la temperatura (T) en la teoría BCS. [Tinkham,1996]

Cerca de $T = 0$, la variación con la temperatura es lenta ya que la tangente hiperbólica tiende a uno y no se ve fuertemente afectada por T . En contraste, cerca de T_c , $\Delta(T)$ tiende a cero aproximadamente como

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1.74 \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}. \quad (2.72)$$

La variación del parámetro Δ a través de la raíz de $(T_c - T)$ es una de las características de la aproximación de campo medio.

2.5 Formalismo de Bogoliubov-de Gennes

Dado que la teoría de BCS se desarrolla en el espacio de momentos, el formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) traslada el problema al espacio real y se establecen nuevas ecuaciones fundamentales de la superconductividad similares a (2.66).

Realizando una transformación de Fourier a los operadores de creación y aniquilación se tienen

$$\hat{c}(\mathbf{r}\sigma) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \quad \text{y} \quad \hat{c}^\dagger(\mathbf{r}\sigma) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \quad (2.73)$$

donde los nuevos operadores en el espacio real satisfacen las reglas de anticonmutación fermiónicas. Así el hamiltoniano de BCS (2.27) se puede reescribir como [Gennes,1999]

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (2.74)$$

donde

$$\hat{H}_0 = \int \sum_{\sigma} \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \left(\frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2}{2m} + U_0(\mathbf{r}) \right) \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{r}, \quad (2.75)$$

y

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2} V \int \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{r}, \quad (2.76)$$

siendo $U_0(\mathbf{r})$ un potencial externo del hamiltoniano electrónico que puede depender de la posición de los iones. Definiendo

$$\hat{H}_0 - \mu \hat{N} \equiv \int \sum_{\sigma} \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{H}_e \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{r} \quad (2.77)$$

con

$$\hat{H}_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2 + U_0(\mathbf{r}) - \mu, \quad (2.78)$$

y reemplazando la interacción $V \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma)$ por un potencial promedio que actúa sobre una sola partícula podemos dar un hamiltoniano efectivo de la forma [Galván,2013]

$$\begin{aligned} \hat{H}_{eff} = & \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma} \left[\hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{H}_e \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma) + U(\mathbf{r}) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{c}(\mathbf{r}, \sigma) \right] \\ & + \int d\mathbf{r} \left[\Delta(\mathbf{r}) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) + \Delta^*(\mathbf{r}) \hat{c}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{c}(\mathbf{r}, \uparrow) \right], \end{aligned} \quad (2.79)$$

donde

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= -V \langle \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{c}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle = -V \langle \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{c}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle \\ \Delta(\mathbf{r}) &= -V \langle \hat{c}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{c}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle = V \langle \hat{c}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{c}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Desarrollando los valores esperados de los operadores de creación y aniquilación uno puede encontrar

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{c}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle &= \sum_{\alpha} \left[|u^{\alpha}(\mathbf{r})|^2 f_{\alpha} + |v^{\alpha}(\mathbf{r})|^2 (1 - f_{\alpha}) \right] \\ \langle \hat{c}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{c}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle &= -\sum_{\alpha} u^{\alpha}(\mathbf{r}) v^{\alpha}(\mathbf{r}) (1 - 2f_{\alpha}), \end{aligned} \quad (2.81)$$

donde

$$f_{\alpha} = \frac{1}{1 + \exp(E_{\alpha}/k_B T)} \quad (2.82)$$

es la distribución de Fermi-Dirac. Por lo tanto, (2.80) se puede reescribir como

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= -V \sum_{\alpha} \left[|u^{\alpha}(\mathbf{r})|^2 f_{\alpha} + |v^{\alpha}(\mathbf{r})|^2 (1 - f_{\alpha}) \right] \\ \Delta(\mathbf{r}) &= V \sum_{\alpha} u^{\alpha}(\mathbf{r}) v^{\alpha*}(\mathbf{r}) (1 - 2f_{\alpha}). \end{aligned} \quad (2.83)$$

Para diagonalizar el hamiltoniano (2.79) se realiza una tranformacion análoga a (2.56) de la forma

$$\begin{aligned}\hat{c}(\mathbf{r} \uparrow) &= \sum_{\alpha} \left[u^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow} - v^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}^{\dagger} \right] \\ \hat{c}(\mathbf{r} \downarrow) &= \sum_{\alpha} \left[u^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow} + v^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}^{\dagger} \right]\end{aligned}\quad (2.84)$$

con lo que (2.79) se convierte a

$$\hat{H}_{eff} = E_g + \sum_{\alpha, \sigma} E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha \sigma}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\alpha \sigma}, \quad (2.85)$$

donde E_g es la energía del estado base de H_{eff} y E_{α} es la energía de excitación α . Esta condición de diagonalización es equivalente a

$$\begin{aligned}[\hat{H}_{eff}, \gamma_{\alpha \sigma}] &= -E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha \sigma} \\ [\hat{H}_{eff}, \gamma_{\alpha \sigma}^{\dagger}] &= E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha \sigma}^{\dagger}\end{aligned}\quad (2.86)$$

Las ecuaciones (2.86) determinan las funciones u^{α} y v^{α} en (2.84). Para encontrar explícitamente las ecuaciones de u^{α} y v^{α} , calculamos el conmutador $[\hat{c}(\mathbf{r}, \sigma), H_{eff}]$ usando (2.79) y obtenemos

$$\begin{aligned}[\hat{c}(\mathbf{r} \uparrow), \hat{H}_{eff}] &= [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \hat{c}(\mathbf{r} \uparrow) + \Delta(\mathbf{r}) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r} \downarrow) \\ [\hat{c}(\mathbf{r} \downarrow), \hat{H}_{eff}] &= [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \hat{c}(\mathbf{r} \downarrow) - \Delta^*(\mathbf{r}) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r} \uparrow)\end{aligned}\quad (2.87)$$

Al sustituir (2.84) y (2.86) en (2.87), sus lados izquierdos quedan como

$$\begin{aligned}[\hat{c}(\mathbf{r} \uparrow), \hat{H}_{eff}] &= \left[\sum_{\alpha} (u^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow} - v^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}^{\dagger}), \hat{H}_{eff} \right] = \sum_{\alpha} u^{\alpha}(\mathbf{r}) [\hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}, \hat{H}_{eff}] - \sum_{\alpha} v^{\alpha*}(\mathbf{r}) [\hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}^{\dagger}, \hat{H}_{eff}] \\ &= \sum_{\alpha} u^{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow} + \sum_{\alpha} v^{\alpha*}(\mathbf{r}) E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}^{\dagger} \\ [\hat{c}(\mathbf{r} \downarrow), \hat{H}_{eff}] &= \left[\sum_{\alpha} (u^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow} + v^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}^{\dagger}), \hat{H}_{eff} \right] = \sum_{\alpha} u^{\alpha}(\mathbf{r}) [\hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}, \hat{H}_{eff}] + \sum_{\alpha} v^{\alpha*}(\mathbf{r}) [\hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}^{\dagger}, \hat{H}_{eff}] \\ &= \sum_{\alpha} u^{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow} - \sum_{\alpha} v^{\alpha*}(\mathbf{r}) E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}^{\dagger}\end{aligned}\quad (2.88)$$

mientras que los lados derechos pueden reescribirse como

$$\begin{aligned}[\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \hat{c}(\mathbf{r} \uparrow) + \Delta(\mathbf{r}) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r} \downarrow) &= [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \sum_{\alpha} \left[u^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow} - v^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}^{\dagger} \right] + \Delta(\mathbf{r}) \sum_{\alpha} \left[u^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}^{\dagger} + v^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow} \right] \\ &= \sum_{\alpha} \left\{ u^{\alpha}(\mathbf{r}) [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] + v^{\alpha}(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) \right\} \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow} + \sum_{\alpha} \left\{ u^{\alpha*}(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) - v^{\alpha*}(\mathbf{r}) [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \right\} \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow}^{\dagger} \\ [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \hat{c}(\mathbf{r} \downarrow) - \Delta^*(\mathbf{r}) \hat{c}^{\dagger}(\mathbf{r} \uparrow) &= [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \sum_{\alpha} \left[u^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow} + v^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}^{\dagger} \right] - \Delta^*(\mathbf{r}) \sum_{\alpha} \left[u^{\alpha*}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}^{\dagger} - v^{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow} \right] \\ &= \sum_{\alpha} \left\{ u^{\alpha}(\mathbf{r}) [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] + \Delta^*(\mathbf{r}) v^{\alpha}(\mathbf{r}) \right\} \hat{\gamma}_{\alpha \downarrow} + \sum_{\alpha} \left\{ [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] v^{\alpha*}(\mathbf{r}) - \Delta^*(\mathbf{r}) u^{\alpha*}(\mathbf{r}) \right\} \hat{\gamma}_{\alpha \uparrow}^{\dagger}.\end{aligned}\quad (2.89)$$

Igualando (2.88) y (2.89) obtenemos

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha} \left\{ u^{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha} - u^{\alpha}(\mathbf{r}) [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] - v^{\alpha}(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) \right\} \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} + \sum_{\alpha} \left\{ v^{\alpha*}(\mathbf{r}) E_{\alpha} - u^{\alpha*}(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) + v^{\alpha*}(\mathbf{r}) [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] \right\} \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow} = 0 \\
& \sum_{\alpha} \left\{ u^{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha} - u^{\alpha}(\mathbf{r}) [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] - \Delta^*(\mathbf{r}) v^{\alpha}(\mathbf{r}) \right\} \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow} - \sum_{\alpha} \left\{ v^{\alpha*}(\mathbf{r}) E_{\alpha} + [\hat{H}_e + U(\mathbf{r})] v^{\alpha*}(\mathbf{r}) - \Delta^*(\mathbf{r}) u^{\alpha*}(\mathbf{r}) \right\} \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} = 0
\end{aligned} \tag{2.90}$$

Por lo tanto, de (2.90) se obtienen las ecuaciones de BdG dadas por

$$\begin{aligned}
& \left[\hat{H}_e + U(\mathbf{r}) \right] u^{\alpha}(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) v^{\alpha}(\mathbf{r}) = E_{\alpha} u^{\alpha}(\mathbf{r}) \\
& \Delta^*(\mathbf{r}) u^{\alpha}(\mathbf{r}) - \left[\hat{H}_e + U(\mathbf{r}) \right] v^{\alpha}(\mathbf{r}) = E_{\alpha} v^{\alpha}(\mathbf{r}),
\end{aligned} \tag{2.91}$$

las cuales se pueden escribir en forma matricial de eigenvalores como

$$\hat{\Omega} \begin{pmatrix} u^{\alpha}(\mathbf{r}) \\ v^{\alpha}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_e + U(\mathbf{r}) & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -\hat{H}_e - U(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^{\alpha}(\mathbf{r}) \\ v^{\alpha}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_{\alpha} \begin{pmatrix} u^{\alpha}(\mathbf{r}) \\ v^{\alpha}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \tag{2.92}$$

De esta forma utilizando las ecuaciones (2.80) y (2.92) encontramos una relación de autoconsistencia donde proponemos una solución inicial $(u^{\alpha}(\mathbf{r}), v^{\alpha}(\mathbf{r}))$ y calculamos los parámetros $U(\mathbf{r})$ y $\Delta(\mathbf{r})$ a través de (2.83). Así usando las ecuaciones de BdG (2.92) se encuentra una nueva solución de $(u^{\alpha}(\mathbf{r}), v^{\alpha}(\mathbf{r}))$. El proceso se repite hasta cumplir algún parámetro de convergencia predeterminado para la solución.

Capítulo 3 Superconductividad en Nanoalambres y Nanocintas

En los capítulos anteriores hemos realizado un repaso de los modelos tanto fenomenológicos como cuánticos de la superconductividad. En este capítulo se aplicará el método de Bogoliubov-de Gennes al hamiltoniano de Hubbard atractivo que se introducirá en la siguiente sección.

3.1 Modelo de Hubbard atractivo

En 1963 John Hubbard desarrolló un modelo para el estudio de las correlaciones electrónicas en sólidos, el cual en lenguaje de segunda cuantización se parte de [Hubbard,1963]

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | 1/r | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'_2, \sigma_2} \hat{c}_{\mathbf{k}'_1, \sigma_1}, \quad (3.1)$$

donde la suma de \mathbf{k} se realiza sobre la primera zona de Brillouin y

$$\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | 1/r | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 \rangle = e^2 \int \frac{\psi_{\mathbf{k}_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'_1}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}'_2}(\mathbf{r}')}{r} d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (3.2)$$

siendo $\psi_{\mathbf{k}}$ la función de Bloch con energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. El primer término de (3.1) representa la estructura de bandas de un solo electrón, mientras que el segundo es la energía de interacción entre electrones.

Introduciendo las funciones de Wannier para un sólido de N_S átomos dadas por

$$\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.3)$$

las funciones de Bloch pueden escribirse como

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (3.4)$$

donde la suma se realiza sobre todas las posiciones \mathbf{R}_j de los átomos. De la misma forma, los operadores de creación y aniquilación en el espacio recíproco pueden reescribirse en el espacio real como

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \hat{c}_{j,\sigma} \quad \text{y} \quad \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger. \quad (3.5)$$

Sustituyendo (3.4) y (3.5) en (3.1) el hamiltoniano se puede reescribir como

$$\hat{H} = \sum_{j,l} \sum_{\sigma} t_{j,l} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{jklm} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \langle jk | 1/r | lm \rangle \hat{c}_{j,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma_2} \hat{c}_{m,\sigma_1}, \quad (3.6)$$

donde

$$t_{j,l} = \frac{1}{N_S} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_l)} \quad (3.7)$$

$$\langle jk|1/r|lm\rangle = e^2 \int \frac{\phi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l)\phi^*(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_k)\phi(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_m)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (3.8)$$

Nótese que la ecuación (3.8) representa los coeficientes de interacción entre electrones, cuyo término dominante en (3.6) es la integral $\langle jj|1/r|jj\rangle = I$ que origina de la interacción coulombiana. Por otro lado, considerando el apantallamiento electrónico e interacciones indirectas por el intercambio de un fonón u otros bosones, el parámetro U puede resultar negativo, es decir, un hamiltoniano atractivo dado por

$$\hat{H} = \sum_{j,j'} \sum_{\sigma} t_{j,j'} \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j',\sigma} + U \sum_{j,\sigma} \hat{n}_{j,\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma}. \quad (3.9)$$

donde $t_{j,j'}$ es el parámetro de salto entre sitios j y j' , los cuales en esta tesis son vecinos mas cercanos. El hamiltoniano (3.9) será el punto de partida para el estudio de la superconductividad en nanoalambres y nanocintas.

3.2 Bogoliubov-de Gennes en el espacio combinado

Consideremos nanoalambres y nanocintas de longitud infinita y secciones transversales de pocos átomos, por lo que resulta conveniente trabajar en el espacio recíproco a lo largo de la dirección Z y en el espacio real para el plano XY. Para este propósito reescribiremos las ecuaciones de BdG basado en el hamiltoniano de Hubbard atractivo con el fin de calcular los parámetros superconductores mas importantes tales como la brecha superconductora y la temperatura crítica.

• Ecuaciones de BdG para el modelo de Hubbard

Aplicando la aproximación de campo medio de dos partículas al hamiltoniano (3.9), incluyendo el operador de número (\hat{N}) y el potencial químico (μ) dado que el número de pares no es fijo, obtenemos [Galván,2013]

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \hat{H}_t + \hat{H}_{\mu} + \hat{H}_U \quad (3.10)$$

donde

$$\hat{H}_t = \sum_{j,j'} \sum_{\sigma} t_{j,j'} \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j',\sigma} \quad \text{y} \quad \hat{H}_{\mu} = -\mu \sum_{j,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma}, \quad (3.11)$$

$$\hat{H}_U \approx U \sum_j \left[-n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + n_{j\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\downarrow} + n_{j\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\uparrow} \right] + U \sum_j \left[-\Lambda_{jj}^* \Lambda_{jj} + \Lambda_{jj}^* \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} + \Lambda_{jj} \hat{c}_{j,\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\downarrow}^{\dagger} \right] \quad (3.12)$$

siendo

$$n_{jj\sigma} \equiv \langle \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle, \quad \Lambda_{jj} \equiv \langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \rangle = -\langle \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow} \rangle \quad \text{y} \quad \Lambda_{jj}^* \equiv \langle \hat{c}_{j,\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\downarrow}^{\dagger} \rangle = -\langle \hat{c}_{j,\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\uparrow}^{\dagger} \rangle. \quad (3.13)$$

Dentro del formalismo de BdG los operadores de creación y aniquilación pueden escribirse de la forma

$$\begin{aligned} \hat{c}_{j,\uparrow} &= \sum_{\alpha} (u_j^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} - v_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^{\dagger}) & \hat{c}_{j,\uparrow}^{\dagger} &= \sum_{\alpha} (u_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^{\dagger} - v_j^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}) \\ \hat{c}_{j,\downarrow} &= \sum_{\alpha} (u_j^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} + v_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^{\dagger}) & \hat{c}_{j,\downarrow}^{\dagger} &= \sum_{\alpha} (u_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^{\dagger} + v_j^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde α es el número cuántico de las excitaciones con las que se diagonalizará el hamiltoniano (3.10). Utilizando (3.14) y las reglas de conmutación fermiónicas de $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ y $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger$, podemos expresar los productos de operadores como

$$\begin{aligned}\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j',\sigma} &= \sum_{\alpha} (u_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \mp v_j^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}) \sum_{\alpha'} (u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} \mp v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger) \\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} \mp u_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger \mp v_j^{\alpha} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} + v_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger) \\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} + v_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \delta_{\alpha,\alpha'} - v_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \mp u_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger \mp v_j^{\alpha} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}),\end{aligned}\quad (3.15)$$

$$\begin{aligned}\hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{j',-\sigma} &= \sum_{\alpha} (u_j^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \mp v_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger) \sum_{\alpha'} (u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \pm v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^\dagger) \\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \pm u_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^\dagger \mp v_j^{\alpha*} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} - v_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^\dagger) \\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} (\pm u_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \delta_{\alpha,\alpha'} \mp u_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \mp v_j^{\alpha*} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} - v_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^\dagger + u_j^{\alpha} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}),\end{aligned}\quad (3.16)$$

donde el signo superior corresponde a $\sigma = \uparrow$ y el inferior a $\sigma = \downarrow$. Sustituyendo (3.15) y (3.16) en (3.10) podemos reescribir nuestro hamiltoniano como

$$\begin{aligned}\hat{H}_t &= \sum_{j,j'} t_{j,j'} [2v_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha*} + \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} - v_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - u_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - v_j^{\alpha} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}) \\ &\quad + \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - v_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} + u_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} + v_j^{\alpha} u_{j'}^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow})]\end{aligned}\quad (3.17)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_\mu &= -\mu \sum_j [2v_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} + \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} - v_j^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - v_j^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}) \\ &\quad + \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - v_j^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} + u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} + v_j^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow})]\end{aligned}\quad (3.18)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_U &\approx U \sum_j \{-n_{jj\uparrow} n_{jj\downarrow} + n_{jj\uparrow} [v_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} + \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - v_j^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} + u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} + v_j^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow})] \\ &\quad + n_{jj\downarrow} [v_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} + \sum_{\alpha,\alpha'} (u_j^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} - v_j^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} - v_j^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow})]\} \\ &\quad + U \sum_j \{-\Lambda_{jj}^* \Lambda_{jj} + \Lambda_{jj}^* [-u_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} + v_j^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} - v_j^{\alpha*} v_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} + u_j^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}] \\ &\quad + \Lambda_{jj} [-u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha} + u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} + v_j^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} - v_j^{\alpha} v_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} + u_j^{\alpha*} u_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}]\}.\end{aligned}\quad (3.19)$$

Utilizando (3.17), (3.18) y (3.19), podemos escribir de forma explicita el hamiltoniano (3.10) como

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = E_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = E_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_{1\uparrow} + \hat{H}_{1\downarrow}, \quad (3.20)$$

donde E_0 , \hat{H}_0 y \hat{H}_1 son la parte constante, diagonal y no diagonal dadas por

$$\begin{aligned}E_0 &= 2 \sum_{j,j',\alpha} t_{j,j'} v_j^{\alpha} v_{j'}^{\alpha*} - 2\mu \sum_{j,\alpha} v_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} \\ &\quad + U \sum_j \left[-n_{jj\uparrow} n_{jj\downarrow} + \sum_{\alpha} (n_{jj\uparrow} + n_{jj\downarrow}) v_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} - \Lambda_{jj}^* \Lambda_{jj} - \sum_{\alpha} \Lambda_{jj}^* u_j^{\alpha} v_j^{\alpha*} - \sum_{\alpha} \Lambda_{jj} u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha} \right]\end{aligned}\quad (3.21)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{\alpha,\sigma} \left[\sum_{j,j'} t_{j,j'} (u_j^{\alpha*} u_{j'}^\alpha - v_j^\alpha v_{j'}^{\alpha*}) - \mu \sum_j (u_j^{\alpha*} u_j^\alpha - v_j^\alpha v_j^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} + U \sum_{\alpha,\sigma,j} (n_{jj-\sigma} u_j^{\alpha*} u_j^\alpha - n_{jj\sigma} v_j^\alpha v_j^{\alpha*} + \Lambda_{jj}^* v_j^{\alpha*} u_j^\alpha + \Lambda_{jj} v_j^\alpha u_j^{\alpha*}) \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \quad (3.22)$$

$$\hat{H}_{1\uparrow} = \sum_{\alpha,\alpha'} \left[-\sum_{j,j'} t_{j,j'} (u_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*} + u_j^{\alpha*} v_{j'}^{\alpha'*}) + \mu \sum_j (u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} + u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger + U \sum_{\alpha,\alpha',j} \left[-(n_{jj\uparrow} u_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} + n_{jj\downarrow} u_j^{\alpha'*} v_j^{\alpha*}) - \Lambda_{jj}^* v_j^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} + \Lambda_{jj} u_j^{\alpha*} u_j^{\alpha'*} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \quad (3.23)$$

$$\hat{H}_{1\downarrow} = \sum_{\alpha,\alpha'} \left[-\sum_{j,j'} t_{j,j'} (v_j^\alpha u_{j'}^{\alpha'} + v_j^\alpha u_{j'}^{\alpha'}) + \mu \sum_j (v_j^\alpha u_j^{\alpha'} + v_j^\alpha u_j^{\alpha'}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} + U \sum_{\alpha,\alpha',j} \left[-(n_{jj\downarrow} v_j^\alpha u_j^{\alpha'} + n_{jj\uparrow} v_j^{\alpha'} u_j^\alpha) + \Lambda_{jj}^* u_j^\alpha u_j^{\alpha'} - \Lambda_{jj} v_j^\alpha v_j^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} \quad (3.24)$$

Como se vió en la sección 2.4, el propósito de hacer esta transformación es diagonalizar el hamiltoniano (3.10) obteniendo una ecuación como (2.85). Así que los coeficientes de los términos $\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}$ de la ecuación (3.22) corresponden a las energías de excitación E^α que son eigenvalores de las ecuaciones de BdG dadas por

$$\hat{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\alpha \\ \mathbf{v}^\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta^* & -\mathbf{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\alpha \\ \mathbf{v}^\alpha \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\alpha \\ \mathbf{v}^\alpha \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

donde los elementos de las matrices son

$$\mathbf{H}_{j,j} = -\mu + U n_{jj-\sigma} \quad \text{y} \quad \mathbf{H}_{j,j}^* = -\mu + U n_{jj\sigma}, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{H}_{j,j'} = t_{j,j'} \quad \text{y} \quad \mathbf{H}_{j,j'}^* = t_{j,j'}^*, \quad (3.27)$$

$$\Delta_{j,j} = U \Lambda_{j,j} \quad \text{y} \quad \Delta_{j,j'} = 0. \quad (3.28)$$

En la ecuación (3.27) los átomos j y j' son vecinos mas cercanos. Cabe señalar que

$$\hat{\Omega}^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbf{H}^\dagger & (\Delta^*)^\dagger \\ \Delta^\dagger & -(\mathbf{H}^*)^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta^* & -\mathbf{H}^* \end{pmatrix} = \hat{\Omega}, \quad (3.29)$$

donde \mathbf{H} es hermitiano y Δ es una matriz diagonal debido a la ecuación (3.28). Por lo tanto, $E_\alpha \in \mathbb{R}$.

Al sustituir las trasformaciones de BdG (3.14) en las ecuaciones (3.13) y sacar el valor esperado, se pueden obtener nuevas ecuaciones autoconsistentes dadas por [Galván,2013][Gennes,1999]

$$n_{jj',\uparrow} = n_{jj',\downarrow} = \sum_\alpha \{ u_j^{\alpha*} u_{j'}^\alpha f(E_\alpha) + v_j^\alpha v_{j'}^{\alpha*} [1 - f(E_\alpha)] \} \quad (3.30)$$

y

$$\Lambda_{j,j'} = -\frac{1}{2} \sum_\alpha (u_j^\alpha v_{j'}^{\alpha*} + u_{j'}^\alpha v_j^{\alpha*}) \tanh \left(\frac{E_\alpha}{k_B T} \right). \quad (3.31)$$

• Formalismo de Superceldas

Para nanoalambres y nanocintas cuyas secciones transversales en XY son invariantes en la dirección Z, se puede introducir el concepto de supercelda que contiene los átomos en el plano XY, en otras palabras, dicha supercelda tiene condiciones a la frontera periódicas en la dirección Z. Entonces el hamiltoniano que se encuentra en la ecuación (3.25) puede escribirse como

$$\mathbf{H}_{(l,z),(l',z')} = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{H}}_{(1,z),(1,z')} & t_{xy} \mathbf{I}_z & \cdots & \mathbf{0} \\ t_{xy} \mathbf{I}_z & \bar{\mathbf{H}}_{(2,z),(2,z')} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \bar{\mathbf{H}}_{(N_{xy},z),(N_{xy},z')} \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

donde las coordenadas del sitio j se reescriben como (l, z) con $l = 1, 2, \dots, N_{xy}$ y $z = 1, 2, \dots, N_z$, siendo N_{xy} el número de átomos en supercelda y N_z es el número de planos considerados explícitamente cuyos extremos se relacionan a través de la condición a la frontera cíclica, t_{xy} es el parámetro de salto en el plano XY, las matrices $t_{xy} \mathbf{I}_z$ aparecen cuando los sitios son vecinos mas cercanos,

$$\bar{\mathbf{H}}_{(l,z),(l,z')} = \begin{pmatrix} \varepsilon & t_z & \cdots & 0 \\ t_z & \varepsilon & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \varepsilon \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

es el hamiltoniano de una cadena lineal en la dirección Z asociada al sitio l en la supercelda, ε es la autoenergía de los sitios en la cadena que incluye efectos de campo medio como muestra en (3.26) y t_z el parámetro de salto entre sitios en la dirección Z.

En general, los vectores \mathbf{u}^α y \mathbf{v}^α en la ecuación (3.25) están en el espacio real, cuyos componentes son respectivamente $u_{l,z}^\alpha$ y $v_{l,z}^\alpha$. En el formalismo de superceldas, dichos componentes pueden reescribirse usando la transformación de Fourier como

$$\begin{aligned} u_l^\alpha(k_z) &= \frac{1}{\sqrt{N_z}} \sum_z e^{ik_z z a} u_{l,z}^\alpha \Leftrightarrow (\mathbf{u}_l^\alpha)_{k_z} = \bar{\mathbf{U}}_{k_z, z} (\mathbf{u}_l^\alpha)_z \\ v_l^\alpha(k_z) &= \frac{1}{\sqrt{N_z}} \sum_z e^{ik_z z a} v_{l,z}^\alpha \Leftrightarrow (\mathbf{v}_l^\alpha)_{k_z} = \bar{\mathbf{U}}_{k_z, z} (\mathbf{v}_l^\alpha)_z \end{aligned}, \quad (3.34)$$

donde el índice l representa el l -ésimo átomo en la supercelda y la matriz de transformación $\bar{\mathbf{U}}_{k_z, z}$ tiene los elementos (m, z) dados por [Sutton,1994]

$$\frac{1}{\sqrt{N_z}} \exp \frac{i2\pi m z}{N_z}, \quad (3.35)$$

donde $m = 0, 1, 2, \dots, (N_z - 1)$ que determina el vector de onda en la primera zona de Brillouin $k_z = 2\pi m / (N_z a)$ y $z = 1, 2, \dots, N_z$ es el contador de los sitios para la cadena lineal en la dirección Z. En consecuencia, la matriz de la ecuación (3.25) se transforma como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{U} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{(l,z),(l',z')} & \Delta_{(l,z),(l',z')} \\ \Delta_{(l,z),(l',z')}^* & -\mathbf{H}_{(l,z),(l',z')}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}^\dagger & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{l,l'}(k_z) & \Delta_{l,l'}(k_z) \\ \Delta_{l,l'}^*(k_z) & -\mathbf{H}_{l,l'}^*(k_z) \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

donde $\Delta_{l,l'}(k_z) = \Delta_l \delta_{l,l'}$ siendo Δ_l la brecha superconductor para los sitios de la l -ésima cadena en la nanoestructura, $\mathbf{H}_{l,l'}(k_z) = \mathbf{U} \mathbf{H}_{(l,z),(l',z')} \mathbf{U}^\dagger$ siendo

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{U}}_{k_z,z} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \bar{\mathbf{U}}_{k_z,z} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \bar{\mathbf{U}}_{k_z,z} \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

la matriz de transformación que contiene $N_{xy} \times N_{xy}$ matrices, y $\Delta_{l,l'}(k_z) = \mathbf{U} \Delta_{(l,z),(l',z')} \mathbf{U}^\dagger = \Delta_{(l,z),(l',z')}$ es una matriz diagonal de las brechas superconductoras Δ_l dada por

$$\Delta_{(l,z),(l',z')} = \begin{pmatrix} \Delta_l \mathbf{I}_z & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Delta_2 \mathbf{I}_z & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \Delta_{N_{xy}} \mathbf{I}_z \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

cuyos elementos se transforman como $\bar{\mathbf{U}}_{k_z,z} (\Delta_l \mathbf{I}_z) \bar{\mathbf{U}}_{k_z,z}^\dagger = \Delta_l \mathbf{I}_z$. Así, en el formalismo de superceldas la ecuación (3.25) para nanoalambres y nanocintas orientados en la dirección Z se puede reescribir como

$$\hat{\Omega} \begin{pmatrix} u_{l'}^\alpha(k_z) \\ v_{l'}^\alpha(k_z) \end{pmatrix} = \sum_{l'=1}^{N_{xy}} \begin{pmatrix} H_{l,l'}(k_z) & \Delta_{l,l'} \\ \Delta_{l,l'}^* & -H_{l,l'}^*(k_z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{l'}^\alpha(k_z) \\ v_{l'}^\alpha(k_z) \end{pmatrix} = E_\alpha(k_z) \begin{pmatrix} u_{l'}^\alpha(k_z) \\ v_{l'}^\alpha(k_z) \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

donde $H_{l,l'}$ y $\Delta_{l,l'}$ son elementos de matrices de $N_{xy} \times N_{xy}$. Por otro lado, de la ecuación (3.31) se tiene

$$\frac{1}{N_Z} \sum_{z,z',k_z} e^{ik_z(z-z')a} \Lambda_{(l,z),(l',z')} = \frac{-1}{2N_Z} \sum_{\alpha,k_z} \left(\sum_z e^{ik_z z a} u_{l,z}^\alpha \sum_{z'} e^{-ik_z z' a} v_{l',z'}^{\alpha*} + \sum_{z'} e^{-ik_z z' a} u_{l',z'}^\alpha \sum_z e^{ik_z z a} v_{l,z}^{\alpha*} \right) \tanh \left(\frac{E_\alpha}{k_B T} \right). \quad (3.40)$$

Usando la transformación (3.34), la ecuación (3.40) puede reescribirse como

$$\sum_{z,z'} \delta_{z,z'} \Lambda_{(l,z),(l',z')} = \sum_z \Lambda_{(l,z),(l',z)} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha,k_z} [u_j^\alpha(k_z) v_{j'}^{\alpha*}(k_z) + u_{j'}^\alpha(-k_z) v_j^{\alpha*}(-k_z)] \tanh \left(\frac{E_\alpha}{k_B T} \right). \quad (3.41)$$

Dado que las estructuras consideradas en esta tesis tienen simetría traslacional y centro de inversión en la dirección Z, entonces $\Lambda_{(l,z),(l',z)} = \Lambda_{l,l'}$ y $u_j^\alpha(-k_z) v_{j'}^{\alpha*}(-k_z) = u_{j'}^\alpha(k_z) v_j^{\alpha*}(k_z)$ por lo que (3.41) se convierte en

$$\sum_z \Lambda_{(l,z),(l',z)} = N_Z \Lambda_{l,l'} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha,k_z} [u_j^\alpha(k_z) v_{j'}^{\alpha*}(k_z) + u_{j'}^\alpha(k_z) v_j^{\alpha*}(k_z)] \tanh \left(\frac{E_\alpha}{k_B T} \right). \quad (3.42)$$

Empleando (3.28), la ecuación (3.42) se reescribe como

$$\Delta_{l,l'} = -\frac{U}{2N_Z} \delta_{l,l'} \sum_{\alpha,k_z} [u_j^\alpha(k_z) v_{j'}^{\alpha*}(k_z) + u_{j'}^\alpha(k_z) v_j^{\alpha*}(k_z)] \tanh \left(\frac{E_\alpha(k_z)}{k_B T} \right) \quad (3.43)$$

donde k_z se suma en la primera zona de Brillouin y α se suma sobre el número de átomos en la celda.

3.3 Brecha y temperatura crítica superconductoras

En esta sección se analizará la superconductividad en nanoalambres y nanocintas, resolviendo la ecuación de eigenvalores de BdG (3.39) cuyas soluciones $E_\alpha(k_z)$ y $(\mathbf{u}^\alpha(k_z), \mathbf{v}^\alpha(k_z))$ se sustituyen en la ecuación (3.43) para obtener la brecha $\Delta_{i,l'}$ que se coloca en (3.39) y así determinar las brechas superconductoras locales de forma autoconsistente.

- **Cadena lineal**

Iniciaremos con el caso de una cadena unidimensional, como se muestra en la Figura 3.1, cuya supercelda tiene un solo átomo, es decir $N_{xy} = 1$.

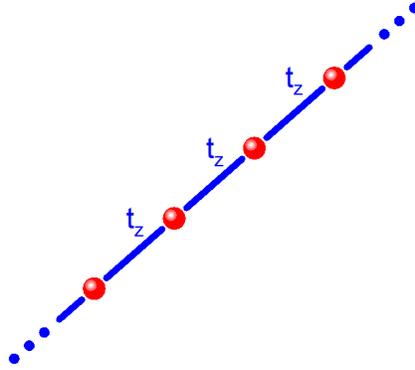


Fig. 3.1. Esquema de una cadena infinita de átomos representados por esferas rojas y los enlaces caracterizados por la integral de salto t_z .

En este caso, despreciando el valor constante de $Un/2$ en las autoenergías, ya que la física es invariante ante traslaciones del origen en la energía, la matriz $\hat{\Omega}$ de tamaño 2×2 en la ecuación (3.39) es de la forma

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \xi & \Delta \\ \Delta & -\xi \end{pmatrix}, \quad (3.44)$$

donde $\xi = 2t_z \cos(k_z a) - \mu$ y Δ son reales. Los eigenvalores de (3.44) son

$$E_1 = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \quad \text{y} \quad E_2 = -\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}, \quad (3.45)$$

cuyos eigenvectores normalizados están dados por

$$\begin{pmatrix} u_1^{(1)} \\ v_1^{(1)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(\xi^2 + \Delta^2 + \xi\sqrt{\xi^2 + \Delta^2})}} \begin{pmatrix} \xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \\ \Delta \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} u_1^{(2)} \\ v_1^{(2)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(\xi^2 + \Delta^2 - \xi\sqrt{\xi^2 + \Delta^2})}} \begin{pmatrix} \xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \\ \Delta \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

Sustituyendo las soluciones (3.45) y (3.46) en (3.43) obtenemos

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{|U|}{N_Z} \sum_{k_z} \sum_{\alpha=1}^{N_{xy}} u^\alpha v^\alpha \tanh\left(\frac{E_\alpha}{2k_B T}\right) = \frac{|U|\Delta}{2N_Z} \sum_{k_z} \frac{\xi(k) + \sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}}{\xi(k)^2 + \Delta^2 + \xi(k)\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{E_1}{2k_B T}\right) \\
&= \frac{|U|\Delta}{2N_Z} \sum_{k_z} \frac{\left[\xi(k) + \sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}\right] \left[\xi(k)^2 + \Delta^2 - \xi(k)\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}\right]}{\left[\xi(k)^2 + \Delta^2 + \xi(k)\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}\right] \left[\xi(k)^2 + \Delta^2 - \xi(k)\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}\right]} \tanh\left(\frac{E_1}{2k_B T}\right) \quad (3.47) \\
&= \frac{\Delta|U|}{2N_Z} \sum_{k_z} \frac{\Delta^2 \sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}}{\left[\xi(k)^2 + \Delta^2\right]^2 - \xi(k)^2 \left[\xi(k)^2 + \Delta^2\right]} \tanh\left(\frac{E_1}{2k_B T}\right) \\
&= \frac{\Delta|U|}{2N_Z} \sum_{k_z} \frac{1}{\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{E_1}{2k_B T}\right) = \frac{\Delta|U|}{2N_Z} \sum_{k_z} \frac{1}{E_1} \tanh\left(\frac{E_1}{2k_B T}\right).
\end{aligned}$$

La ecuación (3.47) puede reescribirse en forma integral como

$$1 = \frac{|U|a}{2(2\pi)} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right). \quad (3.48)$$

Nótese que la ecuación (3.48) es la ecuación de BCS con interacción de Hubbard atractiva para una cadena lineal periódica e infinita.

En la Figura 3.2(a) se muestran los valores de la brecha superconductora (Δ) a $T=0$ como función del potencial químico (μ) obtenidos de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (círculos rojos) en comparación con los calculados de la teoría BCS (3.48) (cuadrados azules), donde las integrales de salto $t_z = t$. Se puede observar que por los dos caminos se tiene el mismo valor de la brecha superconductora. La Figura 3.2(b) ilustra la densidad de estados (DOS) del mismo alambre de la Figura 3.2(a) obtenida usando la siguiente expresión [Economou,2006]

$$DOS(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi\sqrt{(2t)^2 - E^2}}, & \text{si } |E| < 2|t| \\ 0, & \text{si } |E| > 2|t| \end{cases}. \quad (3.49)$$

Obsérvese que los máximos valores de Δ ocurren en los extremos de la banda donde la densidad de estados diverge. Este resultado es consistente con la ecuación (2.45) predicha por la teoría BCS, donde Δ crece con la densidad de estados evaluado en la energía de Fermi $N(0)$.

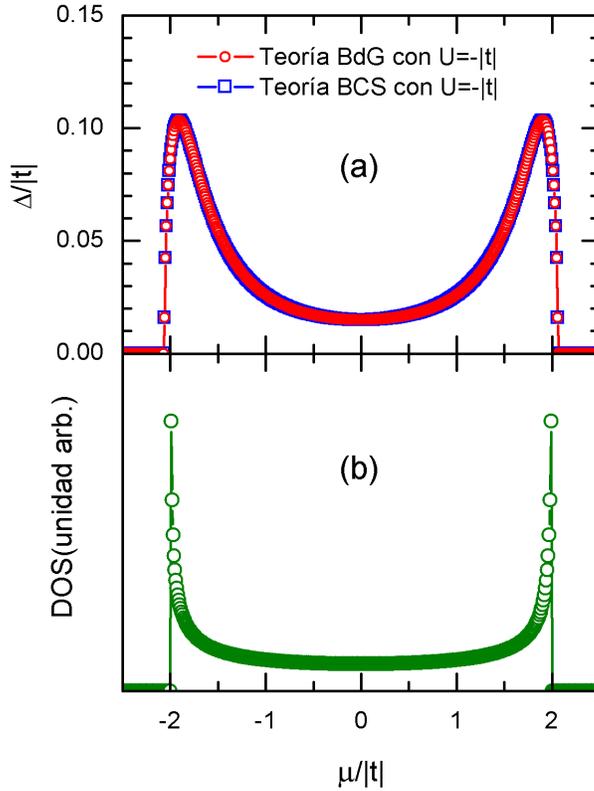


Fig. 3.2. (a) Comparación de la brecha superconductora (Δ) obtenida a través de las teorías BdG y BCS para $U = -|t|$ y (b) densidad de estados (DOS) del nanoalambre mostrado en la Figura 3.1 con $t_z = t$.

Para temperaturas finitas, la brecha superconductora disminuye como se muestra en la Figura 3.3 para el mismo nanoalambre de la Figura 3.2 con $U = -|t|$, $U = -0.9|t|$ y $U = -0.8|t|$, donde los resultados fueron obtenidos de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (3.39) y (3.43) así como de la teoría BCS (3.48). Nótese que ambos resultados de BdG y de BCS muestran un comportamiento típico de la aproximación de campo medio.

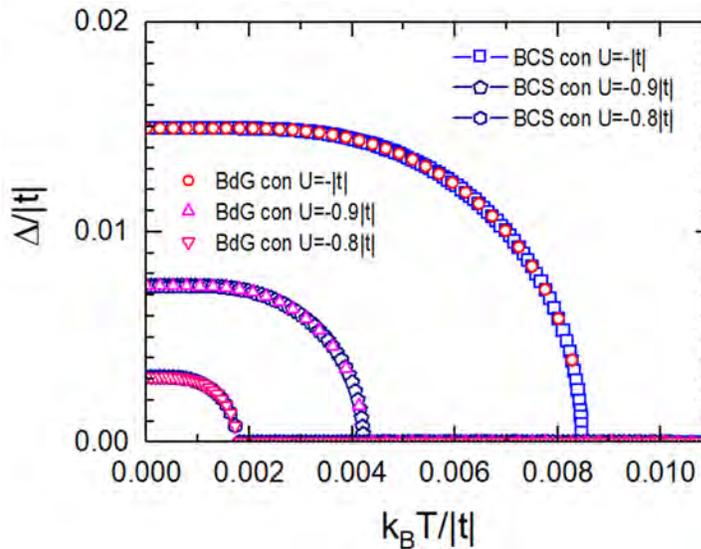


Fig. 3.3. La brecha superconductora (Δ) versus temperatura (T) para el mismo nanoalambre de la Figura 3.3 con $U = -|t|$, $-0.9|t|$ y $-0.8|t|$.

Las temperaturas críticas (T_C) se puede obtener de la ecuación de BCS (3.48) al tomar la brecha superconductora $\Delta = 0$ o dentro del formalismo de BdG a partir de la Figura 3.3 cuando el valor de la

brecha tiende a cero. La Figura 3.4 enseña las variaciones de (a) la brecha superconductora (Δ) y (b) la temperatura crítica T_C como funciones del parámetro de interacción electrón-electrón atractivo (U) obtenidas a partir de la ecuación de BCS (3.48) y de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (3.39) y (3.43).

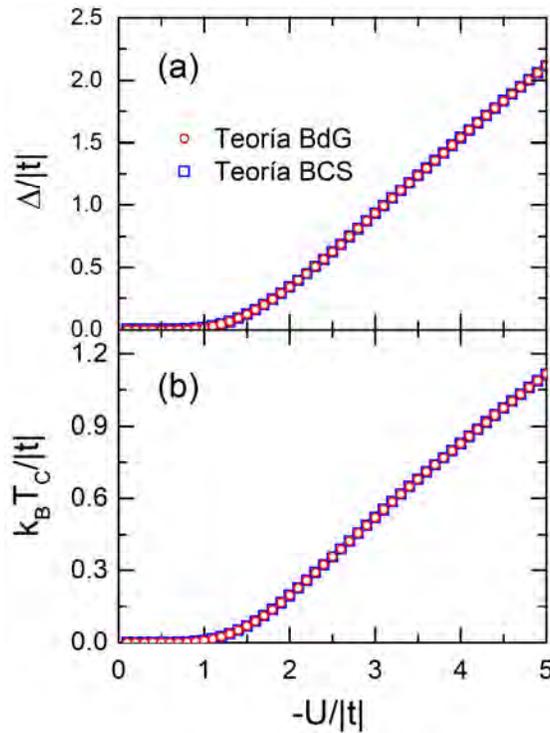


Fig. 3.4. (a) Brecha superconductora (Δ) y (b) temperatura crítica (T_C) versus el parámetro de interacción electrón-electrón atractivo (U) obtenidas a través de las teorías BCS y BdG.

Nota en las Figuras 3.4(a) y 3.4(b) que Δ y T_C tienen casi el mismo comportamiento como funciones de U , por lo que sería interesante evaluar el cociente entre estas dos cantidades. En la Figura 3.5 se muestra la variación del cociente entre la brecha superconductora y la temperatura crítica ($\Delta/k_B T_C$) para una interacción electrón-electrón atractiva de $0 < |U| < 9|t|$.

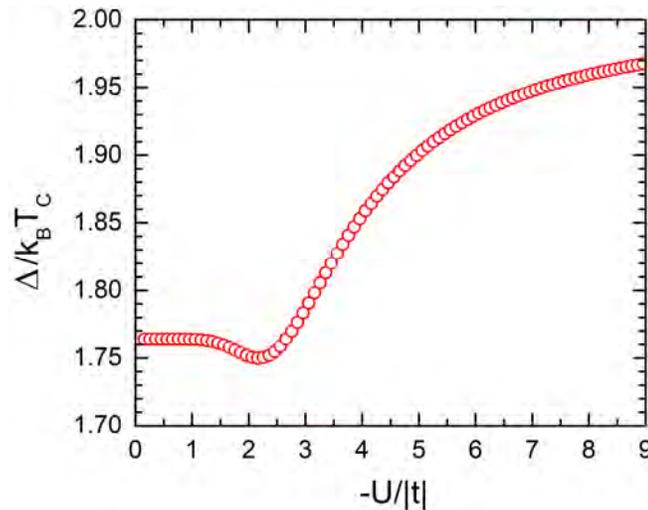


Fig. 3.5. Cociente entre la brecha superconductora (Δ) y la temperatura crítica (T_C) como función del potencial de interacción electrón-electrón atractivo (U).

Observe en la Figura 3.5 que para $|U| \ll |t|$ el valor del cociente tiende a 1.764 en concordancia con los resultados de la teoría BCS desarrollada para el acoplamiento débil [Tinkham,1996], mientras que para $|U| \gg |t|$ la ecuación (3.48) se puede resolver de forma analítica de la siguiente manera. Para $T = 0$ y $\Delta \approx |U|/2 \gg |t|$, entonces la ecuación (3.48) puede reescribirse como

$$1 = \frac{|U|a}{4\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{\sqrt{\xi(k)^2 + \Delta^2}} = \frac{|U|a}{4\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{\Delta \sqrt{(\xi(k)/\Delta)^2 + 1}} \approx \frac{|U|a}{4\pi\Delta} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\xi^2(k)}{\Delta^2} \right] dk. \quad (3.50)$$

Considerando la energía de dispersión $\xi(k) = 2t \cos(ka)$ se tiene

$$\Delta \approx \frac{|U|a}{4\pi} \left[\frac{2\pi}{a} - \frac{2t^2}{\Delta^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \cos^2(ka) dk \right] = \frac{|U|a}{4\pi} \left(\frac{2\pi}{a} - \frac{2t^2}{\Delta^2} \frac{\pi}{a} \right). \quad (3.51)$$

Por otro lado, la ecuación (3.48) para la temperatura crítica tomando $\Delta = 0$ tiene la forma

$$1 = \frac{|U|a}{4\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{|\xi(k)|} \tanh \left(\frac{|\xi(k)|}{2k_B T} \right) \approx \frac{|U|a}{4\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{|\xi(k)|} \left[\frac{|\xi(k)|}{2k_B T_C} - \frac{1}{3} \left(\frac{|\xi(k)|}{2k_B T_C} \right)^3 \right]. \quad (3.52)$$

Realizando la integral, la ecuación (3.52) puede reescribirse como

$$k_B T_C \approx \frac{|U|a}{8\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \left[1 - \frac{|\xi(k)|^2}{12(k_B T_C)^2} \right] = \frac{|U|a}{8\pi} \left[\frac{2\pi}{a} - \frac{t^2 \pi}{3(k_B T_C)^2 a} \right]. \quad (3.53)$$

Ahora, dividiendo la ecuación (3.51) entre (3.53) se tiene

$$\frac{\Delta}{k_B T_C} \approx 2 \frac{1 - t^2/\Delta^2}{1 - t^2/(6k_B^2 T_C^2)} \approx 2 \left(1 - \frac{t^2}{\Delta^2} \right) \left(1 + \frac{t^2}{6k_B^2 T_C^2} \right) = 2 - \frac{2t^2}{\Delta^2} + \frac{t^2}{3k_B^2 T_C^2} - \frac{t^4}{3\Delta^2 k_B^2 T_C^2}, \quad (3.54)$$

el cual, en el límite de $|U| \rightarrow \infty$, tiende a $\Delta/(k_B T_C) \rightarrow 2$ por la parte inferior ya que $2/\Delta^2 > 1/(3k_B^2 T_C^2)$.

• Sección transversal de dos átomos

Ahora estudiaremos el caso de una estructura tipo escalera, como se muestra en la Figura 3.6, donde hay dos átomos por supercelda.

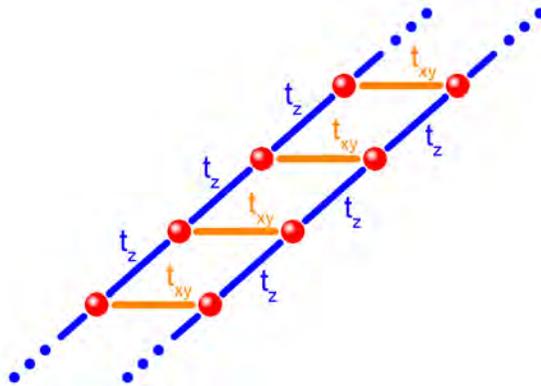


Fig. 3.6. Esquema de una nanocinta con sección transversal de dos átomos en forma de escalera.

Para este caso, la matriz $\hat{\Omega}$ en la ecuación (3.39) tiene un tamaño de 4×4 con la siguiente forma

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta & -\mathbf{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi & t_{xy} & \Delta & 0 \\ t_{xy} & \xi & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & -\xi & -t_{xy} \\ 0 & \Delta & -t_{xy} & -\xi \end{pmatrix}, \quad (3.55)$$

donde t_{xy} es la integral de salto en la supercelda, $\xi = 2t_z \cos(ka) - \mu$ y Δ son reales. La brecha superconductor de los dos átomos es la misma debido a que los átomos en la supercelda son indistinguibles, es decir $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$. Dada la simetría de la solución de $\hat{\Omega}$, en esta tesis utilizaremos únicamente los eigenvalores positivos del hamiltoniano (3.55) dados por

$$E_1 = \sqrt{\Delta^2 + (\xi - t_{xy})^2} \quad \text{y} \quad E_2 = \sqrt{\Delta^2 + (\xi + t_{xy})^2}. \quad (3.56)$$

Los eigenvectores normalizados están dados por

$$\begin{pmatrix} u_1^{(1)} \\ u_2^{(1)} \\ v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2 \left\{ \Delta^2 + \left[\sqrt{\Delta^2 + (\xi - t_{xy})^2} + \xi - t_{xy} \right]^2 \right\}}} \begin{pmatrix} t_{xy} - \xi - \sqrt{\Delta^2 + (\xi - t_{xy})^2} \\ \sqrt{\Delta^2 + (\xi - t_{xy})^2} + \xi - t_{xy} \\ -\Delta \\ \Delta \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

y

$$\begin{pmatrix} u_1^{(2)} \\ u_2^{(2)} \\ v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2 \left\{ \Delta^2 + \left[\sqrt{\Delta^2 + (\xi + t_{xy})^2} + \xi + t_{xy} \right]^2 \right\}}} \begin{pmatrix} \sqrt{\Delta^2 + (\xi + t_{xy})^2} + \xi + t_{xy} \\ \sqrt{\Delta^2 + (\xi + t_{xy})^2} + \xi + t_{xy} \\ \Delta \\ \Delta \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

Sustituyendo las soluciones (3.57) y (3.58) en (3.43) obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{U}{N_z} \sum_{k_z} \sum_{\alpha}^{N_{xy}} u^{\alpha} v^{\alpha} \tanh \left(\frac{E_{\alpha}}{2k_B T} \right) \\ &= \frac{U \Delta}{2N_z} \sum_{k_z} \frac{\sqrt{\Delta^2 + [\xi(k_z) - t_{xy}]^2} + \xi(k_z) - t_{xy}}{\Delta^2 + \left\{ \sqrt{\Delta^2 + [\xi(k_z) - t_{xy}]^2} + \xi(k_z) - t_{xy} \right\}^2} \tanh \left(\frac{E_1(k_z)}{2k_B T} \right) \\ &\quad + \frac{U \Delta}{2N_z} \sum_{k_z} \frac{\sqrt{\Delta^2 + [\xi(k_z) + t_{xy}]^2} + \xi(k_z) + t_{xy}}{\Delta^2 + \left\{ \sqrt{\Delta^2 + [\xi(k_z) + t_{xy}]^2} + \xi(k_z) + t_{xy} \right\}^2} \tanh \left(\frac{E_2(k_z)}{2k_B T} \right) \end{aligned} \quad (3.59)$$

Nótese que en el caso cuando no hay interacción entre las cadenas $t_{xy} = 0$, de la ecuación (3.56) encontramos que $E_1 = E_2$, por lo que la ecuación (3.59) se puede reescribir como

$$\Delta = \frac{U\Delta}{N_z} \sum_{k_z} \frac{\xi(k_z) + \sqrt{\Delta^2 + \xi(k_z)^2}}{\Delta^2 + [\xi(k_z) + \sqrt{\Delta^2 + \xi(k_z)^2}]^2} \tanh\left(\frac{E_1(k_z)}{2k_B T}\right) \quad (3.60)$$

Desarrollando la ecuación (3.60) de manera análoga como se hizo en (3.47) obtenemos la ecuación de BCS para el caso de una cadena lineal, que era de esperarse.

En la Figura 3.7(a) se muestran los valores de la brecha superconductora (Δ) a $T = 0$ como función del potencial químico (μ) obtenidos de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (círculos rojos) en comparación con los calculados con la ecuación tipo BCS (3.59) (cuadrados azules), donde las integrales de salto son $t_z = t_{xy} = t$. La Figura 3.7(b) enseña la densidad de estados (DOS) de la nanoestructura en la Figura 3.6 obtenida a través de la expresión

$$DOS_l(E) = -\frac{a}{2\pi^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \int_{\pi/a}^{\pi/a} \frac{\langle l || k \rangle \langle k || l \rangle}{(E + i\eta) \mathbf{I} - \mathbf{H}(k)} dk, \quad (3.61)$$

donde \mathbf{I} es la matriz identidad, η es la parte imaginaria de la energía que evita la divergencia en la ecuación (3.61) y $\mathbf{H}(k)$ es el hamiltoniano en la ecuación (3.55). Nótese que, en similitud al caso de la cadena unidimensional, los máximos valores de Δ ocurren en los puntos donde la densidad de estados es máxima.

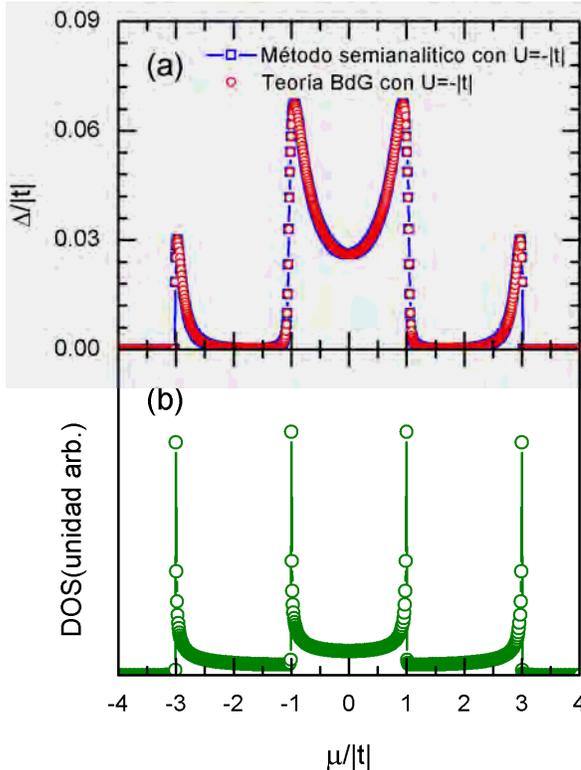


Fig. 3.7. (a) Comparación de la brecha superconductora (Δ) obtenida a través de las teorías BdG y BCS para $U = -|t|$ y (b) densidad de estados (DOS) de la nanocinta mostrada en la Figura 3.6.

La Figura 3.8 nos ilustra como es que decae la brecha superconductora al aumentar la temperatura para la nanocinta de la Figura 3.6 con $U = -|t|$, $U = -0.9|t|$ y $U = -0.8|t|$. Estos resultados se obtuvieron a través de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (3.39) y (3.43).

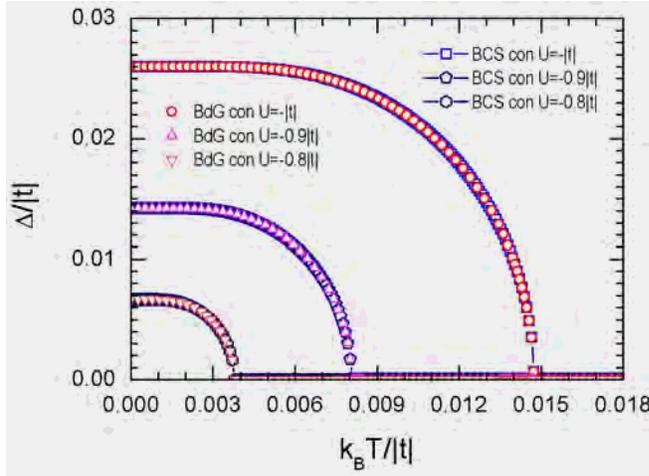


Fig. 3.8. Brecha superconductor (Δ) versus la temperatura (T) para una nanocinta con sección transversal de dos átomos y $\mu = 0$.

Las temperaturas críticas (T_C) pueden ser obtenidas a partir de la Figura 3.8 cuando el valor de la brecha tiende a cero.

- **Sección transversal de tres átomos**

Tenemos dos tipos de nanoestructuras cuando la supercelda contiene tres átomos un nanowire como se muestra en la Figura 3.9(a) o una nanocinta como se observa en la Figura 3.9(b).

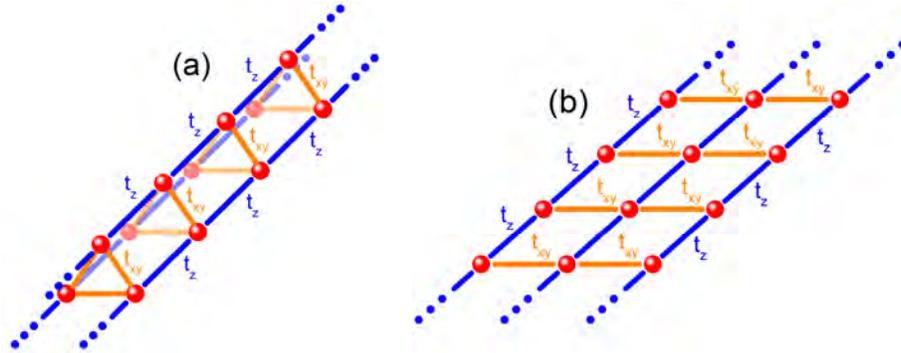


Fig. 3.9. Esquemas de (a) un nanowire y (b) una nanocinta de átomos representados con esferas rojas y sus enlaces caracterizados por la integral de salto t_z a lo largo de la dirección longitudinal y t_{xy} en la sección transversal.

En la Figura 3.10 se muestran (a) la brecha superconductor (Δ) a $T = 0$, obtenida a través de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (3.39) y (3.43) con las integrales de salto $t_z = t_{xy} = t$, y (b) la densidad de estados (DOS) calculada a través de la ecuación (3.61) con $\eta = 10^{-3}|t|$ para el alambre de la Figura 3.9(a) usando la matriz $\hat{\Omega}(k)$ de la forma

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta & -\mathbf{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi & t_{xy} & t_{xy} & \Delta & 0 & 0 \\ t_{xy} & \xi & t_{xy} & 0 & \Delta & 0 \\ t_{xy} & t_{xy} & \xi & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & 0 & -\xi & -t_{xy} & -t_{xy} \\ 0 & \Delta & 0 & -t_{xy} & -\xi & -t_{xy} \\ 0 & 0 & \Delta & -t_{xy} & -t_{xy} & -\xi \end{pmatrix}, \quad (3.62)$$

donde t_{xy} es la integral de salto en la supercelda, $\xi = 2t_z \cos(ka) - \mu$ y la brecha superconductora de los tres átomos es la misma, $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = \Delta$, debido a que los átomos en la supercelda son indistinguibles. Nótese la asimetría en las Figuras 3.10 con respecto al origen, debido a que el alambre triangular de la Figura 3.9(a) no es una red bipartita. Además, se observa nuevamente que los máximos valores de Δ coinciden con los puntos máximos en la densidad de estados calculada para este alambre.

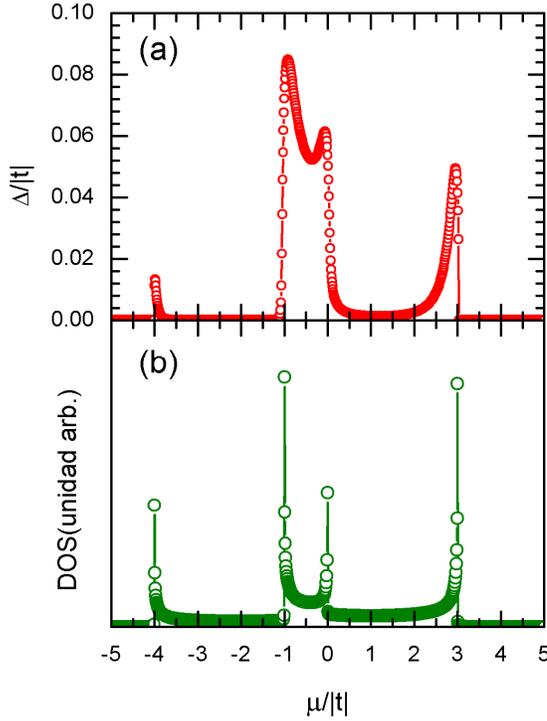


Fig. 3.10. (a) Brecha superconductora (Δ) obtenida a través de la teoría BdG para $U = -|t|$ y (b) densidad de estados (DOS) del nanoalambre mostrado en la Figura 3.9(a).

La Figura 3.11 muestra la brecha superconductora como función de la temperatura para el nanoalambre de la Figura 3.9(a) con $\mu = 0$, $U = -|t|$, $U = -0.9|t|$ y $U = -0.8|t|$.

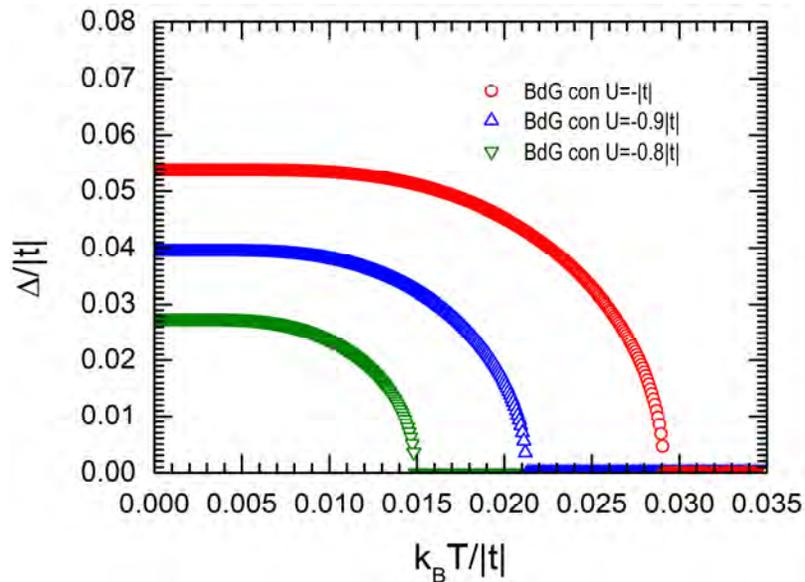


Fig. 3.11. Brecha superconductora (Δ) versus temperatura (T) para un nanoalambre con sección transversal de tres átomos colocados en forma triangular, $\mu = 0$, $U = -|t|$, $U = -0.9|t|$ y $U = -0.8|t|$.

En la Figura 3.12, se presentan (a, c) las brechas superconductoras (Δ_i) a $T = 0$ y (b, d) las densidades de estados (DOS_i) para los átomos (a, b) lateral y (c, d) central en la nanocinta de la Figura 3.9(b). Las Δ_i fueron calculadas a través de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (3.39) y (3.43) con las integrales de salto $t_z = t_{xy} = t$ y las DOS_i fueron calculadas usando la expresión (3.61) usando $\eta = 10^{-3}$ y la matriz

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \mathbf{\Delta} \\ \mathbf{\Delta} & -\mathbf{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi & t_{xy} & 0 & \Delta_L & 0 & 0 \\ t_{xy} & \xi & t_{xy} & 0 & \Delta_C & 0 \\ 0 & t_{xy} & \xi & 0 & 0 & \Delta_L \\ \Delta_L & 0 & 0 & -\xi & -t_{xy} & 0 \\ 0 & \Delta_C & 0 & -t_{xy} & -\xi & -t_{xy} \\ 0 & 0 & \Delta_L & 0 & -t_{xy} & -\xi \end{pmatrix}, \quad (3.63)$$

donde t_{xy} es la integral de salto en la supercelda, $\xi = 2t_z \cos(ka) - \mu$, Δ_L y Δ_C son reales, siendo Δ_L y Δ_C las brechas superconductoras de los átomos lateral y central en la nanocinta de la Figura 3.9(b), respectivamente. Obsérvese que los átomos lateral y central no tienen la misma brecha superconductora. Además, los máximos de la DOS_i coinciden con los máximos de Δ_i , excepto para el átomo central cuya DOS no contiene los máximos en $\pm 2|t|$. Esto se debe a que la eigenfunción correspondiente al eigenvalor cero del hamiltoniano de la sección transversal tiene un nodo en el sitio central. En cambio, observamos la brecha para $\pm 2|t|$ en el átomo central es distinta de cero, debido a la finitud de la longitud de coherencia superconductora.

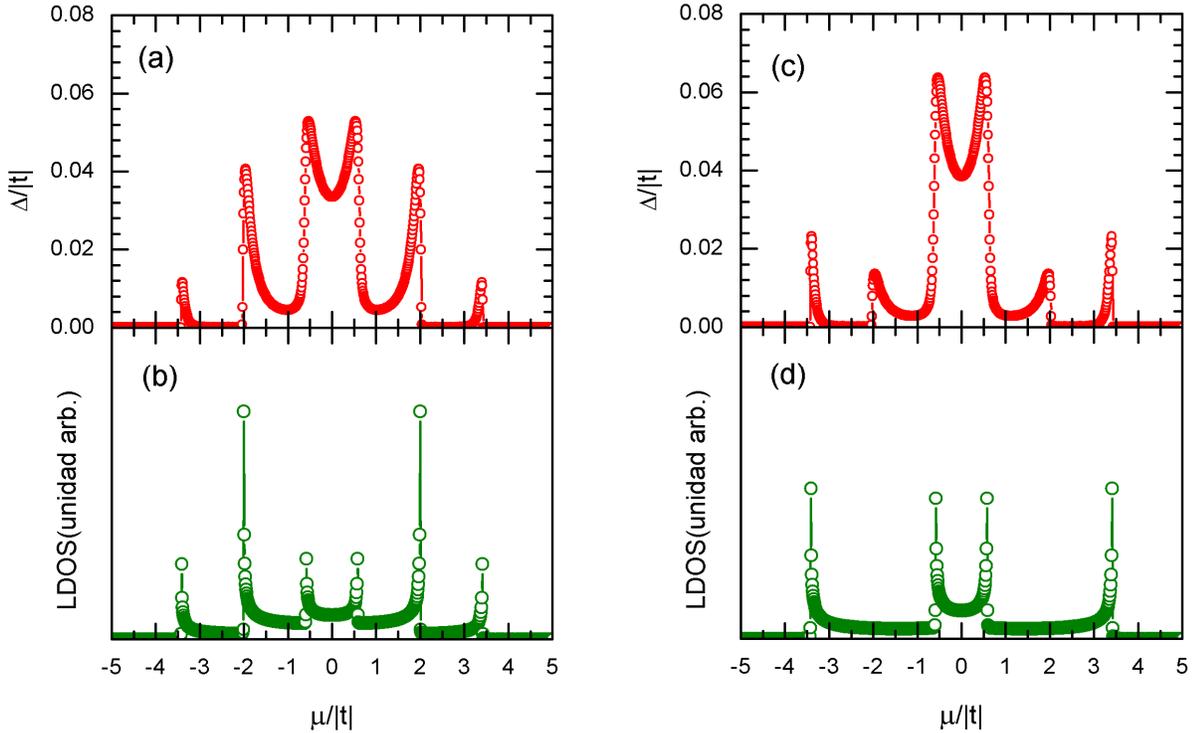


Fig. 3.12. (a, c) Brecha superconductora (Δ), (b, d) densidad de estados (DOS) como funciones del potencial químico (μ) para los átomos (a, b) lateral y (c, d) central de la nanocinta con sección transversal de tres átomos y $U = -|t|$.

La Figura 3.13 muestra la brecha superconductora (Δ_l) como función de la temperatura (T) para los átomos central (símbolos abiertos) y lateral (símbolos cerrados) en la nanocinta de la Figura 3.9(b) con $\mu = 0$, $U = -|t|$ (círculos), $U = -0.9|t|$ (triángulos) y $U = -0.8|t|$ (triángulos invertidos).

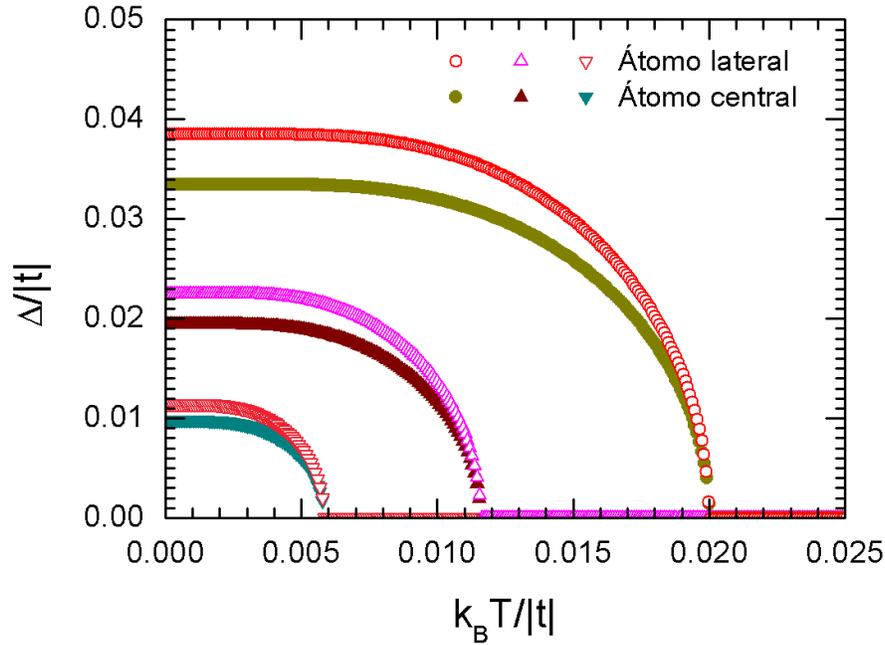


Fig. 3.13. Brechas superconductoras locales del átomo central (símbolos abiertos) y átomos laterales (símbolos cerrados) versus temperatura para una cinta de tres átomos en su sección transversal con $\mu = 0$ y $U = -|t|$ (círculos), $U = -0.9|t|$ (triángulos), $U = -0.8|t|$ (triángulos invertidos).

Nótese que a pesar de que las brechas superconductoras de los átomos no equivalentes geoméricamente son distintas, sus temperaturas críticas son la misma para cada valor de U .

• Sección transversal de cuatro átomos

En esta parte se analizan los nanoalambres y nanocintas con sección transversal de cuatro átomos como se muestran respectivamente en las Figuras 3.14(a) y 3.14(b).

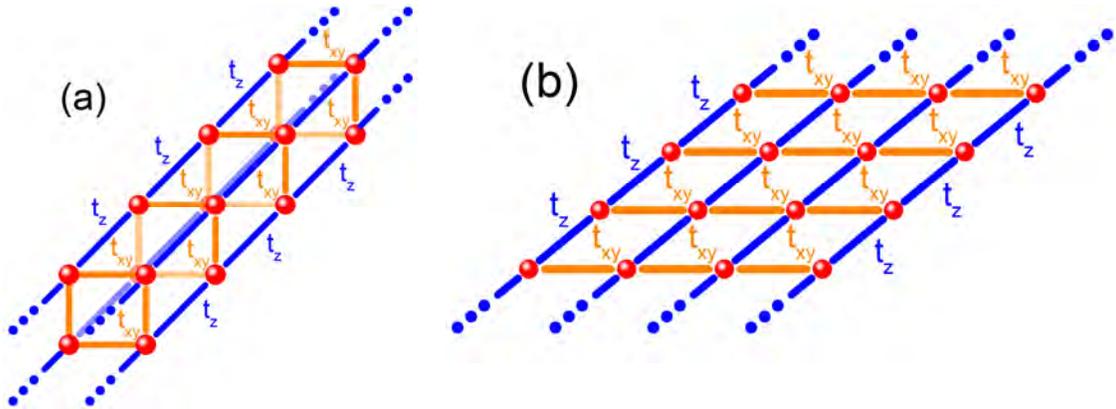


Fig. 3.14. Esquemas de (a) un alambre y (b) una cinta de átomos representados con esferas rojas y sus enlaces caracterizados por las integrales de salto t_z a lo largo de la dirección longitudinal y t_{xy} en la sección transversal.

La Figura 3.15 muestra (a) la brecha superconductora (Δ) a $T = 0$ y (b) la densidad de estados (DOS) para el alambre de la Figura 3.14(a) obtenidas respectivamente a través de las ecuaciones

autoconsistentes de BdG (3.39) y (3.43) con $t_z = t_{xy} = t$ y a través de la ecuación (3.61) con $\eta = 10^{-3}$ y la matriz

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta & -\mathbf{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi & t_{xy} & 0 & t_{xy} & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ t_{xy} & \xi & t_{xy} & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \\ 0 & t_{xy} & \xi & t_{xy} & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ t_{xy} & 0 & t_{xy} & \xi & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & 0 & 0 & -\xi & -t_{xy} & 0 & -t_{xy} \\ 0 & \Delta & 0 & 0 & -t_{xy} & -\xi & -t_{xy} & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & -t_{xy} & -\xi & -t_{xy} \\ 0 & 0 & 0 & \Delta & -t_{xy} & 0 & -t_{xy} & -\xi \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

donde t_{xy} es la integral de salto en la sección transversal, $\xi = 2t_z \cos(ka) - \mu$ y la brecha superconductora de los cuatro átomos es la misma $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_4 = \Delta$. Notemos que nuevamente se observa la coincidencia de los máximos de la brecha y los de la DOS.

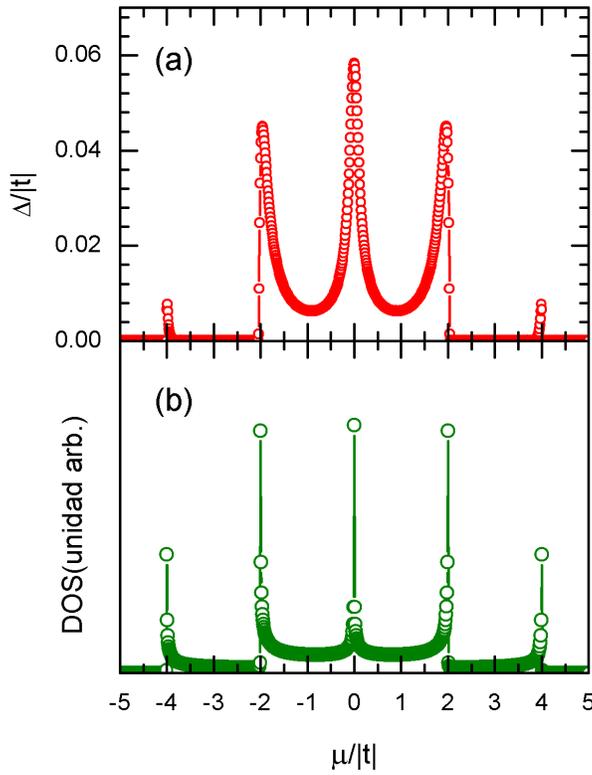


Fig. 3.15. (a) Brecha superconductora (Δ) obtenida a través de la teoría BdG para $U = -|t|$ y (b) la densidad de estados (DOS) del nanoalambre mostrado en la Figura 3.14(a).

La Figura 3.16 muestra la brecha superconductora como función de la temperatura para el nanoalambre de la Figura 3.14(a) con , $\mu = 0$, $U = -|t|$, $U = -0.9|t|$ y $U = -0.8|t|$.

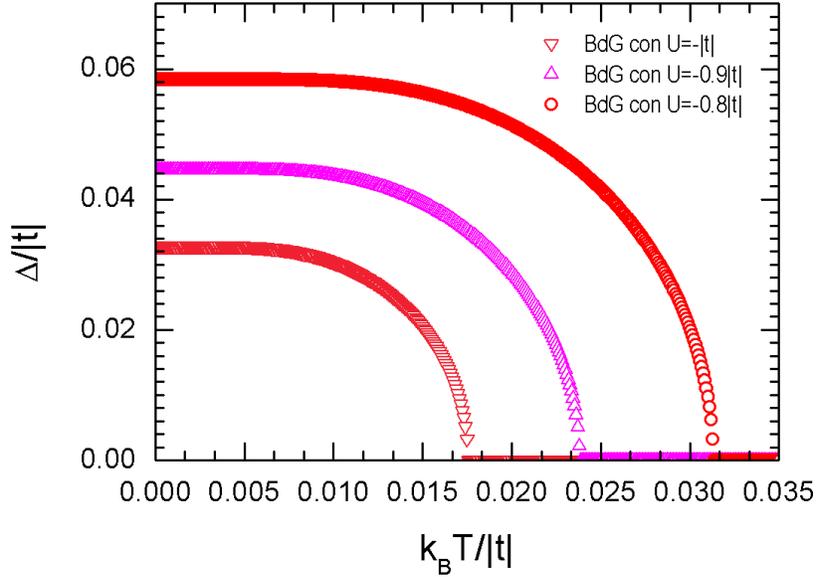


Fig. 3.16. Brecha superconductor (Δ) versus temperatura (T) para un nanoalambre con sección transversal de cuatro átomos colocados en forma triangular, $\mu = 0$, $U = -|t|$, $U = -0.9|t|$ y $U = -0.8|t|$.

La Figura 3.17 presenta (a, c) las brechas superconductoras (Δ_l) a $T = 0$ y (b, d) las densidades de estados (DOS_l) para los átomos (a, b) lateral y (c, d) central en la nanocinta de la Figura 3.14(b). Las Δ_l fueron calculadas a través de las ecuaciones autoconsistentes de BdG (3.39) y (3.43) con las integrales de salto $t_z = t_{xy} = t$ y las DOS_l fueron calculadas usando la expresión (3.61) usando $\eta = 10^{-3}$ y la matriz

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta & -\mathbf{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi & t_{xy} & 0 & 0 & \Delta_L & 0 & 0 & 0 \\ t_{xy} & \xi & t_{xy} & 0 & 0 & \Delta_C & 0 & 0 \\ 0 & t_{xy} & \xi & t_{xy} & 0 & 0 & \Delta_C & 0 \\ 0 & 0 & t_{xy} & \xi & 0 & 0 & 0 & \Delta_L \\ \Delta_L & 0 & 0 & 0 & -\xi & -t_{xy} & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_C & 0 & 0 & -t_{xy} & -\xi & -t_{xy} & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_C & 0 & 0 & -t_{xy} & -\xi & -t_{xy} \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_L & 0 & 0 & -t_{xy} & -\xi \end{pmatrix}, \quad (3.65)$$

donde t_{xy} es la integral de salto en la sección transversal, $\xi = 2t_z \cos(ka) - \mu$, Δ_L y Δ_C son reales, siendo Δ_L y Δ_C las brechas superconductoras de los átomos lateral y central en la nanocinta de la Figura 3.14(b), respectivamente. Obsérvese que los átomos lateral y central no tienen la misma brecha superconductor, y los máximos de la DOS_l coinciden con los máximos de Δ_l .

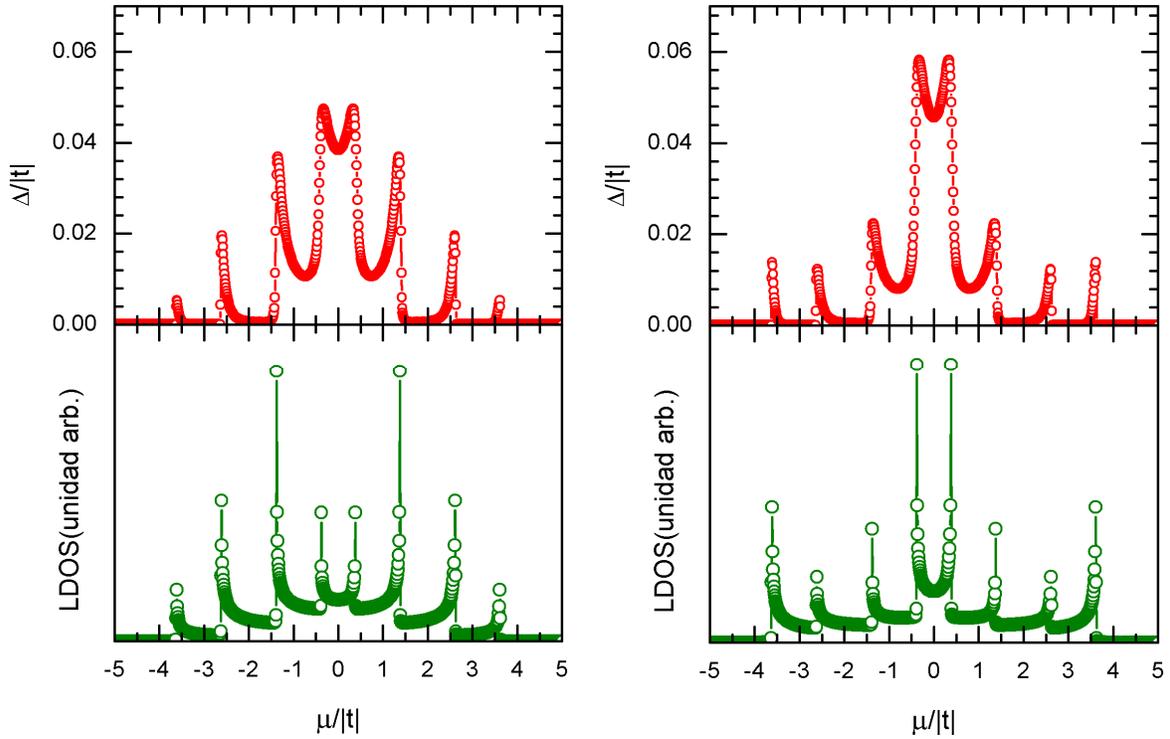


Fig. 3.17. (a, c) Brecha superconductora (Δ), (b, d) densidad de estados (DOS) como funciones del potencial químico (μ) para los átomos (a, b) lateral y (c, d) central de la nanocinta con sección transversal de cuatro átomos y $U = -|t|$.

La Figura 3.18 muestra la brecha superconductora (Δ_l) como función de la temperatura (T) para los átomos central (símbolos abiertos) y lateral (símbolos cerrados) en la nanocinta de la Figura 3.14(b) con $\mu = 0$, $U = -|t|$ (círculos), $U = -0.9|t|$ (triángulos) y $U = -0.8|t|$ (triángulos invertidos).

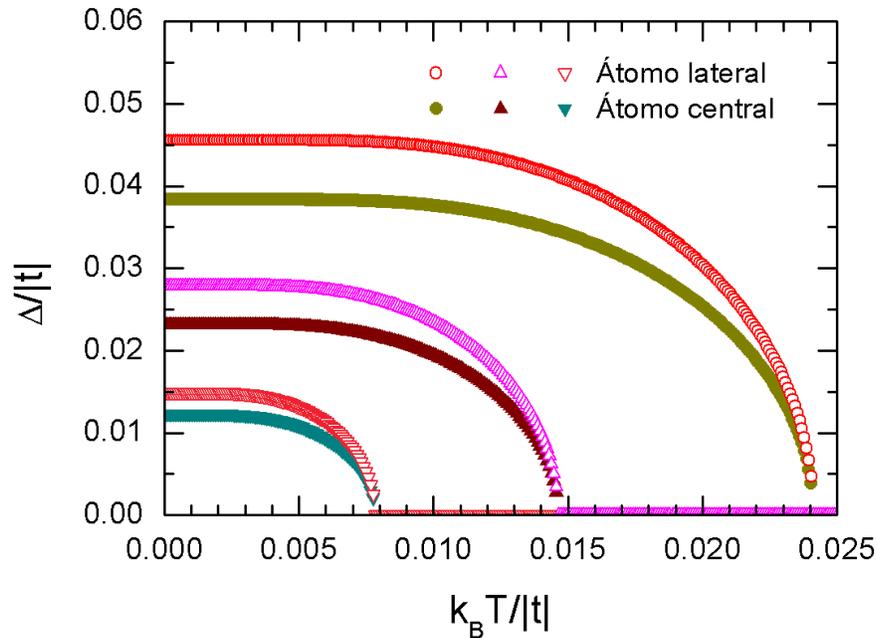


Fig. 3.13. Brechas superconductoras locales del átomo central (símbolos abiertos) y átomos laterales (símbolos cerrados) versus temperatura para una cinta de cuatro átomos en su sección transversal con $\mu = 0$ y $U = -|t|$ (círculos), $U = -0.9|t|$ (triángulos), $U = -0.8|t|$ (triángulos invertidos).

Nótese que a pesar de que las brechas superconductoras de los átomos no equivalentes geoméricamente son distintas, sus temperaturas críticas son la misma para cada valor de U .

En resumen, definamos la integral espectral de la brecha superconductor local como

$$\langle \Delta_l \rangle \equiv \frac{1}{|t|} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta(\mu) d\mu, \quad (3.66)$$

donde μ es el potencial químico. En la tabla 3.1 se muestran dichas integrales tanto para átomos laterales como átomos centrales de nanoalambres y nanocintas con sección transversal uno, dos, tres y cuatro átomos, los cálculos se realizaron con $U = -|t|$.

Tabla 3.1. Integral espectral de la brecha superconductor local $\langle \Delta_l \rangle$ para las nanoestructuras analizadas

No. de átomos en la sección transversal	$\langle \Delta_l \rangle / t $ en alambre	$\langle \Delta_l \rangle / t $ en cinta	
		Lateral	Central
Un átomo	0.16492	0.16492	0.16492
Dos átomos	0.09772	0.09772	0.09772
Tres átomos	0.09142	0.08779	0.08202
Cuatro átomos	0.06645	0.07665	0.07349

Obsérvese en la Tabla 3.1 que la integral de la brecha superconductor decrece con el número de átomos en la sección transversal, indicando que el confinamiento cuántico favorece la superconductividad en nanoestructuras.

En la Tabla 3.2 se exponen las temperaturas críticas para los nanoalambres y nanocintas con distinto numero de átomos en su sección transversal, los cálculos se realizaron con $U = -|t|$ y $\mu = 0$.

Tabla 3.2. Temperatura crítica T_c y la becha superconductor local Δ_l para las nanoestructuras con $U = -|t|$ y $\mu = 0$.

Sección transversal	Alambre		Cinta		
	$\Delta_l / t $	$k_B T_c / t $	$\Delta_l / t $		$k_B T_c / t $
			Lateral	Central	
Un átomo	0.01494	0.00853	0.01494	0.01494	0.00853
Dos átomos	0.02599	0.01482	0.02599	0.02599	0.01482
Tres átomos	0.05382	0.02913	0.03349	0.03850	0.02008
Cuatro átomos	0.05839	0.03137	0.03836	0.04559	0.02413

Conclusiones

La presente tesis estudia la superconductividad en nanoalambres y nanocintas a partir del formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) y del modelo de Hubbard atractivo en una combinación entre el espacio real y el recíproco, donde se utiliza la técnica de superceldas para cuantificar la brecha superconductora local en los átomos de la sección transversal para las nanoestructuras mencionadas. Los principales resultados obtenidos son:

- (1) Desarrollo detallado del método de transformación para las ecuaciones de BdG al espacio combinado real-recíproco.
- (2) Obtención de las ecuaciones integrales tipo BCS para la brecha superconductora a partir del formalismo de BdG extendido al espacio combinado para los nanoalambres con sección transversal reducida de uno y dos átomos.
- (3) Determinación analítica de los comportamientos asintóticos en el cociente entre la brecha superconductora y la temperatura crítica para interacciones electrón-electrón débil y fuerte.
- (4) Hallazgo de una brecha superconductora local inhomogénea en nanoestructuras con mayor sección transversal y su dependencia a la posición del potencial químico o al llenado de la banda electrónica.
- (5) Observación de que las nanocintas con brechas superconductoras inhomogeneas tienen una única temperatura crítica.
- (6) Encuentro de una coincidencia entre los máximos de la brecha superconductora local a temperatura cero y los de la densidad de estados local (LDOS) al nivel de Fermi, en concordancia con la teoría BCS.
- (7) Ausencia de ciertos picos en la LDOS debido a los nodos en las eigenfunciones del hamiltoniano del sistema y la existencia de picos correspondientes en la brecha superconductora local debido a la finitud del parámetro de orden superconductor.
- (8) Descubrimiento de una correlación inversa entre el área de la sección transversal y la integral espectral de la brecha superconductora, la cual confirma la importancia del confinamiento cuántico en la superconductividad de nanoestructuras.

Por último, el desarrollo de esta tesis me ha enseñado que la superconductividad es un fenómeno complejo y difícil de tratar en forma analítica, cuyo estudio requiere el conocimiento de múltiples técnicas y métodos para sistemas de muchos cuerpos. Así mismo, considero que la investigación científica es una actividad que combina la intuición y la dedicación. Además, pienso que los modelos y métodos cuánticos utilizados en esta tesis podrían ser útiles para el diseño de dispositivos superconductores realistas que incluyen múltiples interfases y/o fronteras de grano, ya que estos modelos tienen la virtud de estar expresados en el espacio real.

Bibliografía

- [Abriskov,1957] A. A. Abrikosov, “On the Magnetic Propierties fo Superconductors”, *J.E.T.P. USSR* **32**, 1442 (1952).
- [Alloul,2011] H, Alloul, *Introduction to the Physics of Electrons in Solids* (Springer, Berlin, 2011) p. 151, 153,176,181, 303.
- [Bardeen,1950] J, Bardeen, “Choise of Gauge in London's Approach to the Theory of Superconductivity”, *Phys. Rev.* **81**, 469 (1950).
- [Bardeen,1957] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, “Theory of Superconductivity”, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [Bogoliubov,1958] N.N. Bogoliubov, “A New Method in the Theory of Superconductivity”, *J.E.T.P USSR* **34**, 58 (1958).
- [Cooper,1956] L.N. Cooper, “Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas”, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [Economou,2006] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* 3rd edition (Springer, Berlin, 2006) p. 89.
- [energy.gov,2008] https://www.energy.gov/sites/prod/files/oeprod/DocumentsandMedia/LIPA__5_16_08.pdf
- [Galván,2013] César G. Galván Peña, Tesis doctoral titulada *Superconductividad Anisotrópica en los Formalismos de BCS Generalizado y de Bogoliubov de Gennes* (UNAM, 2013) p. 61.
- [Gennes,1999] P. G. de Gennes, *Superconducticity of Metals and Alloys* (Westview Press, New York, 1999) p. 97.
- [Gor'kov,1959] L. P. Gor'kov, “Microscopic Derivation of the Ginzburg-Landau Equations in the Theory of Superconductivity”, *Soviet Physics J.E.T.P* **36**, 1364 (1959).
- [Gorter,1934] C.J. Gorter, H. Casimir, “On supraconductivity I”, *Physica* **1**, 306 (1934).
- [Han,2010] Q. Han, “A Method of Studying the Bogoliubov-de Gennes Equations for the Superconducting Vortex Lattice State”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **22**, 6 (2010).
- [Hubbard,1963] J. Hubbard, “Electron Correlations in Narrow Energy Bands”, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **276**, 238 (1963).
- [Fröhlich,1950] H. Fröhlich, “Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature”, *Phys. Rev.* **79**, 845 (1950).
- [Kittel,2005] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th edition (John Wiley & Sons, New York, 2005) p. 141.
- [Lyton,1964] E. A. Lyton, *Superconductivity*, 2nd edition (Spottiswoode, London, 1964) p. 19, 38, 71.
- [Mathematics,2011] <https://math.stackexchange.com/questions/10972/integral-with-tanh-int-0b-tanhx-x-mathrmd-x-what-would-be-the-s>
- [Meissner,1933] W. Meissner y R. Ochsenfeld, “Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit”, *Naturwissenschaften* **21**, 787 (1933).
- [Nature Physics,2008] R. Prozorov, A.F. Fidler, J.R. Hoberg y P. C. Canfield, “Suprafroth in type-I Superconductors”, *Nature Physics* **4**, 327 (2008).

- [Onnes,1911] H. Kamerlingh Onnes, “The resistance of pure mercury at helium temperatures”, *Proc. K. Ned. Akad. Wet.* **13**, 1274 (1911).
- [Onnes,1912] H. Kamerlingh Onnes, “On the Sudden Change in the Rate at which the Resistance of Mercury Disappears”, *Proc. K. Ned. Akad. Wet.* **14**, 818 (1911).
- [Tinkham,1996] M. Tinkham, *Introduction to superconductivity*, 2nd edition (Mc Graw-Hill, New York, 1996) p. 65.
- [Zemansky,1997] M, W, Zemansky, *Heat and Thermodynamics*, 7th edition (McGraw-Hill, New York, 1997), p 250.